

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

**ТОМ 18, №4,
2025**

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2025

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;

Жуков А.Е., чл.-кор. РАН;

Рудской А.И., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;

Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;

Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;

Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;

Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;

Дубов В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Карасёв П.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия;

Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;

Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN),
Франкфурт-на-Майне, Германия;

Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;

Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия;

Черепанов А.С., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ».

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Журнал индексируется в базах данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, а также включен в базы данных «**Российский индекс научного цитирования**» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>, и «**Directory of Open Access Journals**» (DOAJ).

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

**VOLUME 18, No.4,
2025**

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2025

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;

V.A.I. Rudskoy – full member of RAS;

A.E. Zhukov – corresponding member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;

A.E. Fotiadi – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;

V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;

V.I. Antonov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

I.B. Bezprozvanny – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;

A.V. Blinov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Cherepanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.V. Donetski – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;

V.V. Dubov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

D.A. Firsov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

P.A. Karaseov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;

O.S. Loboda – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

J.B. Malherbe – Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;

V.M. Ostryakov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

V.E. Privalov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

E.M. Smirnov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

A.V. Solov'yov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;

A.K. Tagantsev – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;

I.N. Toptygin – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU'.

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

The journal is in the **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, the **Russian Science Citation Index** (RSCI) and the **Directory of Open Access Journals** (DOAJ) databases.

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address:

195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: 8 (812) 552-62-16.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

Содержание

Физика конденсированного состояния

Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Кавеев А. К., Федоров В. В. Мемристорный эффект в гетероструктурах на основе нитевидных нанокристаллов нитрида галлия на кремнии .. 9

Математическое моделирование физических процессов

Хлюпин И. В., Мешков В. Р., Соколова Д. А., Бурковский Р. Г. Разработка упругой модели эпитаксиальной тонкой пленки цирконата свинца с учетом приинтерфейсных микро-скручиваний 21

Дубровский В. Г., Лещенко Е. Д. Распределение по длинам нитевидных нанокристаллов с положительной и отрицательной поверхностной диффузией (статья на английском языке) 34

Захаров В. В., Родионов А. В., Томилин И. С., Быков Н. Ю. Околоядерная атмосфера кометы 67P/Чурюмова – Герасименко в момент встречи с зондом Розетта 48

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Зайцев А. С., Зайцев С. А., Зайцева Д. С., Крамарь Е. И. Применение параболических волновых пакетов к решению задачи эволюции атома водорода под действием длительных лазерных импульсов 61

Математическая физика

Бердников А. С., Краснова Н. К., Масюкевич С. В., Подольская Е. П., Соловьев К. В. Аналитические квадратурные формулы для электрических полей радиочастотных ионных воронок общего вида с прямой осью 75

Приборы и техника физического эксперимента

Лисовицкий А. С., Чупин В. А., Московченко Л. Г. Применение фрактальных методов для анализа данных микродеформаций земной коры 101

Физическая электроника

Караулов Д. А., Винниченко М. Я., Шальгин В. А., Фирсов Д. А. Влияние разогрева и дрейфа электронов в электрическом поле на поглощение и преломление терагерцового излучения в электронном антимолибдене индия 114

Семенов С. Е., Сударь Н. Т., Пахотин В. А. Распределение электрического поля в полимерной пленке при кратковременном воздействии высоковольтного импульса 127

Нгуен В. Т. А., Габдуллин П. Г., Архипов А. В. Трансформация морфологии тонких пленок никеля и циркония на естественно окисленных кремниевых подложках при отжиге в вакууме 139

Физическая оптика

Гуляев С. Н., Ганжерли Н. М., Ильюшина Д. А., Маурер И. А. Особенности формирования голографических структур, записанных в контрнаправленной оптической схеме на фотоэмульсии, подвергнутой УФ-облучению 151

Физическое материаловедение

Никитина Е. А., Капралова В. М., Сударь Н. Т., Герасимов В. И., Утаев С. А. *Влияние добавок фуллеренола на поглощение света композитными пленками на основе поливинилового спирта* 167

Ядерная физика

Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В. *Возможности измерять свойства идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5А ГэВ в детекторе MPD на ускорителе NICA* 177

Радиофизика

Еровенко З. А., Маркварт А. А., Петров А. В., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. *Неразрушающий контроль оптических волокон с помощью оптической когерентной томографии* 190

Завалишина Л. Д., Маркварт А. А., Зарипов А. Э., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. *Отклик межмодового волоконно-оптического интерферометра с SMSMS-структурой при спектральном опросе на изменение показателя преломления внешней среды* 206

Contents

Condensed matter physics

Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Kaveev A. K., Fedorov V. V. *Memristor effect in heterostructures based on gallium nitride nanowires on silicon* 9

Simulation of physical processes

Khlyupin I. V., Meshkov V. R., Sokolova D. A., Burkovsky R. G. *Development of an elastic model for the epitaxial thin film of lead zirconate considering interfacial micro-twists* 21

Dubrovskii V. G., Leshchenko E. D. *The length distribution of nanowires with forward and backward surface diffusion* 34

Zakharov V. V., Rodionov A. V., Tomilin I. S., Bykov N. Yu. *The near-nucleus atmosphere of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko at the moment of its rendezvous with the Rosetta space probe* ... 48

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Zaytsev A. S., Zaytsev S. A., Zaytseva D. S., Kramar E. I. *Application of parabolic wave packets to solving the evolution problem of a hydrogen atom exposed to long laser pulses* 61

Mathematical physics

Berdnikov A. S., Krasnova N. K., Masyukevich S. V., Podolskaya E. P., Solovyev K. V. *Analytical quadrature formulae for electric fields of the RF straight-axis ion funnels of a general type* 75

Experimental technique and devices

Lisovitsky A. S., Chupin V. A., Moskovchenko L. G. *Application of fractal methods for analyzing the microdeformation data of the Earth's crust* 101

Physical electronics

Karaulov D. A., Vinnichenko M. Ya., Shalygin V. A., Firsov D. A. *The effect of heating and drift of electrons in an electric field on the absorption and refraction of terahertz radiation in electronic indium antimonide* 114

Semenov S. E., Sudar N. T., Pakhotin V. A. *Distribution of the electric field in a polymer film under a short-term action of a high-voltage pulse* 127

Nguyen V. T. A., Gabdullin P. G., Arkhipov A. V. *Modification of morphology of thin nickel and zirconium films on naturally oxidized silicon substrates by annealing in vacuum* 139

Physical optics

Gulyaev S. N., Ganzherli N. M., Ilyushina D. A., Maurer I. A. *Formation features of holographic structures recorded in a counter-directional optical scheme on the photoemulsion exposed to short-wave UV radiation* 151

Physical materials technology

Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T., Gerasimov V. I., Utaev S. A. *Influence of fullereneol dopant on light absorption by polyvinyl alcohol-based composite films* 167

Nuclear physics

Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V. *Feasibility to measure the properties of identified charged hadrons in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV in the MPD detector at the NICA collider* 177

Radiophysics

Erovenko Z. A., Markvart A. A., Petrov A. V., Liokumovich L. B., Ushakov N. A. *Nondestructive testing of optical fibers using the optical coherence tomography* 190

Zavalishina L. D., Markvart A. A., Zaripov A. E., Liokumovich L. B., Ushakov N. A. *The response of an intermodal fiber-optic interferometer with SMSMS structure in case of spectral interrogation to changes in the refractive index of the external environment* 206

Физика конденсированного состояния

Научная статья

УДК 537.9

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18401>

МЕМРИСТОРНЫЙ ЭФФЕКТ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ НИТРИДА ГАЛЛИЯ НА КРЕМНИИ


К. Ю. Шугуров¹ , А. М. Можаров¹, А. К. Кавеев², В. В. Федоров^{3, 1}

¹ Академический университет им. Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 shugurov17@mail.ru

Аннотация. Проведены экспериментальные и теоретические исследования диодных гетероструктур на основе нитевидных нанокристаллов GaN, синтезированных на кремнии. Измерения вольтамперных характеристик показали закономерность их поведения, характерную для обращенных диодов, в диапазоне от -3 до $+3$ В, и появление петли гистерезиса при больших смещениях. Впервые было показано, что в таких структурах может наблюдаться эффект резистивного переключения биполярного типа. Продемонстрирована способность соответствующих мемристорных ячеек сохранять свое состояние в течение не менее 65 ч при нормальных условиях, а также выдерживать продолжительные циклы считывания без потери информации.

Ключевые слова: мемристорный эффект, резистивное переключение, нитрид галлия, нитевидные нанокристаллы, кремний

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-01279, <https://rscf.ru/project/23-79-01279/>).

Для цитирования: Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Кавеев А. К., Федоров В. В. Мемристорный эффект в гетероструктурах на основе нитевидных нанокристаллов нитрида галлия на кремнии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 9–20. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18401>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18401>

MEMRISTOR EFFECT IN HETEROSTRUCTURES BASED ON GALLIUM NITRIDE NANOWIRES ON SILICON

К. Yu. Shugurov¹ , А. М. Mozharov¹, А. К. Kaveev², V. V. Fedorov^{3, 1}

¹ Alferov University of RAS, St. Petersburg, Russia;

² Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia;

³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 shugurov17@mail.ru

Abstract. In this work, experimental and theoretical studies of diode heterostructures based on GaN nanowires synthesized on silicon have been carried out. Current-voltage measurements showed the typical backward diode behavior in the range from -3 to $+3$ V and the appearance

of a hysteresis loop at greater biases. It was shown for the first time that the effect of bipolar resistive switching could be observed in such structures. The ability of the corresponding memristor cells to remain their state for a long time (not less than 65 hrs) under normal conditions, as well as to bear long read cycles without loss of information were demonstrated.

Keywords: memristor effect, resistive switching, gallium nitride, nanowires, silicon

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Project No. 23-79-01279, <https://rscf.ru/project/23-79-01279/>).

For citation: Shugurov K. Yu., Mozharov A. M., Kaveev A. K., Fedorov V. V., Memristor effect in heterostructures based on gallium nitride nanowires on silicon, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 9–20. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18401>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Текущее развитие информационных технологий, в частности искусственного интеллекта, требует повышения производительности вычислительных систем и, как следствие, энергозатрат на их работу. В настоящее время научным сообществом активно исследуются пути решения проблем, связанных с плотностью размещения транзисторов в интегральных схемах, а также снижением их энергопотребления. Как известно, физический предел интеграции будет практически достигнут в ближайшие годы [1], дальнейший же прогресс возможен либо путем оптимизации существующей архитектуры, либо через внедрение новых архитектур и методов.

Одним из подходов к преодолению препятствий на пути прогресса является перенос вычислений в память. Такой подход получил название In-Memory-Computing (IMC) и обладает рядом преимуществ, позволяя минимизировать как временную, так и энергетическую составляющую общения процессора с памятью. В свою очередь, многообещающий вариант – это использование резистивной памяти с произвольным доступом (RRAM), в основе которой лежит пассивный элемент – мемристор (*англ.* memory + resistor (память + сопротивление)) [2]. Ключевая особенность мемристоров состоит в способности изменять и «запоминать» свое сопротивление в зависимости от приложенного ранее электрического напряжения. Сегодня мемристорный эффект зафиксирован в различных системах материалов, например оксидах металлов (включая многослойные системы) [3, 4], перовскитах [5], двумерных материалах [6], органических соединениях [7] и полупроводниковых гетероструктурах [8].

Среди полупроводниковых материалов отдельного внимания заслуживает нитрид галлия GaN, поскольку на его основе создаются и выпускаются современные компоненты силовой, опто- и СВЧ-электроники. В контексте мемристорных элементов в последние годы GaN также служит объектом интенсивных исследований [9 – 11]. Вместе с тем реализация GaN в виде нитевидных нанокристаллов (ННК), а не планарных слоев, с одной стороны, обеспечивает высокое кристаллическое качество наноструктур, а с другой – способствует созданию полупроводниковых устройств наномасштабного уровня. Кроме того, ННК GaN высокого кристаллического совершенства можно синтезировать прямо на кремнии Si, без использования буферных слоев [12 – 15], что немаловажно для интеграции с доступной и развитой современной кремниевой технологией.

В данной работе представлены результаты исследований, впервые демонстрирующие наличие мемристорного эффекта в туннельной гетероструктуре GaN ННК/Si.

Синтез и подготовка структур

Нитевидные нанокристаллы нитрида галлия были выращены на кремниевых подложках *p*-типа проводимости методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) с использованием источника газообразного азота индуктивно-связанной плазмы, а также

эффузионной ячейки галлия, установленных в систему Veeco GEN III. Подготовка кремневых пластин и процесс формирования защитного оксидного слоя осуществлялись с помощью модифицированного метода Шираки [16]. Далее оксид удалялся в ростовой камере с помощью термического отжига до температуры $800 - 850^\circ\text{C}$ в течение получаса в условиях сверхвысокого вакуума, с образованием реконструкции поверхности Si(111) 7×7 , подтверждающей ее высокую чистоту. После этого проводилась нитридизация поверхности кремния при температуре 550°C в потоке активированной плазмы азота (скорость – 10 мл/мин) и установленной мощности источника 500 Вт. Затем при той же температуре поверхность ростовой пластины покрывалась моноатомным слоем алюминия, который при последующей подаче азота превращался в слой нитрида алюминия (AlN) и формировал селективную маску для синтеза ННК GaN. При этом на поверхности AlN происходит формирование галлий-полярного слоя GaN, который затем превращается в срастающийся островковый слой, а синтез ННК осуществляется в местах соединений отдельных доменов слоя нитрида алюминия [17].

Дальнейший рост ННК GaN осуществлялся при температуре 850°C . Важно отметить, что использование маски из AlN выбрано не случайно. В процессе осаждения слоя алюминия на поверхность эпитаксиальной пластины происходит частичная диффузия осажденного материала, что приводит к образованию сильнолегированной приповерхностной области p -типа в кремнии. В свою очередь, для обеспечения проводимости n -типа нитевидных нанокристаллов, в процессе их роста они дополнительно легировались кремнием. В совокупности это позволяет уменьшить толщину области пространственного заряда на интерфейсе GaN/Si и усилить влияние туннельных процессов на условия протекания тока в данной структуре.

Изучение морфологии синтезированных структур было проведено с использованием сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Zeiss Supra 25 (рис. 1, *a*, *b*). ННК имеют типичную для данного режима роста коническую форму, которая уширяется по мере удаления от ростовой подложки. На полученных СЭМ-изображениях, помимо массива ННК, отмечается наличие сетчатого паразитного слоя галлий-полярного GaN,

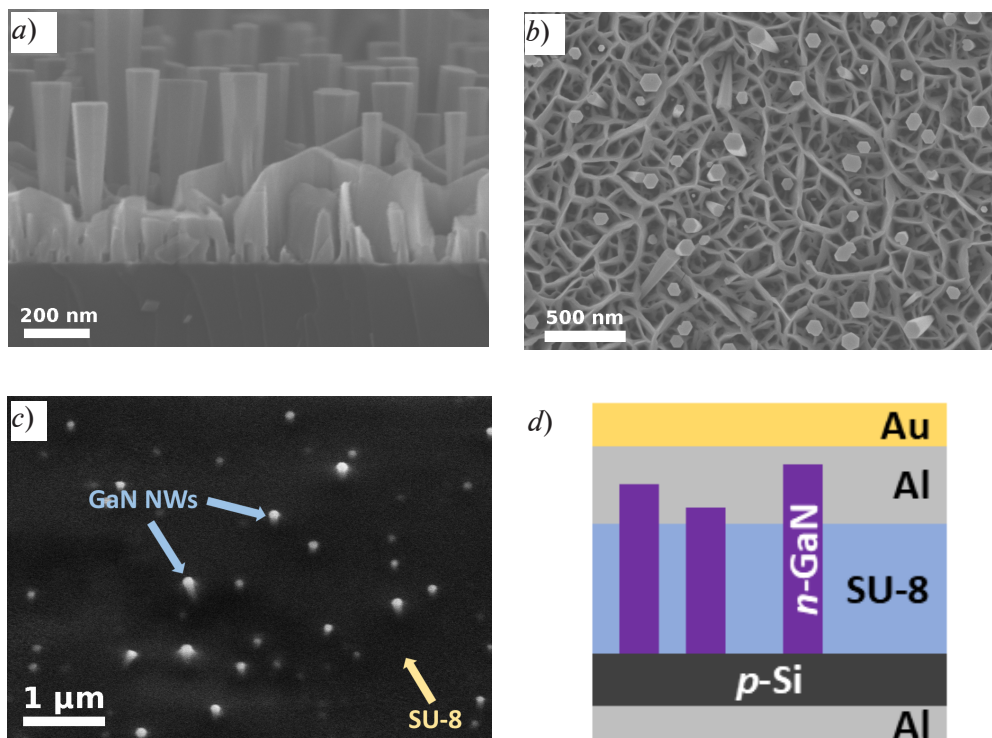


Рис. 1. СЭМ-изображения синтезированной структуры n -GaN ННК / p -Si (*a* – *c*) и схематическое изображение этой структуры после полного цикла постростовой обработки (*d*); *a* – поперечный срез, *b* – вид сверху, *c* – вид под 45° после травления SU-8 в кислородной плазме

расположенного между отдельными ННК, что является типичным для синтеза с использованием маски из AlN. Высота ННК составила до 700 нм при разбросе среднего диаметра от 50 до 150 нм. Оценка поверхностной плотности ННК составила величину порядка 10 мкм^{-2} .

Следующий этап работы был посвящен изготовлению экспериментальных образцов на основе синтезированных эпитаксиальных структур. После нанесения тонкой алюминиевой пленки на тыльную сторону кремниевой подложки (нижний контакт) образец обрабатывали в установке быстрого термического отжига Jipelec JetFirst 100 при температуре 300°C в течение 10 мин в атмосфере азота. Далее пространство между ННК заполнялось при помощи пипетки-дозатора фотоотверждаемой эпоксидной смолой SU-8 с последующим центрифугированием, УФ-экспонированием и окончательным запеканием при температуре 250°C . Для высвобождения вершин ННК от SU-8 (для последующего формирования омического контакта с ННК) проводили частичное травление структуры в кислородной плазме с использованием установки PiNK Plasma system V15-G (400 Вт, 60 ссст, 15 мин). Верхний контакт был выполнен в виде массива круглых мез Al/Au диаметром 100 мкм, полученных с помощью метода лазерной литографии и вакуумного осаждения. Общая толщина контакта составила 250 нм. Для обоих контактов металлизация наносилась в установке термического напыления Auto 500 VOC Edwards. Непосредственно перед загрузкой в камеру соответствующие поверхности в каждом случае обрабатывались растворами плавиковой и соляной кислот (для кремния и нитрида галлия соответственно) с целью удаления поверхностного оксида. Результаты постростового процесса представлены на рис. 1, *c*, *d*.

Результаты и обсуждение

Первым этапом характеризации изготовленных образцов мез были измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ), которые проводились при комнатной температуре на специализированной зондовой станции. Положительный полюс прецизионного источника-измерителя Keithley 2401 прикладывали к нижнему контакту (*p*-Si), а отрицательный – к верхнему (*n*-GaN). Сначала на структуру подавались относительно небольшие напряжения с постепенным расширением диапазона (рис. 2), при этом измерения проводили в циклическом режиме со следующей направленностью:

$$-U \rightarrow 0 \rightarrow +U \rightarrow 0 \rightarrow -U. \quad (1)$$

Как видно на графиках рис. 2, *a*, в диапазоне от -3 до $+3$ В вид ВАХ соответствует поведению обращенного диода, когда обратная ветвь открывается раньше, чем прямая. Это свидетельствует о том, что степени легирования слоев, образующих *p-n*-переход, подобраны так, что дно зоны проводимости нитрида галлия в равновесном состоянии находится примерно на одном энергетическом уровне с потолком валентной зоны кремния [18].

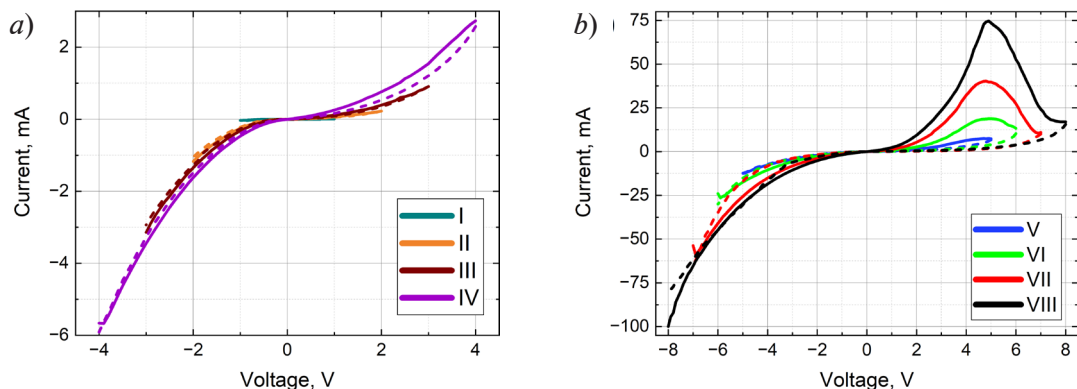


Рис. 2. Графики шестнадцати ВАХ, измеренных в режиме (1) (сплошные линии) и в обратном направлении ($+U \rightarrow -U$) (пунктиры) одной из мез изготовленной структуры.

Цветные кривые отражают результаты I – IV (*a*) и V – VIII (*b*) измерений

При дальнейшем повышении прикладываемого напряжения (сверх 5 В) отмечается появление участка отрицательного дифференциального сопротивления, а также гистерезиса при прямом ($-U \rightarrow +U$) и обратном ($+U \rightarrow -U$) направлениях смещения (рис. 2, *b*).

Для получения более полной картины аналогичный эксперимент был проведен на пяти других мезах (порядковые номера C2R5 – C2R9). В данном случае (рис. 3) измерительный цикл с началом и окончанием при нулевом напряжении состоял из четырех последовательных участков, совокупно охватывающих диапазон от -8 до $+8$ В. Как следует из рис. 3, все мезы проявляют гистерезисы, при этом графики ВАХ хорошо соответствуют друг другу во всем рассматриваемом диапазоне. Гистерезис в области положительных напряжений наблюдался только после предварительного обратного смещения структур (шаги 1 и 2), что согласуется с ВАХ в режиме (1) (сплошные линии на рис. 2, *b*). На основании этих результатов, а также аналогичных вольтамперных характеристик других мез (здесь не представлены), можно сделать вывод, что подача на структуру напряжения обратной полярности в течение порядка 10 с (это время измерения ВАХ в диапазоне от 0 до -8 В) в последующем приводит к значительному росту прямого тока относительно этой же структуры, что эквивалентно процедуре записи в ячейку памяти. В свою очередь подача прямого смещения, эквивалентного шагу 4, нивелирует этот эффект, переводя структуру в исходное состояние с меньшей проводимостью (см. рис. 2, *b* и 3). Данное явление повторяется, и структуру можно многократно переводить из одного стабильного состояния в другое, прикладывая напряжение нужной полярности (прямое смещение – стирание, обратное – запись).

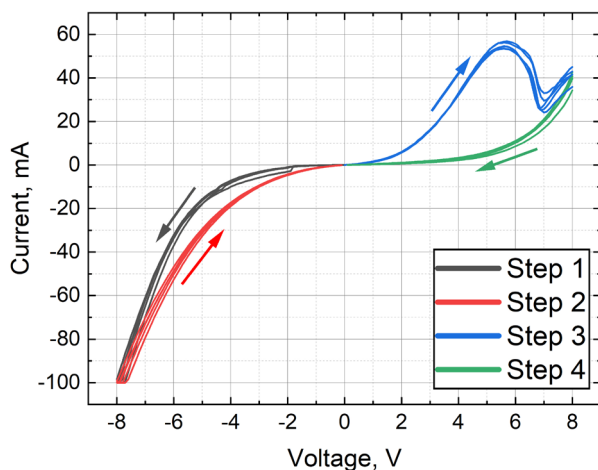


Рис. 3. Суперпозиция циклических ВАХ, полученных в режиме измерения $0 \text{ В} \rightarrow -8 \text{ В} \rightarrow 0 \text{ В} \rightarrow +8 \text{ В} \rightarrow 0 \text{ В}$ для пяти различных мез (их порядковые номера C2R5 – C2R9)

имеет малый радиус). При этом уровни, для которых волновая функция в значительной степени локализована внутри слоя, будут образовывать ловушки для носителей заряда с длительным временем жизни. Такие уровни не будут участвовать в транспорте носителей заряда, но могут косвенно влиять на процесс переноса заряда, инициируемый кулоновскими силами. Как мы полагаем, именно указанные состояния в исследуемой структуре ответственны за появление особенностей на кривых вольтамперных характеристик.

На рис. 4 представлены зонные диаграммы исследуемых структур, соответствующие различным шагам измерения ВАХ, отмеченных на рис. 3. Первоначально зонная структура исследуемой системы (см. рис. 4, *a*) соответствует некоторому распределению носителей заряда на изолированных центрах широкозонного интерфейсного слоя (на рис. 4 не представлен), которое определяется процедурой эпитаксиального синтеза и, предположительно, близко к равновесному вследствие высокой температуры роста. Зонная структура системы при этом будет соответствовать зонной структуре интерфейса GaN/Si с учетом статических поправок, вызванных наличием локальных механических деформаций ввиду

Мы полагаем, что физическая природа такого поведения исследуемых структур тесно связана с особенностями синтеза ННК. Алюминий, галлий, азот и кремний – это представители разных групп таблицы Менделеева и способны образовывать большое количество различных соединений, включая широкозонные полупроводники. Таким образом, в процессе синтеза структуры между подложкой и ННК GaN возможно образование тонких слоев нитрида кремния, силицидов и других соединений, наличие которых может влиять на процесс транспорта носителей заряда между нитридом галлия и кремнием. Широкозонные слои обладают важной особенностью – возможным наличием зарядовых центров, энергетические уровни которых расположены глубоко в запрещенной зоне материала и описываются высоколокализованной волновой функцией (электронная орбиталь

разницы постоянных кристаллической решетки GaN и Si, а также наличием заряда в нитриде галлия, индуцированного в результате пьезоэффекта. При подаче отрицательного напряжения (см. рис. 4, *b*) на полупроводниковую структуру (I шаг, согласно рис. 3) может сложиться ситуация, когда с обеих сторон изолированных центров окажутся в непосредственной близости состояния непрерывного спектра (разрешенные зоны нитрида галлия и кремния); а это обеспечит возможность туннелирования носителей через такие центры по механизму Пула – Френкеля [19], т.е. уменьшения времени жизни состояний и их перезарядки до установления локального равновесия, отвечающего данному уровню смещения – происходит «запись» состояния. При снятии приложенного напряжения (см. II шаг на рис. 3) снова происходит изоляция носителей на глубоких центрах, при этом измененное распределение носителей заряда на центрах обеспечивает изменение кулоновского поля и, как следствие, искажается зонная структура всего гетероинтерфейса (см. рис. 4, *c*), что влияет на равновесную концентрацию свободных носителей заряда в GaN и Si вблизи интерфейса и приводит к изменению условий их туннелирования и рекомбинации. В исследуемой нами полупроводниковой структуре изменение заряда изолированных центров соответствует увеличению силы тока при прямом смещении (см. шаг 3 на рис. 3), что в совокупности с ожидаемыми уровнями легирования GaN (порядка 10^{19} см⁻³) и Si (порядка 10^{20} см⁻³) дает основание полагать, что энергетические уровни локализованных центров в запрещенной зоне расположены ниже уровня Ферми, а процедура их «записи» при подаче отрицательного смещения приводит к росту положительного заряда и сближению значений высоты потенциального барьера вблизи интерфейса для электронов в GaN и дырок в Si, т.е. росту произведения равновесных концентраций. Дальнейшее увеличение прямого смещения обеспечивает открывание диодной структуры (рис. 4, *d*), что приводит к значительному росту концентрации свободных носителей заряда вблизи интерфейса и перезарядке изолированных центров либо через процесс рекомбинации Шокли – Рида – Холла с участием свободных носителей, заброшенных в разрешенную зону широкозонного интерфейсного слоя между GaN и Si, либо через захват носителей на иные энергетические уровни в запрещенной зоне данного слоя и их последующую рекомбинацию с носителями, расположенными на изолированных центрах. Таким образом происходит операция «стирания» состояния. Важно при этом отметить, что подача напряжения ниже пороговых значений (порога туннелирования носителей по механизму Пула – Френкеля или порога активации механизма рекомбинации Шокли – Рида – Холла) не будет приводить к изменению распределения заряда на изолированных центрах и тем самым не будет трансформировать состояние системы. В нашем случае такая ситуация экспериментально наблюдается; это можно видеть на рис. 2, *a*: на ВАХ в диапазоне от -3 до $+3$ В отсутствует гистерезис.

Полученные результаты целесообразно сопоставить с литературными данными. Например, интерфейсный тип переключения в мемристорах упоминается в книге [20]. В работах [21, 22] наблюдается резистивное переключение в структурах металл/перовскит, зависящее от полярности прикладываемого напряжения. При этом авторы объясняют данный эффект в рамках модели с ловушечными состояниями на интерфейсе. В статьях [23, 24] исследуются мемристоры, в основе работы которых лежат зарядовые ловушки. Встречаются также теоретические исследования резистивного переключения в мемристорах на базе интерфейсной ловушечной модели [25]. Таким образом, мы считаем возможным, что в исследуемых образцах имеет место резистивное переключение биполярного типа (переключение состояний выполняется напряжением различной полярности). Насколько нам известно, для гетероструктур GaN ННК/Si данный эффект установлен впервые.

На следующем этапе исследований анализировались мемристоры свойства рассматриваемых гетероструктур. С учетом того, что запись логической единицы (или низкоомного состояния, *англ.* Low Resistive State (LRS)) осуществляется напряжением обратной полярности, мы подали смещение -8 В в течение 10 с на одну из мез (с порядковым номером C2R4), ранее не задействованной в измерениях. Затем структура была отключена от внешней цепи и оставлена на 65 ч без каких-либо воздействий. По истечении указанного времени к ней вновь подсоединили токосъемные зонды и провели серию считываний ее сопротивления из 738 циклов при помощи вспомогательной обвязки (рис. 5, *a*).

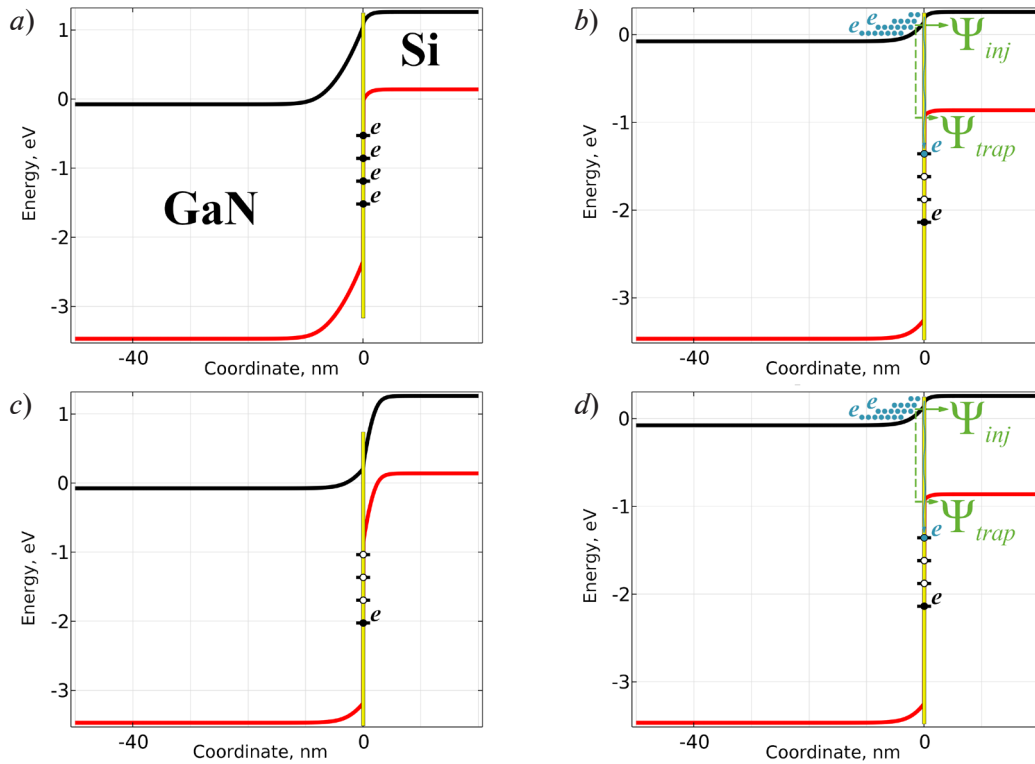


Рис. 4. Зонные диаграммы, поясняющие наблюдаемый эффект в исследуемых структурах на примере цикла запись-стирание: изначальное состояние $U = 0$ (a), запись $0 \rightarrow -U$ (b), запись $-U \rightarrow 0$ (c), стирание $0 \rightarrow +U$ (d); Ψ_{tun} , Ψ_{inj} , Ψ_{trap} – волновые функции тунnelирования, состояний системы после инжекции и захвата электронов (e) в ловушки, соответственно

Считывание проводили прямоугольными импульсами напряжением $+0,5$ В с частотой $0,1$ Гц (длительность импульсов составляла 1 мс). Ток, проходящий через структуру, преобразовывался при помощи трансимпедансного усилителя (ТА на рис. 5) в напряжение, которое регистрировалось осциллографом. Первые 198 циклов показания напряжения на выходе ТА записывались каждые 10 с, следующие 60 циклов – каждую минуту и последние 480 циклов – каждые 10 мин. Результаты измерений представлены на рис. 5, b.

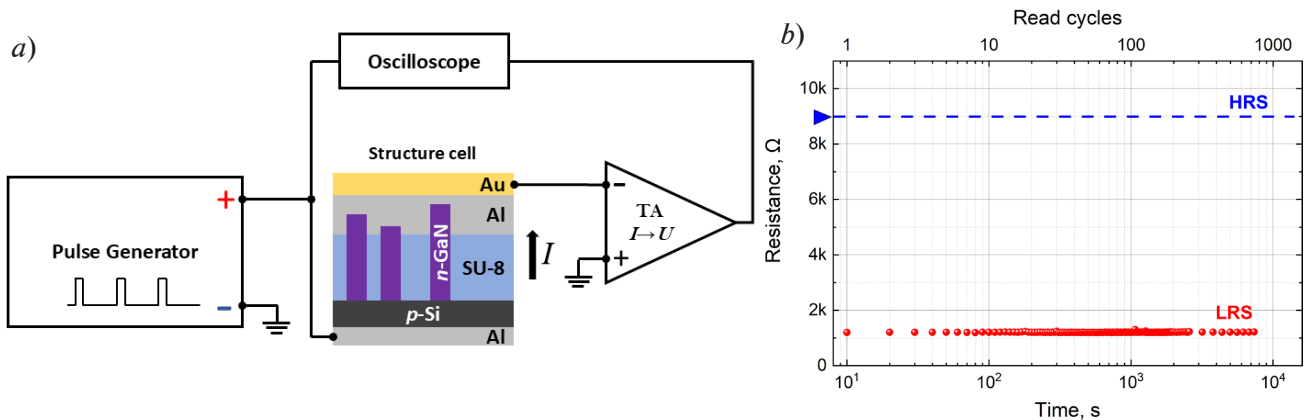


Рис. 5. Исследование мемристорных свойств ячейки C2R4 через 65 ч после записи в нее логической единицы: a – схематичное изображение измерительной цепи, b – временная развертка последовательных импульсных считываний сопротивления напряжением $V_{read} = 0,5$ В с частотой $0,1$ Гц;

HRS, LRS – высоко- и низкоомное состояния, которые соответствуют уровням логического нуля и единицы соответственно

Поскольку в изначальных условиях структурные ячейки находятся в высокоомном состоянии (*англ.* High Resistive State (HRS)), или состоянии логического нуля, то перед процедурой записи логической единицы была получена прямая ветвь ВАХ для значений напряжения до 5 В. По этой зависимости для напряжения считывания было найдено значение сопротивления, соответствующее HRS-состоянию, оно составило 9 кОм (отмечено синей линией на рис. 5, *b*).

Как видно, на протяжении всего времени считываний значение сопротивления ячейки практически не претерпевает изменений и находится на уровне 1,2 кОм, что более чем в 7 раз ниже относительно HRS-состояния. После этого эксперимента на ячейку было подано продолжительное прямое смещение +8 В, в результате чего она была возвращена в первоначальное высокоомное состояние. Контроль возврата в исходное состояние выполнен путем повторного измерения ВАХ, а также через ее сопоставление с аналогичной характеристикой, полученной до записи логической единицы в ячейку. Таким образом, исследуемые структуры демонстрируют способность запоминать и хранить логическую переменную.

Заключение

В работе проведены исследования гетероструктур нитевидных нанокристаллов (ННК) *n*-GaN/*p*-Si, синтезированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии с использованием алюминиевой затравки для инициации роста ННК. К массивам вертикально ориентированных ННК методами постростовой обработки сформированы омические контакты в виде круглых мез-площадок диаметром 100 мкм. По результатам вольтамперных измерений в циклических режимах впервые обнаружено, что в соответствующих структурах наблюдается эффект биполярного резистивного переключения, а также продемонстрирована их способность в течение довольно длительного времени (не менее 65 ч) сохранять низкоомное состояние с последующей серией многократного считывания (738 циклов) без потери данных.

Таким образом, гетероструктуры нитевидных нанокристаллов *n*-GaN/*p*-Si способны проявлять мемристорские свойства, которые, как мы полагаем, обусловлены наличием в области гетероинтерфейса управляемых зарядовых центров, влияющих на проводимость системы за счет полевых эффектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li H., Li Q., Li Y., et al. Experimental breakthroughs on 2D transistors: Approaching the theoretical limit // *Advanced Functional Materials*. 2024. Vol. 34. No. 38. P. 2402474.
2. Chua L. Memristor – the missing circuit element // *IEEE Transactions on Circuit Theory*. 1971. Vol. 18. No. 5. Pp. 507–519.
3. Mohammad B., Jaoude M. A., Kumar V., Al Homouz D. M., Nahla H. A., Al-Qutayri M., Christoforou N. State of the art of metal oxide memristor devices // *Nanotechnology Reviews*. 2016. Vol. 5. No. 3. Pp. 311–329.
4. Mikhaylov A., Belov A., Korolev D., et al. Multilayer metal-oxide memristive device with stabilized resistive switching // *Advanced Materials Technologies*. 2020. Vol. 5. No. 1. P. 1900607.
5. Xiao X., Hu J., Tang S., Yan K., Gao B., Chen H., Zou D. Recent advances in halide perovskite memristors: Materials, structures, mechanisms, and applications // *Advanced Materials Technologies*. 2020. Vol. 5. No. 6. P. 1900914.
6. Duan H., Cheng S., Qin L., Zhang X., Xie B., Zhang Y., Jie W. Low-power memristor based on two-dimensional materials // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2022. Vol. 13. No. 31. Pp. 7130–7138.
7. Kim M.-H., Park H.-L., Kim M.-H., Jang J., Bae J.-H., Kang I.M., Lee S.-H. Fluoropolymer-based organic memristor with multifunctionality for flexible neural network system // *npj Flexible Electronics*. 2021. Vol. 5. No. 1. P. 34.
8. Song W., Yu H., Li X., Fang R., Zhu W., Zhang L. Electric-controlled resistive switching and different synaptic behaviors in p^+ -Si/*n*-ZnO heterojunction memristor // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2023. Vol. 70. No. 4. Pp. 1648–1652.

9. Khan M. U., Furqan C. M., Kim J., et al. Asymmetric GaN/ZnO engineered resistive memory device for electronic synapses // *ACS Applied Electronic Materials*. 2022. Vol. 4. No. 1. Pp. 297–307.
10. Dragoman M., Tiginyanu I., Dragoman D., Dinescu A., Braniste T., Ciobanu V. Learning mechanisms in memristor networks based on GaN nanomembranes // *Journal of Applied Physics*. 2018. Vol. 124. No. 15. P. 152110.
11. Liu M., Lu S., Jia Y., Zang H., Jiang K., Sun X., Li D. AlScN/*n*-GaN ferroelectric memristors with controllable on/off ratios and reversible bipolar resistive switching characteristics // *IEEE Electron Device Letters*. 2024. Vol. 45. No. 3. Pp. 356–359.
12. Bolshakov A. D., Fedorov V. V., Shugurov K. Y., Mozharov A. M., Sapunov G. A., Shtrom I. V., Mukhin M. S., Uvarov A. V., Cirlin G. E., Mukhin I. S. Effects of the surface preparation and buffer layer on the morphology, electronic and optical properties of the GaN nanowires on Si // *Nanotechnology*. 2019. Vol. 30. No. 39. P. 395602.
13. Bolshakov A. D., Mozharov A. M., Sapunov G. A., Shtrom I. V., Sibirev N. V., Fedorov V. V., Ubyivovk E. V., Tchernycheva M., Cirlin G. E., Mukhin I. S. Dopant-stimulated growth of GaN nanotube-like nanostructures on Si(111) by molecular beam epitaxy // *Beilstein Journal of Nanotechnology*. 2018. Vol. 9. No. 1. Pp. 146–154.
14. Mozharov A., Bolshakov A., Cirlin G., Mukhin I. Numerical modeling of photovoltaic efficiency of *n*-type GaN nanowires on *p*-type Si heterojunction // *Physica Status Solidi – Rapid Research Letters*. 2015. Vol. 9. No. 9. Pp. 507–510.
15. Fedorov V. V., Bolshakov A. D., Kirilenko D. A., Mozharov A. M., Sitnikova A. A., Sapunov G. A., Dvoretckaia L. N., Shtrom I. V., Cirlin G. E., Mukhin I. S. Droplet epitaxy mediated growth of GaN nanostructures on Si (111) via plasma-assisted molecular beam epitaxy // *CrystEngComm*. 2018. Vol. 20. No. 24. Pp. 3370–3380.
16. Kern W. The evolution of silicon wafer cleaning technology // *Journal of The Electrochemical Society*. 1990. Vol. 137. No. 6. Pp. 1887–1892.
17. Brubaker M. D., Duff S. M., Harvey T. E., Blanchard P. T., Roshko A., Sanders A. W., Sanford N. A., Bertness K. A. Polarity-controlled GaN/AlN nucleation layers for selective-area growth of GaN nanowire arrays on Si(111) substrates by molecular beam epitaxy // *Crystal Growth & Design*. 2016. Vol. 16. No. 2. Pp. 596–604.
18. Барыкин Д. А., Шугуров К. Ю., Можаров А. М., Мухин И. С. Численное моделирование туннельного эффекта в гетероструктуре нитрида галлия на кремнии // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2024. Т. 17. № 3. С. 46–56.
19. Frenkel J. On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors // *Physical Review*. 1938. Vol. 54. No. 8. Pp. 647–648.
20. Ielmini D., Waser R. (Eds.) Resistive switching: From fundamentals of nanoionic redox processes to memristive device applications. 1st edition. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2016. 784 p.
21. Sawa A., Fujii T., Kawasaki M., Tokura Y. Hysteretic current–voltage characteristics and resistance switching at a rectifying Ti/Pr_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃ interface // *Applied Physics Letters*. 2004. Vol. 85. No. 18. Pp. 4073–4075.
22. Fujii T., Kawasaki M., Sawa A., Akoh H., Kawazoe Y., Tokura Y. Hysteretic current–voltage characteristics and resistance switching at an epitaxial oxide Schottky junction SrRuO₃/SrTi_{0.99}Nb_{0.01}O₃ // *Applied Physics Letters*. 2005. Vol. 86. No. 1. P. 012107.
23. Yoon J. H., Song S. J., Yoo I., Seok J. Y., Yoon K. J., Kwon D. E., Park T. H., Hwang C. S. Highly uniform, electroforming-free, and self-rectifying resistive memory in the Pt/Ta₂O₅/HfO_{2-x}/TiN structure // *Advanced Functional Materials*. 2014. Vol. 24. No. 32. Pp. 5086–5095.
24. Park T., Kim J., Kwon Y. J., Kim H. J., Yim S. P., Shin D. H., Kim Y. R., Kim H. J., Hwang C. S. Au-nanodots embedded self-rectifying analog charge trap memristor with modified bias voltage application method for stable multi-bit hardware-based neural network // *Advanced Materials Technologies*. 2025. Vol. 10. No. 3. P. 2400965.
25. Tian Y., Jiang L., Zhang X., Zhang G., Zhu Q. Trap-assisted transition between Schottky emission and Fowler–Nordheim tunneling in the interfacial-memristor based on Bi₂S₃ nano-networks // *AIP Advances*. 2018. Vol. 8. No. 3. P. 035105.

REFERENCES

1. Li H., Li Q., Li Y., et al., Experimental breakthroughs on 2D transistors: Approaching the theoretical limit, *Adv. Funct. Mater.* 34 (38) (2024) 2402474.
2. Chua L., Memristor – the missing circuit element, *IEEE Trans. Circuit Theory.* 18 (5) (1971) 507–519.
3. Mohammad B., Jaoude M. A., Kumar V., et al., State of the art of metal oxide memristor devices, *Nanotechnol. Rev.* 5 (3) (2016) 311–329.
4. Mikhaylov A., Belov A., Korolev D., et al., Multilayer metal-oxide memristive device with stabilized resistive switching, *Adv. Mater. Technol.* 5 (1) (2020) 1900607.
5. Xiao X., Hu J., Tang S., et al., Recent advances in halide perovskite memristors: Materials, structures, mechanisms, and applications, *Adv. Mater. Technol.* 5 (6) (2020) 1900914.
6. Duan H., Cheng S., Qin L., et al., Low-power memristor based on two-dimensional materials, *J. Phys. Chem. Lett.* 13 (31) (2022) 7130–7138.
7. Kim M.-H., Park H.-L., Kim M.-H., et al., Fluoropolymer-based organic memristor with multifunctionality for flexible neural network system, *npj Flex.* 5 (1) (2021) 34.
8. Song W., Yu H., Li X., et al., Electric-controlled resistive switching and different synaptic behaviors in p^+ -Si/ n -ZnO heterojunction memristor, *IEEE Trans. Electron Dev.* 70 (4) (2023) 1648–1652.
9. Khan M. U., Furqan C. M., Kim J., et al., Asymmetric GaN/ZnO engineered resistive memory device for electronic synapses, *ACS Appl. Electron. Mater.* 44 (1) (2022) 297–307.
10. Dragoman M., Tiginyanu I., Dragoman D., et al., Learning mechanisms in memristor networks based on GaN nanomembranes, *J. Appl. Phys.* 124 (15) (2018) 152110.
11. Liu M., Lu S., Jia Y., et al., AlScN/ n -GaN ferroelectric memristors with controllable on/off ratios and reversible bipolar resistive switching characteristics, *IEEE Electron Device Lett.* 45 (3) (2024) 356–359.
12. Bolshakov A. D., Fedorov V. V., Shugurov K. Y., et al., Effects of the surface preparation and buffer layer on the morphology, electronic and optical properties of the GaN nanowires on Si, *Nanotechnol.* 30 (39) (2019) 395602.
13. Bolshakov A. D., Mozharov A. M., Sapunov G. A., et al., Dopant-stimulated growth of GaN nanotube-like nanostructures on Si(111) by molecular beam epitaxy, *Beilstein J. Nanotechnol.* 9 (1) (2018) 146–154.
14. Mozharov A., Bolshakov A., Cirilin G., Mukhin I., Numerical modeling of photovoltaic efficiency of n -type GaN nanowires on p -type Si heterojunction, *Phys. Status Solidi – Rapid Res. Lett.* 9 (9) (2015) 507–510.
15. Fedorov V. V., Bolshakov A. D., Kirilenko D. A., et al., Droplet epitaxy mediated growth of GaN nanostructures on Si (111) via plasma-assisted molecular beam epitaxy, *CrystEngComm.* 20 (24) (2018) 3370–3380.
16. Kern W., The evolution of silicon wafer cleaning technology, *J. Electrochem. Soc.* 137(6) (1990) 1887–1892.
17. Brubaker M. D., Duff S. M., Harvey T. E., et al., Polarity-controlled GaN/AlN nucleation layers for selective-area growth of GaN nanowire arrays on Si(111) substrates by molecular beam epitaxy, *Cryst. Growth Des.* 16 (2) (2016) 596–604.
18. Barykin D., Shugurov K., Mozharov A., Mukhin I., Numerical simulation of the tunnel effect in the gallium nitride heterostructure on silicon, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 17 (3) (2024) 46–56 (in Russian).
19. Frenkel J., On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors, *Phys. Rev.* 54 (8) (1938) 647–648.
20. Ielmini D., Waser R. (Eds.), Resistive switching: From fundamentals of nanoionic redox processes to memristive device applications; 1st edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim, Germany, 2016.
21. Sawa A., Fujii T., Kawasaki M., Tokura Y., Hysteretic current–voltage characteristics and resistance switching at a rectifying Ti/Pr_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃ interface, *Appl. Phys. Lett.* 85 (18) (2004) 4073–4075.



22. **Fujii T., Kawasaki M., Sawa A., et al.**, Hysteretic current–voltage characteristics and resistance switching at an epitaxial oxide Schottky junction $\text{SrRuO}_3/\text{SrTi}_{0.99}\text{Nb}_{0.01}\text{O}_3$, *Appl. Phys. Lett.* 86 (1) (2005) 012107.
23. **Yoon J. H., Song S. J., Yoo I., et al.**, Highly uniform, electroforming-free, and self-rectifying resistive memory in the $\text{Pt}/\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{HfO}_{2-x}/\text{TiN}$ structure, *Adv. Funct. Mater.* 24 (32) (2014) 5086–5095.
24. **Park T., Kim J., Kwon Y. J., et al.**, Au-nanodots embedded self-rectifying analog charge trap memristor with modified bias voltage application method for stable multi-bit hardware-based neural network, *Adv. Mater. Technol.* 10 (3) (2025) 2400965.
25. **Tian Y., Jiang L., Zhang X., et al.**, Trap-assisted transition between Schottky emission and Fowler–Nordheim tunneling in the interfacial-memristor based on Bi_2S_3 nano-networks, *AIP Adv.* 8 (3) (2018) 035105.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ШУГУРОВ Константин Юрьевич – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
shugurov17@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8973-3187

МОЖАРОВ Алексей Михайлович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
mozharov@spbau.ru
ORCID: 0000-0002-8661-4083

КАВЕЕВ Андрей Камилевич – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории мощных полупроводниковых приборов Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
kaveev@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0002-3640-677X

ФЕДОРОВ Владимир Викторович – кандидат физико-математических наук, заведующий научно-исследовательской лабораторией Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии Академического университета имени Ж. И. Алфёрова РАН, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
fedorov_vv@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5547-9387

THE AUTHORS

SHUGUROV Konstantin Yu.

Alferov University, RAS
8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia
shugurov17@mail.ru
ORCID: 0000-0001-8973-3187

MOZHAROV Alexey M.

Alferov University, RAS

8/3 Khlopin St., St. Petersburg, 194021, Russia

mozharov@spbau.ru

ORCID: 0000-0002-8661-4083

KAVEEV Andrey K.

Ioffe Institute, RAS

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

kaveev@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0002-3640-677X

FEDOROV Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,

Alferov University, RAS

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

fedorov_vv@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5547-9387

*Статья поступила в редакцию 18.04.2025. Одобрена после рецензирования 16.07.2025.
Принята 16.07.2025.*

Received 18.04.2025. Approved after reviewing 16.07.2025. Accepted 16.07.2025.

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 538.913

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18402>

РАЗРАБОТКА УПРУГОЙ МОДЕЛИ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ ЦИРКОНАТА СВИНЦА С УЧЕТОМ ПРИИНТЕРФЕЙСНЫХ МИКРОСКРУЧИВАНИЙ

И. В. Хлюпин , **В. Р. Мешков**, **Д. А. Соколова**, **Р. Г. Бурковский**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 hlyupin.iv@yandex.ru

Аннотация. Цель работы – построение модели для описания микроскопических скручиваний в эпитаксиальных тонких пленках на основе цирконата свинца $PbZrO_3$. Модель описывает эпитаксиальный контакт пленки с подложкой и условия механической совместимости доменов, вклады от псевдополяризации, упругих и домен-доменных взаимодействий, а также вклад от аналога электрострикции в сегнетоэлектрических материалах. Оптимизация значений параметров осуществлялась через минимизацию свободной энергии при варьировании величины упругих смещений и векторов псевдополяризации. Полученные результаты качественно воспроизвели часть экспериментальных наблюдений по стыковке доменов в изучаемых пленках, а именно – изменение микроскопических скручиваний в области доменных стенок при удалении эпитаксиальной структуры от ее подложки.

Ключевые слова: антисегнетоэлектрик, эпитаксиальная тонкая пленка, псевдополяризация, свободная энергия, метод градиентного спуска

Финансирование: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №20-72-10126).

Для цитирования: Хлюпин И. В., Мешков В. Р., Соколова Д. А., Бурковский Р. Г. Разработка упругой модели эпитаксиальной тонкой пленки цирконата свинца с учетом приинтерфейсных микроскручиваний // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 21–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18402>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18402>

DEVELOPMENT OF AN ELASTIC MODEL FOR THE EPITAXIAL THIN FILM OF LEAD ZIRCONATE CONSIDERING INTERFACIAL MICRO-TWISTS

I. V. Khlyupin , **V. R. Meshkov**, **D. A. Sokolova**, **R. G. Burkovsky**

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 hlyupin.iv@yandex.ru

Abstract. The aim of this work was to develop a model to describe some microscopic phenomena in the epitaxial thin films based on lead zirconate $PbZrO_3$. The model takes into

account the epitaxial contact of the film with the substrate and conditions for mechanical compatibility of the domains. It includes contributions from pseudopolarization, elastic and domain-domain interactions as well as a contribution analogous to electrostriction in ferroelectric materials. The parameter optimization has been performed through free energy minimization with varying the magnitudes of elastic displacements and the pseudopolarization vectors. The results obtained qualitatively reproduced a part of the experimental observations on the domain matching in the thin films, to be exact, the change in microscopic twisting in the domain wall regions when removing the epitaxial structure away from the substrate.

Keywords: antiferroelectrics, epitaxial thin films, pseudopolarization, free energy, gradient descent method

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Project No. 20-72-10126).

For citation: Khlyupin I. V., Meshkov V. R., Sokolova D. A., Burkovsky R. G., Development of an elastic model for the epitaxial thin film of lead zirconate considering interfacial micro-twists, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 21–33. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18402>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Антисегнетоэлектрики – это кристаллические соединения, в которых наблюдается антипараллельное ориентирование электрических дипольных моментов соседствующих ионов (в определенном интервале температур). Сегнетоэлектрики – это кристаллические соединения, в которых наблюдается спонтанная поляризация даже в отсутствие внешнего электрического поля. Эти два типа материалов во многом родственны, но на данный момент первые относятся к менее изученным. Однако уже сейчас антисегнетоэлектрики находят практическое применение, например, при производстве конденсаторов в качестве диэлектриков. Антисегнетоэлектрики близки к использованию в других областях: активно изучается возможность их применения для хранения данных и запасаания энергии [1 – 4].

Особые свойства указанных материалов двух типов обусловлены их доменной структурой. В случае сегнетоэлектриков доменом называют область, в пределах которой наблюдается однородное упорядочение дипольных моментов элементарных ячеек. Наличие в элементарной ячейке нескомпенсированного электрического дипольного момента приводит к появлению макроскопической поляризации. Что касается антисегнетоэлектриков, то домены уже не удастся охарактеризовать только через поляризацию и приходится вводить дополнительную характеристику – антиполяризацию [5]. Последняя подразумевает противоположно направленную поляризацию в соседних элементарных ячейках, приводящую к нулевой макроскопической поляризации.

На сегодняшний день существует много различных моделей для описания свойств монокристаллических сегнето- и антисегнетоэлектриков [5 – 10]. В основе большинства из них лежит феноменологическая теория Ландау. Для описания свободной энергии антисегнетоэлектриков, в качестве параметров порядка используются поляризация и антиполяризация, а также деформация кристаллической решетки [5].

Однако моделей, согласующихся с экспериментальными наблюдениями взаимодействия доменов в тонких пленках антисегнетоэлектриков, в настоящий момент не существует. Тенденции в разработке электронных устройств говорят о необходимости изучения тонкопленочных эпитаксиальных структур для возможности предсказывать свойства наноразмерных структур и снижать количество дорогостоящих экспериментов. Создание таких моделей может служить подспорьем в трактовке сложных явлений, характерных для тонких эпитаксиальных структур антисегнетоэлектриков [6, 11 – 13], а значит построение таких моделей является актуальной задачей.

В недавней работе по изучению эпитаксиальной тонкой пленки PbZrO_3 [12] было экспериментально зафиксировано уширение сверхструктурных дифракционных рефлексов. Этот эффект не наблюдался ранее; авторы работы объяснили его тем, что связь с подложкой препятствует установлению условий механической совместимости доменов в пленке – появляются приинтерфейсные микроскривания.

Указанное экспериментальное изучение эпитаксиальной тонкой пленки цирконата свинца послужило отправной точкой для данной работы.

Цели настоящего исследования – построить модель микроструктурных явлений в эпитаксиальной тонкой пленке цирконата свинца для анализа влияния подложки на сосуществование доменов, оценить применимость предложенной модели через воспроизведение экспериментальных наблюдений.

В основу модели легла феноменологическая теория фазовых переходов Ландау. При этом мы рассматривали кристалл PbZrO_3 в контексте сегнетоупругих искажений, происходящих в его структуре; модель оперирует введенным нами вспомогательным параметром порядка – псевдополяризацией. Данный параметр используется вместо применявшегося ранее параметра антиполяризации для упрощения модели: она соответствует доменным структурам более высокого уровня. Если определенное направление антиполяризации соответствует направлениям ионных сдвигов в доменах PbZrO_3 , то определенное направление псевдополяризации соответствует агломерациям доменов с практически одинаковым тензором спонтанной деформации. Такой подход более удобен, когда рассматриваются только эффекты упругости.

Оптимальные параметры модели подбирались таким образом, чтобы при минимизации свободной энергии воспроизводились экспериментально найденные соотношения постоянных решетки путем численных расчетов.

Модель свободной энергии

Основой предложенного нами описания стала модель, предложенная в статье [10] для титаната бария BaTiO_3 на базе феноменологической теории Ландау с одним параметром порядка. Картина антисегнетоэлектрических доменов в кристаллах PbZrO_3 сложна для описания, тогда как характер сегнетоупругих искажений описывается значительно проще. В нашей модели для рассмотрения сегнетоупругих искажений в качестве параметра порядка был выбран параметр псевдополяризации.

Псевдополяризация – это введенный нами вспомогательный параметр порядка, который отличается от поляризации тем, что не приводит к появлению деполяризующих полей. Это абстрактный параметр порядка, и мы считаем, что он возникает в кристалле цирконата свинца при фазовом переходе кристалла из параэлектрической фазы в антисегнетоэлектрическую.

Возникновение спонтанной псевдополяризации приводит к понижению симметрии кристалла с кубической до тетрагональной. Это более высокая симметрия, чем реальная симметрия PbZrO_3 (орторомбическая), но она с допустимой точностью соответствует реальному тензору спонтанных натяжений орторомбической фазы.

Элементарную ячейку орторомбической симметрии целесообразно рассматривать как псевдотетрагональную, с постоянными кристаллической решетки

$$a_{pt} = a_0/\sqrt{2} \approx b_0/2\sqrt{2}, \quad c_{pt} = c_0/\sqrt{2},$$

где a_0, b_0, c_0 – постоянные орторомбической решетки; a_{pt}, c_{pt} – постоянные псевдотетрагональной решетки [12].

Таким образом, построенное нами описание аналогично модели в работе [10] для сегнетоэлектрика, за исключением того, что в предложенном нами описании отсутствует слагаемое, отвечающее за возникновение деполяризующих полей.

Направление псевдополяризации задается соосно c_{pt} при псевдотетрагональном рассмотрении кристаллической решетки. Отношение постоянных решетки вдоль осей **a** и **b** составляет 1 : 2, в то время как постоянная решетки в направлении оси **c** на 1% меньше, чем в направлении оси **a**. Благодаря этому значительное нарушение механической совместимости антисегнетоэлектрических доменов наблюдается, только если у доменов имеют место разнонаправленные оси **c**.

Рассмотрим подробнее возможные антисегнетоэлектрические доменные конфигурации, чтобы уточнить, что представляют собой псевдополяризационные домены. Антисегнетоэлектрические доменные структуры в цирконате свинца иерархичны и весьма сложны. В орторомбической фазе возможны шесть ориентационных состояний, для каждого из которых возможны четыре трансляционных состояния. В итоге имеются 24 возможных доменных состояния. Самыми простыми являются доменные структуры, состоящие из доменов, которые различаются только трансляцией. Например, при воображаемом движении вдоль оси \mathbf{b} мы проходим через смещения ионов свинца в последовательности вверх-вверх-вниз-вниз. Когда эта последовательность локально нарушается с изменением фазы волны, описывающей сдвиги, например за счет лишнего смещения «вниз», мы имеем антифазную доменную стенку, расположенную перпендикулярно оси \mathbf{b} . Эти стенки разделяют домены с одинаковым ориентационным и разными трансляционными состояниями (упрощенно их называют антифазными доменами). С точки зрения спонтанных натяжений такие домены одинаковы. Более сложные доменные структуры образуются, когда стыкуются области, заполненные антифазными доменными структурами с разными ориентациями. Простейший случай – это 90-градусные сопряжения, когда оси \mathbf{b} по разные стороны от доменной стенки расположены под прямым углом. Формально домены по разные стороны такой стенки различаются спонтанными натяжениями, но на деле это различие оказывается малым, поскольку ось \mathbf{b} в центре симметрии, с достаточно высокой точностью равна двум осям \mathbf{a} по длине (см. выше). Кластеры таких 90-градусных доменов характеризуются единым направлением оси \mathbf{c} . Спонтанные натяжения становятся важными при стыковке кластеров 90-градусных доменов с различными направлениями оси \mathbf{c} , поскольку эта ось существенно (на 1%) отличается от $a/\sqrt{2}$ и $b/2\sqrt{2}$ по длине.

Представленное уточнение приводит к следующей формулировке: при рассмотрении сегнетоупругой картины доменом является кластер 90-градусных антисегнетоэлектрических доменов с общей осью \mathbf{c} , вдоль которой направлен вектор псевдополяризации.

Формула полной энергии, учитывающая явления различной природы, выглядит следующим образом:

$$F = \int \left[f_L^{(e)}(P_i) + f_C(e_{ij}) + f_q(P_i, e_{ij}) + f_G(P_{i,j}) \right] dV,$$

где f_L, f_C, f_G – вклады от псевдополяризации, от чисто упругих взаимодействий, от домен-доменных взаимодействий, соответственно; f_q – вклад, аналогичный таковому от электрострикции в сегнетоэлектрических материалах; P_i – компонент вектора поля псевдополяризации; $P_{i,j}$ – производная компонент вектора псевдополяризации вдоль различных направлений; e_{ij} – поле упругих напряжений.

Для областей с однородной псевдополяризацией и деформацией (монодоменов) энергия f_G равна нулю, поскольку зависит только от градиентов указанных полей. Отличные от нуля значения появляются на границах доменов (доменных стенках), в связи с чем эту составляющую энергии уместно назвать энергией «домен-доменного» взаимодействия. Из формулы следует, что энергия определяется полем псевдополяризации, ее градиентом и полем упругих напряжений. Поле e_{ij} зависит от поля упругих смещений u_i по следующей формуле:

$$e_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2,$$

где i, j – индексы направлений трехмерного пространства, соответствующие направлениям координат x, y, z ; $i, j = \{1, 2, 3\}$.

Полная энергия кристалла задается как интеграл суммы вкладов по всему кристаллу. Представленная модель является континуальной, построенной на сетке с расстоянием 1 нм. В отсутствие искажений эта сетка соответствует кубической фазе. При смене симметрии происходит искажение сетки таким образом, чтобы соотношения ее сторон отражали соотношения новых постоянных решетки.

Согласно работе [14], формула для расчета вклада от одного параметра порядка для некоторой области кристалла F_L имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 f_L^{(e)}(P_i) = & \alpha_1(P_1^2 + P_2^2 + P_3^2) + \\
 & + \alpha_{11}(P_1^4 + P_2^4 + P_3^4) + \\
 & + \alpha_{12}(P_1^2 P_2^2 + P_1^2 P_3^2 + P_2^2 P_3^2) + \\
 & + \alpha_{111}(P_1^6 + P_2^6 + P_3^6) + \\
 & + \alpha_{112} [P_1^4(P_2^2 + P_3^2) + P_2^4(P_1^2 + P_3^2) + P_3^4(P_1^2 + P_2^2)] + \\
 & + \alpha_{123} P_1^2 P_2^2 P_3^2,
 \end{aligned}$$

где $\alpha_i, \alpha_{ij}, \alpha_{ijk}$ – коэффициенты потенциала Ландау – Девоншира для псевдополяризации.

Для расчета вклада от упругой энергии в некоторой области кристалла была использована следующая формула [10]:

$$f_C(e_{ij}) = \frac{1}{2} C_{11} (e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + C_{12} (e_{22} e_{33} + e_{11} e_{33} + e_{11} e_{22}) + 2C_{44} (e_{23}^2 + e_{13}^2 + e_{12}^2),$$

где C – тензор жесткости (его компоненты C_{11}, C_{12}, C_{44} указаны в нотации Фойгта и выбраны согласно данным статьи [15], исходя из кубической сингонии исходного кристалла).

Вклад упруго-псевдополяризационных взаимодействий рассчитывался по формуле [10]:

$$\begin{aligned}
 f_q(P_i, e_{ij}) = & -q_{11} (e_{11} P_1^2 + e_{22} P_2^2 + e_{33} P_3^2) - \\
 & - q_{12} [e_{11} (P_2^2 + P_3^2) + e_{22} (P_1^2 + P_3^2) + e_{33} (P_1^2 + P_2^2)] - \\
 & - 2q_{44} (e_{12} P_1 P_2 + e_{13} P_1 P_3 + e_{23} P_2 P_3).
 \end{aligned}$$

Для сегнетоэлектрических кристаллов слагаемое f_q учитывает влияние тензора электрострикционного взаимодействия q , определяющего величину и направление упругих деформаций кристаллической решетки. В предлагаемой нами модели слагаемое f_q определяет аналогичный эффект в антисегнетоэлектрическом кристалле, обусловленный псевдополяризацией.

Для определения энергии доменных стенок в кристалле было использовано соотношение [10]:

$$\begin{aligned}
 f_G(P_{i,j}) = & \frac{1}{2} G_{11} (P_{1,1}^2 + P_{2,2}^2 + P_{3,3}^2) + G_{14} (P_{1,1} P_{2,2} + P_{2,2} P_{3,3} + P_{1,1} P_{3,3}) + \\
 & + \frac{1}{2} G_{44} (P_{1,2}^2 + P_{2,1}^2 + P_{2,3}^2 + P_{3,2}^2 + P_{3,1}^2 + P_{1,3}^2).
 \end{aligned}$$

Таким образом, в предложенной нами модели помимо параметра псевдополяризации P можно выделить четыре группы параметров:

- описывающие упругие взаимодействия соседних атомов – C_{11}, C_{12} и C_{44} ;
- задающие величину и направление вектора псевдополяризации \mathbf{P} – $\alpha_1, \alpha_{11}, \alpha_{12}, \alpha_{111}, \alpha_{112}$ и α_{123} ;
- определяющие взаимное влияние упругих смещений u и псевдополяризации \mathbf{P} – q_{11}, q_{12} и q_{44} ;
- определяющие взаимодействие соседних атомов, возникающее при возникновении пространственного градиента вектора псевдополяризации \mathbf{P} – G_{11}, G_{14} и G_{44} .

Программная реализация предлагаемой модели

Оптимизация функции энергии проводилась методом градиентного спуска. В нашем случае под оптимизацией подразумевается минимизация функции свободной энергии путем варьирования величины упругих смещений u и псевдополяризации P при фиксированных остальных параметрах. Для задания эпитаксиальных условий пленки было решено ввести начальные условия на нижней границе кристалла, соответствующие эпитаксиальному сжатию или растяжению кристалла подложкой. Далее для фиксации

приэпитаксиального слоя в начальном положении необходимо считать градиент упругих смещений на нижней границе равным нулю на протяжении всей процедуры оптимизации модели.

Шаг градиентного спуска подбирался автоматически из начального приближения, связанного с максимальным значением градиента, которое увеличивалось или уменьшалось до тех пор, пока величина энергии не принимала постоянное значение при движении по градиенту.

Расчет градиента можно было бы упростить, если ввести циклические граничные условия по направлениям x и y . Однако в данном случае это невозможно из-за условия эпитаксиального натяжения, в результате которого положения атомов на границах слоев не совпадают. Это препятствие привело к необходимости увеличивать количество атомов, участвующих в вычислениях, и аналитически рассчитывать пространственный градиент от функции энергии с целью ускорения процедуры оптимизации.

Результаты моделирования

В соответствии с одной из целей данной работы, было необходимо оценить применимость предложенной модели для описания сосуществования доменов в антисегнетоэлектрических тонких пленках на основе цирконата свинца PbZrO_3 с ориентацией нормали к пленке вдоль направления $[0\ 0\ 1]$ на подложке титаната стронция SrTiO_3 . Выбор объектов обусловлен тем, что их доменная структура была нам известна, поскольку эти гетероструктуры были изучены нами ранее (см. статьи [11, 12]) методом монокристалльной дифрактометрии. Объект, характеризуемый математически, представляет собой сетку, нижний слой которой описывает подложку. Положение подложки жестко зафиксировано, тогда как остальная сетка, относящаяся к пленке, упорядочивается согласно модели. В процессе компьютерного моделирования нами было решено не «привязывать» сетку к атомам решетки подложки и пленки, а представлять их как кубическую область кристалла со стороной куба 1 нм. В таком случае смещения и псевдополяризация в точке считаются средней величиной для атомов внутри этой области с возможными небольшими флуктуациями.

Стартовые значения параметров были взяты для сегнетоэлектрика – титаната бария BaTiO_3 из работы [10]. С нашей точки зрения, такой подход допустим, так как значения параметров для антисегнетоэлектриков должны быть близкими к таковым для сегнетоэлектриков, ввиду родственной природы материалов. Действительно, при некоторых условиях, например в высокосимметричных фазах, кристаллы антисегнетоэлектриков и сегнетоэлектриков демонстрируют практически одинаковые свойства (видимо, и значения параметров для их описания должны быть очень близкими). В то же время предложенная модель рассматривает сегнетоупругие искажения кристалла вместо антисегнетоэлектрической картины доменов; поэтому также возможно использование характеристик перовскитных сегнетоэлектрических материалов.

Начальное значение псевдополяризации также было принято равным нулю, что эквивалентно случаю кристалла цирконата свинца в кубической фазе с постоянной решетки $a = 4,15 \text{ \AA}$ [16]. Оптимизация значений параметров происходила в несколько этапов, на каждом из которых определялись оптимальные значения одной или нескольких групп параметров модели. В нашем случае невозможна полная верификация истинности полученных значений параметров, так как экспериментов по получению конкретно этих параметров для пленок PbZrO_3 не проводилось. Таким образом, критерии достижения оптимальных значений параметров были основаны на сходстве параметров смоделированного объекта с экспериментальными данными.

На первом этапе проверялась возможность применения стартовых значений компонент тензора жесткости C : C_{11} , C_{12} и C_{44} , использованных для описания кристалла сегнетоэлектрика BaTiO_3 в модели [10]. Показателем возможности использовать значения служила релаксация постоянной решетки пленки, т.е. стремление величины постоянной решетки к значению, характерному для монокристалла при удалении от подложки. В результате были получены следующие численные значения компонент тензора жесткости C :

Параметр	Значение, нДж·м ⁻³
C_{11}	2,750
C_{12}	1,790
C_{44}	0,543

На рис. 1 показано, как изменяется значение параметра ρ – усредненного расстояния между соседними слоями в зависимости от близости к подложке. Параметр ρ следует нормализованному выражению вида

$$\rho = (L_{i+1} - L_i)/a,$$

где L_i, L_{i+1} – средние координаты атомов i -го и $(i + 1)$ -го слоев по направлению z , соответственно, при удалении от подложки, a – параметр кристаллической решетки.

По этой формуле и на рис. 1 видно, что условие релаксации выражается равенством $\rho = 1$. При удалении от подложки параметр ρ равномерно возрастает: вблизи интерфейса подложка – пленка значение ρ меньше единицы ввиду рассогласования постоянных решеток пленки и подложки, однако после 13-го атомного слоя параметр ρ становится равным единице, т. е. расстояние между слоями возвращается к случаю недеформированного монокристалла. Следует отметить, что численные значения компонент тензора жесткости C , подобранные в ходе минимизации и представленные выше, совпадают с численными значениями, полученными из модели для сегнетоэлектрика BaTiO_3 (см. работу [10]). Таким образом доказано, что значения компонент тензора жесткости применимы к случаю анизотропных сегнетоэлектрических пленок цирконата свинца PbZrO_3 .

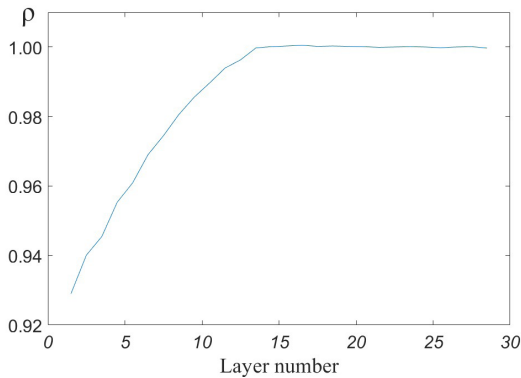


Рис. 1. Расчетная зависимость усредненного расстояния между соседними слоями атомов анизотропных сегнетоэлектрических пленок цирконата свинца PbZrO_3 от близости к подложке из титаната стронция SrTiO_3

На втором этапе моделирования мы определили оптимальные значения компонент тензоров доменного (α) и упруго-доменного (q) взаимодействий, используя компоненты тензора упругого взаимодействия C , полученные на первом этапе моделирования. Влияние параметров $\alpha_i, \alpha_{ij}, \alpha_{ijk}, q$ и P прослеживается при переходе от структуры PbZrO_3 в кубической фазе к тому же соединению, но в антисегнетоэлектрической фазе с орторомбической симметрией; элементарную ячейку второй фазы можно рассматривать как псевдотетрагональную [17]. Понижение симметрии в структуре цирконата свинца обусловлено смещением нескольких групп атомов со своих положений в кубической фазе и появлением сопутствующих натяжений. Что касается поведения узлов координатной сетки, то переход в антисегнетоэлектрическую фазу приводит к сжатию элементарной ячейки цирконата свинца в кубической фазе вдоль вектора псевдополяризации на 1%, в результате чего новые параметры ячейки PbZrO_3 в псевдотетрагональном представлении должны принять значения $a \approx b \approx 4,16 \text{ \AA}$, $c \approx 4,11 \text{ \AA}$. Согласно работе [12], в тонких пленках PbZrO_3 с ориентацией нормали вдоль направления $[0 0 1]$ сторона элементарной решетки может лежать только в плоскости пленки, поэтому мы выбрали такие значения компонент параметра α , при которых вектор псевдополяризации был бы ориентирован вдоль направления $[1 0 0]$. Значения компонент тензора q были выбраны так, чтобы воспроизводилось сжатие кристаллической решетки пленки на 1%. Таким образом, в результате второго этапа моделирования мы получили оптимальные значения параметров $\alpha_i, \alpha_{ij}, \alpha_{ijk}$ и q , при которых элементарная ячейка пленки сжималась вдоль направления вектора псевдополяризации на 1%. Полученные численные значения параметров $\alpha_i, \alpha_{ij}, \alpha_{ijk}$ и q сведены в таблицу.

На третьем этапе моделирования мы определили оптимальные значения параметров G_{11} , G_{14} и G_{44} . Для этого мы ввели в рассмотрение доменную стенку и изучили ее движение в условиях эпитаксиального натяжения пленки с подложкой. Была рассмотрена самая простая конфигурация доменов, которая сводится к двум доменам, которые изначально разделены доменной стенкой, расположенной под углом 45° к вектору псевдополяризации. Выбор расположения доменной стенки был продиктован тем обстоятельством, что такая конфигурация доменов и стенки реализуется в кристалле без контакта с подложкой в силу механической совместимости доменов; другими словами, при такой конфигурации

Таблица

Результаты оптимизации ключевых параметров системы

Обозначение параметра	Значение	Единица измерения
α_1	-3,98	$10^7 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2}$
α_{11}	6,723	$10^8 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5 \cdot \text{Кл}^{-4}$
α_{12}	5,32	$10^8 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5 \cdot \text{Кл}^{-4}$
α_{111}	1,15	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-9} \cdot \text{Кл}^{-6}$
α_{112}	-2,46	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-9} \cdot \text{Кл}^{-6}$
α_{123}	-2,28	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-9} \cdot \text{Кл}^{-6}$
q_{11}	-5,61	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2}$
q_{12}	-3,7	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2}$
q_{44}	1,41	$10^9 \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{Кл}^{-2}$

доменов в кристалле, их можно совместить без возникновения натяжений [12]. Стоит отметить, что на данном, третьем, этапе исследований размер доменов при моделировании не учитывался. Строго говоря, использование двухдоменной конфигурации не совсем корректно, так как на самом деле доменов, как правило, больше двух и их размеры могут значительно различаться [18]. Тем не менее, на данном этапе исследований нам не представлялось возможным описать более сложные доменные конфигурации ввиду затруднительной технической реализации.

Критерием оптимизации параметра на этом этапе служило сохранение двухдоменной конфигурации при не слишком широкой доменной стенке (не превышающей нескольких межатомных расстояний). На рис. 2 представлены для наглядности двумерные картины начальных условий ориентации векторов псевдополяризации \mathbf{P} (до применения оптимизации свободной энергии согласно модели (см. рис. 2, *a*)) и соответствующие картины направления векторов псевдополяризации после процедуры оптимизации энергии в соответствии с моделью (см. рис. 2, *b*). Видно, что оптимизация параметров приводит к искривлению доменной стенки. В нашем понимании, искривление доменной стенки есть не что иное, как артефакт оптимизации, который возникает вследствие недостаточно больших размеров сетки.

На рис. 3 графически представлены два случая деформирования разных слоев пленки при учете всех вкладов в свободную энергию системы. Сдвиг позиций атомов увеличен, что позволяет наглядно продемонстрировать деформацию кристалла несмотря на то, что в реальных масштабах происходит изменение его размера менее, чем на 1%. На картинах форм кристалла можно видеть деформации, связанные с разницей форм доменов, имеющих различные направления вектора поляризации. Различие форм приводит к деформациям в области доменных стенок. Амплитуды деформации неодинаковы для разных слоев кристалла: ближе к подложке наблюдаются деформации меньшей амплитуды. По контуру деформации можно проследить, что домены поворачиваются в противоположных направлениях по отношению к доменной стенке и их поворот наглядно воспроизводит

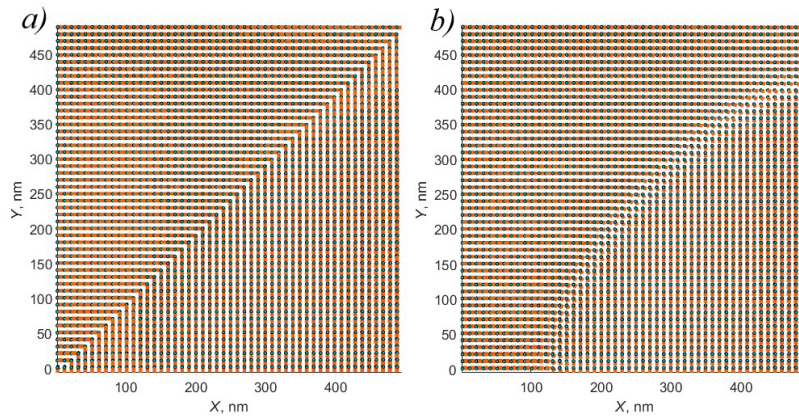


Рис. 2. 2D-изображения ориентации векторов псевдополяризации кристалла (виды сверху): *a* – начальные условия, *b* – после процедуры оптимизации согласно принятой модели

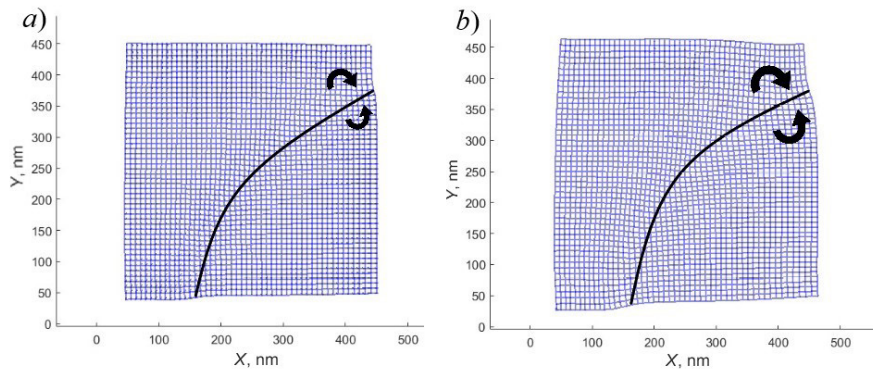


Рис. 3. 2D-изображения деформации слоев пленки при удалении от подложки на три (*a*) и десять (*b*) атомных расстояний. Для наглядности деформация слоев увеличена в 20 раз. Стрелками показаны направления поворота доменов в области доменной стенки

экспериментально наблюдаемое «схлопывание» доменов, заявленное в работе [12]. Для сравнения с экспериментальными данными этой статьи мы вычислили значения угла схлопывания для разных слоев пленки.

Угол схлопывания 2φ был вычислен по формуле вида

$$2\varphi = |\Delta c - \Delta a|/a_c,$$

где $\Delta c = c_{pt} - a_c$, $\Delta a = a_{pt} - a_c$; произведение a_c определено как $(a_{pt} + c_{pt})/2$. Индекс *pt* относится к параметрам псевдотетрагональной кристаллической решетки, а индекс *c* – к параметрам кубической.

Значения угла схлопывания, полученные из модельных данных, различаются и зависят от рассматриваемого слоя: вблизи интерфейса подложка – пленка угол $2\varphi = 0,0021^\circ$, на третьем слое – $2\varphi = 0,0057^\circ$, на десятом – $2\varphi = 0,0095^\circ$ и почти не меняется при последующем удалении от подложки. Значение угла 2φ для релаксированной пленки (тринадцатый слой и далее) оказалось довольно близким к экспериментальным наблюдениям [12], согласно которым угол схлопывания $2\varphi = 0,0097^\circ$.

Таким образом, угол схлопывания различен для слоев, близких к подложке, и стремится к теоретическому значению в монокристалле. Ниже представлены численные значения компонент тензора домен-доменного взаимодействия G , найденные нами на третьем этапе.

Параметр	Значение, пДж·м ³ ·Кл ⁻²
G_{11}	320
G_{14}	0
G_{44}	100

Заключение

Для проведения исследования был использован подход к описанию взаимодействия доменов в антисегнетоэлектрических эпитаксиальных структурах через разложение свободной энергии на несколько вкладов: от псевдополяризации, от чисто упругих взаимодействий, от взаимодействий между доменами с разными векторами псевдополяризации, от взаимодействия упругих смещений, а также вклад, аналогичный таковому от электрострикции в сегнетоэлектрических материалах. Коэффициенты для различных вкладов в общую энергию были подобраны таким образом, чтобы расчетные результаты хотя бы качественно согласовывались с данными экспериментальных наблюдений.

В итоге полученные нами результаты качественно воспроизводят часть экспериментальных наблюдений по стыковке доменов в тонких пленках PbZrO_3 : препятствие подложки установлению механической совместимости доменов выражается в изменении угла схлопывания при удалении от подложки эпитаксиальной структуры.

Полученные результаты моделирования неплохо согласуются с экспериментальными данными, что указывает на определенную успешность использования модели при рассмотрении подобных эффектов.

Предложенное модельное описание носит предварительный характер и, на наш взгляд, требует дальнейшей доработки. Улучшение моделирования возможно через уточнение граничных условий, учитывающих взаимодействия пленки с подложкой и окружающей средой. Кроме того, требуется экспериментальное уточнение параметров модели, что даст возможность воспроизводить многодоменные случаи и их структуры в кристаллических соединениях с большей точностью. Описание таких систем требует валидации результатов компьютерного моделирования и доработки оптимизирующего подхода, чтобы обеспечить возможности моделирования объектов больших размеров, например, серии полосовых доменов в эпитаксиальных гетероструктурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Morris D. H., Avci U. E., Young I. A.** Anti-ferroelectric capacitor memory cell. Патент США № US 1135504 B2. Заявлен 31.05.2018; опубликован 07.06.2022; заявитель и патентообладатель – Intel Corporation, США. 25 с.
2. **Pesic M., Knebel S., Hoffmann M., Richter C., Mikolajick T., Shroeder V.** How to make DRAM non-volatile? Anti-ferroelectrics: A new paradigm for universal memories // Proceedings of the 2016 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). December 3–7, 2016. San Francisco, California, USA. IEEE. 2016. Pp. 298–301.
3. **Zhang Y., Li X., Song J., Zhang S., Wang J., Dai X., Liu B., Dong G., Zhao L.** AgNbO₃ antiferroelectric film with high energy storage performance // Journal of Materiomics. 2021. Vol. 7. No. 6. Pp. 1294–1300.
4. **Huang X.-X., Zhang T.-F., Wang W., Ge P.-Z., Tang X.-G.** Tailoring energy-storage performance in antiferroelectric PbHfO₃ thin films // Materials & Design. 2021. Vol. 204. June. P. 109666.
5. **Haun M. J., Harvin T. J., Lanagan M. T., Zhuang Z. Q., Jang S. J., Cross L. E.** Thermodynamic theory of PbZrO₃ // Journal of Applied Physics. 1989. Vol. 65. No. 8. Pp. 3173–3180.
6. **Chaudhuri A. R., Arredondo M., Hähnel A., Morelli A., Becker M., Alexe M., Vrejoiu I.** Epitaxial strain stabilization of a ferroelectric phase in PbZrO₃ thin films // Physical Review B. 2011. Vol. 84. No. 5. P. 054112.
7. **Mtebwa M., Feigl L., Yudin P., McJilly L. J., Shapovalov K., Tagantsev A. K., Setter N.** Room temperature concurrent formation of ultra-dense arrays of ferroelectric domain walls // Applied Physics Letters. 2015. Vol. 107. No. 14. P. 142903.

8. **Sawaguchi E.** Ferroelectricity versus antiferroelectricity in the solid solutions of PbZrO_3 and PbTiO_3 // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1953. Vol. 8. No. 5. Pp. 615–629.
9. **Burkovsky R. G., Bronwald I., Andronikova D., et al.** Triggered incommensurate transition in PbHfO_3 // *Physical Review B*. 2019. Vol. 100. No. 1. P. 014107.
10. **Marton P., Hlinka J.** Simulation of domain patterns in BaTiO_3 // *Phase Transitions*. 2006. Vol. 79. No. 6–7. Pp. 467–483.
11. **Burkovsky R. G., Lityagin G. A., Ganzha A. E., Vakulenko A. F., Gao R., Dasgupta A., Xu B., Filimonov A. V., Martin L. W.** Field-induced heterophase state in PbZrO_3 thin films // *Physical Review B*. 2022. Vol. 105. No. 12. P. 125409.
12. **Kniazeva M. A., Ganzha A. E., Gao R., Dasgupta A., Filimonov A. V., Burkovsky R. G.** Highly mismatched antiferroelectric films: Transition order and mechanical state // *Physical Review B*. 2023. Vol. 107. No. 18. P. 184113.
13. **Wei X.-K., Vaideeswaran K., Sandu C. S., Jia Ch.-L., Setter N.** Preferential creation of polar translational boundaries by interface engineering in antiferroelectric PbZrO_3 thin films // *Advanced Materials Interfaces*. 2015. Vol. 2. No. 18. P. 1500349.
14. **Pertsev N. A., Zembilgotov A. G., Tagantsev A. K.** Effect of mechanical boundary conditions on phase diagrams of epitaxial ferroelectric thin films // *Physical Review Letters*. 1998. Vol. 80. No. 9. P. 1988.
15. **Остросаблин Н. И.** Классы симметрии тензоров анизотропии квазиупругих материалов и обобщение подхода Кельвина // *Прикладная механика и техническая физика*. 2017. Т. 58. № 3. С. 108–129.
16. **Sawaguchi E., Shirane G., Takagi Y.** Phase transition in lead zirconate // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1951. Vol. 6. No. 5. Pp. 333–339.
17. **Corker D. L., Glazer A. M., Dec J., Roleder K., Whatmore R. W.** A re-investigation of the crystal structure of the perovskite PbZrO_3 by X-ray and neutron diffraction // *Acta Crystallographica. Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*. 1997. Vol. 53. No. 1. Pp. 135–143.
18. **Gonzales-Flores J. E., Ganzha A., Kniazeva M. A., et al.** Thickness independence of antiferroelectric domain characteristic sizes in epitaxial $\text{PbZrO}_3/\text{SrRuO}_3/\text{SrTiO}_3$ films // *Journal of Applied Crystallography*. 2023. Vol. 56. No. 3. Pp. 697–706.

REFERENCES

1. **Morris D. H., Avci U. E., Young I. A.** Anti-ferroelectric capacitor memory cell: US Patent No. 11,355,504 B2, filed May 31, 2018, published Jun. 7, 2022. Assignee: Intel Corporation, USA.
2. **Pesic M., Knebel S., Hoffmann M., et al.** How to make DRAM non-volatile? Anti-ferroelectrics: A new paradigm for universal memories, Proc. 2016 IEEE Int. Electron Devices Meeting (IEDM), Dec. 3–7, 2016. San Francisco, California, USA, IEEE (2016) 298–301.
3. **Zhang Y., Li X., Song J., et al.** AgNbO_3 antiferroelectric film with high energy storage performance, *J. Materiomics*. 7 (6) (2021) 1294–1300.
4. **Huang X.-X., Zhang T.-F., Wang W., et al.** Tailoring energy-storage performance in antiferroelectric PbHfO_3 thin films, *Materials & Design*. 204 (Jun) (2021) 109666.
5. **Haun M. J., Harvin T. J., Lanagan M. T., et al.** Thermodynamic theory of PbZrO_3 , *J. Appl. Phys.* 65 (8) (1989) 3173–3180.
6. **Chaudhuri A. R., Arredondo M., Hähnel A., et al.** Epitaxial strain stabilization of a ferroelectric phase in PbZrO_3 thin films, *Phys. Rev. B*. 84 (5) (2011) 054112.
7. **Mtebwa M., Feigl L., Yudin P., et al.** Room temperature concurrent formation of ultra-dense arrays of ferroelectric domain walls, *Appl. Phys. Lett.* 107 (14) (2015) 142903.
8. **Sawaguchi E.** Ferroelectricity versus antiferroelectricity in the solid solutions of PbZrO_3 and PbTiO_3 , *J. Phys. Soc. Jpn.* 8 (5) (1953) 615–629.
9. **Burkovsky R. G., Bronwald I., Andronikova D., et al.** Triggered incommensurate transition in PbHfO_3 , *Phys. Rev. B*. 100 (1) (2019) 014107.
10. **Marton P., Hlinka J.** Simulation of domain patterns in BaTiO_3 , *Phase Transit.* 79 (6–7) (2006) 467–483.
11. **Burkovsky R. G., Lityagin G. A., Ganzha A. E., et al.** Field-induced heterophase state in PbZrO_3 thin films, *Phys. Rev. B*. 105 (12) (2022) 125409.

12. **Kniazeva M. A., Ganzha A. E., Gao R., et al.**, Highly mismatched antiferroelectric films: Transition order and mechanical state, *Phys. Rev. B.* 107 (18) (2023) 184113.
13. **Wei X.-K., Vaideeswaran K., Sandu C. S., et al.**, Preferential creation of polar translational boundaries by interface engineering in antiferroelectric PbZrO_3 thin films, *Adv. Mater. Interf.* 2 (18) (2015) 1500349.
14. **Pertsev N. A., Zembilgotov A. G., Tagantsev A. K.**, Effect of mechanical boundary conditions on phase diagrams of epitaxial ferroelectric thin films, *Phys. Rev. Lett.* 80 (9) (1998) 1988.
15. **Ostrosablin N. I.**, Symmetry classes of the anisotropy tensors of quasielastic materials and a generalized Kelvin approach, *Appl. Mech. Tech. Phys.* 58 (3) (2017) 469–488.
16. **Sawaguchi E., Shirane G., Takagi Y.**, Phase transition in lead zirconate, *J. Phys. Soc. Jpn.* 6 (5) (1951) 333–339.
17. **Corker D. L., Glazer A. M., Dec J., et al.**, A re-investigation of the crystal structure of the perovskite PbZrO_3 by X-ray and neutron diffraction, *Acta Crystallogr. B.* 53 (1) (1997) 135–143.
18. **Gonzales-Flores J. E., Ganzha A., Kniazeva M. A., et al.**, Thickness independence of antiferroelectric domain characteristic sizes in epitaxial $\text{PbZrO}_3/\text{SrRuO}_3/\text{SrTiO}_3$ films, *J. Appl. Crystallogr.* 56 (3) (2023) 697–706.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ХЛЮПИН Иван Владимирович – лаборант научно-образовательного центра «Физика нанокomпозитных материалов электронной техники» Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
hlyupin.iv@yandex.ru
ORCID: 0009-0000-7669-4705

МЕШКОВ Вадим Ростиславович – кандидат технических наук, доцент Высшей школы теоретической механики и математической физики Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
meshkovadim@yandex.ru
ORCID: 0009-0009-2088-3932

СОКОЛОВА Дарья Арнольдовна – ассистент Высшей инженерно-физической школы Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kirpich_da@spbstu.ru
ORCID: 0009-0008-5965-3301

БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
roman.burkovsky@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0474-3242

THE AUTHORS

KHLYUPIN Ivan V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
hlyupin.iv@yandex.ru
ORCID: 0009-0000-7669-4705

MESHKOV Vadim R.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
meshkovadim@yandex.ru
ORCID: 0009-0009-2088-3932

SOKOLOVA Daria A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kirpich_da@spbstu.ru
ORCID: 0009-0008-5965-3301

BURKOVSKY Roman G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
roman.burkovsky@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0474-3242

*Статья поступила в редакцию 05.05.2025. Одобрена после рецензирования 08.09.2025.
Принята 08.09.2025.*

Received 05.05.2025. Approved after reviewing 08.09.2025. Accepted 08.09.2025.

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18403>

THE LENGTH DISTRIBUTION OF NANOWIRES WITH FORWARD AND BACKWARD SURFACE DIFFUSION

V. G. Dubrovskii ¹□, E. D. Leshchenko ²

¹ St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia;

² Submicron Heterostructures for Microelectronics, Research & Engineering Center, RAS,
St. Petersburg, Russia

□ dubrovskii.ioffe@mail.ru

Abstract. The length distributions of III – V nanowires growing by direct impingement and surface diffusion of adatoms are of fundamental and instrumentation interest. Here, we study kinetic rate equations for the length distribution of nanowires with forward and backward surface diffusion along their growing axes, where the average nanowire length either increases infinitely with time or saturates to a constant. We have obtained the exact solution to the discrete rate equations in the form of a modified Polya distribution, investigated its continuum approximation and analyzed the available experimental data on the length distributions of different III – V nanowires. The obtained results can be used to model various growth systems with size-linear forward and backward rate constants.

Keywords: nanowires, III–V semiconductors, length distribution, rate equations, modeling

Funding: Dubrovskii V. G. gratefully acknowledges financial support from the research grant of St. Petersburg State University (Grant No. 129360164).

For citation: Dubrovskii V. G., Leshchenko E. D., The length distribution of nanowires with forward and backward surface diffusion, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 34–47. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18403>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Научная статья

УДК 538.975

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18403>

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ДЛИНАМ НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ С ПОЛОЖИТЕЛЬНОЙ И ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФФУЗИЕЙ

В. Г. Дубровский ¹□, Е. Д. Лещенко ²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН,
Санкт-Петербург, Россия

□ dubrovskii.ioffe@mail.ru

Аннотация. Распределения по длинам нитевидных нанокристаллов полупроводниковых соединений III – V групп представляют интерес с фундаментальной точки зрения и для приборных приложений. В работе исследованы кинетические уравнения роста нитевидных нанокристаллов с положительной и отрицательной диффузией вдоль оси роста, с бесконечным ростом средней длины или ее насыщением на больших временных интервалах. Получено точное решение задачи в виде распределения Пойа, изучена континуальная форма данного распределения и проанализированы экспериментальные



распределения по длине различных нитевидных нанокристаллов III – V групп. Полученные результаты можно использовать для моделирования различных систем, которые подчиняются уравнениям Беккера – Деринга с линейными по размеру константами скоростей роста и фрагментации.

Ключевые слова: нитевидный нанокристалл, полупроводниковые соединения III – V, распределение по длине, управляющие уравнения

Финансирование. Автор В. Г. Дубровский благодарит исследовательский грант Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 129360164) за финансовую поддержку.

Для цитирования: Дубровский В. Г., Лещенко Е. Д. Распределение по длинам нитевидных нанокристаллов с положительной и отрицательной поверхностной диффузией // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 34–47. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18403>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Introduction

Freestanding semiconductor nanowires (NWs), in particular III – V NWs and heterostructures of different types based on such NWs, are widely reported in the literature as promising building blocks for nanoscience and nanotechnology [1, 2]. These NWs are grown by the vapor-liquid-solid method with a foreign metal catalyst (often Au [3]), which can be replaced by a group III metal in the self-catalyzed vapor-liquid-solid approach [4], or via selective-area epitaxy without any catalyst [5]. Surface diffusion of group III adatoms contributes into the vertical growth rate of Au-catalyzed NWs preparing by the vapor-liquid-solid method, of catalyst-free NWs preparing by selective-area epitaxy procedure and of similar selective-area epitaxy structures such as elongated nanomembranes [6 – 12].

Surface diffusion along the NW sidewalls is also possible in the NWs of elemental semiconductors [6]. The total diffusion flux of group III adatoms to the NW top equals the forward (direct) flux minus the backward (rejected) one [6, 8, 9, 11, 12]. According to current concepts [11, 12], the backward diffusion flux depends on the nucleation-mediated growth rate on the top nanowire/nanomembrane facet and rapidly increases when the nucleation is suppressed by surface energetics or geometry (see Refs. [12, 13] and references therein). When adatoms are collected from the entire NW length and the total diffusion flux is positive, the NWs elongate exponentially with time [6, 8, 9, 12]. Negative diffusion flux leads to the limited growth regime with a length value saturation [12, 13].

Length distributions (LDs) of NWs are interesting from the fundamental viewpoint and paramount for processing and device functionalization of the NW ensembles. In particular, narrow length distributions enable easier contacting of as-grown NWs and suppress the unwanted inhomogeneous broadening of light-emitting devices [2].

Theoretical and experimental studies of the III – V NW length distributions [14 – 19] have led to the following results. NWs growing by the direct impingement without surface diffusion and nucleation delays feature the Poisson length distributions [14]. NWs growing by the direct impingement and forward diffusion from their entire length feature much broader Polya LDs [15]. Sub-Poissonian narrowing of the NW length distributions [18, 19] can be observed in thin enough NWs growing by the direct impingement due to a specific effect of nucleation antibunching which suppresses fluctuational broadenings [20 – 24]. Nucleation delay in the formation of the very first NW monolayer above the substrate surface leads to a very significant broadening of the NW length distributions, with a long tail for shorter lengths [14, 16, 18]. It cannot be suppressed by nucleation antibunching [18]. Desorption of semiconductor material from a catalyst droplet does not change the Poisson shape of the length distributions [17].

On a more general ground, NWs growing by the direct impingement and surface diffusion present an interesting example of non-equilibrium system described by the Becker – Döring

rate equations with size-linear rate constants, where the LDs can easily be measured in different growth stages. The Becker – Döring rate equations are widely used in the nucleation theory [26 – 28] and other growth-related theories [29 – 52] including those for epitaxial islands [38 – 45]. One important outcome of these works in the Family – Vicsek scaling of the size distribution [38]. In Refs. [50 – 52], we demonstrated that size-linear forward rate constants naturally led to the Family – Vicsek scaling, which was confirmed experimentally for Au-catalyzed InAs NWs in Ref. [15]. However, backward surface diffusion was never studied in this regard.

Consequently, our goal of this work is to analyze theoretically the length distributions of nanowires with forward and backward diffusion and to reveal whether backward diffusion affects the previously obtained the Polya length distribution [15].

Computational model

The usual growth law for the length L of individual NW growing by the direct impingement from the vapor flux v , forward and backward surface diffusion of adatoms is given by [6, 11, 12]:

$$\frac{dL}{dt} = \sigma v + \frac{2\lambda}{R} \tanh\left(\frac{L}{\lambda}\right) \eta v (1-c), \quad (1)$$

where λ is the diffusion length of adatoms on the NW sidewalls; σ , η are the dimensionless geometrical factors that depend on the droplet geometry (or the no droplet case for NWs grown through selective-area epitaxy and deposition technique (vapor deposition or directional molecular beam epitaxy); c is the factor for describing the backward diffusion (it is independent of the NW length).

The same growth law is valid for nanomembranes [12]. The case $c = 0$ corresponds to the absence of backward diffusion. Such a growth was earlier considered in Ref. [15]. For fairly short structures with $L \ll \lambda$, $\tanh(L/\lambda) = L/\lambda$. In this case, adatoms diffuse along the entire NW length and the NW growth rate scale linearly with L and is independent of λ [8, 9].

It is convenient to measure the NW length L in monolayers (MLs); this dimensionless length is

$$s = L/h = 0, 1, 2, \dots,$$

where h is the height of a monolayer (in particular, $h = 0.326$ MLs for GaAs).

Introducing the dimensionless time τ and constant a according to expressions

$$\tau = \frac{2\eta v}{R} t, \quad a = \frac{\sigma R}{2\eta h}, \quad (2)$$

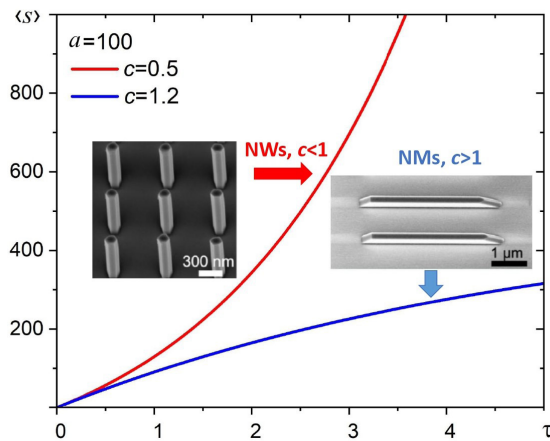


Fig. 1. A comparison of the curves' behavior of the average length $\langle s \rangle$ (over monolayers of NW) with dimensionless time τ for two c values at $a = 100$.

Inserts: The examples of hexahedral GaAs NWs and elongated GaAs nanomembranes [10], exhibiting these growth regimes due to predominantly forward and backward surface Ga diffusion, respectively

Eq. (1) for the average NW length over the monolayers $\bar{s} = \langle s \rangle$ takes the following form:

$$\frac{d\bar{s}}{d\tau} = a + (1-c)\bar{s}. \quad (3)$$

The solution to Eq. (3) with zero initial condition at $\tau = 0$ is

$$\bar{s} = a \frac{e^{(1-c)\tau} - 1}{1-c}. \quad (4)$$

From Eq. (4) it will be obvious that \bar{s} increases infinitely at $c < 1$ or saturates to the quantity

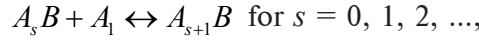
$$\bar{s}_\infty = a / (c-1) \quad \text{at } c > 1.$$

It can be seen from Fig. 1 an exponential growth of the average length at $c = 0.5$ and sublinear growth with the length saturation at $c = 1.2$ for $a = 100$. In so doing, the hexahedral GaAs NWs and elongated GaAs



NMs from Ref. [10] exhibit superlinear and sublinear growth regimes due to predominantly forward and backward surface Ga diffusion, respectively (see inserts in Fig. 1). This explains the experimentally observed infinite and limited growth modes of nanowires and nanomembranes [11 – 13] but tells us nothing about the length distribution in the nanowire ensemble grown under identical conditions for each NW.

To access the statistical properties within the NW ensemble, we note that the NW formation occurs via the reaction scheme



where A_1 denotes the NW monolayer, and $A_s B$ is the NW composed of s monolayers with $A_0 B \equiv B$ as the nucleation seed (a catalyst nanoparticle for the vapor-liquid-solid growth or patterned pinhole in a mask layer for the selective-area epitaxy growth) [6, 14 – 19].

We introduce the normalized length distribution $f_s(\tau)$ which satisfies the normalization condition

$$\sum_{s=0}^{\infty} f_s(\tau) = 1 \quad (5)$$

at any time.

The discrete set of the Becker – Döring rate equations for heterogeneous growth writes [6, 14 – 19, 50]:

$$\frac{df_0}{dt} = -J_1, \quad \frac{df_s}{dt} = J_s - J_{s+1}, \quad s \geq 1. \quad (6)$$

The flux J_s for the regular growth rate given by Eq. (3) can be written as

$$J_s = (a + s)f_{s-1} - csf_s, \quad s \geq 1. \quad (7)$$

The NW length distribution contains all statistical characteristics of a NW ensemble, including the average length $\bar{s}(\tau)$ and variance $D(\tau)$:

$$\bar{s}(\tau) = \langle s \rangle_{\tau} = \sum_{s=1}^{\infty} s f_s(\tau), \quad D(\tau) = \langle (s - \bar{s})^2 \rangle_{\tau} = \langle s^2 \rangle_{\tau} - \bar{s}^2(\tau). \quad (8)$$

No nucleation delay for the formation of the very first NW monolayer is considered in this model. The nucleation delay is described by

$$J_1 = b f_0 - c f_1, \text{ with } b < a \text{ or even } b \ll a \text{ [14, 16, 18],}$$

and strongly affects the length-distribution shape.

It was earlier considered for irreversible NW growth at $c = 0$ by the direct impingement without nucleation antibunching in Ref. [14], direct impingement with nucleation antibunching in Ref. [18], and direct impingement with forward surface diffusion of adatoms in Ref. [16]. Introduction of the nucleation delay in the Becker – Döring equations for reversible growth (at $c > 0$) is a very complex problem that will be studied elsewhere.

Analytic solution for the length distribution

Analytic solution of the Becker – Döring rate equations with size-linear rate constants is obtained by using the generating function for the length distributions [14 – 16, 50, 51]:

$$f(x, \tau) = \sum_{s=0}^{\infty} f_s(\tau) x^s. \quad (9)$$

Differentiating the generating function with respect to time and using Eqs. (6), we get

$$\frac{\partial f(x, \tau)}{\partial \tau} = \left(1 - \frac{1}{x}\right) \sum_{s=1}^{\infty} J_s(\tau) x^s. \quad (10)$$

Remarkably, size-linear rate constants yielding Eq. (7) for J_s lead to the closed first-order equation in partial derivatives for the generating function:

$$\frac{\partial f(x, \tau)}{\partial \tau} = (x-1) \left[(x-c) \frac{\partial f(x, \tau)}{\partial x} + af(x, \tau) \right]. \quad (11)$$

This equation should be solved with the initial condition

$$f(x, \tau = 0) = 1 \quad (12)$$

that corresponds to $f_0(\tau = 0) = 1, f_s(\tau = 0) = 0$ for $s \geq 1$ (no NWs at the beginning of deposition).

From Eq. (11), the generating function obeys the normalization condition $f(1, \tau) = 1$.

The average length is obtained from the equation

$$\bar{s}(\tau) = \left. \frac{\partial f(x, \tau)}{\partial x} \right|_{x=1}. \quad (13)$$

Differentiating Eq. (11) with respect to x and putting $x = 1$, we obtain Eq. (3) for the average length, with the solution given by Eq. (4). Now Eq. (11) contains only two parameters: a and c . Therefore, the resulting NW length distribution should be two-parametric. At $c = 0$, the solution should yield the result of Ref. [15], that is, the Polya length distributions for irreversible NW growth without backward diffusion.

Eq. (11) is solved by the method of characteristics. The equivalent system of ordinary differential equations is

$$\frac{d\tau}{1} = -\frac{dx}{(x-1)(x-c)} = \frac{df}{a(x-1)f}. \quad (14)$$

Integration of the first equation gives the first integral $T(x, \tau)$ of the form

$$e^{(1-c)(T-\tau)} = \frac{1-x}{c-x}. \quad (15)$$

Using the expression

$$x-1 = (1-c) / \{ \exp[(1-c)(\tau-T)] - 1 \}$$

in the second equation and integrating it with the initial condition

$$f(\tau = 0) = 1,$$

we obtain the following equation:

$$f(x, \tau) = \left[\frac{1 - e^{(1-c)(T-\tau)}}{1 - e^{(1-c)T}} \right]^a. \quad (16)$$

Using Eq. (15), the final result for the generating function is given by

$$f(x, \tau) = \frac{1}{[1 + y(\tau)(1-x)]^a}, \quad (17)$$

with

$$y(\tau) = \frac{\bar{s}(\tau)}{a} = \frac{e^{(1-c)\tau} - 1}{1-c}. \quad (18)$$

The discrete length distribution is obtained from this generating function by applying the known formulae:

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+s)}{\Gamma(a)\Gamma(s+1)} \varepsilon^s = \frac{1}{(1-\varepsilon)^a}, \varepsilon = \frac{y}{1+y}. \quad (19)$$



Our final result for the exact length distribution is given by the Polya distribution, which can be presented in the two equivalent forms:

$$f_s(\tau) = \frac{1}{[1+y(\tau)]^a} \frac{\Gamma(a+s)}{\Gamma(a)\Gamma(s+1)} \left[\frac{y(\tau)}{1+y(\tau)} \right]^s, \quad s \geq 0, \quad (20)$$

$$f_s(\tau) = \left[1 + \frac{\bar{s}(\tau)}{a} \right]^{-a} \frac{\Gamma(a+s)}{\Gamma(a)\Gamma(s+1)} \left[1 + \frac{a}{\bar{s}(\tau)} \right]^{-s}, \quad s \geq 0.$$

Here $\Gamma(\xi)$ denotes the gamma-function.

Results and discussion

Thus, the main result of this work can be formulated as follows. The nanowire length distribution in reversible growth with forward and backward surface diffusion of adatoms along their entire length is able to be given by the same Polya distribution as in Ref. [15] without backward diffusion.

However, there is one important difference. For irreversible growth at $c = 0$, the length distribution is truly one-parametric, because the average length of the Polya length distribution is given by the expression

$$\bar{s}(\tau) = a[\exp(\tau) - 1],$$

and increases infinitely in the large time limit.

Our refined model with arbitrary c describes either infinite growth at $c < 1$ or limited growth at $c > 1$, and hence is appropriate for a much wider range of data including the sub-linear growth regimes of nanowires and nanomembranes [6, 12, 13] as well as more general reversible growth systems [27 – 35]. In particular, the equilibrium length distribution at $c > 1$ is two-parametric:

$$f_s(\infty) = [1 - 1/c]^a \frac{\Gamma(a+s)}{\Gamma(a)\Gamma(s+1)} \frac{1}{c^s}, \quad (21)$$

with the average length $\bar{s}_\infty = a/(c-1)$.

This asymptotic equilibrium state is maintained even under the deposition flux due to the prevalent backward diffusion that equalizes the direct impingement flux and forward diffusion to the top of the structures.

The variance of the Polya length distribution is given by the expression

$$D = \frac{\bar{s}^2}{a} + \bar{s}. \quad (22)$$

Therefore, the asymptotic width \sqrt{D} of the broad Polya length distribution is proportional to the average size at $\bar{s} \gg a$. At $a \rightarrow \infty$, the Polya length distribution is reduced to a much narrower Poisson one:

$$f_s(\bar{s}) = \exp(-\bar{s}) \frac{\bar{s}^s}{s!} \bar{s}^{-s} \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{s}}} \exp\left[-\frac{(s-\bar{s})^2}{2\bar{s}}\right], \quad (23)$$

with the variance $D = \bar{s}$.

The continuum Polya LD at $s \gg a$ is obtained in the same way as in Refs. [15, 50]. We use

$$(1 + \bar{s}/a)^{-a} \cong (\bar{s}/a)^{-a}, \quad \Gamma(a+s)/\Gamma(s+1) \cong s^{a-1},$$

along with

$$(1 + a/\bar{s})^{-s} \cong \lim_{s \rightarrow \infty} \left[1 + (as/\bar{s})/s \right]^{-s} = \exp(-as/\bar{s})$$

at large s and finite as/\bar{s} .

This results in the continuum LD has the form

$$f(s, \bar{s}) = \frac{1}{\bar{s}} \frac{a^a}{\Gamma(a)} \left(\frac{s}{\bar{s}} \right)^{a-1} \exp\left(-a \frac{s}{\bar{s}}\right). \quad (24)$$

From Eq. (2) in a , we can see that this parameter is always much larger than unity for NWs, ranging from about 10 for very thin NWs with $R \approx 5$ nm to ~ 200 nm for thicker NWs with $R \approx 50$ nm. At $a \gg 1$, we can use the Stirling formula for

$$\Gamma(a) = \Gamma(a+1)/a = \sqrt{2\pi/a} (a/e)^a.$$

The function

$$x^{a-1} \exp(-ax) \cong \exp(-ax + a \ln x)$$

has the sharp maximum under the exponent at $x = 1$.

This allows us to write the following:

$$\exp(-ax + a \ln x) \cong \exp\left[-a - (a/2)(x-1)^2\right],$$

resulting in the symmetrical Gaussian approximation for the continuum length distribution [15]:

$$f(s, \bar{s}) = \frac{1}{\bar{s}} \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp\left[-\frac{a}{2} \frac{(s-\bar{s})^2}{\bar{s}^2}\right]. \quad (25)$$

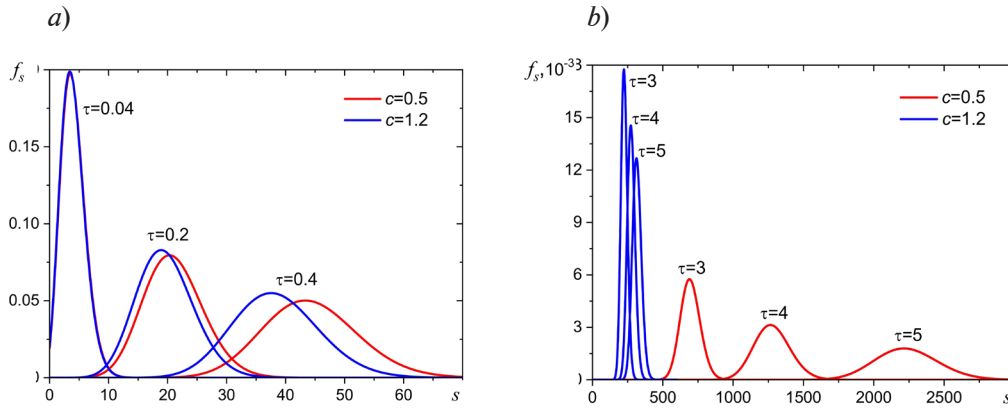


Fig. 2. Evolution of the NW length distributions in the initial growth stage (a) and for longer values of growth time τ : from 3 to 5 (b) in the infinite ($c = 0.5$) and limited ($c = 1.2$) growth regimes at $a = 100$; s is a number of NW monolayers

Fig. 2 shows the time evolution of the LD in the infinite ($c = 0.5$) and limited ($c = 1.2$) growth regimes with the same a value ($a = 100$). The LDs are similar in the initial stage for short τ values from zero to 0.4 (see Fig. 2, a), but become very different for longer growth times from 3 to 5 (see Fig. 2, b). These LDs are given by the same Eqs. (20). The only difference is in the average length \bar{s} , which is c -dependent and evolves differently in the infinite and limited growth regimes. Fig. 3 shows the equilibrium LDs given by Eq. (21) at different c values for the same a value ($a = 10$). These LDs narrow up for larger c , corresponding to the shorter equilibrium lengths.

Hence, the magnitude of the backward diffusion from top to bottom of the structures can be used as an additional tuning knob for their LDs.

It can be seen from Eq. (25) that the Family – Vicsek scaling function for the re-normalized LD $\bar{s}f(s, \bar{s})$ versus $x = s/\bar{s}$ is given by the probability density of the gamma-distribution [16, 50]:

$$\bar{s}f(s, \bar{s}) = F(x) = \frac{a^a}{\Gamma(a)} x^{a-1} e^{-ax}, x = \frac{s}{\bar{s}}. \quad (26)$$

At $a \gg 1$ this is further reduced to

$$\bar{s}f(s, \bar{s}) = F(x) = \sqrt{\frac{a}{2\pi}} \exp\left[-\frac{a}{2}(x-1)^2\right]. \quad (27)$$



These universal scaling functions do not depend on the average NW length and satisfy the usual sum rules for the surface density and average size of the structures [38 – 44]:

$$\int_0^{\infty} dx F(x) = \int_0^{\infty} dx x F(x) = 1. \quad (28)$$

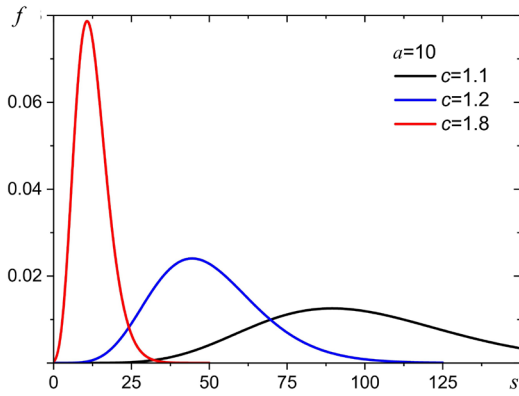


Fig. 3. Equilibrium NW length distributions at different c values ($a = 10$)

Gaussian approximation becoming indistinguishable from Eqs. (24) or (26) at $a \geq 100$.

The shapes of both length distributions in Fig. 4 are similar. As evident, they narrow up for larger a -values.

However, the non-scaled length distributions in Fig. 4,*a* describe the NW ensemble with a given mean length, while the scaled length distributions in Fig. 4,*b* apply for any mean length $\bar{s} \gg 1$ or, equivalently, for all but very short growth times.

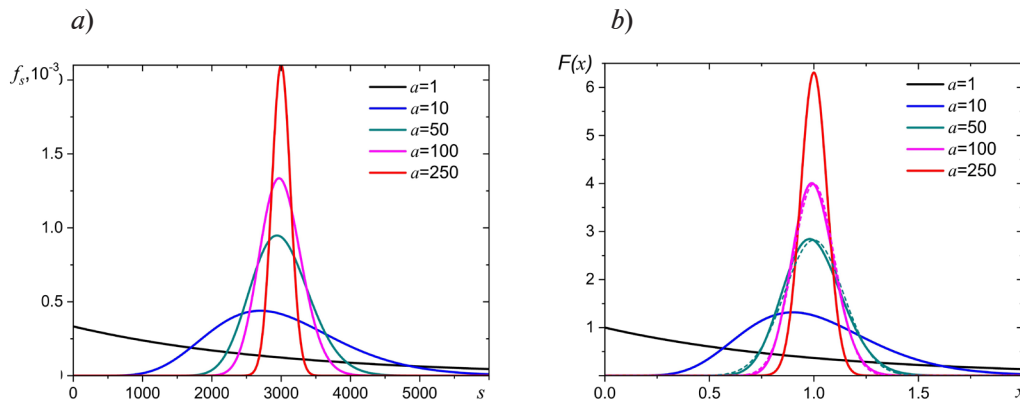


Fig. 4. Continuum LDs in the natural (*a*) and Family – Vicsek-scaled variables (*b*) for the same average length of 3000 monolayers and different a values.

In Fig. 4, *b*, the symmetrical Gaussian scaling function given by Eq. (27) is shown (dashed lines); it becomes indistinguishable from Eq. (26) at $a \geq 100$ for this average length

Fig. 5 shows the experimental NW length distributions with similar average lengths from Refs. [15, 19], fitted by the model. GaAs NWs of Ref. [19] were grown by the self-catalyzed vapor-liquid-solid method (with liquid Ga droplets). In this case, the NW axial growth rate is controlled by the As input, and Ga surface diffusion does not contribute to the NW elongation. These LDs are well-fitted by the Poisson length distribution given by Eq. (23), with $\bar{s} = 4035$ MLs and $D(\bar{s}) = \bar{s}$. InAs NWs of Ref. [15] were grown by the Au-catalyzed vapor-liquid-solid method, where indium surface diffusion is always effective. Consequently, their length distribution is

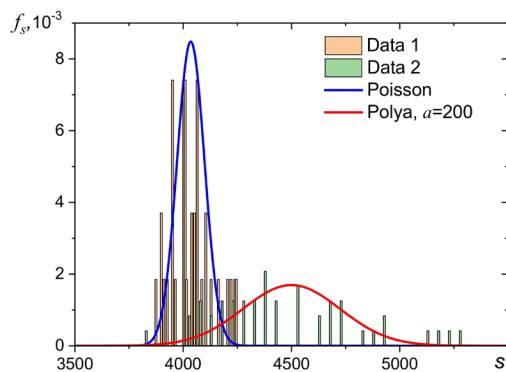


Fig. 5. LDs of self-catalyzed GaAs [19] (Data 1) and Au-catalyzed InAs [15] (Data 2) NWs with surface diffusion of group III adatoms with $\bar{s} = 4035$ MLs and without it ($\bar{s} = 4500$ MLs), respectively (histograms), fitted by the continuum Poisson (see Eq. (23)) and Polya LD with $a = 200$ (see Eq. (27)) (blue and red lines)

well-fitted by the Polya distribution given by Eq. (27) with $\bar{s} = 4500$ MLs and $D(\bar{s}) = \bar{s}^2/a$. This length distribution is much broader than Poissonian one. Further growth of these Ga-catalyzed GaAs NWs leads to sub-Poissonian narrowing due to nucleation antibunching (as described in detail in Ref. [19]). No nucleation delays are present in both cases, which is achieved by the droplet organization prior to NW growth.

Summary

To summarize, it has been shown in the paper that backward diffusion of adatoms along the NW sidewalls does not obey the Polya LD shape, previously obtained for irreversible NW growth by surface diffusion [15, 16]. Consequently, the FV scaling form of the continuum LD remains the same. However, the reversible growth model describes different

regimes of NW growth depending on the parameter c . At $c < 1$, NWs grow to infinite length, while at $c > 1$ they evolve to the equilibrium Polya distribution. These exact results can be used for understanding and controlling the NW/NM LDs grown by different epitaxy techniques and under different conditions, including the experimentally observed sublinear growth modes with the length saturation [11 – 13]. We hope that the obtained analytic distribution will be useful for modeling different systems including linear rows of adatoms [53 – 55], surface islands [26, 28, 37, 43, 44], planar NWs [56], and III – V ternary nanostructures [2]. The complex case of the diffusion-induced heterogeneous growth with a nucleation delay will be considered in our future work.

REFERENCES

1. Ning C.-Z., Dou L., Yang P., Bandgap engineering in semiconductor alloy nanomaterials with widely tunable compositions, *Nat. Rev. Mater.* 2 (31 Oct) (2017) 17070.
2. McIntyre P. C., Morral A. F. I., Semiconductor nanowires: To grow or not to grow? *Mater. Today Nano.* 9 (March) (2020) 100058.
3. Wagner R. S., Ellis W. C., Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth, *Appl. Phys. Lett.* 4 (5) (1964) 89–90.
4. Colombo C., Spirkoska D., Frimmer M., et al., Ga-assisted catalyst-free growth mechanism of GaAs nanowires by molecular beam epitaxy, *Phys. Rev. B.* 77 (15) (2008) 155326.
5. Aseev P., Fursina A., Boekhout F., et al., Selectivity map for molecular beam epitaxy of advanced III-V quantum nanowire networks, *Nano Lett.* 19 (1) (2019) 218–227.
6. Dubrovskii V. G., Glas F., Vapor-liquid-solid growth of semiconductor nanowires, In book: N. Fukata, R. Rurali (Eds.), *Fundamental properties of semiconductor nanowires*, Springer Nature Pte Ltd., Singapore (2020) 1–38.
7. Seifert W., Borgstrom M., Deppert K., et al., Growth of one-dimensional nanostructures in MOVPE, *J. Cryst. Growth.* 272 (1–4) (2004) 211–220.
8. Plante M. C., LaPierre R. R., Analytical description of the metal-assisted growth of III–V nanowires: Axial and radial growths, *J. Appl. Phys.* 105 (11) (2009) 114304.
9. Harmand J. C., Glas F., Patriarche G., Growth kinetics of a single $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$ nanowire, *Phys. Rev. B.* 81 (23) (2010) 235436.
10. Mosiats D., Genuist Y., Cibert J., et al., Dual-adatom diffusion-limited growth model for compound nanowires: Application to InAs nanowires, *Cryst. Growth Des.* 24 (9) (2024) 3888.
11. Dubrovskii V. G., Nucleation-dependent surface diffusion in anisotropic growth of III–V nanostructures, *Cryst. Growth Des.* 24 (15) (2024) 6450.



12. **Zendrini M., Dubrovskii V., Rudra A., et al.**, Nucleation-limited kinetics of GaAs nanostructures grown by selective area epitaxy: Implications for shape engineering in optoelectronic devices, *ACS Appl. Nano Mat.* 7 (16) (2024) 19065–19074.
13. **Semlali E., Avit G., André Y., et al.**, Circumventing the ammonia-related growth suppression for obtaining regular GaN nanowires by HVPE, *Nanotechnol.* 35 (26) (2024) 265604.
14. **Dubrovskii V. G., Sibirev N. V., Berdnikov Y., et al.**, Length distributions of Au-catalyzed and In-catalyzed InAs nanowires, *Nanotechnol.* 27 (37) (2016) 375602.
15. **Dubrovskii V. G., Berdnikov Y., Schmidtbauer J., et al.**, Length distributions of nanowires growing by surface diffusion, *Cryst. Growth Des.* 16 (4) (2016) 2167–2172.
16. **Dubrovskii V. G.**, Length distributions of nanowires: Effects of surface diffusion versus nucleation delay, *J. Cryst. Growth* 463 (1 Apr) (2017) 139–144.
17. **Dubrovskii V. G., Barcus J., Kim W.**, Does desorption affect the length distributions of nanowires? *Nanotechnol.* 30 (47) (2019) 475604.
18. **Glas F., Dubrovskii V. G.**, Self-narrowing of size distributions of nanostructures by nucleation antibunching, *Phys. Rev. Mater.* 1 (3) (2017) 036003.
19. **Koivusalo E., Hakkarainen T., Guina M. T., Dubrovskii V. G.**, Sub-Poissonian narrowing of length distributions realized in Ga-catalyzed GaAs nanowires, *Nano Lett.* 17 (9) (2017) 5350–5355.
20. **Wen C.-Y., Tersoff J., Hillerich K., et al.**, Periodically changing morphology of the growth interface in Si, Ge, and GaP nanowires, *Phys. Rev. Lett.* 107 (2) (2011) 025503.
21. **Jacobsson D., Panciera F., Tersoff J., et al.**, Interface dynamics and crystal phase switching in GaAs nanowires, *Nature.* 531 (17 March) (2016) 317–322.
22. **Dubrovskii V. G.**, Refinement of nucleation theory for vapor – liquid – solid nanowires, *Cryst. Growth Des.* 17 (5) (2017) 2589–2593.
23. **Glas F., Panciera F., Harmand J. C.**, Statistics of nucleation and growth of single monolayers in nanowires: Towards a deterministic regime, *Phys. Stat. Solidi (RRL)*. 16 (5) (2022) 2100647.
24. **Glas F.**, Incomplete monolayer regime and mixed regime of nanowire growth, *Phys. Rev. Mater.* 8 (4) (2024) 043401.
25. **Becker R., Düring W.**, Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen, *Ann. Phys.* 416 (8) (1935) 719–752.
26. **Kashchiev D.**, Nucleation: Basic theory with applications. Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2000.
27. **Slezov V. V.**, Kinetics of first-order phase transitions, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Berlin, 2009.
28. **Kukushkin S. A., Osipov A. V.**, Thin-film condensation processes, *Phys. Usp.* 41 (10) (1998) 983–1014.
29. **Ball J. M., Carr J., Penrose O.**, The Becker – Döring cluster equations: Basic properties and asymptotic behaviour of solutions, *Commun. Math. Phys.* 104 (4) (1986) 657–692.
30. **Jun Y.-S., Zhu Y., Wang Y., et al.**, Classical and nonclassical nucleation and growth mechanisms for nanoparticle formation, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 73 (April) (2022) 453–477.
31. **Wattis J. A. D., King J. R.**, Asymptotic solutions of the Becker – Döring equations, *J. Phys. A: Math. Gen.* 31 (34) (1998) 7169.
32. **King J. R., Wattis J. A. D.**, Asymptotic solutions of the Becker – Döring equations with size-dependent rate constants, *J. Phys. A: Math. Gen.* 35 (6) (2002) 1357.
33. **Wattis J. A. D.**, A Becker – Döring model of competitive nucleation, *J. Phys. A: Math. Gen.* 32 (49) (1999) 8755.
34. **Wattis J. A. D.**, Similarity solutions of a Becker – Döring system with time-dependent monomer input, *J. Phys. A: Math. Gen.* 37 (32) (2004) 7823.
35. **Duncan D. B., Soheili A. R.**, Approximating the Becker – Döring cluster equations, *Appl. Numer. Math.* 37 (1–2) (2001) 1–29.
36. **Álvarez-Cuartas J. D., Camargo M., González-Cabrera D. L.**, Colloidal model for nucleation and aggregation in one dimension: Accessing the interaction parameters, *Phys. Rev. E.* 109 (6) (2024) 064604.
37. **Tomellini M., De Angelis M.**, Fokker – Planck equation for the crystal-size probability density in progressive nucleation and growth with application to lognormal, Gaussian and gamma distributions, *J. Cryst. Growth.* 650 (15 Jan) (2025) 127970.

38. **Vicsek T., Family F.**, Dynamic scaling for aggregation of clusters, *Phys. Rev. Lett.* 52 (19) (1984) 1669–1672.
39. **Bartelt M. C., Evans J. W.**, Exact island-size distributions for submonolayer deposition: Influence of correlations between island size and separation, *Phys. Rev. B.* 54 (24) (1996) R17359–R17362.
40. **Vvedensky D. D.**, Scaling functions for island-size distributions, *Phys. Rev. B.* 62 (23) (2000) 15435–15438.
41. **Körner M., Einax M., Maass P.**, Capture numbers and island size distributions in models of submonolayer surface growth, *Phys. Rev. B.* 86 (8) 085403.
42. **Evans J. W., Thiel P. A., Bartelt M. C.**, Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds, *Surface Surf. Sci. Rep.* 61 (1–2) (2006) 1–128.
43. **Dieterich W., Einax M., Maass P.**, Stochastic theories and scaling relations for early-stage surface growth, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 161 (1) (2008) 151–165.
44. **Einax M., Dieterich W., Maass P.**, Colloquium: Cluster growth on surfaces: Densities, size distributions, and morphologies, *Rev. Mod. Phys.* 85 (3) (2013) 921–939.
45. **Gibou F. G., Ratsch C., Caflisch R. E.**, Capture numbers in rate equations and scaling laws for epitaxial growth, *Phys. Rev. B.* 67 (15) (2003) 155403.
46. **Álvarez-Cuartas J. D., González-Cabrera D. L., Camargo M.**, Epitaxial growth in one dimension, *J. Phys: Cond. Matter* 36 (46) (2024) 463001.
47. **Aditya S., Roy N.**, Family – Vicsek dynamical scaling and Kardar-Parisi-Zhang-like superdiffusive growth of surface roughness in a driven one-dimensional quasiperiodic model, *Phys. Rev. B.* 109 (3) (2024) 035164.
48. **Bhakuni D. S., Lev Y. B.**, Dynamic scaling relation in quantum many-body systems, *Phys. Rev. B.* 110 (1) (2024) 014203.
49. **Fujimoto K., Hamazaki R., Kawaguchi Y.**, Family – Vicsek scaling of roughness growth in a strongly interacting Bose gas, *Phys. Rev. Lett.* 124 (21) (2020) 210604.
50. **Dubrovskii V. G., Berdnikov Yu. S.**, Natural scaling of size distributions in homogeneous and heterogeneous rate equations with size-linear capture rates, *J. Chem. Phys.* 142 (12) (2015) 124110.
51. **Dubrovskii V. G., Sibirev N. V.**, Analytic scaling function for island-size distributions, *Phys. Rev. E.* 91 (4) (2015) 042408.
52. **Dubrovskii V. G.**, A general solution to the continuum rate equation for island-size distributions: Epitaxial growth kinetics and scaling analysis, *Nanomaterials.* 15 (5) (2025) 396.
53. **Albao M. A., Evans M. M. R., Nogami J., et al.**, Monotonically decreasing size distributions for one-dimensional Ga rows on Si(100), *Phys. Rev. B.* 72 (3) (2005) 035426.
54. **Javorský J., Setvín M., Ošťádal I., et al.**, Heterogeneous nucleation and adatom detachment at one-dimensional growth of In on Si (100)-2 × 1, *Phys. Rev. B.* 79 (16) (2009) 165424.
55. **Liu H., Reinke P.**, Formation of manganese nanostructures on the Si(100)-(2×1) surface, *Surf. Sci.* 602 (4) (2008) 986–992.
56. **Rothman A., Dubrovskii V. G., Joselevich E.**, Kinetics and mechanism of planar nanowire growth, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* 117 (1) (2020) 152–160.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ning C.-Z., Dou L., Yang P.** Bandgap engineering in semiconductor alloy nanomaterials with widely tunable compositions // *Nature Reviews Materials.* 2017. Vol. 2. 31 October. P. 17070.
2. **McIntyre P. C., Morral A. F. I.** Semiconductor nanowires: To grow or not to grow? // *Materials Today Nano.* 2020. Vol. 9. March. P. 100058.
3. **Wagner R. S., Ellis W. C.** Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // *Applied Physics Letters.* 1964. Vol. 4. No. 5. Pp. 89–90.
4. **Colombo C., Spirkoska D., Frimmer M., Abstreiter G., Morral A. F. I.** Ga-assisted catalyst-free growth mechanism of GaAs nanowires by molecular beam epitaxy // *Physical Review B.* 2008. Vol. 77. No. 15. P. 155326.
5. **Aseev P., Fursina A., Boekhout F., et al.** Selectivity map for molecular beam epitaxy of advanced III–V quantum nanowire networks // *Nano Letters.* 2019. Vol. 19. No. 1. Pp. 218–227.
6. **Dubrovskii V. G., Glas F.** Vapor–liquid–solid growth of semiconductor nanowires // N. Fukata, R. Rurali (Eds.) *Fundamental properties of semiconductor nanowires.* Singapore: Springer Nature Pte Ltd., 2020. Pp. 1–38.



7. **Seifert W., Borgstrom M., Deppert K., et al.** Growth of one-dimensional nanostructures in MOVPE // *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 272. No. 1–4. Pp. 211–220.
8. **Plante M. C., LaPierre R. R.** Analytical description of the metal-assisted growth of III–V nanowires: Axial and radial growths // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 105. No. 11. P. 114304.
9. **Harmand J. C., Glas F., Patriarche G.** Growth kinetics of a single $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$ nanowire // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. No. 23. P. 235436.
10. **Mosiiets D., Genuist Y., Cibert J., Bellet-Amalric E., Hosevar M.** Dual-atom diffusion-limited growth model for compound nanowires: Application to InAs nanowires // *Crystal Growth Design*. 2024. Vol. 24. No. 9. P. 3888.
11. **Dubrovskii V. G.** Nucleation-dependent surface diffusion in anisotropic growth of III–V nanostructures // *Crystal Growth Design*. 2024. Vol. 24. No. 15. P. 6450.
12. **Zendrini M., Dubrovskii V., Rudra A., Dede D., Morral A. F. I., Piazza V.** Nucleation-limited kinetics of GaAs nanostructures grown by selective area epitaxy: Implications for shape engineering in optoelectronic devices // *ACS Applied Nano Materials*. 2024. Vol. 7. No. 16. Pp. 19065–19074.
13. **Semlali E., Avit G., André Y., Gil E., Moskalenko A., Shields P., Dubrovskii V. G., Cattoni A., Harmand J.-Ch., Trassoudaine A.** Circumventing the ammonia-related growth suppression for obtaining regular GaN nanowires by HVPE // *Nanotechnology*. 2024. Vol. 35. No. 26. P. 265604.
14. **Dubrovskii V. G., Sibirev N. V., Berdnikov Y., Gomes U. P., Ercolani D., Zannier V., Sorba L.** Length distributions of Au-catalyzed and In-catalyzed InAs nanowires // *Nanotechnology*. 2016. Vol. 27. No. 37. P. 375602.
15. **Dubrovskii V. G., Berdnikov Y., Schmidtbauer J., Borg M., Storm K., Deppert K., Johansson J.** Length distributions of nanowires growing by surface diffusion // *Crystal Growth Design*. 2016. Vol. 16. No. 4. Pp. 2167–2172.
16. **Dubrovskii V. G.** Length distributions of nanowires: Effects of surface diffusion versus nucleation delay // *Journal of Crystal Growth*. 2017. Vol. 463. 1 April. Pp. 139–144.
17. **Dubrovskii V. G., Barcus J., Kim W.** Does desorption affect the length distributions of nanowires? // *Nanotechnology*. 2019. Vol. 30. No. 47. P. 475604.
18. **Glas F., Dubrovskii V. G.** Self-narrowing of size distributions of nanostructures by nucleation antibunching // *Physical Review Materials*. 2017. Vol. 1. No. 3. P. 036003.
19. **Koivusalo E., Hakkarainen T., Guina M. T., Dubrovskii V. G.** Sub-Poissonian narrowing of length distributions realized in Ga-catalyzed GaAs nanowires // *Nano Letters*. 2017. Vol. 17. No. 9. Pp. 5350–5355.
20. **Wen C.-Y., Tersoff J., Hillerich K., Reuter M. C., Park J. H., Kodambaka S., Stach E. A., Ross F. M.** Periodically changing morphology of the growth interface in Si, Ge, and GaP nanowires // *Physical Review Letters*. 2011. Vol. 107. No. 2. P. 025503.
21. **Jacobsson D., Panciera F., Tersoff J., Reuter M. C., Lechmann S., Hofmann S., Dick K. A., Ross F. M.** Interface dynamics and crystal phase switching in GaAs nanowires // *Nature*. 2016. Vol. 531. 17 March. Pp. 317–322.
22. **Dubrovskii V. G.** Refinement of nucleation theory for vapor–liquid–solid nanowires // *Crystal Growth Design*. 2017. Vol. 17. No. 5. Pp. 2589–2593.
23. **Glas F., Panciera F., Harmand J. C.** Statistics of nucleation and growth of single monolayers in nanowires: Towards a deterministic regime // *Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*. 2022. Vol. 16. No. 5. P. 2100647.
24. **Glas F.** Incomplete monolayer regime and mixed regime of nanowire growth // *Physical Review Materials*. 2024. Vol. 8. No. 4. P. 043401.
25. **Becker R., Döring W.** Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen // *Annalen der Physik*. 1935. Vol. 416. No. 8. Pp. 719–752.
26. **Kashchiev D.** Nucleation: Basic theory with applications. Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2000. 544 p.
27. **Slezov V. V.** Kinetics of first-order phase transitions. Berlin: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2009. 415 p.
28. **Кукушкин С. А., Осипов А. В.** Процессы конденсации тонких пленок // *Успехи физических наук*. 1998. Т. 168. № 10. С. 1083–1116.
29. **Ball J. M., Carr J., Penrose O.** The Becker – Döring cluster equations: Basic properties and asymptotic behaviour of solutions // *Communications in Mathematical Physics*. 1986. Vol. 104. No. 4. Pp. 657–692.

30. **Jun Y.-S., Zhu Y., Wang Y., Ghim D., Wu X., Kim D., Jung H.** Classical and nonclassical nucleation and growth mechanisms for nanoparticle formation // *Annual Review of Physical Chemistry*. 2022. Vol. 73. April. Pp. 453–477.
31. **Wattis J. A. D., King J. R.** Asymptotic solutions of the Becker – Döring equations // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1998. Vol. 31. No. 34. P. 7169.
32. **King J. R., Wattis J. A. D.** Asymptotic solutions of the Becker – Döring equations with size-dependent rate constants // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2002. Vol. 35. No. 6. P. 1357.
33. **Wattis J. A. D.** A Becker – Döring model of competitive nucleation // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1999. Vol. 32. No. 49. P. 8755.
34. **Wattis J. A. D.** Similarity solutions of a Becker – Döring system with time-dependent monomer input // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2004. Vol. 37. No. 32. P. 7823.
35. **Duncan D. B., Soheili A. R.** Approximating the Becker – Döring cluster equations // *Applied Numerical Mathematics*. 2001. Vol. 37. No. 1–2. Pp. 1–29.
36. **Álvarez-Cuartas J. D., Camargo M., González-Cabrera D. L.** Colloidal model for nucleation and aggregation in one dimension: Accessing the interaction parameters // *Physical Review E*. 2024. Vol. 109. No. 6. P. 064604.
37. **Tomellini M., De Angelis M.** Fokker – Planck equation for the crystal-size probability density in progressive nucleation and growth with application to lognormal, Gaussian and gamma distributions // *Journal of Crystal Growth*. 2025. Vol. 650. 15 January. P. 127970.
38. **Vicsek T., Family F.** Dynamic scaling for aggregation of clusters // *Physical Review Letters*. 1984. Vol. 52. No. 19. Pp. 1669–1672.
39. **Bartelt M. C., Evans J. W.** Exact island-size distributions for submonolayer deposition: Influence of correlations between island size and separation // *Physical Review B*. 1996. Vol. 54. No. 24. Pp. R17359 – R17362.
40. **Vvedensky D. D.** Scaling functions for island-size distributions // *Physical Review B*. 2000. Vol. 62. No. 23. Pp. 15435–15438.
41. **Körner M., Einax M., Maass P.** Capture numbers and island size distributions in models of submonolayer surface growth // *Physical Review B*. 2012. Vol. 86. No. 8. Pp. 085403.
42. **Evans J. W., Thiel P. A., Bartelt M. C.** Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds // *Surface Science Reports*. 2006. Vol. 61. No. 1–2. Pp. 1–128.
43. **Dieterich W., Einax M., Maass P.** Stochastic theories and scaling relations for early-stage surface growth // *The European Physical Journal. Special Topics*. 2008. Vol. 161. No. 1. Pp. 151–165.
44. **Einax M., Dieterich W., Maass P.** Colloquium: Cluster growth on surfaces: Densities, size distributions, and morphologies // *Reviews of Modern Physics*. 2013. Vol. 85. No. 3. Pp. 921–939.
45. **Gibou F. G., Ratsch C., Caflisch R. E.** Capture numbers in rate equations and scaling laws for epitaxial growth // *Physical Review B*. 2003. Vol. 67. No. 15. Pp. 155403.
46. **Álvarez-Cuartas J. D., González-Cabrera D. L., Camargo M.** Epitaxial growth in one dimension // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2024. Vol. 36. No. 46. P. 463001.
47. **Aditya S., Roy N.** Family – Vicsek dynamical scaling and Kardar-Parisi-Zhang-like superdiffusive growth of surface roughness in a driven one-dimensional quasiperiodic model // *Physical Review B*. 2024. Vol. 109. No. 3. P. 035164.
48. **Bhakuni D. S., Lev Y. B.** Dynamic scaling relation in quantum many-body systems // *Physical Review B*. 2024. Vol. 110. No. 1. P. 014203.
49. **Fujimoto K., Hamazaki R., Kawaguchi Y.** Family – Vicsek scaling of roughness growth in a strongly interacting Bose gas // *Physical Review Letters*. 2020. Vol. 124. No. 21. P. 210604.
50. **Dubrovskii V. G., Berdnikov Yu. S.** Natural scaling of size distributions in homogeneous and heterogeneous rate equations with size-linear capture rates // *The Journal of Chemical Physics*. 2015. Vol. 142. No. 12. P. 124110.
51. **Dubrovskii V. G., Sibirev N. V.** Analytic scaling function for island-size distributions // *Physical Review E*. 2015. Vol. 91. No. 4. P. 042408.
52. **Dubrovskii V. G.** A general solution to the continuum rate equation for island-size distributions: Epitaxial growth kinetics and scaling analysis // *Nanomaterials*. 2025. Vol. 15. No. 5. P. 396.



53. Albao M. A., Evans M. M. R., Nogami J., Zorn D., Gordon M. S., Evans J. W. Monotonically decreasing size distributions for one-dimensional Ga rows on Si(100) // Physical Review B. 2005. Vol. 72. No. 3. P. 035426.
54. Javorský J., Setvín M., Ošťádal I., Sobotic P., Kotria M. Heterogeneous nucleation and adatom detachment at one-dimensional growth of In on Si (100) -2×1 // Physical Review B. 2009. Vol. 79. No. 16. Pp. 165424.
55. Liu H., Reinke P. Formation of manganese nanostructures on the Si(100)-(2×1) surface // Surface Science. 2008. Vol. 602. No. 4. Pp. 986–992.
56. Rothman A., Dubrovskii V. G., Joselevich E. Kinetics and mechanism of planar nanowire growth // Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA. 2020. Vol. 117. No. 1. Pp. 152–160.

THE AUTHORS

DUBROVSKII Vladimir G.

St. Petersburg State University

7 – 9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia

dubrovskii.ioffe@mail.ru

ORCID: 0000-0003-2088-7158

LESHCHENKO Egor D.

Submicron Heterostructures for Microelectronics, Research & Engineering Center, RAS

26 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

leshchenko.spb@gmail.com

ORCID: 0000-0002-2158-9489

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДУБРОВСКИЙ Владимир Германович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7 – 9

dubrovskii.ioffe@mail.ru

ORCID: 0000-0003-2088-7158

ЛЕЩЕНКО Егор Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

leshchenko.spb@gmail.com

ORCID: 0000-0002-2158-9489

Received 24.05.2025. Approved after reviewing 23.06.2025. Accepted 23.06.2025.


Статья поступила в редакцию 24.05.2025. Одобрена после рецензирования 23.06.2025. Принята 23.06.2025.

Научная статья

УДК 523.64


DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18404>

ОКОЛОЯДЕРНАЯ АТМОСФЕРА КОМЕТЫ 67P/ЧУРЮМОВА – ГЕРАСИМЕНКО В МОМЕНТ ВСТРЕЧИ С ЗОНДОМ РОЗЕТТА

В. В. Захаров¹, А. В. Родионов², И. С. Томилин³, Н. Ю. Быков³ 

¹Лаборатория "LIRA" Парижской обсерватории, Парижский университет науки и литературы, Университет Сорбонны, Национальный центр научных исследований Франции, г. Медон, Франция;

²Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
г. Саров Нижегородской области, Россия;

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;
 nbykov2006@yandex.ru

Аннотация. Проведено моделирование многокомпонентной атмосферы кометы с ядром сложной формы. Геометрия и интегральные параметры газопроизводительности ядра соответствуют условиям кометы 67P/Чурюмова – Герасименко в момент встречи с зондом «Розетта». Для моделирования применялись как газодинамические методы, предполагающие численное решение систем уравнений Эйлера и Навье – Стокса, так и кинетический подход на базе решения уравнения Больцмана. Проанализирована структура течения в окрестности ядра, выполнена оценка возможности применения газодинамических методов для расчета разреженной атмосферы, проведен анализ необходимости учета поступательно-вращательной неравновесности для интерпретации известных результатов наблюдений.

Ключевые слова: околоядерная атмосфера кометы, комета 67P/Чурюмова – Герасименко, разреженное течение, численное моделирование

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 24-12-00299 (<https://rscf.ru/project/24-12-00299>).

Для цитирования: Захаров В. В., Родионов А. В., Томилин И. С., Быков Н. Ю. Околоядерная атмосфера кометы 67P/Чурюмова – Герасименко в момент встречи с зондом Розетта // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. Т. 18. № 4. С. 48–60. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18404>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18404>

THE NEAR-NUCLEUS ATMOSPHERE OF COMET 67P/CHURYUMOV – GERASIMENKO AT THE MOMENT OF ITS RENDEZVOUS WITH THE ROSETTA SPACE PROBE

V. V. Zakharov¹, A. V. Rodionov², I. S. Tomilin³, N. Yu. Bykov³ 

¹LIRA, Observatoire de Paris, Université Paris Sciences et Lettres, Sorbonne Université,
CNRS, Meudon, France;



² Russian Federal Nuclear Center All-Russian Research Institute of Experimental Physics,
Sarov, Russia;

³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia
□ nbykov2006@yandex.ru

Abstract. The multicomponent atmosphere of a comet with a complex-shaped nucleus has been simulated. The geometry and integral parameters of the gas production of the nucleus correspond to the conditions of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko at the moment of its rendezvous with the Rosetta probe. The simulation was performed using both gas-dynamic methods, which involve numerical solution of the Euler/Navier – Stokes equations, and the kinetic approach based on the solution of the Boltzmann equation. The flow structure in the vicinity to the nucleus was analyzed, the applicability of gas-dynamic methods for prediction of a rarefied atmosphere was assessed, and the importance of considering translational-rotational nonequilibrium for interpreting observational data was analyzed.

Keywords: near-nucleus atmosphere of comet, comet 67P/Churyumov-Gerasimenko, rarefied flow, numerical simulation

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 24-12-00299 (<https://rscf.ru/project/24-12-00299>)).

For citation: Zakharov V. V., Rodionov A. V., Tomilin I. S., Bykov N. Yu., The near-nucleus atmosphere of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko at the moment of its rendezvous with the Rosetta space probe, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics, 18 (4) (2025) 48–60. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18404>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Кометы – это малые тела Солнечной системы с большим содержанием первородного льда, состав которых мог оставаться неизменным с момента их образования в протопланетном диске. Под действием солнечного излучения ядро нагревается, лед сублимирует, и продукты сублимации покидают ядро, истекая в космическое пространство и образуя кометную атмосферу. Исследования состава и структуры кометных ядер дают важную информацию об эволюции Солнечной системы и процессах формирования планет [1, 2].

В отсутствие возможности непосредственного исследования кометного ядра, данные по структуре и составу ядра можно получать лишь на основе информации о динамике, структуре и составе околоядерной атмосферы кометы (комы). Такая информация накапливается благодаря наблюдениям за кометами как с больших расстояний с использованием телескопов, находящихся на поверхности Земли или на околоземных орбитах, так и с относительно малых расстояний (например, с использованием космических зондов).

Получение данных о физических характеристиках ядра посредством измерений состава и параметров околоядерной атмосферы нуждается в физической модели, связывающей процессы внутри и на поверхности ядра с процессами, протекающими в околоядерной атмосфере. Создание такой модели, интерпретация данных наблюдений, а также оптимизация программы наблюдений требует детального понимания структуры комы и закономерностей поведения ее компонентов. С этой целью в настоящей работе рассматривается один из возможных вариантов газовой атмосферы кометы, находящейся на относительно большом расстоянии от Солнца.

Моделирование динамики атмосферы представляет собой нетривиальную вычислительную задачу. В общем случае необходимо рассматривать трехмерные нестационарные процессы в широком диапазоне параметров. Поскольку продукты газопроизводительности ядра истекают в вакуум, течение в атмосфере кометы характеризуется наличием областей неконтиуального и неравновестного течения. Поэтому для описания таких течений необходимо использовать как контиуальные модели (уравнения Эйлера, Навье – Стокса), так и кинетические (уравнение Больцмана). Кроме того, для формулировки

граничных условий у поверхности ядра, для непрерывных методов требуется решить проблему кнудсеновского слоя (приповерхностный слой, в котором происходит релаксация изначально немаксвелловской функции распределения по скоростям молекул, эмитируемых с поверхности, к равновесной максвелловской функции). Кинетические методы, например метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (*англ.* the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)), позволяющие физически корректно проводить моделирование разреженных и неравновесных течений, намного более трудоемки для вычислений, чем газодинамические методы.

В качестве примера, для моделирования в настоящей работе выбрана комета 67P/Чурюмова – Герасименко (далее для краткости – 67P) как наиболее детально изученная в ходе программы Европейского космического агентства «Розетта» [3, 4]. Выбранное гелиоцентрическое расстояние соответствует моменту встречи зонда «Розетта» с кометой, когда газопродуктивность ядра еще далека от максимальной (в перигелии) и полные эмиссии разных компонентов сравнимы.

Цели настоящей работы следующие:

- (i) определение структуры течения в окрестности ядра кометы 67P на гелиоцентрическом расстоянии порядка 3 а.е.;
- (ii) оценка возможности расчета возникающего течения на базе уравнений Эйлера и/или Навье – Стокса;
- (iii) анализ необходимости учета поступательно-вращательной неравновесности при моделировании динамики атмосферы комет.

Постановка задачи

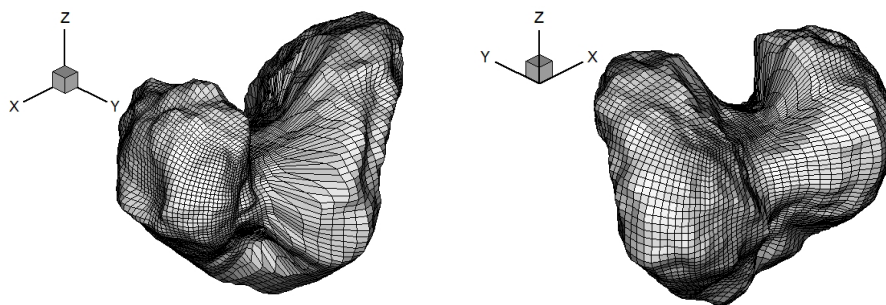


Рис. 1. Модель формы ядра кометы 67P/Чурюмова – Герасименко “RMOС shape 3” (показаны 3D-виды на ядро с двух ракурсов вокруг оси Z)

Рассматривается расчетная область, где внутренняя (входная) граница – это поверхность ядра, а внешняя (выходная) – это поверхность сферы с радиусом 35 км, описанная вокруг ядра. Геометрия ядра (рис. 1) соответствует форме “RMOС shape 3” – одной из первых реконструкций ядра кометы 67P. Эквивалентный радиус этой формы $R_n = 1,7$ км.

Предполагается, что ядро вращается вокруг оси z с периодом вращения 12,4 ч. Рассматриваемая область моделирования имеет протяженность 35 км в радиальном направлении, а характерная скорость течения в области – более 100 м/с, т.е. время пролета молекул от поверхности до внешней границы области моделирования составляет менее 350 с. За это время положение ядра изменяется менее, чем на 3° . Поэтому в данной работе предполагалось, что смена положения Солнца за время установления течения в рассматриваемой области не оказывает заметного влияния на распределение газопродуктивности поверхности и для описания течения в коме используются стационарные решения.

Предполагается, что ядро состоит из смеси льдов воды, монооксида и диоксида углерода (H_2O , CO и CO_2), а также тугоплавких компонентов. Соответствующие льды имеют разные температуры сублимации. Согласно работе [5], лед H_2O находится на поверхности, а льды CO и CO_2 залегают в ядре на некоторой глубине. Таким образом, сублимация молекул воды происходит непосредственно с поверхности кометного ядра, а молекулы монооксида и диоксида углерода диффундируют из глубины ядра.

Модель эмиссии H_2O предполагает, что поверхность кометы покрыта большим числом малоразмерных ледяных участков с интегральной долей f от площади поверхности; в данной работе принято, что $f = 0,033$ и эта доля постоянна по всей поверхности ядра.

Солнечный тепловой поток, приходящийся на единицу освещенной (незатененной) поверхности ядра, следует выражению

$$E_{in} = (1 - A) \cdot c_{sun} \cdot \max(0, \cos \theta) / r_h^2, \quad (1)$$

где A – визуальное альbedo (принималось $A = 0,05$); c_{sun} – поток энергии солнечного излучения на гелиоцентрическом расстоянии $r_h = 1$ а.е., $c_{sun} = 1360$ Вт/м²; θ , рад, – угол между локальной нормалью к поверхности и направлением на Солнце.

Уравнение баланса энергии на ледяной поверхности предполагает, что энергия, падающая на поверхность, расходуется на тепловое излучение и сублимацию молекул H_2O (теплообменом с внутренними слоями ядра и участками поверхности, не покрытыми льдом, пренебрегается):

$$E_{in} = \varepsilon_n \cdot \sigma_B \cdot T_l^4 + L_s \cdot Z_{0,(H_2O)}, \quad (2)$$

где T_l , К, – температура льда на поверхности кометы; ε_n – коэффициент излучения поверхности ядра, $\varepsilon_n = 0,9$; σ_B , Вт/(м² · К⁴), – постоянная Стефана – Больцмана; $Z_{0,(H_2O)}$, кг/(с · м²), – массовый поток молекул воды с единичной площади ледяного участка поверхности; L_s , Дж/кг, – скрытая теплота сублимации льда.

Молекулы воды, сублимирующие с поверхности ядра, имеют полумаксвелловское распределение по скоростям (т.е. среднemasсовая скорость течения полагается нулевой, а влетающие молекулы имеют компоненту скорости, перпендикулярную к поверхности, – больше нуля). Вследствие межмолекулярных столкновений распределение по скоростям релаксирует (если столкновений достаточно) к равновесному максвелловскому распределению в слое над поверхностью (слой Кнудсена). Для использования континуальных методов необходимо определить параметры газа на верхней границе кнудсеновского слоя. С учетом того, что радиус ядра намного превышает толщину кнудсеновского слоя, в данной работе используется аналитическое решение для плоскопараллельного кнудсеновского слоя, полученное Карло Черчиньяни [6] из решения уравнения Больцмана:

$$Z_{0,(H_2O)} = \frac{p_s(T_l)}{\sqrt{k_B T_0 / m}} \cdot \sqrt{2} \cdot S \cdot \left\{ \frac{1}{2} - S \sqrt{\frac{T_0}{\pi T_l}} + \left[\left(S^2 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{T_0}{T_l}} - \frac{S \sqrt{\pi}}{2} \right] \operatorname{erfc}(S) \exp(S^2) \right\}; \quad (3)$$

$$\sqrt{\frac{T_0}{T_l}} = \sqrt{1 + \left(\frac{S \sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^2} - \frac{S \sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}, \quad (4)$$

где k_B , Дж/К, – постоянная Больцмана; m , кг, – масса молекулы воды; T_0 , К, – температура газа; S – безразмерная скорость на верхней границе кнудсеновского слоя, $S = u_0 / \sqrt{2 k_B T_0 / m}$ (u_0 , м/с – скорость); $p_s(T_l)$, Па, – давление насыщенного водяного пара; γ – показатель адиабаты.

Поток молекул воды с поверхности, имеющей ледяные участки и не покрытые льдом, определяется как произведение $f \cdot Z_{0,(H_2O)}$.

Выражения (3) и (4) зависят от параметра, определяющего влияние атмосферы кометы на поток, истекающий с поверхности кометы. В качестве такого параметра используется локальное число Маха у поверхности:

$$M_0 = S \sqrt{2 / \gamma} \quad (M_0 \leq 1).$$

Модель эмиссии монооксида и диоксида углерода предполагает, что сублимация льда происходит внутри ядра и молекулы диффундируют из глубины через поры на поверхность. С учетом большой неопределенности (отсутствие данных наблюдений) в

параметрах структуры поверхностного слоя, в данной работе используется простейшая модель, позволяющая качественно воспроизвести интегральные характеристики наблюдаемой активности ядра. Считается, что поток эмиссии складывается из двух частей (в определенной пропорции):

равномерно распределенной по всей поверхности,
пропорциональной падающему солнечному излучению.

Первая часть связана с низкой температурой сублимации CO и CO₂ (у воды она значительно выше). Для сублимации CO, CO₂ температура в поверхностном слое в течение периода вращения остается довольно высокой даже на ночной стороне.

Вторая часть связана с изменением потока сублимации из-за нагрева поверхности, пропорционального падающему солнечному излучению.

Таким образом, величина потока, истекающего с единичной площади поверхности, выражается как

$$Z_J = Q_J \left[\frac{a_{0,J}}{A_{ext}} + \frac{(1-a_{0,J})}{A_{\odot}} \max(0, \cos \theta) \right], \quad (5)$$

где индекс J относится к CO или CO₂; Q_J , кг/с – полный поток компонента J с поверхности кометы (входной параметр модели); A_{ext} , A_{\odot} , м² – общая площадь поверхности и площадь освещенного сечения ядра, соответственно; $a_{0,J}$ – доля эмиссии, равномерно распределенной по поверхности (в данной работе $a_0 = 0,11$).

Модели газовой эмиссии, использованные в настоящей работе, являются простейшими с минимальным числом параметров. Однако способность этих моделей описывать интегральное и качественное изменение газопродуктивности у различных комет подтверждена в ряде работ (см., например, работы [5, 7 – 10]). В работе [5] параметры моделей подгонялись для согласования с данными измерений *in situ* (вдоль траектории зонда) состава и плотности атмосферы, а также изменения полной газопродуктивности ядра. Эти простейшие модели (без учета теплопроводности внутри ядра) позволяют получать удовлетворительное согласие с данными наблюдений для определенного угла между осью вращения ядра и направлением на Солнце, т.е. только для определенного участка траектории кометы и ограниченного временного промежутка.

Начальной поверхностью для решения уравнений Эйлера и Навье – Стокса служит верхняя граница кнудсеновского слоя, толщина которого считается пренебрежимо малой, по сравнению с радиусом ядра, поэтому геометрическое положение этой границы совпадает с поверхностью ядра. Предполагается, что поток эмиссии направлен перпендикулярно от поверхности. По величинам потока эмиссии и температуры, полученным на верхней границе кнудсеновского слоя, и числу Маха M_0 (задано у поверхности) можно вычислить остальные параметры газа (плотность, давление, скорость) для расчета континуальными методами.

На внешней границе области моделирования (сфера радиуса 35 км вокруг ядра) ставилось условие свободного вытекания. Радиальная составляющая скорости – сверхзвуковая, и такое граничное условие является корректным.

При континуальном описании течения, в настоящей работе решается система уравнений Эйлера или Навье – Стокса – Фурье (для вязкой теплопроводной сжимаемой жидкости).

Для расчета уравнений газовой динамики используется схема типа Годунова второго порядка точности, предложенная Родионовым и описанная в работе [11]. Указанная схема имеет отличительную черту: для получения второго порядка точности по пространству используется линейное распределение параметров внутри каждой ячейки (с применением реконструкций-ограничителей Колгана или ван Лира). Второй порядок по времени достигается благодаря использованию процедуры типа предиктор-корректор. Расчеты задач проводятся методом установления по времени, когда стационарное течение находят путем длительного расчета нестационарного течения.

В случае решения уравнений Навье – Стокса их правые части (члены, описывающие процессы вязкости, теплопроводности и диффузии компонентов смеси) аппроксимируются явным образом с использованием центральных разностей. В отличие от решения



уравнений Эйлера, здесь может возникать проблема моделирования сильно разреженной комы, когда диссипативные процессы (правые части уравнений Навье – Стокса) начинают доминировать над конвективными процессами (перетекание вещества между ячейками). В таких случаях расчеты в рамках уравнений Навье – Стокса не приводят к стационарному решению.

Для кинетического описания течения используется метод DSMC [12, 13], который представляет собой стохастический метод решения уравнения Больцмана. Метод DSMC не требует специального выделения кнудсеновского слоя, и значения потока эмиссии и температуры для H_2O следуют из решения уравнения (2), а для CO и CO_2 – из уравнения (5). Вылет молекул с поверхности описывается полумаксвелловской функцией распределения по скоростям, т.е. скорости влетающих молекул соответствуют функции Максвелла с нулевой средней скоростью и имеют только положительную компоненту скорости, перпендикулярную к поверхности.

При моделировании DSMC, для частиц применялась модель твердых сфер переменного диаметра (*англ.* Variable Hard Sphere (VHS)) и схема столкновений без счетчика времени (*англ.* no-time-counter (NTC)) [12]. Для описания поступательно-вращательного энергообмена использовалась модель Ларсена – Боргнакке с числом столкновений, необходимым для установления поступательно-вращательного равновесия $\Lambda = 1$. В рассматриваемом температурном диапазоне колебательные степени свободы молекул полагались невозбужденными. Часть β потока молекул, возвращающихся на поверхность ($\beta = f$), конденсировалась, а остальная часть $(1 - \beta)$ отражалась диффузно с полной аккомодацией энергии.

Подробное описание параметров (зависимость вязкости от температуры, сечения столкновений и прочее), используемых в газодинамическом и кинетическом моделировании, приведено в работах [14 – 18].

Результаты расчетов и их обсуждение

В настоящей работе рассмотрено газовое течение в окрестности ядра кометы 67P, когда она находится на гелиоцентрическом расстоянии, равном 3,22 а.е. Предполагается, что Солнце находится в плоскости XZ и направление на Солнце составляет 50° от оси Z (в сторону оси X).

Рис. 2 показывает распределения потоков газовой эмиссии по поверхности ядра кометы. Для заданной модели газопродуктивности, распределения потоков монооксида углерода CO ($Q_{CO} = 2 \cdot 10^{25} \text{ с}^{-1}$) и его диоксида CO_2 ($Q_{CO_2} = 3 \cdot 10^{24} \text{ с}^{-1}$) отличаются на постоянный коэффициент $Q_{CO_2}/Q_{CO} = 0,15$, поэтому на рис. 2 представлено только распределение газового потока монооксида углерода CO . Эмиссия воды H_2O определяется поверхностной сублимацией льда. Интенсивность этой эмиссии очень чувствительна к температуре, поэтому потоки с освещенной и затененной поверхностей отличаются на порядки величины (от 10^{10} до $10^{21} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$). Потоки эмиссии CO и CO_2 задаются независимо от температуры поверхности в виде суммы двух составляющих:

равномерно распределенной по всей поверхности,
зависящей от освещенности поверхности.

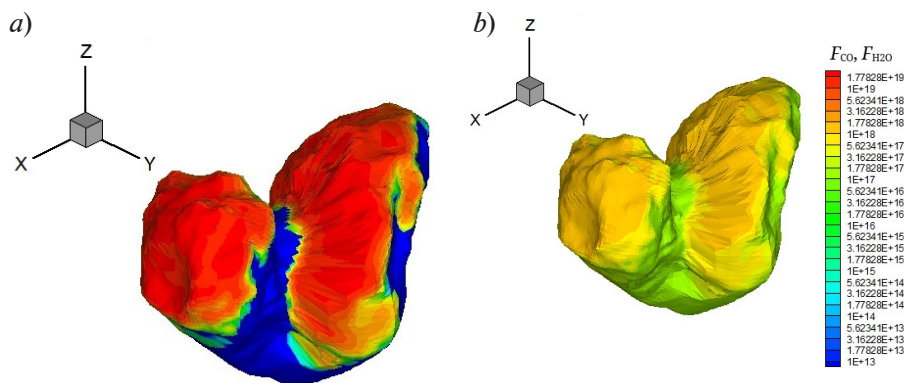


Рис. 2. 3D-изображения распределений по поверхности ядра потоков газовой эмиссии (в $\text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$), рассчитанных для воды H_2O (a) и монооксида углерода CO (b)

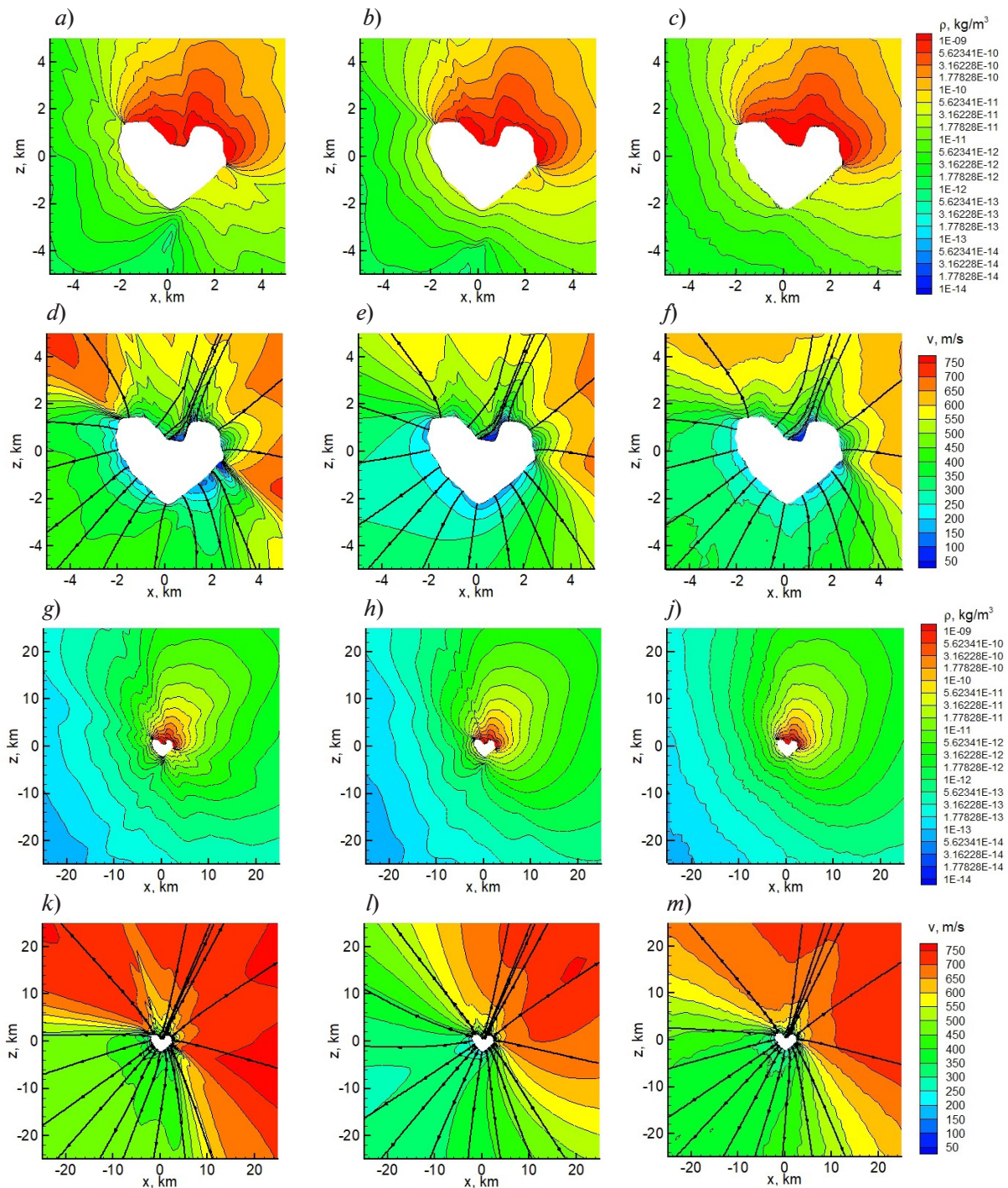


Рис. 3. Изолинии плотности (в $\text{кг}\cdot\text{м}^{-3}$) ($a - c, g - j$) и скорости (в $\text{м}\cdot\text{с}^{-1}$) ($d - f, k - m$) течения смеси газов ($\text{H}_2\text{O}, \text{CO}, \text{CO}_2$) в плоскости XZ , в окрестности ядра кометы (области до $3R_n$ ($a - f$) и до $15R_n$ ($g - m$)), рассчитанных с помощью уравнений Эйлера (a, d, g, k) и Навье – Стокса (b, e, h, l), а также методом DSMC (c, f, j, m)

У этих составляющих значения потоков эмиссии на освещенной и затененной поверхностях сопоставимы:

$$5,0 \cdot 10^{16} - 1,0 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1} \text{ для } \text{CO},$$

$$7,5 \cdot 10^{15} - 1,5 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1} \text{ для } \text{CO}_2.$$

Распределения плотности и скорости (с линиями тока) в плоскости XZ , полученные из решения уравнений Эйлера и Навье – Стокса, а также DSMC показаны на рис. 3 (для областей до $3R_n$ и до $15R_n$).

В окрестности ядра кометы (область менее $5R_n$) имеет место хорошее качественное согласие решений, полученных разными методами (см. рис. 3, $a - f$). Решения, полученные методами сплошной среды и в предположении о равновесности течения, показывают более интенсивное расширение и ускорение потока. Кроме того, в результатах, полученных методами сплошной среды, имеются выраженные ударно-волновые структуры. В результатах кинетического моделирования эти структуры отсутствуют или сильно размыты ввиду недостаточной частоты столкновений молекул.

По мере удаления от ядра различия в решениях возрастают. При этом качественное согласие между решением Эйлера и решением, полученным методом DSMC, сохраняется на больших расстояниях от ядра (см. рис. 3, $g - m$). Согласно решению уравнений Навье – Стокса, на расстоянии порядка $5R_n$ начинается искусственное торможение потока. Это связано с тем, что сильная разреженность течения приводит к преобладанию диссипативных процессов над конвективными.

Макроскопические параметры течения (плотность, скорость и пр.) – это осредненные значения соответствующих молекулярных величин (среднее число молекул в единице объема, их средняя скорость и т.п.) в течении. Поэтому их можно определять лишь до тех пор, пока имеется достаточное число молекул в самом малом из значимых объемов течения. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии в течении можно вывести, пользуясь континуальной и/или кинетической моделью, но эти уравнения не замкнуты, пока касательные (сдвиговые) напряжения и тепловые потоки не выражены через макроскопические величины низшего порядка. Такое условие накладывает ограничение на применение континуальных уравнений. Члены уравнений, отвечающие за перенос (транспортные члены) в уравнениях Навье – Стокса, не отражают рассматриваемого процесса, если градиенты макроскопических переменных становятся настолько велики, что их характерная длина оказывается соизмеримой с длиной свободного пробега молекул между их столкновениями.

Рассматриваемое гелиоцентрическое расстояние и соответствующая ему газопроизводительность ядра кометы порождают весьма разреженное течение уже в непосредственной окрестности ядра. Рис. 4, a иллюстрирует распределение числа Кнудсена Kn в поле течения:

$$Kn = \lambda/L, \tag{6}$$

где λ – длина свободного пробега молекул; L – характерный линейный размер течения, определяемый по градиенту плотности, $L = \rho/(d\rho/dr)$.

На дневной стороне, до расстояния порядка $5R_n$, имеется область с $Kn < 1$; на всей же ночной стороне течения $Kn > 1$. Принято считать, что применимость газодинамических методов на базе уравнений Навье – Стокса и Эйлера ограничена значениями числа Кнудсена: $Kn < 1$ [9, 6]. Однако отметим, что в работах [10, 13, 14] показано, что газодинамические методы могут давать качественно правильные распределения плотности и скорости течения даже при значениях $Kn > 1$.

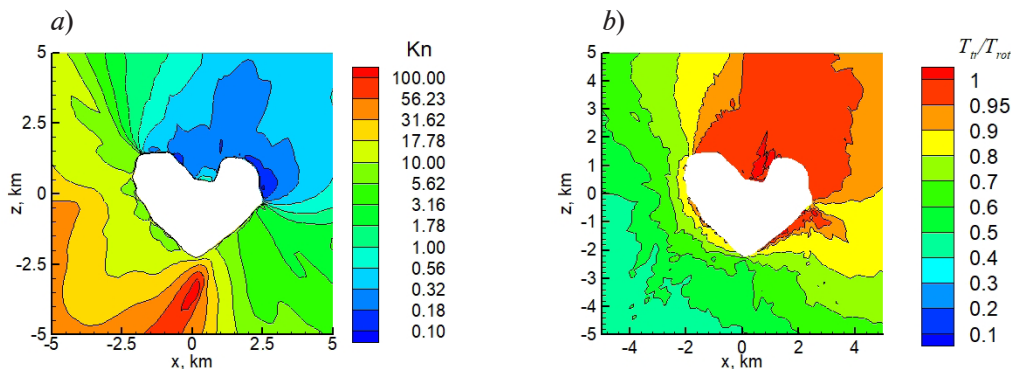


Рис. 4. Изолинии числа Кнудсена (Kn) (a) и отношения поступательной температуры к вращательной (T_{tr}/T_{tot}) (b) в плоскости XZ

Даже при максимально быстром поступательно-вращательном энергообмене, постулированном в расчетах ($\Lambda = 1$), равновесие между поступательными и вращательными степенями свободы молекул (характеризуемое отношением соответствующих температур $T_{tr}/T_{rot} > 0,9$) сохраняется только на дневной стороне, в области протяженностью в несколько радиусов ядра (рис. 4, *b*). Недостаточная частота столкновений приводит к замораживанию внутренней энергии молекул и, соответственно, к меньшей доле тепловой энергии газа, преобразуемой в поступательное движение, и меньшей интенсивности ускорения потока.

Рис. 5 показывает распределение в течении относительной концентрации молекул H_2O , CO , CO_2 (результат решения методом DSMC). Вследствие значительной разницы в потоках эмиссии H_2O , CO и CO_2 с освещенной поверхности (см. рис. 2), в течении газовой смеси доминирует вода H_2O . На ночной стороне доминирует монооксид углерода CO . Наличие эмиссии CO и CO_2 на ночной и затененной сторонах ограничивает расширение H_2O с дневной на ночную сторону и препятствует формированию потока конденсации на неосвещенную поверхность. Относительная концентрация диоксида углерода CO_2 имеет максимум на ночной стороне, но даже там она не превышает 15%. На дневной стороне, около затененных частей поверхности, относительные концентрации H_2O и CO сравнимы (имеют значения около 50%). По мере удаления от ядра кометы вода (компонент с наибольшей общей газопроизводительностью) постепенно занимает доминирующее положение во всей области.

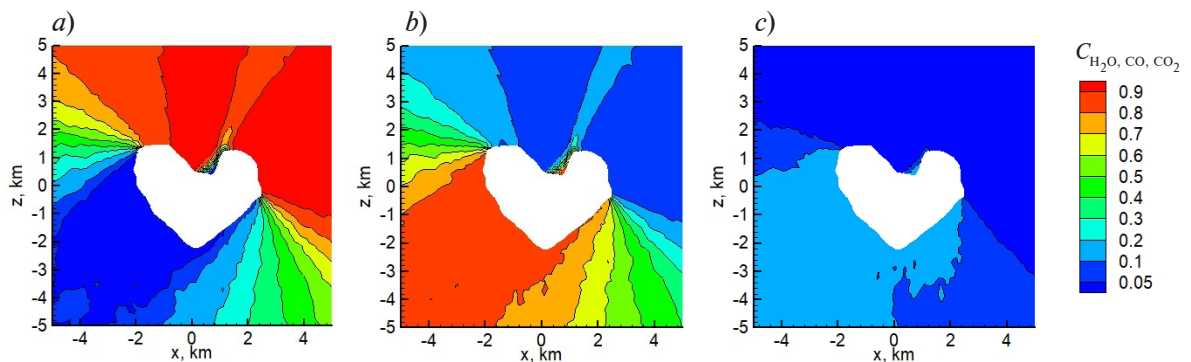


Рис. 5. Изолинии относительной концентрации молекул H_2O (*a*), CO (*b*) и CO_2 (*c*) в течении, полученные методом Монте-Карло

Численное моделирование было выполнено на вычислительном кластере с узлами из Intel Xeon E5-2650 v4 (2,20 ГГц). Без использования распараллеливания решение уравнений Эйлера заняло 3 ч, уравнений Навье – Стокса – 5 ч, расчет методом DSMC – 48 ч.

Заключение

Проведено математическое моделирование газодинамическими и кинетическими методами течения во внутренней атмосфере кометы 67P/Чурюмова – Герасименко в момент ее встречи с зондом «Розетта». По результатам моделирования можно описать следующий характер протекающих процессов.

Многокомпонентная эмиссия с поверхности ядра сложной формы приводит к формированию в непосредственной окрестности ядра кометы многомерного течения со сложной структурой и областями разного молекулярного состава. Однако уже на расстоянии около $5R_n$ структура течения приближается к течению от точечного источника с переменной угловой интенсивностью, а именно – расширение газа происходит в радиальном направлении с практически постоянной (но зависящей от направления) скоростью.

Распределения плотности и скорости указанного течения, полученные из решения уравнений Эйлера, качественно согласуются с результатами моделирования методом DSMC. Учитывая большую неопределенность параметров эмиссии с поверхности ядра (вследствие отсутствия прямых измеряемых данных) и необходимость многочисленных расчетов для инверсии данных косвенных наблюдений (например, спектроскопии



комы), решения уравнений Эйлера можно использовать для интерпретации наблюдений как наиболее вычислительно эффективные.

Рассматриваемое гелиоцентрическое расстояние (3,2 а.е.) и соответствующая ему газопроизводительность ядра имеют следствием сильную разреженность и неравносность течения в большей части области моделирования. В расчетах переноса излучения при моделировании вращательных спектров в субмиллиметровом диапазоне важно учитывать поступательно-вращательную неравносность, так как вращательная температура определяет заселенность энергетических уровней, а поступательная температура определяет частоту столкновений и величину доплеровского сдвига.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Thomas N.** An introduction to comets. Post-Rosetta perspectives (Book Series: Astronomy and Astrophysics Library). Cham, Switzerland: Springer, 2020. 503 p.
2. **Еленин Л. В.** Кометы Странники Солнечной системы. М.: Эксмо, 2024. 304 с.
3. **Gulkis S., Allen M., von Allmen P., et al.** Subsurface properties and early activity of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko // *Science*. 2015. Vol. 347. No. 6220. P. aaa0709.
4. **Sierks H., Barbieri C., Lamy Ph. L., et al.** On the nucleus structure and activity of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko // *Science*. 2015. Vol. 347. No. 6220. P. aaa1044.
5. **Zakharov V. V., Crifo J.-F., Rodionov A. V., Rubin M., Altwegg K.** The near-nucleus gas coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko prior to the descent of the surface lander PHILAE // *Astronomy & Astrophysics*. 2018. Vol. 618. October. P. A71.
6. **Cercignani C.** Strong evaporation of a polyatomic gas // *Proceedings of the 12-th International Symposium “Rarefied gas dynamics”*. July, 7–11, 1980. Charlottesville (USA); Technical Papers. Part 1. (A82-13026 03-77). New York: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1981. Pp. 305–320.
7. **Bieler A., Altwegg K., Balsiger H., et al.** Comparison of 3D kinetic and hydrodynamic models to ROSINA-COPS measurements of the neutral coma of 67P/Churyumov – Gerasimenko // *Astronomy & Astrophysics*. 2015. Vol. 583. November. P. A7.
8. **Fougere N., Combi M.R., Tenishev V., Rubin M., Bonev B. P., Mumma M. J.** Understanding measured water rotational temperatures and column densities in the very innermost coma of Comet 73P/Schwassmann – Wachmann 3 B // *Icarus*. 2012. Vol. 221. No. 1. Pp. 174–185.
9. **Fougere N., Altwegg K., Berthelier J.-J., et al.** Three-dimensional direct simulation Monte-Carlo modeling of the coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko observed by the VIRTIS and ROSINA instruments on board Rosetta // *Astronomy & Astrophysics*. 2016. Vol. 588. April. P. A134.
10. **Marschall R., Su C. C., Liao Y., et al.** Modelling observations of the inner gas and dust coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko using ROSINA/COPS and OSIRIS data: First results // *Astronomy & Astrophysics*. 2016. Vol. 589. May. P. A90.
11. **Родионов А. В.** Повышение порядка аппроксимации схемы С. К. Годунова // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1987. Т. 27. № 12. С. 1853–1860.
12. **Bird G. A.** The DSMC method. North Charleston, USA: CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013. 300 p.
13. **Bird G. A.** Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows (Oxford Engineering Science Series, No. 42). Oxford, UK: Clarendon Press, 1994. 458 p.
14. **Crifo J. F., Lukianov G. A., Rodionov A. V., Khanlarov G. O., Zakharov V. V.** Comparison between Navier – Stokes and direct Monte-Carlo simulations of the circumnuclear coma: I. Homogeneous, spherical source // *Icarus*. 2002. Vol. 156. No. 1. Pp. 249–268.
15. **Crifo J. F., Lukianov G. A., Zakharov V. V., Rodionov A. V.** Physical model of the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko (Chapfer) // L. Colangelli, E. M. Epifani, P. Palumbo (Eds.). *The new Rosetta targets. Observations, simulations and instrument performances*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 2004. Pp. 119–130.
16. **Rodionov A. V., Crifo J.-F., Szegö K., Lagerros J., Fulle M.** An advanced physical model of cometary activity // *Planetary and Space Science*. 2002. Vol. 50. No. 11–12. Pp. 983–1024.
17. **Crifo J.-F., Loukianov G. A., Rodionov A. V., Zakharov V. V.** Navier–Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear gas coma II. Homogeneous, aspherical sources // *Icarus*. 2003. Vol. 163. No. 2. Pp. 479–503.

18. **Zakharov V. V., Rodionov A. V., Loukianov G. A., Crifo J. F.** Navier –Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear gas coma III. Spherical, inhomogeneous sources // *Icarus*. 2008. Vol. 194. No. 1. Pp. 327–346.

REFERENCES

1. **Thomas N.**, An introduction to comets. Post-Rosetta perspectives (Book Ser.: Astronomy and Astrophysics Library), Springer Cham, 2020.
2. **Yelenin L.**, Comets: The Wanderers of the Solar System, Bombora Publishing, Moscow, 2024.
3. **Gulkis S., Allen M., von Allmen P., et al.**, Subsurface properties and early activity of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko, *Science*. 347 (6220) (2015) aaa0709.
4. **Sierks H., Barbieri C., Lamy Ph. L., et al.**, On the nucleus structure and activity of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko, *Science*. 347 (6220) (2015) aaa1044.
5. **Zakharov V. V., Crifo J.-F., Rodionov A. V., et al.**, The near-nucleus gas coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko prior to the descent of the surface lander PHILAE, *Astronomy & Astrophysics*. 618 (Oct) (2018) A71.
6. **Cercignani C.**, Strong evaporation of a polyatomic gas, Proc. 12-th Int. Symp. “Rarefied gas dynamics”. July, 7–11, 1980, Charlottesville (USA); Tech. Papers. P. 1. (A82-13026 03-77), AIAA (1981) 305–320.
7. **Bieler A., Altwegg K., Balsiger H., et al.**, Comparison of 3D kinetic and hydrodynamic models to ROSINA-COPS measurements of the neutral coma of 67P/Churyumov – Gerasimenko, *A&A*. 583 (Nov) (2015) A7.
8. **Fougere N., Combi M. R., Tenishev V., et al.**, Understanding measured water rotational temperatures and column densities in the very innermost coma of Comet 73P/Schwassmann – Wachmann 3 B, *Icarus*. 221(1) (2012) 174–185.
9. **Fougere N., Altwegg K., Berthelier J.-J., et al.**, Three-dimensional direct simulation Monte-Carlo modeling of the coma of comet 67P/Churyumov –Gerasimenko observed by the VIRTIS and ROSINA instruments on board Rosetta, *A&A*. 588 (Apr) (2016) A134.
10. **Marschall R., Su C. C., Liao Y., et al.**, Modelling observations of the inner gas and dust coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko using ROSINA/COPS and OSIRIS data: First results, *A&A*. 589 (May) (2016) A90.
11. **Rodionov A. V.**, Increase in the order of approximation of a scheme of S. K. Godunov, *USSR Comput. Math. Math. Phys.* 27 (6) (1987) 164–169.
12. **Bird G. A.**, The DSMC method, CreateSpace Independent Publishing Platform, North Charleston, USA, 2013.
13. **Bird G. A.**, Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows (Oxford Engineering Science Series, No. 42), Clarendon Press, Oxford, UK, 1994.
14. **Crifo J. F., Lukianov G. A., Rodionov A. V., et al.**, Comparison between Navier – Stokes and direct Monte-Carlo simulations of the circumnuclear gas coma: I. Homogeneous, spherical source, *Icarus*. 156 (1) (2002) 249–268.
15. **Crifo J. F., Lukianov G. A., Zakharov V. V., Rodionov A. V.**, Physical model of the coma of comet 67P/Churyumov – Gerasimenko (Chapfer), In book: L. Colangelli, E.M. Epifani, P. Palumbo (Eds.). The new Rosetta targets. Observations, simulations and instrument performances, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands (2004) 119–130.
16. **Rodionov A. V., Crifo J.-F., Szegő K., et al.**, An advanced physical model of cometary activity, *Planet. Space Sci.* 50 (11–12) (2002) 983–1024.
17. **Crifo J.-F., Loukianov G. A., Rodionov A. V., Zakharov V. V.**, Navier–Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear gas coma II. Homogeneous, aspherical sources, *Icarus*. 163 (2) (2003) 479–503.
18. **Zakharov V. V., Rodionov A. V., Loukianov G. A., Crifo J. F.**, Navier –Stokes and direct Monte Carlo simulations of the circumnuclear gas coma III. Spherical, inhomogeneous sources, *Icarus*. 194 (1) (2008) 327–346.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАХАРОВ Владимир Валентинович – доктор физико-математических наук, научный сотрудник Лаборатории “LIRA” Парижской обсерватории, Парижский университет науки и литературы, Университет Сорбонны, Национальный центр научных исследований Франции, г. Медон, Франция.

92195, Франция, г. Медон, Площадь Жюль-Жанссен, 5, CNRS
vladimir.zakharov@obspm.fr
ORCID: 0000-0002-2411-506X

РОДИОНОВ Александр Владимирович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Российского федерального ядерного центра – Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики, г. Саров Нижегородской области, Россия.

607188, Россия, г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37
avrodionov@rambler.ru
ORCID: 0000-0002-8123-6298

ТОМИЛИН Илья Сергеевич – ассистент Высшей школы программной инженерии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
tomilin.is@edu.spbstu.ru
ORCID: 0009-0000-3375-9126

БЫКОВ Николай Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nbykov2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0041-9971

THE AUTHORS

ZAKHAROV Vladimir V.

LIRA, Observatoire de Paris, Université Paris Sciences et Lettres, Sorbonne Université, CNRS, Meudon, France

5 Place Jules Janssen, Meudon, 92195, France
vladimir.zakharov@obspm.fr
ORCID: 0000-0002-2411-506X

RODIONOV Alexander V.

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics

37 Mir Ave., Sarov, Nizhny Novgorod Region, 607188, Russia
avrodionov@rambler.ru
ORCID: 0000-0002-8123-6298

TOMILIN Ilya S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
tomilin.is@edu.spbstu.ru
ORCID: 0009-0000-3375-9126

ВУКОВ Nikolay Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
nbykov2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0041-9971

*Статья поступила в редакцию 28.07.2025. Одобрена после рецензирования 26.08.2025.
Принята 27.08.2025.
Received 28.07.2025. Approved after reviewing 26.08.2025. Accepted 27.08.2025.*

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Научная статья

УДК 539.1, 539.18

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ЭВОЛЮЦИИ АТОМА ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДЛИТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

А. С. Зайцев [□], С. А. Зайцев, Д. С. Зайцева, Е. И. Крамарь

Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия

[□] alzaytsev@togudv.ru

Аннотация. Исследованы особенности применения предложенных нами параболических волновых пакетов (PWP) к решению нестационарного уравнения Шрёдингера (TDSE) для атома водорода, находящегося под действием длительного лазерного импульса. В рамках нестационарного вариационного принципа (TDVP) уравнение TDSE преобразуется в систему дифференциальных уравнений первого порядка относительно параметров PWP. Эффективность предлагаемой схемы исследована на точно решаемом примере импульсов произвольной (в том числе комплексной) амплитуды и длительности. Рассмотрен также случай воздействия ультрафиолетового излучения, для которого выполнено сопоставление наших расчетных данных с результатами других авторов. Перечислены возможные причины наблюдаемого расхождения между результатами применения нашего подхода и результатами использования стандартных методов.

Ключевые слова: параболические волновые пакеты, уравнение Шрёдингера, вариационный принцип, атом водорода, импульсный лазер

Финансирование. Разработка формализма применения PWP для описания действия длительных лазерных импульсов на атом водорода, а также действия на него коротких интенсивных импульсов когерентного экстремального ультрафиолетового (XUV) излучения поддержана Российским научным фондом (проект № 23-72-01072, <https://rscf.ru/project/23-72-01072/>).

Вычислительная часть работы поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта FEME-2024-0005.

Для цитирования: Зайцев А. С., Зайцев С. А., Зайцева Д. С., Крамарь Е. И. Применение параболических волновых пакетов к решению задачи эволюции атома водорода под действием длительных лазерных импульсов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 61–74. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

APPLICATION OF PARABOLIC WAVE PACKETS TO SOLVING THE EVOLUTION PROBLEM OF A HYDROGEN ATOM EXPOSED TO LONG LASER PULSES

A. S. Zaytsev [□], S. A. Zaytsev, D. S. Zaytseva, E. I. Kramar

Pacific National University, Khabarovsk, Russia

[□] alzaytsev@togudv.ru

Abstract. The article studies the features of application of the parabolic wave packets (PWP) (we proposed) to the solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation (TDSE) for a hydrogen atom exposed to a long laser pulse. Within the framework of the Time-Dependent Variational Principle, the TDSE is transformed into a system of first-order differential equations with respect to the PWP parameters. The efficiency of the proposed scheme has been studied using an exactly solvable example of pulses of arbitrary (including complex) amplitude and duration. The case of ultraviolet radiation was also considered, for which our calculations were compared with the results obtained by other authors. Possible reasons for the observed discrepancy between the results of applying our approach and those obtained by standard methods were listed.

Keywords: parabolic wave packets, time-dependent Schrödinger equation, time-dependent variational principle, hydrogen atom

Funding: Formalism development of using PWP for description of the action of long laser pulses on a hydrogen atom as well as the action of narrow high-power pulses of coherent XUV on this atom was funded by Russian Science Foundation (project No. 23-72-01072, <https://rscf.ru/project/23-72-01072/>).

The computational part of the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russian Federation within the project FEME-2024-0005.

For citation: Zaytsev A. S., Zaytsev S. A., Zaytseva D. S., Kramar E. I., Application of parabolic wave packets to solving the evolution problem of a hydrogen atom exposed to long laser pulses, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 61–74. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Прогресс, достигнутый в разработке аттосекундных импульсных источников рентгеновского и ультрафиолетового излучения [1], позволяет значительно расширить круг исследуемых явлений в атомах и молекулах, развивающихся во времени. В таких экспериментах оказывается возможным, например, наблюдать динамику сверхбыстрых электронов в режиме реального времени [2, 3], изучать генерацию высоких гармоник [4] и т. п. В свою очередь, необходимость теоретического осмысления новых экспериментальных данных привела к интенсивным исследованиям, направленным на разработку эффективных методов численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера (*англ.* Time-Dependent Schrödinger Equation (TDSE)) [5]. В случае слабых полей кулоновские состояния рассеяния, модифицированные лазерным излучением, достаточно точно описываются аналитически в рамках приближения сильного поля [6], подхода Бункина – Федорова [7] и модели Кулона – Волкова [8].

Переход к более мощным лазерным излучениям стимулировал развитие более точных методов, основанных на прямом решении TDSE. Наиболее известный из них – это метод Кранка – Николсона [9], который, по сути, представляет собой конечно-разностную явно-неявную схему с полусуммой и его модификации [10]. Кроме того, получил

развитие подход, основанный на вариационном принципе Дирака – вариационном принципе, зависящем от времени (*англ.* Time-Dependent Variational Principle (TDVP) [11]). Принципу TDVP удовлетворяют параметры пробных функций, используемых для представления решения TDSE. В качестве удачного примера применения TDVP можно указать развитый в работе [12] метод, где решение TDSE ищется в представлении гауссовых волновых пакетов (*англ.* Gaussian Wave Packets (GWP)).

Ранее нами был предложен метод решения TDSE [13], описывающего процесс воздействия линейно-поляризованного лазерного излучения на атом водорода. В основе нашего подхода лежит представление решения в пространстве так называемых параболических волновых пакетов (*англ.* Parabolic Wave Packet (PWP)), параметры которых зависят от времени. В рамках нашего PWP-подхода аксиальная симметрия учтена путем использования параболических координат с осью z , направленной вдоль вектора поляризации. Тем самым изначально трехмерная задача сводится к поиску решения на плоскости (ξ, η) .

К преимуществу метода можно отнести его способность находить решение в неограниченном пространстве, так что численная процедура свободна от граничных явлений в виде нефизического отражения, присущего подходам, в которых границы области, где ищется решение, задаются явно.

Вместе с тем метод имеет ряд недостатков, главным из которых является требование к порядку используемой численной схемы: этот порядок способен обеспечить точность вычислений, необходимую для устойчивой работы процедуры. Так, например, в случае применения метода конечных элементов или сеточного метода дискретизации пространства наиболее часто в задачах эволюции используется довольно стабильный метод Кранка – Николсона [9]. К сожалению, этот метод оказался недостаточно точным для применения в нашем случае; в результате уже на первых шагах работы процедуры матрица уравнения становилась сингулярной.

В данном исследовании наши усилия были направлены на расширение возможностей PWP-подхода, чтобы сделать его применимым к случаю импульсов продолжительностью около 10 оптических циклов. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана – Принса 8-го порядка [14], относящегося к методам Рунге – Кутты. Разработанная численная схема протестирована на примере с комплексным импульсом, допускающим точное решение в виде единственной функции PWP. Примечательно, что через выбор значений параметров импульса можно получить решение, которое время от времени перестает быть нормируемым, что выходит за рамки стандартных граничных условий и может служить дополнительной проверкой эффективности работы численной схемы.

Мы также выполнили расчеты спектров фотоэлектронов, соответствующих импульсам различной длительности, и сопоставили наши расчетные результаты с полученными ранее другими авторами. В частности, были рассмотрены случаи короткого и интенсивного импульса когерентного экстремального ультрафиолетового (*англ.* eXtreme UltraViolet (XUV)) излучения [15], а также импульсов длительностью 1 и 7 оптических циклов [16, 17]. Полное согласие с результатами других авторов, достигнутое в нашей статье [13] для коротких импульсов, длительность которых не превышала нескольких оптических циклов, нарушается при переходе к импульсам большей длительности. В частности, спектр фотоионизации, рассчитанный стандартным методом, для такого излучения демонстрирует относительно регулярные осцилляции с ростом энергии электрона. В то же время, согласно нашим расчетам, кривая поведения спектра электрона, выбитого импульсом, характеризуется несколькими максимумами с последующим монотонным убыванием. Для определения причин такого расхождения мы исследовали погрешность нашей численной схемы, а также сходимость результатов с уменьшением шага по времени и с повышением размеров базисного набора.

Атомные единицы (a.u./a.e.) $\hbar = e = m_e = 1$ используются везде, если не оговаривается иное.

Квантовомеханическая теория рассматриваемого явления

Рассмотрим TDSE вида

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{\mathcal{H}}(t) \Psi(t), \quad (1)$$

где полный гамильтониан системы

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{H}_C + \hat{U}(t), \quad (2)$$

представлен суммой кулоновского гамильтониана \hat{H}_C и энергии возмущения вызванного лазерным полем.

Кулоновский гамильтониан определяется выражением

$$\hat{H}_C = -\frac{1}{2M} \nabla_r^2 + \frac{Z}{r}, \quad (3)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор частицы массой M ; для атома водорода имеем $M = 1$ и заряд частицы $Z = -1$.

В случае линейно-поляризованного лазерного импульса естественным выбором направления оси z будет направление, параллельное вектору поляризации.

Таким образом, оператор возмущения в дипольном приближении и калибровке длины принимает вид

$$\hat{U}(t) = E(t)z, \quad (4)$$

где $E(t)$ – поле.

Аксиальная симметрия диктует применение параболических координат: ξ, η, ϕ , которые связаны с декартовыми согласно формулам

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \phi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \phi, \quad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta). \quad (5)$$

Таким образом, TDSE, выраженное формулой (1), сводится к следующему уравнению на плоскости (ξ, η) :

$$i \frac{(\xi + \eta)}{4} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \xi, \eta) = \left[-\frac{1}{2M} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{Z}{2} + \frac{E(t)}{8} (\xi^2 - \eta^2) \right] \times \Psi(t, \xi, \eta). \quad (6)$$

Параболические волновые пакеты. Решение уравнения (1) предлагается искать в виде следующего разложения [13]:

$$\Psi(t) = \sum_{\kappa} \sum_{j=1}^N u_j^{\kappa}(t), \quad (7)$$

по базисным функциям

$$\langle \xi, \eta, \phi | u^{\kappa}(t) \rangle = \frac{e^{i\kappa\phi}}{\sqrt{2\pi}} [\xi\eta]^{\frac{\lambda}{2}} g(t, \xi, \eta), \quad \lambda = |\kappa|, \quad (8)$$

где

$$g(t, \xi, \eta) = \exp[\gamma(t) - a(t)\xi - b(t)\eta]. \quad (9)$$

Пробные функции (9) мы назвали параболическими волновыми пакетами (PWP) по аналогии с известными в литературе гауссовыми волновыми пакетами (GWP) [12].

Вариационный принцип. В случае использования базисного набора из N векторов (9) волновую функцию системы будет представлять вектор длины $3N$, компонентами которого являются нелинейные параметры

$$\{\gamma_j(t), a_j(t), b_j(t)\}, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

упорядоченные следующим образом:

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \{\gamma_1(t), \gamma_2(t), \dots, \gamma_N(t)\}, \\ \{a_1(t), a_2(t), \dots, a_N(t)\}, \\ \{b_1(t), b_2(t), \dots, b_N(t)\} \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Таким образом, зависимость от времени параметров PWP определяет эволюцию атомной системы. Уравнение относительно компонент вектора параметров получается подстановкой разложения (7) в уравнение (1) с последующим применением вариационного принципа Маклачлана (TDVP) [11].

В результате исходное TDSE преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка относительно параметров (см., например, статью [12]):

$$iM\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}. \quad (11)$$

Здесь M – положительно определенная эрмитова матрица размером $3N \times 3N$, элементы которой определяются формулой

$$M_{jj'} = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial q_{j'}} \right. \right\rangle, \quad (12)$$

где \mathbf{v} – комплексный вектор длины $3N$ со следующими элементами:

$$v_j = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \left| \hat{H} \Psi \right. \right\rangle. \quad (13)$$

Начальные значения параметров $q(0)$ определяются путем диагонализации гамильтониана (3) для атома водорода.

Точно решаемый случай. В развитии нового численного подхода особое значение имеют эталонные решения, которые играют роль теста эффективности предлагаемой схемы. В качестве такового мы предложили следующее вспомогательное поле [13]:

$$E(t) = F(t) + i \frac{s(t)}{r}, \quad (14)$$

где $F(t) = 0$ при $t \leq 0$ и

$$s(t) = \int_0^t F(t') dt', \quad (15)$$

допускает точное решение в виде единственного PWP (9). Действительно, если подставить выражение (9) в уравнение (6), то получим уравнение вида

$$i \frac{(\xi + \eta)}{4} \frac{\partial}{\partial t} g(t, \xi, \eta) = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + 1 - \frac{F(t)}{4} (\xi^2 - \eta^2) - i \frac{s(t)}{2} \right] \times \\ \times g(t, \xi, \eta). \quad (16)$$

Из уравнения (16) следует система уравнений относительно параметров PWP:

$$\begin{aligned} a(t) + b(t) &= 1, \\ \frac{\partial}{\partial t} a(t) &= \frac{i}{2} F(t), \\ \frac{\partial}{\partial t} b(t) &= -\frac{i}{2} F(t), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma(t) = s(t) + 2ia^2(t) = -s(t) + 2ib^2(t).$$

Наконец, полагая для основного состояния атома водорода

$$a(0) = b(0) = \frac{1}{2}, \quad \gamma(0) = \frac{1}{2} \ln 2,$$

получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} a(t) &= \frac{1}{2} [1 + is(t)], \\ b(t) &= \frac{1}{2} [1 - is(t)], \\ \gamma(t) &= \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{i}{2} \left[t - \int_0^t s^2(t') dt' \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Следует отметить, что функция $F(t)$ может быть произвольной, а это означает, что к такому импульсу с произвольными значениями несущей частоты и амплитуды теория возмущений может оказаться неприменимой.

В случае эталонного решения (14), (15), допускающего существование решения в виде единственного PWP (см. формулу (9)), (3×3) -матрица M (12) принимает следующий явный вид:

$$M = \frac{e^{i\omega}}{4u^2v^2} \begin{bmatrix} u+v & -\frac{u+2v}{u} & -\frac{2u+v}{v} \\ -\frac{u+2v}{u} & 2\frac{u+3v}{u^2} & 2\frac{u+v}{uv} \\ -\frac{2u+v}{v} & 2\frac{u+v}{uv} & 2\frac{3u+v}{v^2} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

где $u = a + a^*$, $v = b + b^*$ и $\omega = \gamma + \gamma^*$ (звездочкой обозначена операция комплексного сопряжения).

В свою очередь выражение (13) для вектора \mathbf{v} также принимает простой вид:

$$\mathbf{v} = \frac{e^{i\omega}}{2uv} \begin{bmatrix} -1 + a + b - \frac{2a^2 - is(t)}{2u} - \frac{2b^2 - is(t)}{2v} + \frac{E(t)}{2} \left(\frac{1}{u^2} - \frac{1}{v^2} \right) \\ \frac{1 - a - b}{u} + \frac{2a^2 - is(t)}{u^2} + \frac{2b^2 + is(t)}{2uv} - \frac{E(t)}{2} \left(\frac{3}{u^3} - \frac{1}{uv^2} \right) \\ \frac{1 - a - b}{v} + \frac{2a^2 - is(t)}{2uv} + \frac{2b^2 + is(t)}{v^2} - \frac{E(t)}{2} \left(\frac{1}{u^2v} - \frac{3}{v^3} \right) \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Заметим, однако, что матричное уравнение (11) не сводится к системе (17) символьными преобразованиями, так что для проверки работоспособности подхода, основанного на уравнениях (11) – (13), в нашем распоряжении остается вариант численной схемы [13]. Эффективность нашего подхода мы проверяем на примерах, представленных в следующих разделах.

Амплитуда ионизации. Решение TDSE (1) можно использовать для получения информации об энергетическом и угловом распределениях электронов, выбитых из атома лазерным импульсом. В нашем случае исследуемой характеристикой является амплитуда ионизации, определяемая следующим образом.

Возмущение $\hat{U}(t)$ обращается в нуль при $t > t_f$, так что решение $\Psi(t)$ формально можно разложить по собственным функциям гамильтониана \hat{H}_C :

$$\Psi(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} C(\mathbf{k}) \psi_k^-(\mathbf{r}) e^{-i\frac{k^2}{2M}(t-t_f)} + \psi_b(t-t_f, \mathbf{r}), \quad (21)$$

где ψ_k^- – волновая функция состояния непрерывного спектра атомной системы,

нормированная по импульсу на δ -функцию; ψ_b обозначает вклад всех связанных состояний атома.

Коэффициенты $C(\mathbf{k})$ в выражении (21) определяют амплитуду перехода электрона в состояние континуума ψ_k^- , а именно – амплитуду ионизации.

Как показано в работе [18], для извлечения амплитуды $C(\mathbf{k})$ достаточно подействовать оператором функции Грина кулоновской системы

$$\hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \equiv \left[\frac{k^2}{2M} + i\varepsilon - \hat{H}_c \right]^{-1}$$

на решение $\Psi(t)$ в конце действия импульса, т. е. в момент времени $t = t_f$.

Действительно, из свойств функции Грина при $r \rightarrow \infty$ [19] следует, что искомая амплитуда будет фигурировать в асимптотическом выражении для $\hat{G}_c^{(+)}\Psi(t_f)$ в виде коэффициента при расходящейся кулоновской волне:

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \right| \Psi(t_f) \right\rangle \approx -\sqrt{2\pi} C(k\hat{\mathbf{r}}) \frac{\exp\{i[kr - \beta \ln(2kr)]\}}{r}, \quad (22)$$

где β – параметр Зоммерфельда, $\beta = ZM/k$.

С другой стороны, в работе [13] нами было показано, что

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \right| \frac{g_j(t, \xi, \eta)}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \approx -\sqrt{2\pi} C_j(k\hat{\mathbf{r}}) \frac{\exp\{i[kr - \beta \ln(2kr)]\}}{r}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} C_j(\mathbf{k}) \equiv C_j^0(\mathbf{k}) = & \frac{M \exp\{\gamma_j\}}{\pi [4a_j b_j]^2} \Gamma(i\beta + 1) e^{-\frac{\pi\beta}{2}} \frac{1}{c_j + s_j} \left(\frac{(1+p_j)(1+q_j)}{c_j + s_j} \right)^{i\beta} \times \\ & \times \left\{ a_j + b_j + b_j \left(\frac{1-p_j}{1+p_j} \right) \left[1 + (1+i\beta) \frac{4p_j}{(1-p_j)^2} \frac{c_j}{c_j + s_j} \right] + \right. \\ & \left. + a_j \left(\frac{1-q_j}{1+q_j} \right) \left[1 + (1+i\beta) \frac{4q_j}{(1-q_j)^2} \frac{s_j}{c_j + s_j} \right] \right\} \Bigg|_{t=t_f}. \end{aligned} \quad (24)$$

причем

$$\begin{aligned} p &= -ik/2a, \quad q = -ik/2b, \\ c &= (1-p)(1+q)\cos^2(\theta/2), \\ s &= (1+p)(1-q)\sin^2(\theta/2), \end{aligned} \quad (25)$$

$$c_v^{(n,\lambda)} = (-1)^v \frac{(n+\lambda)!}{(n-v)!(v+\lambda)!v!}. \quad (26)$$

Таким образом, амплитуда ионизации представляется в виде суммы

$$C(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^N C_j(\mathbf{k}). \quad (27)$$

В свою очередь, вероятность ионизации или спектр фотоэлектрона вычисляются путем интегрирования квадрата амплитуды по всем возможным углам вылета электрона:

$$\frac{dP}{dE} = k \int |C(\mathbf{k})|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (28)$$

Численная реализация решения матричного уравнения

Решение матричного уравнения (11) в настоящей работе реализовано методом Рунге – Кутты 8-го порядка с постоянной длиной шага, зависящей от размеров матрицы.

Дифференциальная система (11) является жесткой, что приводит к необходимости увеличивать число шагов по мере расширения размеров базиса. Мы полагаем, что это происходит потому, что показатели экспонент $a_j(t)$, $b_j(t)$, отвечающие разным g_j (см. выражение (9)), как показывает опыт, могут различаться на несколько порядков. При этом различие в параметрах нарастает довольно быстро. В результате даже при небольших значениях N ($N \approx 10$) матрица уравнения становится сингулярной уже на первых шагах работы процедуры, и процесс решения аварийно завершается.

Вместе с тем нам удалось обеспечить точность вычислений, необходимую для устойчивой работы указанной процедуры. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана – Принса 8-го порядка [14]. Избранная схема позволила нам получить решение также в случае импульсов продолжительностью около 10 оптических циклов. Была исследована погрешность вычислений решения, а также сходимость метода как с повышением размеров базиса, так и по мере увеличения числа шагов (уменьшения длины шага) по времени.

Результаты и их обсуждение

Точно решаемые задачи. Особый интерес представляет случай, когда напряженность внешнего поля лазера сопоставима с напряженностью внутриатомного поля. Поскольку теория возмущений оказывается неприменимой, такая ситуация служит удобным тестом для нашего численного подхода.

Мы рассмотрели два точно решаемых примера вспомогательного поля $E(t)$ (14), когда функция $F(t)$ следует разным выражениям:

$$\text{I. } F_{\text{I}}(t) = \sin(t); \text{ II. } F_{\text{II}}(t) = [(1 + i)/2] \sin(t).$$

Как следует из системы уравнений (18), в I примере функция $s(t)$ вещественная, так что

$$\text{Re}[a(t)] = \text{Re}[b(t)] = 1/2,$$

и таким образом решение $g(t, \xi, \eta)$ остается нормируемым в каждый момент времени. Сохранение единичной нормы – это одно из стандартных требований к решению TDSE для изначально связанного состояния квантовой системы.

Во II примере амплитуда импульса комплексная, что приводит к необычному поведению вещественной части параметра $a(t)$, которая теперь обращается в нуль в точках $t_j = \pi(2j + 1)$. Следовательно, в эти моменты времени решение $g(t, \xi, \eta)$ перестает быть нормируемым по переменной ξ . Это отклонение от поведения, характерного для квантовых систем, может служить дополнительным тестом устойчивости работы численной схемы, основанной на уравнении (11).

Результаты абсолютных отклонений рассчитанных параметров $\gamma(t)$, $a(t)$ и $b(t)$ от их точных значений (18) представлены на рис. 1. В вычислениях использовались различные версии схем: Рунге – Кутты 4-го порядка и Дормана – Принса. Из результатов, показанных на рис. 1, следует, что точность расчетов ожидаемо возрастает на 6 – 8 порядков при переходе к схеме Дормана – Принса.

К основным результатам следует отнести стабильность величины погрешности с течением времени, что делает возможным использование нашего подхода в сочетании со схемой Дормана – Принса для импульсов большой длительности. Наконец, полученные результаты могут служить доказательством работоспособности метода применительно к лазерному излучению высокой интенсивности, когда ни одно из полей (ни атомное, ни внешнее) не может быть рассмотрено в рамках теории возмущений.

Ультрафиолетовое излучение. Тестирование работоспособности PWP-подхода было выполнено также на примере поля слабой интенсивности, допускающего применение теории возмущений. В частности, был рассчитан спектр фотоэлектронов, покидающих атом водорода под действием лазерного импульса следующей формы [16, 17]:

$$E(t) = E_0 \sin[\omega(t - t_0)] \sin^2 \frac{\pi t}{T_f}, t_0 = \frac{T_f - \pi}{2}, 0 \leq t \leq T_f, \quad (29)$$

где $\omega = 1,71$; $T_f = 3,67$ либо $25,72$ для случаев одного либо семи оптических циклов, соответственно.

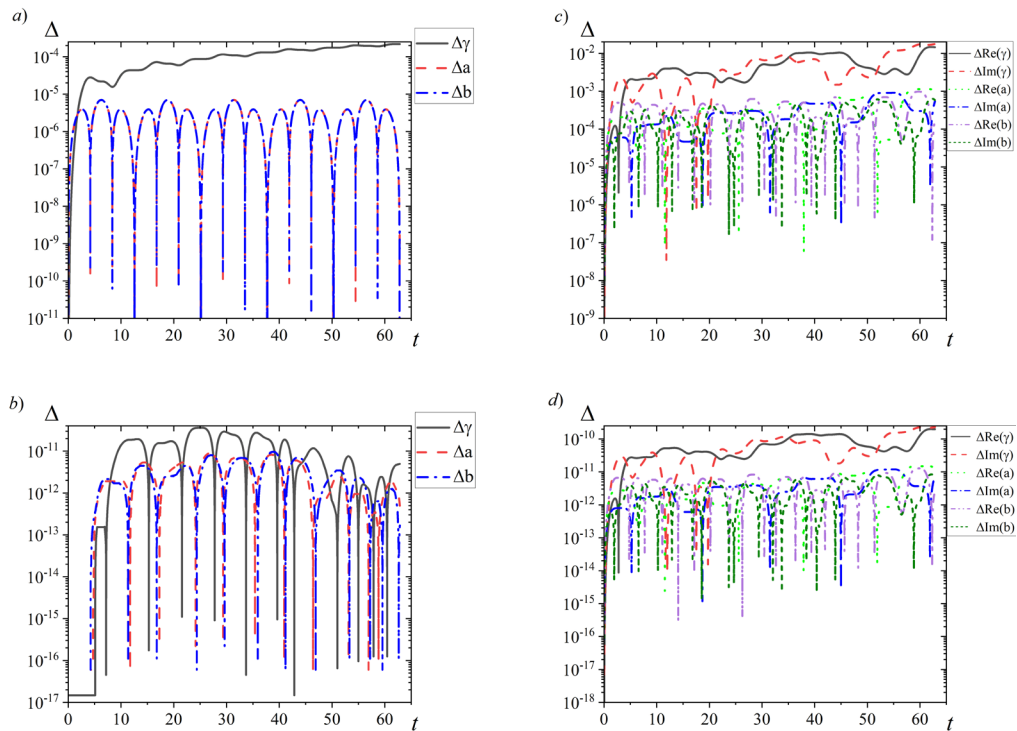


Рис. 1. Временная динамика абсолютных отклонений Δ параметров γ , a и b (решений системы (12) с учетом (19) и (20)) от своих точных значений (18): использованы схемы Рунге – Кутты 4-го порядка (a, c) и Дормана – Принса (b, d). Соответствующий PWP (9) удовлетворяет уравнению (16) с импульсом (14), (15), где функция $F(t)$ следует выражениям $F_1(t)$ (a, b) и $F_{II}(t)$ (c, d)

Амплитуду E_0 поля, линейно-поляризованного вдоль оси z , полагали равной 0,05 (малой, по сравнению со значением напряженности внутриатомного поля).

Результаты расчетов вероятности ионизации представлены на рис. 2, a и b, соответственно для значений продолжительности импульса в один либо семь оптических циклов (полученные нами данные сравниваются также с результатами работ [16, 17]).

В случае импульса длительностью в один цикл, форма которого представлена выражением (29), использован базисный набор PWP (8) размером $N = 54$. При этом была исследована зависимость результатов от длины шага h , который варьировали в интервале $7,34 \cdot (10^{-5} - 10^{-6})$.

Как следует из рис. 2, a, сходимость плотности вероятности ионизации достигается довольно быстро: соответствующие кривые становятся неразличимыми начиная с $h = 7,34 \cdot 10^{-5}$. Для сравнения мы также привели на рис. 2, a результаты расчетов, полученные в статье [16]. Плотность вероятности ионизации для 7-циклового импульса, по сравнению с результатами работы [17], также представлены на рис. 2, b. Свойства сходимости в данном случае были исследованы с размерами базисного набора $N = 54$ и 78. С учетом увеличения длительности импульса начальное значение шага по времени здесь также было увеличено до $h = 1,29 \cdot 10^{-4}$. Мы довели значение h до $2,57 \cdot 10^{-5}$. Как видно на рис. 2, b, сходимость наступает уже при $h = 1,29 \cdot 10^{-4}$. Аналогичная картина наблюдается и с повышением числа используемых PWP, которое в наших расчетах достигало 78.

Наконец, нами был рассмотрен случай воздействия на атом водорода импульсом длительностью 9 циклов [15]:

$$E(t) = f(t) E_0 \sin(\omega t) \quad (30)$$

с довольно распространенной формой огибающей $f(t)$:

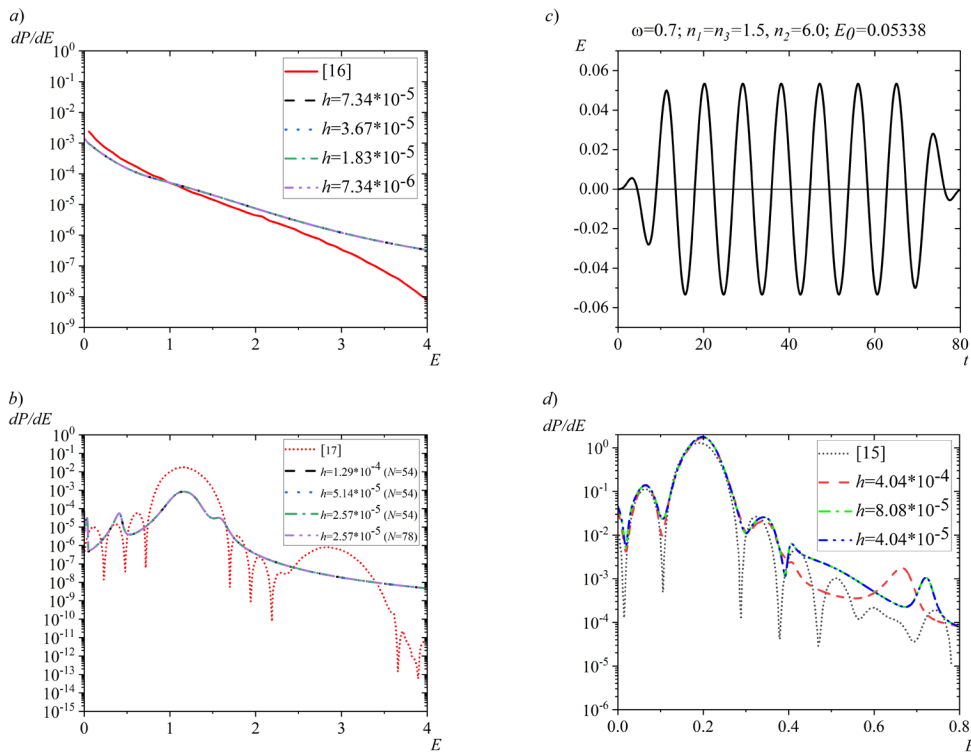


Рис. 2. Графическое представление результатов расчетов плотности вероятности ионизации (28) под действием импульсов XUV (29) (a, b) и (30) с огибающей (31) (d); данные получены с применением схемы Дормана – Принса в зависимости от шага по времени: a – для импульса длительностью 1 цикл ($T_f = 3,67$), b – 7 циклов ($T_f = 25,72$); c – форма импульса длительностью 9 циклов с соответствующими параметрами, d – полученная плотность вероятности для этого (c) импульса. Для сравнения приведены соответствующие результаты из работ [16] (a), [17] (b) и [15] (d)

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2\left(\frac{\pi t}{2n_1 T}\right), & 0 \leq t \leq n_1 T, \\ 1, & n_1 T \leq t \leq (n_1 + n_2) T, \\ \sin^2\left(\frac{\pi t}{2n_3 T}\right), & (n_1 + n_2) T \leq t \leq t_f, \end{cases} \quad (31)$$

где T – период одного цикла центральной частоты, $T = 2\pi/\omega$; n_1, n_2, n_3 – параметры формы, которые задают количество циклов, отвечающих фазам нарастания, плато и спада импульса, соответственно.

В итоге величина $t_f = (n_1 + n_2 + n_3)T$ определяет общую длительность импульса. Мы использовали характерные значения параметров [15]: $n_1 = n_3 = 1,5$; $n_2 = 6,0$. Амплитуда и частота импульса также взяты из работы [15]: $\omega = 0,7$; $E_0 = 0,05338$. Форма импульса представлена на рис. 2, c.

В данном случае мы также использовали 54 PWP (см. формулу (8)). Из результатов, полученных для вероятности ионизации (рис. 2, d), следует, что сходимость достигается при длине шага по времени $h = 8,08 \cdot 10^{-5}$; отметим, что эффект от дальнейшего уменьшения шага пренебрежимо мал.

Во всех случаях, рассмотренных в данном разделе, полученные нами результаты в целом согласуются с соответствующими результатами других авторов.

Анализ отличий от результатов литературных источников. Наблюдаемые явные различия требуют анализа их возможного происхождения. Начнем с того, что в рассчитанных нами ранее случаях ультракоротких импульсов длительностью в полцикла [13] было



достигнуто полное согласие с результатами работы [11]. Таким образом, естественно предположить, что расхождения, наблюдаемые при переходе к импульсам большей длительности (большее число циклов), объясняются потерей точности с соответствующим ростом числа шагов по времени. Чтобы исключить эту возможную причину, мы воспользовались схемой Дормана – Принса, обеспечивающей более высокую точность (на 6 – 8 порядков), чем метод Рунге – Кутты 4-го порядка (см. рис. 1); последний был использован нами в работе [13].

В качестве второй возможной причины можно указать неудачный выбор шага по времени. Таким образом, мы включили в расчеты исследование сходимости с уменьшением шага по времени, подобное проведенному в работе [13]. Напомним, что хорошее соответствие наших расчетов результатам статьи [10] для 4-циклового импульса, достигнутое при шаге 0,0001 а.е., нарушается по мере уменьшения шага. Заметим, что в наших расчетах (как в прежней работе [13], так и в этой работе) была достигнута сходимость по шагу. С другой стороны, мы не встречали подобного исследования в упомянутых выше работах.

Наконец, отдельного обсуждения заслуживает представление угловой части решения. Заметим, что при использовании сферических координат, для описания решения зачастую приходится использовать довольно большое (от 15 до 60) количество парциальных волн. Иными словами, угловая зависимость имеет вид полиномов, включающих функции $\sin\theta$ и $\cos\theta$ довольно высокой степени. В нашем представлении, как следует из выражений (24) и (25) для амплитуды ионизации, зависимость этой амплитуды от функций угла θ является дробно-рациональной, и ее не всегда удается аппроксимировать с помощью даже того количества полиномов Лежандра, которое характерно для расчетов, использующих сферические координаты. Таким образом, в общем случае невозможно провести сопоставление нашего метода со стандартными подходами.

Заключение

В проведенном исследовании наши усилия были направлены на расширение возможностей нашего PWP-метода [13], чтобы сделать эффективным его применение к случаю импульсов длительностью около 10 оптических циклов. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана – Принса 8-го порядка [14]. Разработанная численная схема протестирована на примере модельного импульса, допускающего точное решение в виде единственного PWP. Примечательно, что путем выбора значений параметров импульса можно получить решение, которое время от времени перестает быть нормируемым, что выходит за рамки стандартных граничных условий и тем самым может служить дополнительной проверкой эффективности работы численной схемы.

Мы также выполнили расчеты спектров фотоэлектронов для слабых полей, рассмотренных другими авторами. В частности, были получены результаты для импульсов длительностью в 1 [16], 7 [16, 17] и 9 [15] оптических циклов.

Несмотря на общее согласие наших расчетов с результатами работ [15 – 17], имеют место существенные различия. Например, спектр фотоионизации, рассчитанный другими авторами, демонстрирует осцилляции с ростом энергии электрона. В нашем случае спектр ограничивается несколькими максимумами, после чего наблюдается его монотонное убывание. Мы полагаем, что для такого отличия имеются две основные причины. Во-первых, в нашем PWP-подходе и в стандартных методах, использующих сферические координаты, описание угловой части решения радикально различаются. В PWP-амплитуде фигурируют дробно-рациональные выражения, содержащие функции $\sin\theta$ и $\cos\theta$, тогда как в стандартных методах применяется разложение амплитуды по полиномам Лежандра.

Таким образом, сопоставление этих двух подходов затруднено, например тем, что разложение PWP-амплитуды может потребовать неограниченного числа полиномов Лежандра. Кроме того, наши расчеты включают исследование сходимости результатов с существенным уменьшением шага по времени. К сожалению, подобное исследование отсутствует в работах [15 – 17], так что сопоставление методов на этом уровне пока невозможно.

В своих будущих работах мы планируем выполнить детальное (насколько это возможно) сопоставление методов, для чего рассмотрим различные аспекты реализации стандартных подходов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gassert H., Chuluunbaatar O., Waitz M., et al. Agreement of experiment and theory on the single ionization of helium by fast proton impact // *Physical Review Letters*. 2016. Vol. 116. No. 7. P. 073201.
2. Krausz F., Ivanov M. Attosecond physics // *Reviews of Modern Physics*. 2009. Vol. 81. No. 1. Pp. 163–234.
3. Hütten K., Mittermair M., Stock S. O., et al. Ultrafast quantum control of ionization dynamics in krypton // *Nature Communications*. 2018. Vol. 9. 19 February. P. 719.
4. Cui S., He P.-L., He F. Ionization of hydrogen atoms in attosecond pulse trains and strong infrared laser pulses // *Physical Review A*. 2016. Vol. 94. No. 5. P. 053401.
5. Fareed M. A., Strelkov V. V., Thiré N., Mondal S., Schmidt B. E., Légaré F., Ozaki T. High-order harmonic generation from the dressed autoionizing states // *Nature Communications*. 2017. Vol. 8. 17 July. P. 16061.
6. Keldysh L. V. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave // *Journal of Experimental and Theoretical Physics (USSR)*. 1965. Vol. 20. No. 5. Pp. 1307–1314.
7. Bunkin F. V., Fedorov M. V. Bremsstrahlung in a strong radiation field // *Journal of Experimental and Theoretical Physics (USSR)*. 1966. Vol. 22. No. 4. Pp. 844–847.
8. Jain M., Tzoar N. Compton scattering in the presence of coherent electromagnetic radiation // *Physical Review A*. 1978. Vol. 18. No. 2. Pp. 538–545.
9. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // *Advances in Computational Mathematics*. 1996. Vol. 6. No. 1. Pp. 207–226.
10. Grum-Grzhimailo A. N., Abeln B., Bartschat K., Weflen D., Urness T. Ionization of atomic hydrogen in strong infrared laser fields // *Physical Review A*. 2010. Vol. 81. No. 4. P. 043408.
11. McLachlan A. D. A variational solution of the time-dependent Schroedinger equation // *Molecular Physics*. 1964. Vol. 8. No. 1. Pp. 39–44.
12. Rowan K., Schatzki L., Zaklama T., Suzuki Y., Watanabe K., Varga K. Simulation of a hydrogen atom in a laser field using the time-dependent variational principle // *Physical Review E*. 2020. Vol. 101. No. 2. P. 023313.
13. Zaytsev A., Zaytseva D., Zaytsev S., Ancarani L. U., Popov Y., Kouzakov K. Parabolic wave packets for time propagation of atomic hydrogen in an electric field of short laser pulses // *The European Physical Journal Plus*. 2024. Vol. 139. No. 2. P. 199.
14. Хайпер Э., Нёрсерт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 512 с.
15. Bartschat K., Venzke J., Grum-Grzhimailo A. N. Pulse-shape effects in ionization of atomic hydrogen by short-pulse XUV intense laser radiation: A sensitivity study // *Physical Review A*. 2015. Vol. 91. No. 5. P. 053404.
16. Della Picca R., Fiol J., Fainstein P. D. Factorization of laser-pulse ionization probabilities in the multiphotonic regime // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2013. Vol. 46. No. 17. P. 175603.
17. Gersbacher R., Broad J. T. J-Matrix time propagation of atomic hydrogen in attosecond fields // *Scientific Reports*. 2022. Vol. 12. 01 July. P. 11155.
18. Palacios A., McCurdy C. W., Rescigno T. N. Extracting amplitudes for single and double ionization from a time-dependent wave packet // *Physical Review A*. 2007. Vol. 76. No. 4. P. 043420.
19. Мессиа А. Квантовая механика. Пер. с франц. В 2 тт. Т. 2. М.: Наука, 1979. 583 с.

REFERENCES

1. Gassert H., Chuluunbaatar O., Waitz M., et al., Agreement of experiment and theory on the single ionization of helium by fast proton impact, *Phys. Rev. Lett.* 116 (7) (2016) 073201.
2. Krausz F., Ivanov M., Attosecond physics, *Rev. Modern Phys.* 81 (1) (2009) 163–234.
3. Hütten K., Mittermair M., Stock S. O., et al., Ultrafast quantum control of ionization dynamics in krypton, *Nat. Commun.* 9 (19 Febr) (2018) 719.
4. Cui S., He P.-L., He F., Ionization of hydrogen atoms in attosecond pulse trains and strong infrared laser pulses, *Phys. Rev. A*. 94 (5) (2016) 053401.

5. Fareed M. A., Strelkov V. V., Thiré N., et al., High-order harmonic generation from the dressed autoionizing states, Nat. Commun. 8 (17 July) (2017) 16061.
6. Keldysh L. V., Ionization in the field of a strong electromagnetic wave, JETP. 20 (5) (1965) 1307–1314.
7. Bunkin F. V., Fedorov M. V., Bremsstrahlung in a strong radiation field, JETP. 22 (4) (1966) 844–847.
8. Jain M., Tzoar N., Compton scattering in the presence of coherent electromagnetic radiation, Phys. Rev. A. 18 (2) (1978) 538–545.
9. Crank J., Nicolson P., A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type, Adv. Comput. Math. 6 (1) (1996) 207–226.
10. Grum-Grzhimailo A. N., Abeln B., Bartschat K., et al., Ionization of atomic hydrogen in strong infrared laser fields, Phys. Rev. A. 81 (4) (2010) 043408.
11. McLachlan A. D., A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation, Mol. Phys. 8 (1) (1964) 39–44.
12. Rowan K., Schatzki L., Zaklama T., et al., Simulation of a hydrogen atom in a laser field using the time-dependent variational principle, Phys. Rev. E. 101 (2) (2020) 023313.
13. Zaytsev A., Zaytseva D., Zaytsev S., et al., Parabolic wave packets for time propagation of atomic hydrogen in an electric field of short laser pulses, Eur. Phys. J. Plus. 139 (2) (2024) 199.
14. Hairer E., Wanner G., Nørsett S. P., Solving ordinary differential equations: I. Nonstiff problems (Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 8). Springer Berlin, Heidelberg, 1993.
15. Bartschat K., Venzke J., Grum-Grzhimailo A. N., Pulse-shape effects in ionization of atomic hydrogen by short-pulse XUV intense laser radiation: A sensitivity study, Phys. Rev. A. 91 (5) (2015) 053404.
16. Della Picca R., Fiol J., Fainstein P. D., Factorization of laser-pulse ionization probabilities in the multiphotonic regime, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46 (17) (2013) 175603.
17. Gersbacher R., Broad J. T., J-Matrix time propagation of atomic hydrogen in attosecond fields, Sci. Rep. 12 (01 July) (2022) 11155.
18. Palacios A., McCurdy C. W., Rescigno T. N., Extracting amplitudes for single and double ionization from a time-dependent wave packet, Phys. Rev. A. 76 (4) (2007) 043420.
19. Messiah A., Quantum mechanics (Dover books on physics), Dover Publications, New York, USA, 2014. 1152 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАЙЦЕВ Александр Сергеевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул.,136.
alzaytsev@togudv.ru
ORCID: 0009-0004-6895-6436

ЗАЙЦЕВ Сергей Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы физико-математических наук Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул.,136.
zaytsevsa@togudv.ru
ORCID: 0000-0003-3771-3541

ЗАЙЦЕВА Дарья Сергеевна – младший научный сотрудник Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул.,136.
2012002939@togudv.ru
ORCID: 0009-0007-7192-9166

КРАМАРЬ Елена Ивановна – ассистент Высшей школы физико-математических наук
Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.

680035, Россия, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.

000286@togudv.ru

ORCID: 0009-0000-2294-7113

THE AUTHORS

ZAYTSEV Alexander S.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

alzaytsev@togudv.ru

ORCID: 0009-0004-6895-6436

ZAYTSEV Sergey A.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

zaytsevsa@togudv.ru

ORCID: 0000-0003-3771-3541

ZAYTSEVA Darya S.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

2012002939@togudv.ru

ORCID: 0009-0007-7192-9166

KRAMAR Elena I.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

000286@togudv.ru

ORCID: 0009-0000-2294-7113

*Статья поступила в редакцию 09.04.2025. Одобрена после рецензирования 27.05.2025.
Принята 27.05.2025.*

Received 09.04.2025. Approved after reviewing 27.05.2025. Accepted 27.05.2025.

Математическая физика

Научная статья

УДК 537.534.7, 543.51

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18406>

АНАЛИТИЧЕСКИЕ КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ РАДИОЧАСТОТНЫХ ИОННЫХ ВОРОНОК ОБЩЕГО ВИДА С ПРЯМОЙ ОСЬЮ

А. С. Бердников^{1□}, **Н. К. Краснова**², **С. В. Масюкевич**¹,
Е. П. Подольская¹, **К. В. Соловьев**^{2,1}

¹ Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

□ asberd@yandex.ru

Аннотация. В статье представлены аналитические формулы для потенциалов электрических полей, которые соответствуют радиочастотным воронкам с прямолинейным каналом транспортировки общего вида, в частности воронок с криволинейным профилем канала, с мультипольными диафрагмами, с неравномерно расположенными электродами. При определении электрических полей, за основу было взято распределение электрического потенциала на оси устройства. Полученные выражения целесообразно использовать для быстрого качественного моделирования радиочастотных устройств, предназначенных для изолирования, транспортировки и фокусировки ионов, а также при решении соответствующих задач математической физики.

Ключевые слова: аналитическое решение уравнения Лапласа, аналитическое электрическое поле, электронно-оптическая система

Финансирование: Исследование выполнено в рамках темы FFZM-2025-0006 Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00444-25-00 от 26.12.2024.

Для цитирования: Бердников А. С., Краснова Н. К., Масюкевич С. В., Подольская Е. П., Соловьев К. В. Аналитические квадратурные формулы для электрических полей радиочастотных ионных воронок общего вида с прямой осью // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 75–100. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18406>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18406>

ANALYTICAL QUADRATURE FORMULAE FOR ELECTRIC FIELDS OF THE RF STRAIGHT-AXIS ION FUNNELS OF A GENERAL TYPE

A. S. Berdnikov^{1□}, **N. K. Krasnova**², **S. V. Masyukevich**¹,
E. P. Podolskaya¹, **K. V. Solovyev**^{2,1}

¹ Institute for Analytical Instrumentation, RAS, St. Petersburg, Russia;

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

□ asberd@yandex.ru

Abstract. The article presents analytical quadrature expressions for electric field potentials that correspond to radio-frequency straight-axis ion funnels of a general type, specifically, the funnels with a curved channel profile, with multipole diaphragms, and with unequally spaced electrodes. When determining electric fields, the distribution of electric potential over the axis of the device was taken as a basis. The resulting formulae would be appropriate for use in quick, high-quality simulating of radio-frequency devices designed for isolation, conveying and focusing ions, as well as in solving some problems of mathematical physics.

Keywords: analytical solutions of the Laplace equation, analytical electric fields, electron-optical systems with periodic electrodes, ion guides, radio-frequency ion funnels

Funding: The reported study was carried out within the framework of the theme FFZM-2025-0006 of the State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 075-00444-235-00 dated 26.12.2024.

For citation: Berdnikov A. S., Krasnova N. K., Masyukevich S. V., Podolskaya E. P., Solovyev K. V., Analytical quadrature formulae for electric fields of the RF straight-axis ion funnels of a general type, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 75–100. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18406>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Настоящее исследование является прямым продолжением материалов статей [1 – 4], где рассматриваются аналитические выражения для потенциалов электрических полей в цилиндрических и конических радиочастотных транспортирующих каналах [5, 6]. Прототипом подобных устройств следует считать цилиндрические радиочастотные ловушки типа SRIG (Stacked Ring Ion Guides), впервые предложенные авторами публикаций [7, 8] и подробно исследованные в работах [5, 9 – 11, 12]. Конические радиочастотные воронки, которые относятся к следующему поколению устройств такого типа, рассмотрены и подробно изучены в работах [12 – 19]. Однако потенциальные возможности радиочастотных ионных воронок не исчерпываются этими простейшими случаями.

В данной работе получены и представлены аналитические формулы для электрических потенциалов; эти выражения удобно применять для быстрого качественного моделирования ионных воронок со сложной структурой. Действительно, при проектировании ионно-оптических устройств бывает целесообразно использовать радиочастотные фокусирующие воронки, профиль которых отличается от конического (см., например, статью [17]), а также квадрупольно- либо мультипольно-сегментированные электроды (см. работу [20]). Могут оказаться полезными и некруговые диафрагмы; в этом случае соответствующие электрические потенциалы являются аддитивной суперпозицией осесимметричных аналитических потенциалов и мультипольных поправок, представляющих собой аналитические решения для мультипольно-сегментированных электродов (результат разложения по азимутальному углу в сумму гармоник Фурье для коллокационных точек краевого условия одиночной диафрагмы требуемой формы). Дополнительно при оптимизации параметров радиочастотных ионных воронок сложной структуры может потребоваться неравномерное размещение диафрагм вдоль канала транспортировки и соответствующие аналитические решения.

Применение точных или приближенных аналитических моделей позволяет облегчить исследование свойств ионно-оптических устройств, а также ставить и решать обратные задачи синтеза ионно-оптических систем. В последнем случае по заданному поведению заряженных частиц восстанавливают электрическое поле, обеспечивающее указанные функциональные характеристики, а потом (в соответствии с этим электрическим полем) определяют конфигурацию электродов, реализующих требуемое устройство. Работы Ю. К. Голикова (см., например, книги [21 – 23]) наглядно демонстрируют преимущества такого подхода.



Для конструирования электрических потенциалов высокочастотных электрических полей используется принцип квазистатичности. Квазистатическая модель электрического поля, меняющегося во времени, подразумевает, что можно выразить высокочастотный потенциал этого поля в виде функции времени, задающей закон изменения напряжений на электродах, умноженной на потенциал электростатического поля, соответствующий постоянным напряжениям на электродах.

Предположение о квазистатичности высокочастотного электрического поля справедливо, когда время характерного изменения электрических напряжений на электродах существенно превышает время распространения электромагнитного возмущения в пределах устройства. Зависящий от времени множитель описывает временное изменение электрических напряжений, а зависящий от координат потенциал соответствует постоянным напряжениям на электродах, которые изменяются во времени синхронно и пропорционально друг другу. Хотя такой шаг есть, по сути, пренебрежение электродинамическими эффектами максвелловских уравнений, он все же допустим, если частота напряжений, прикладываемых к электродам, не слишком велика (в указанном выше смысле).

Далее рассматриваются аналитические выражения для электростатических потенциалов, которые соответствуют конфигурациям электродов, типичным для радиочастотных ионных воронок. Подразумевается, что при моделировании радиочастотных ионных воронок с прямой осью и соответствующим профилем транспортирующего канала эти электростатические потенциалы необходимо будет умножать на быстро осциллирующие функции времени, задающие закон (в большинстве случаев синусоидальный) для изменения высокочастотных напряжений на электродах. В рамках квазистатической модели электрического поля, вместо синусоидальных радиочастотных напряжений могут использоваться радиочастотные напряжения со сложным спектром и, в частности, импульсные напряжения с произвольной формой импульсов [24]. Кроме того, в зависимости от режима функционирования воронки, к электродам могут прикладываться двух- и четырехфазные радиочастотные напряжения [12], а также амплитудно-, частотно- и фазомодулированные радиочастотные напряжения [12], обеспечивающие режим А-волны при транспортировке ионов [25 – 37].

Целью данной работы является вывод аналитических квадратурных формул, которые позволяют быстро восстанавливать структуру электрического поля во всем требуемом пространстве по заданному распределению электрического потенциала на оси устройства.

Имея восстановленную структуру электрического поля, мы тем самым можем восстановить и структуру электродов, ответственных за создание соответствующего электрического поля.

Полученные аналитические решения трехмерного уравнения Лапласа представляют не только практический, но и самостоятельный научный интерес, так как их можно применять для решения задач математической физики, не имеющих прямого отношения к вопросам оптики заряженных частиц.

Теоретические предпосылки

В этом разделе приводится краткая справка о математическом аппарате, который будет использоваться при последующих математических выкладках. Мы сочли уместным включить краткое изложение этих методов во введении к данной статье, поскольку, как правило, данный материал не слишком широко известен специалистам по оптике заряженных частиц, а первоисточники, на которые можно сослаться, труднодоступны в силу раритетного происхождения и/или небольшого тиража соответствующих изданий [21 – 23].

Планарные поля. Планарные (двумерные) электростатические поля характеризуются электрическим потенциалом $U(x, y)$, который зависит лишь от двух декартовых координат и удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 U(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U(x, y)}{\partial y^2} = 0. \quad (1)$$

Хорошо известно, что вещественная и мнимая части любой аналитической функции комплексной переменной, например, имеющей вид

$$f(z) = f(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y), \quad (2)$$

удовлетворяют двумерному уравнению Лапласа в силу того, что для этих функций выполняются условия Коши – Римана [38]:

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial v(x, y)}{\partial y}, \quad \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = -\frac{\partial v(x, y)}{\partial x}. \quad (3)$$

Если же для вещественной и мнимой частей комплекснозначной функции двух вещественных переменных существуют частные производные первого порядка и выполнены условия Коши – Римана (3), то такая функция есть аналитическая функция комплексной переменной. Это означает, что в окрестности любой точки, в которой выполняются условия (3), она разлагается в сходящийся степенной ряд и в силу этого дифференцируема сколько угодно раз.

Менее известно, что обратное утверждение тоже справедливо.

Утверждение 1. Любую вещественную функцию двух переменных, которая удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа, можно рассматривать как вещественную (мнимую) часть некоторой аналитической функции комплексной переменной.

Доказательство. Пусть имеется функция $u(x, y)$, которая удовлетворяет уравнению (1). Соотношения (3) можно рассматривать как систему дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных [38], заданную для неизвестной функции $v(x, y)$ при известной функции $u(x, y)$. Система уравнений разрешима, решение существует, и оно единственное с точностью до аддитивной постоянной, если для неизвестной функции $v(x, y)$ справедливо условие равенства смешанных производных:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v(x, y)}{\partial x} \right) \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v(x, y)}{\partial y} \right). \quad (4)$$

В силу гармоничности функции $u(x, y)$, для рассматриваемой системы уравнений (3) данное условие выполнено.

Решением системы уравнений (3) является следующая функция:

$$\begin{aligned} v(x, y) &= -\int_{x_0}^x dt \left(\int_{y_0}^y \frac{\partial^2 u(t, s)}{\partial y^2} ds \right) - \int_{x_0}^x \frac{\partial u(t, y_0)}{\partial y} dt + \int_{y_0}^y \frac{\partial u(x_0, s)}{\partial x} ds + C = \\ &= + \int_{y_0}^y ds \left(\int_{x_0}^x \frac{\partial^2 u(t, s)}{\partial x^2} dt \right) + \int_{y_0}^y \frac{\partial u(x_0, s)}{\partial x} ds - \int_{x_0}^x \frac{\partial u(t, y_0)}{\partial y} dt + C, \end{aligned} \quad (5a)$$

которую также можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} v(x, y) &= -\int_{x_0}^x \frac{\partial u(t, y)}{\partial y} dt + \int_{y_0}^y \frac{\partial u(x_0, s)}{\partial x} ds + C = \\ &= + \int_{y_0}^y \frac{\partial u(x, s)}{\partial x} ds - \int_{x_0}^x \frac{\partial u(t, y_0)}{\partial y} dt + C. \end{aligned} \quad (5b)$$

Функция видов (5a) и (5b) определена однозначным образом, с точностью до вещественной аддитивной константы C , задающей значение функции $v(x_0, y_0)$. Поэтому для любой функции $u(x, y)$, которая удовлетворяет уравнению (1), можно восстановить недостающую мнимую часть $v(x, y)$, которая бы обеспечивала выполнение условий Коши – Римана (3). Тем самым будет определена аналитическая функция комплексной переменной (2) – единственная, с точностью до аддитивной мнимой константы.

Имеющуюся функцию $v(x, y)$, которая удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа, всегда можно аналогичным образом дополнить недостающей вещественной частью $u(x, y)$ и получить на выходе требуемую аналитическую функцию комплексной переменной.

Утверждение 1 доказано.



Следствие утверждения 1. Если в процессе синтеза двумерных электронно- и ионно-оптических систем исследуются только те гармонические функции двух переменных, которые получены из аналитических функций комплексной переменной, то ни одно решение не будет пропущено.

Пусть имеется произвольная аналитическая функция комплексной переменной. Ее можно симметризовать, обеспечив по второму аргументу четность вещественной части и нечетность части мнимой.

Утверждение 2. Любой аналитической функции комплексной переменной $f(z) = f(x+iy)$ можно сопоставить симметризованную (по переменной y) аналитическую функцию комплексной переменной (причем единственным образом), у которой вещественная часть четная по переменной y , мнимая – нечетная по той же переменной, а значения вещественной части на оси $y = 0$ совпадают со значениями вещественной части исходной функции.

Доказательство. Возьмем произвольную аналитическую функцию комплексной переменной $f(z)$, заданную формулой (2), у которой вещественная и мнимая части удовлетворяют соотношениям Коши – Римана (3). Тогда у комплекснозначной функции (которая, вообще говоря, не обязательно должна быть аналитической функцией) вида

$$\bar{f}(\bar{z}) = u(x, -y) - iv(x, -y)$$

вещественная и мнимая части удовлетворяют соотношениям Коши – Римана (3). Следовательно, эта функция также является аналитической функцией комплексной переменной. Поэтому аналитической функцией комплексной переменной будет функция

$$h(z) = \frac{1}{2}[f(z) + \bar{f}(\bar{z})] = \frac{1}{2}[u(x, y) + u(x, -y)] + \frac{i}{2}[v(x, y) - v(x, -y)], \quad (6)$$

у которой вещественная и мнимая части обладают требуемой четностью по y .

Точно так же, аналитической функцией комплексной переменной будет антисимметричная функция вида

$$g(z) = \frac{1}{2}[f(z) - \bar{f}(\bar{z})] = \frac{1}{2}[u(x, y) - u(x, -y)] + \frac{i}{2}[v(x, y) + v(x, -y)], \quad (7)$$

у которой вещественная часть нечетная по переменной y и тождественно равна нулю при $y = 0$, а мнимая часть четная по переменной y и на оси $y = 0$ совпадает с мнимой частью функции $f(z)$.

Значение на оси симметрии $y = 0$ для вещественной части функции $f(z)$ и для вещественной части функции $h(z)$, которая задается формулой (6), будет одним и тем же. Точно так же, на оси симметрии $y = 0$ нормальные производные (производные по переменной y) у мнимых частей функций $f(z)$ и $h(z)$ будут совпадать.

Единственность симметризованной функции комплексной переменной следует из единственности решения задачи Коши (8) для двумерной гармонической функции, которая рассматривается далее, а также из единственности мнимой части аналитической функции комплексной переменной (с точностью до аддитивной константы, см. Утверждение 1) при заданной вещественной части.

Утверждение 2 доказано.

Процесс симметризации (6), примененный к уже симметризованной функции, эту функцию не изменяет. Частная производная симметризованной аналитической функции комплексной переменной, взятая по переменной x , будет тоже симметризованной функцией комплексной переменной. Частная производная симметризованной функции комплексной переменной, взятая по переменной y , будет функцией комплексной переменной, обладающей, аналогично функции (7), нечетностью вещественной и четностью мнимой части по второму аргументу. Такими же свойствами четности обладают компоненты симметризованной (согласно выражению (6)) аналитической функции комплексной переменной, умноженной на мнимую единицу. Аналогичные утверждения справедливы для функций комплексной переменной, полученных преобразованием (7). Последовательное использование преобразований (6) и (7) дает тождественный нуль.

Для гармонической функции $U(x, y)$, четной по переменной y и удовлетворяющей условию $U(x, -y) = U(x, y)$, можно поставить задачу Коши, а именно – определить значение функции на всей плоскости по ее поведению на оси симметрии:

$$U(x, y)|_{y=0} = G(x). \quad (8)$$

Утверждение 3. *Решение задачи Коши (8) для планарной гармонической функции, четной по переменной y , существует и оно единственное, по крайней мере, в окрестности оси симметрии $y = 0$, если функция $G(x)$ дифференцируема бесконечное число раз и разлагается в сходящийся степенной ряд в каждой точке.*

Доказательство. Если учитывать требования четности по y , то двумерную гармоническую функцию $U(x, y)$ в окрестности оси симметрии $y = 0$ можно разложить в ряд по четным степеням переменной y :

$$U(x, y) = U_0(x) - \frac{1}{2}y^2U_2(x) + \dots + (-1)^k \frac{y^{2k}}{(2k)!}U_{2k}(x) + \dots \quad (9)$$

Возможность разложения в степенной ряд следует из аналитичности двумерных гармонических функций (см. теорему Бернштейна об аналитичности решений двумерных эллиптических уравнений [39, 40]). После подстановки выражения (9) в уравнение (1) и комбинирования множителей при одинаковых степенях переменной y получаем значения всех коэффициентов ряда (9) с помощью следующих рекуррентных соотношений:

$$U_0(x) = G(x), U_{2k+2}(x) = \frac{d^2U_{2k}(x)}{dx^2}. \quad (10)$$

Ряд (9) для функции $U(x, y)$ сходится, причем абсолютно, так как сходится степенной ряд для функции $G(x)$, который можно использовать как мажоранту для ряда (9).

Утверждение 3 доказано.

Ряды вида (9), функциональные по одной переменной и степенные по другой, получили название рядов Шерцера¹. Они используются в ионной оптике для описания симметричных электрических и магнитных полей при анализе параксиальных траекторий в окрестности плоскости симметрии или оси симметрии.

Аналогичным образом формулируется и исследуется задача Коши о восстановлении гармонической функции, нечетной по переменной y , по ее нормальной производной на оси симметрии:

$$\left. \frac{\partial U(x, y)}{\partial y} \right|_{y=0} = H(x). \quad (11)$$

Поиск решения в виде антисимметричного ряда

$$U(x, y) = yU_1(x) - \frac{1}{6}y^3U_3(x) + \dots + (-1)^k \frac{y^{2k+1}}{(2k+1)!}U_{2k+1}(x) + \dots \quad (12)$$

позволяет выразить с помощью рекуррентных соотношений вида

$$U_1(x) = H(x), U_{2k+1}(x) = \frac{d^2U_{2k-1}(x)}{dx^2} \quad (13)$$

все члены ряда через производные функции $H(x)$. Тем самым можно найти единственно возможное решение, справедливое, по крайней мере, в некоторой окрестности оси симметрии $y = 0$, в которой этот ряд сходится.

Ряд Шерцера (9) с коэффициентами (10) не содержит информации о поведении функции $U(x, y)$, которая будет решением задачи Коши (8), вдали от оси симметрии. Интегральная формула, использующая функцию Грина для задачи Дирихле двумерного уравнения Лапласа на верхней полуплоскости [42], свободна от этого недостатка и имеет следующий вид:

¹ По всей видимости, этот термин введен в обращение в монографии [41].

$$U(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(t)}{(x-t)^2 + y^2} dt. \quad (14)$$

С помощью непосредственной проверки можно убедиться, что если интеграл в формуле (14) сходится, то функция $U(x, y)$ при $y > 0$ удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа, а при $y \rightarrow 0$ удовлетворяет условию (8). Если функция (14) будет должна подчиняться указанному уравнению Лапласа, в том числе и на границе $y = 0$, то потребуются дифференцируемость (аналитичность) функции $G(t)$.

Формулу (14) следует использовать для непосредственных вычислений лишь при $y > 0$. Однако функция (14) удовлетворяет условию $\partial U(x, y)/\partial y = 0$ при $y = 0+$ и поэтому может быть гладко продолжена на полуплоскость $y < 0$ симметричным образом, порождая тем самым четную функцию по переменной y .

Аналогичным образом функция Грина для задачи Неймана (11), которая рассматривается на верхней полуплоскости $y > 0$ для нечетной по y гармонической функции $U(x, y)$ (см. книгу [42]), приводит к следующей формуле:

$$U(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} H(t) \ln[(x-t)^2 + y^2] dt. \quad (15)$$

Эта формула обеспечивает единственно возможное решение для антисимметричной задачи Коши (11), если функция $H(t)$ достаточно быстро стремится к нулю на бесконечности.

К сожалению, формула (14) для симметричной задачи Коши (8) применима на деле только тогда, когда модуль функции $G(t)$ растет на бесконечности медленнее линейной функции. Еще более жесткое условие для стремления к нулю на бесконечности налагается на функцию $H(t)$, которая используется в интеграле (15). Кроме того, для вычисления интегралов в выражениях (14) и (15) необходимо либо иметь высокий уровень мастерства и навыков в аналитическом вычислении интегралов, либо иметь в распоряжении надежные математические справочники (довольно большого объема), посвященные интегрированию функций.

Однако, как правило, функция $G(t)$ представляет собой суперпозицию хорошо известных элементарных функций, и тогда задача решается проще. Действительно, для любой элементарной функции вещественной переменной известен ее аналог на комплексной плоскости (результат аналитического продолжения с вещественной оси на всю комплексную плоскость). Все, что требуется в этом случае, – это составить аналогичную суперпозицию, включающую известные аналитические функции комплексной переменной, и отделить от полученного результата его вещественную либо мнимую часть. При необходимости может потребоваться выполнение симметризации либо антисимметризации полученного решения, в соответствии с формулами (6) или (7).

Осесимметричные поля. Электрический потенциал осесимметричных электростатических полей имеет вид

$$U(x, y, z) = V(z, \sqrt{x^2 + y^2}),$$

где функция $V(z, r)$ удовлетворяет осесимметричному уравнению Лапласа вида

$$\frac{\partial^2 V(z, r)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 V(z, r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V(z, r)}{\partial r} = 0. \quad (16)$$

Как и в случае планарных полей, для осесимметричного потенциала можно поставить задачу Коши о восстановлении функции $V(z, r)$ по ее значению на оси симметрии:

$$V(z, r)|_{r=0} = F(z). \quad (17)$$

Утверждение 4. *Решение задачи Коши (17) для осесимметричной гармонической функции в окрестности оси симметрии существует и является единственным, если функция $F(z)$ дифференцируема бесконечное число раз и разлагается в сходящийся степенной ряд в каждой точке.*

Доказательство. Поиск решения в виде ряда Шерцера

$$V(z, r) = V_0(z) - \frac{1}{2}r^2V_2(z) + \dots + (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!}V_{2k}(z) + \dots \quad (18)$$

позволяет после подстановки этого ряда в уравнение (16) и учета начального значения (17) получить следующие рекуррентные соотношения:

$$V_0(z) = F(z), V_{2k+2}(z) = \frac{2k+1}{2(k+1)}V_{2k}''(z). \quad (19)$$

Если использовать рекуррентные соотношения (19), то можно однозначным образом восстановить неизвестные коэффициенты ряда (18). Абсолютная сходимость ряда (18) с этими коэффициентами следует из сходимости степенного ряда для функции $F(z)$, который может служить в качестве мажоранты.

Утверждение 4 доказано.

Как и в планарном случае, осесимметричный ряд Шерцера (18) позволяет изучить поведение осесимметричного электрического потенциала лишь в некоторой окрестности оси симметрии $r \approx 0$. Для восстановления осесимметричного электрического потенциала на всей плоскости (z, r) можно воспользоваться следующим эффективным методом. С помощью рассмотренных выше инструментов надо аналитически продолжить вещественную функцию $F(x)$ на комплексную плоскость; это позволяет найти двумерную гармоническую функцию $u(x, y)$ с требуемым поведением на оси $y = 0$:

$$F(x) \rightarrow f(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y), u(x, 0) = F(x).$$

Затем можно применить формулу Уиттекера – Ватсона² вида

$$V(z, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi u(z, r \cos \varphi) d\varphi, \quad (20)$$

которая позволяет вычислить осесимметричный потенциал $V(z, r)$, когда под знаком интеграла находится двумерная гармоническая функция $u(x, y)$.

В случае, когда функция $u(x, y)$ будет четной по y , т. е. удовлетворяет условию $u(x, -y) = u(x, y)$, формула (20) приводится к виду

$$V(z, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} u(z, r \cos \varphi) d\varphi. \quad (21)$$

Утверждение 5. Формула (20) обеспечивает взаимно-однозначную связь между решениями $V(z, r)$ задачи Коши (17) для осесимметричных гармонических функций и решениями $u(x, y)$ задачи Коши (8) для планарных гармонических функций, четных по второму аргументу, которые характеризуются одинаковым поведением на оси симметрии.

Доказательство. Функция $V(z, r)$, заданная с помощью формулы (20), удовлетворяет осесимметричному уравнению (16), когда функция $u(x, y)$ удовлетворяет планарному уравнению Лапласа (1). Это можно проверить прямой подстановкой после замены переменной интегрирования φ на переменную y , в соответствии с формулами

$$y = r \cos \varphi, dy = -\sqrt{r^2 - y^2} d\varphi, x = z.$$

² Эта формула приводится в монографии [43]. Автор формулы нам неизвестен, но предположительно, формула получена одним из авторов монографии как частный случай общей формулы для трехмерной гармонической функции, которая выводится и исследуется авторами монографии в главе 18. Название «формула Уиттекера», введенное в оборот Ю. К. Голиковым, постепенно становится общепотребительным.

Получим следующее равенство:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V(z,r)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 V(z,r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V(z,r)}{\partial r} &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \cos^2 \varphi + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial u}{\partial y} \right) d\varphi = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-r}^r \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \frac{y^2}{r^2} + \frac{y}{r^2} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{dy}{\sqrt{r^2 - y^2}} = \frac{1}{\pi r^2} \int_{-r}^r \left(-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} (r^2 - y^2) + y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{dy}{\sqrt{r^2 - y^2}} = \\ &= \frac{1}{\pi r^2} \left(-\frac{\partial u}{\partial y} \sqrt{r^2 - y^2} \right) \Big|_{y=-r}^{y=+r} = 0. \end{aligned}$$

При $r = 0$ выполняется условие

$$V(z,0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi u(z,0) d\varphi = u(z,0) = F(z),$$

поэтому поведение функций $V(z, r)$ и $u(z, r)$ обязано совпадать на оси симметрии $r = 0$.

Как было показано в Утверждении 3, задача Коши (8) о восстановлении планарной гармонической функции $u(z, r)$, которая будет четной по переменной r , по ее значению $u(z, 0)$ на оси симметрии $r = 0$, всегда разрешима; причем это решение не только существует, но и единственное, по крайней мере, в некоторой окрестности оси симметрии $r = 0$. Подставив в формулу (20) полученное решение $u(z, r)$, получим на выходе осесимметричную гармоническую функцию $V(z, r)$ с требуемым поведением на оси симметрии (вообще говоря, одну из многих). Однако из анализа ряда Шерцера (18) следует, что такая осесимметричная гармоническая функция – единственная и, следовательно, других решений поставленной задачи, кроме выраженного формулой (20), не существует.

Утверждение 5 доказано.

Если представить функцию $u(z, r)$ как сумму четной по r планарной гармонической функции

$$u_+(z, r) = [u(z, r) + u(z, -r)]/2$$

и нечетной по r планарной гармонической функции

$$u_-(z, r) = [u(z, r) - u(z, -r)]/2,$$

то легко заметить, что для нечетной функции интеграл (20) обращается в нуль, а замена гармонической функции $u(z, r)$ симметризованной гармонической функцией $u_+(z, r)$ оставляет значение этого интеграла без изменения. Поэтому для практического применения формулы (20) важны только планарные гармонические функции, четные по r . Отметим, что хотя планарных гармонических прототипов $u(z, r)$ для формулы (20) у имеющейся функции $V(z, r)$ может быть много, но симметризованный планарный гармонический прототип является единственным.

В заключение подраздела, посвященного осесимметричным полям, важно сделать вывод, что при анализе и синтезе систем оптики заряженных частиц интегральная формула (20) позволяет перебирать без пропусков все возможные осесимметричные потенциалы, не имеющие особенностей на оси симметрии.

Мультипольные поля. В общем случае потенциалы мультипольных электростатических полей имеют вид

$$U(x, y, z) = \left(\sqrt{x^2 + y^2} \right)^m \cos(m \arg(x + iy) + \gamma) W\left(z, \sqrt{x^2 + y^2}\right), \quad (22)$$

где m – положительное целое число, определяющее порядок мультипольности³; $\arg(x, y)$ – (здесь и далее) функция, возвращающая аргумент комплексного числа $x + iy$, лежащий в диапазоне от $-\pi$ до $+\pi$.

³ Строго говоря, для последующих математических выкладок необязательно, чтобы индекс m был положительным либо целым числом.

Когда функция $U(x, y, z)$ удовлетворяет трехмерному уравнению Лапласа, функция $W(z, r)$ удовлетворяет мультипольному уравнению Лапласа:

$$\frac{\partial^2 W(z, r)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 W(z, r)}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial W(z, r)}{\partial r} = 0. \quad (23)$$

Мультипольную симметрию задают мультипольные множители

$$\begin{aligned} R_m(x, y) &= \left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^m \cos[m \arg(x + iy) + \gamma] = \\ &= c_p P_m(x, y) + c_q Q_m(x, y), \\ P_m(x, y) &= \left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^m \cos[m \arg(x + iy)], \\ Q_m(x, y) &= \left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)^m \sin[m \arg(x + iy)], \end{aligned} \quad (24)$$

для которых выполняется планарное уравнение Лапласа (1).

При положительных целочисленных значениях индекса m множители (24) являются однородными гармоническими полиномами степени m , как это следует из рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned} P_0(x, y) &= 1, \quad Q_0(x, y) = 0, \\ P_{m+1}(x, y) &= xP_m(x, y) - yQ_m(x, y), \\ Q_{m+1}(x, y) &= yP_m(x, y) + xQ_m(x, y). \end{aligned}$$

Рассмотрим задачу Коши о восстановлении функции $W(z, r)$ по ее значению на оси симметрии:

$$W(z, r)|_{r=0} = F(z). \quad (25)$$

Утверждение 6. *Решение задачи Коши (25) для множителя мультипольной гармонической функции (22) в окрестности оси симметрии существует и является единственным, если функция $F(z)$ дифференцируема бесконечное число раз и разлагается в сходящийся степенной ряд в каждой точке.*

Доказательство. Поиск решения в виде ряда Шерцера

$$W(z, r) = W_0(z) - \frac{1}{2}r^2W_2(z) + \dots + (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!}W_{2k}(z) + \dots \quad (26)$$

позволяет после подстановки ряда (26) в уравнение (23), с учетом начального значения (25), получить следующие рекуррентные соотношения:

$$W_0(z) = F(z), \quad W_{2k+2}(z) = \frac{2k+1}{2(k+m+1)}W_{2k}''(z), \dots \quad (27)$$

Из рекуррентных соотношений (27) можно однозначным образом восстановить неизвестные коэффициенты ряда (26). Его абсолютная сходимость с коэффициентами (27) следует из сходимости степенного ряда для $F(z)$, если этот ряд использовать в качестве мажоранты для ряда (26).

Утверждение 6 доказано.

Ряд Шерцера (26) не позволяет исследовать поведение мультипольного электрического потенциала (22) вдали от оси симметрии $r = 0$. Как и в случае осесимметричного электрического потенциала, для определения значений множителя $W(z, r)$ вдали от оси симметрии вещественная функция $F(x)$ аналитически продолжается на комплексную плоскость. Это позволяет определить двумерную гармоническую функцию $u(x, y)$ с заданным поведением на оси симметрии:

$$F(x) \rightarrow f(x + iy) = u(x, y) + iv(x, y), \quad u(x, 0) = F(x),$$

после чего становится возможным применение формулы Дугалла (28).

Формула Дугалла⁴, частным случаем которой при $m = 0$ является формула Уиттекера – Ватсона (20), позволяет конструировать мультипольные потенциалы, используя произвольные двумерные гармонические функции $u(x, y)$ в качестве исходного материала:

$$W(z, r) = \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^\pi u(z, r \cos \varphi) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi. \quad (28)$$

В случае, когда гармоническая функция $u(x, y)$ является четной по переменной y и удовлетворяет условию $u(x, -y) = u(x, y)$, формула (28) приводится к виду

$$W(z, r) = \frac{2m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^{\pi/2} u(z, r \cos \varphi) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi. \quad (29)$$

Нормирующий множитель перед знаком интеграла в формулах (28) или (29) не является необходимым и не влияет на форму искомого мультипольного потенциала, однако он нужен для нормировки значения функции вдоль оси мультипольной симметрии $r = 0$, чтобы обеспечивать его совпадение с функцией $u(z, 0)$.

Утверждение 7. Формула (28) обеспечивает взаимно-однозначную связь между решениями задачи Коши (25) для множителей мультипольных гармонических функций (22) и решениями задачи Коши (8) для планарных четных по второму аргументу гармонических функций с одинаковым поведением на оси симметрии.

Доказательство. Функция $W(z, r)$, заданная с помощью формулы (28), удовлетворяет мультипольному уравнению (23), когда функция $u(x, y)$ удовлетворяет планарному уравнению Лапласа (1). Это проверяется прямой подстановкой после замены переменной интегрирования φ на переменную y , в соответствии с формулами

$$\begin{aligned} y &= r \cos \varphi, \quad dy = -\sqrt{r^2 - y^2} d\varphi, \quad x = z: \\ \frac{\partial^2 W(z, r)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 W(z, r)}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial W(z, r)}{\partial r} &= \\ &= \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^\pi \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \cos^2 \varphi + \frac{(2m+1) \cos \varphi}{r} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi = \\ &= \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_{-r}^r \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \frac{y^2}{r^2} + \frac{(2m+1)y}{r^2} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \left(\frac{r^2 - y^2}{r^2} \right)^m \frac{dy}{\sqrt{r^2 - y^2}} = \\ &= \frac{1}{r^{2m+2}} \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_{-r}^r \left(-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} (r^2 - y^2) + (2m+1)y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \left(\sqrt{r^2 - y^2} \right)^{2m-1} dy = \\ &= \frac{1}{r^{2m+2}} \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \left(-\frac{\partial u}{\partial y} \left(\sqrt{r^2 - y^2} \right)^{2m+1} \right) \Bigg|_{y=-r}^{y=r} = 0. \end{aligned}$$

При $r = 0$ выполняется условие

$$W(z, 0) = \frac{m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^\pi u(z, 0) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi = u(z, 0) = F(z),$$

поэтому поведение функций $W(z, r)$ и $u(z, r)$ обязано совпадать на оси симметрии $r = 0$.

Как было показано в Утверждении 3, задача Коши (8) о восстановлении четной по r планарной гармонической функции $u(z, r)$ по ее значению на оси симметрии всегда разрешима, причем ее решение не только существует, но и является единственным. Подставив в формулу (28) этот прототип $u(z, r)$ с заданным поведением на оси симметрии,

⁴ Формула приводится в монографии [43] (см. гл. 18, пример 2 в конце главы) со ссылкой на шотландского математика Джона Дугалла (John Dougall) в качестве автора этого результата. Дж. Дугалл (1867 – 1960) – выдающийся шотландский математик, член Эдинбургского математического общества и Королевского общества Эдинбурга. Оригинальная публикация, в которой содержится вывод этой формулы, нам неизвестна.

получим на выходе искомым множитель $W(z, r)$ мультипольной гармонической функции (22) с требуемым поведением на оси симметрии (вообще говоря, этот множитель – один из многих возможных). Из анализа ряда Шерцера (26), проведенного ранее для решений уравнения (23), следует, что такой множитель единственный и, следовательно, других решений для задачи Коши (25) не существует, за исключением функции, заданной формулой (28).

Утверждение 7 доказано.

При представлении функции $u(z, r)$ в виде суммы, состоящей из четной по r планарной гармонической функции

$$u_+(z, r) = [u(z, r) + u(z, -r)]/2$$

и нечетной по r планарной гармонической функции

$$u_-(z, r) = [u(z, r) - u(z, -r)]/2,$$

легко заметить, что интеграл (28) для нечетной функции обращается в нуль, а замена гармонической функции $u(z, r)$ на симметризованную гармоническую функцию $u_+(z, r)$ оставляет без изменения значение этого интеграла. Другими словами, для использования формулы (28) имеют значение только четные планарные гармонические функции, причем при наличии множества подходящих планарных гармонических прототипов $u(z, r)$, для любой заданной функции $W(z, r)$ существует единственный симметризованный планарный гармонический прототип.

Таким образом, при анализе и синтезе систем оптики заряженных частиц интегральная формула (28) позволяет перебирать все возможные мультипольные потенциалы, не имеющие особенностей на оси симметрии, не пропустив ни одного.

Радиочастотные воронки общего вида с равномерно расположенными электродами

В данном разделе рассматриваются аналитические формулы для планарных, осесимметричных и мультипольных электростатических полей, которые обеспечивают на оси устройства OZ потенциалы вида

$$U_c(x, y, z) \Big|_{x=0, y=0} = U_c^0(z) = f(z) \cos(\lambda z), \quad (30)$$

$$U_s(x, y, z) \Big|_{x=0, y=0} = U_s^0(z) = f(z) \sin(\lambda z). \quad (31)$$

где λ – параметр, определяющий геометрический масштаб транспортирующего устройства.

При этом функция $f(z)$ медленно изменяется вдоль оси устройства, по сравнению с быстро осциллирующими функциями $\cos(\lambda z)$ и $\sin(\lambda z)$.

Исследование планарных, осесимметричных или мультипольных рядов Шерцера применительно к условиям Коши (30), (31) подсказывает, что решение (которое существует и является единственным, по крайней мере, в окрестности оси $r = 0$) следует искать в виде

$$\begin{aligned} U_c(z, r) &= F(z, r) \cos(\lambda z) + G(z, r) \sin(\lambda z), \\ U_s(z, r) &= F(z, r) \sin(\lambda z) - G(z, r) \cos(\lambda z), \end{aligned} \quad (32)$$

$$F(z, 0) = f(z), \quad G(z, 0) = 0.$$

Важно отметить, что с целью унификации обозначений для планарного уравнения Лапласа (1) здесь сделана замена переменных $x \rightarrow z, y \rightarrow r$.

Решение вида (32) позволяет, в частности, рассматривать для функций $U_c(z, r)$ и $U_s(z, r)$ модифицированные ряды Шерцера:

$$\begin{aligned} U_c(z, r) &= [\cos(\lambda z) F_0(z) + \sin(\lambda z) G_0(z)] - \\ &- \frac{1}{2} r^2 [\cos(\lambda z) F_2(z) + \sin(\lambda z) G_2(z)] + \dots + \\ &+ (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!} [\cos(\lambda z) F_k(z) + \sin(\lambda z) G_k(z)] + \dots; \end{aligned} \quad (33)$$

$$\begin{aligned}
 U_s(z, r) = & \left[\sin(\lambda z) F_0(z) - \cos(\lambda z) G_0(z) \right] - \\
 & - \frac{1}{2} r^2 \left[\sin(\lambda z) F_2(z) - \cos(\lambda z) G_2(z) \right] + \dots + \\
 & + (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!} \left[\sin(\lambda z) F_k(z) - \cos(\lambda z) G_k(z) \right] + \dots
 \end{aligned} \tag{34}$$

Подстановка выражений (33) и (34) в соответствующие уравнения Лапласа показывает, что коэффициенты рядов Шерцера (33) и (34) одинаковы и удовлетворяют одним и тем же рекуррентным соотношениям:

а) для планарного уравнения Лапласа (1) –

$$\begin{cases} F_0(z) = f(z), \quad G_0(z) = 0, \\ F_{k+1}(z) = \frac{1}{2(k+1)(2k+1)} \left[F_k''(z) + 2\lambda G_k'(z) - \lambda^2 F_k(z) \right], \\ G_{k+1}(z) = \frac{1}{2(k+1)(2k+1)} \left[G_k''(z) - 2\lambda F_k'(z) - \lambda^2 G_k(z) \right]; \end{cases} \tag{35}$$

б) для осесимметричного уравнения Лапласа (16) –

$$\begin{cases} F_0(z) = f(z), \quad G_0(z) = 0, \\ F_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)^2} \left[F_k''(z) + 2\lambda G_k'(z) - \lambda^2 F_k(z) \right], \\ G_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)^2} \left[G_k''(z) - 2\lambda F_k'(z) - \lambda^2 G_k(z) \right]; \end{cases} \tag{36}$$

в) для мультипольного уравнения Лапласа (23) –

$$\begin{cases} F_0(z) = f(z), \quad G_0(z) = 0, \\ F_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)(k+m+1)} \left[F_k''(z) + 2\lambda G_k'(z) - \lambda^2 F_k(z) \right], \\ G_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)(k+m+1)} \left[G_k''(z) - 2\lambda F_k'(z) - \lambda^2 G_k(z) \right]. \end{cases} \tag{37}$$

Подстановка выражений (32) непосредственно в соответствующие уравнения Лапласа и раздельное обращение в нуль каждого из сгруппированных множителей, стоящих при синусах и косинусах, приводит к задаче Коши на оси $r = 0$ для системы двух линейных эллиптических уравнений в частных производных, которые заданы относительно двух неизвестных функций ($F(z, r)$ и $G(z, r)$):

а) для планарного уравнения Лапласа (1) –

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial r^2} - \lambda^2 F + 2\lambda \frac{\partial G}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} - \lambda^2 G - 2\lambda \frac{\partial F}{\partial z} = 0, \\ F(z, 0) = f(z), \quad \frac{\partial F(z, 0)}{\partial r} = 0, \quad G(z, 0) = 0, \quad \frac{\partial G(z, 0)}{\partial r} = 0; \end{cases} \tag{38}$$

б) для осесимметричного уравнения Лапласа (16) –

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial r} - \lambda^2 F + 2\lambda \frac{\partial G}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial G}{\partial r} - \lambda^2 G - 2\lambda \frac{\partial F}{\partial z} = 0, \\ F(z, 0) = f(z), \frac{\partial F(z, 0)}{\partial r} = 0, G(z, 0) = 0, \frac{\partial G(z, 0)}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (39)$$

в) для мультипольного уравнения Лапласа (23) –

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial F}{\partial r} - \lambda^2 F + 2\lambda \frac{\partial G}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial G}{\partial r} - \lambda^2 G - 2\lambda \frac{\partial F}{\partial z} = 0, \\ F(z, 0) = f(z), \frac{\partial F(z, 0)}{\partial r} = 0, G(z, 0) = 0, \frac{\partial G(z, 0)}{\partial r} = 0. \end{cases} \quad (40)$$

Пусть вещественная функция $f(z)$ аналитически продолжена на комплексную плоскость, в результате чего получается симметризованная функция комплексной переменной:

$$\begin{aligned} f(z) &\rightarrow f(x+iy) = u(x, y) + iv(x, y), \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}, \\ u(z, 0) &= f(z), \quad v(z, 0) = 0, \\ u(z, -r) &= u(z, r), \quad v(z, -r) = -v(z, r). \end{aligned} \quad (41)$$

Для планарного уравнения Лапласа с помощью прямой подстановки можно убедиться, что решение вида

$$\begin{cases} F(z, r) = u(z, r) \operatorname{ch}(\lambda r), \\ G(z, r) = v(z, r) \operatorname{sh}(\lambda r) \end{cases} \quad (42)$$

удовлетворяет системе уравнений (38), в том числе начальным условиям.

Если применить формулу Уиттекера – Ватсона (20) с учетом четности по r функций $u(z, r)$ и $v(z, r)$, то получим, что для осесимметричного уравнения Лапласа (16), записанного в виде (32), решения задачи Коши (39) следуют выражениям:

$$\begin{cases} F(z, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} u(z, r \cos \varphi) \operatorname{ch}(r \cos \varphi) d\varphi, \\ G(z, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} v(z, r \cos \varphi) \operatorname{sh}(r \cos \varphi) d\varphi. \end{cases} \quad (43)$$

Точно так же, после применения формулы Дугалла (28) с учетом четности по r функций $u(z, r)$ и $v(z, r)$ получим, что решения (32) для задачи Коши (40) (выведена для мультипольного уравнения Лапласа (23)) после подстановки (32), можно получить с помощью формул вида

$$\begin{cases} F(z, r) = \frac{2m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^{\pi/2} u(z, r \cos \varphi) \operatorname{ch}(r \cos \varphi) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi, \\ G(z, r) = \frac{2m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^{\pi/2} v(z, r \cos \varphi) \operatorname{sh}(r \cos \varphi) \sin^{2m}(\varphi) d\varphi. \end{cases} \quad (44)$$



Размещение основных и вспомогательных диафрагм для ионной воронки с равномерно расположенными электродами. Пусть имеется планарный, осесимметричный или мультипольный электрический потенциал $U_C(z, r)$, заданный с помощью первой формулы (32) при функциях $F(z, r)$ и $G(z, r)$, вычисленных надлежащим образом, и такой потенциал ведет себя вдоль оси $r = 0$ как

$$U_C(z, 0) = f(z) \cos(\lambda z).$$

Тонкие диафрагмы (планарные, осесимметричные или мультипольные) должны располагаться в точках локальных минимумов и максимумов осевого распределения, т.е. в точках $z_k = \pi k / \lambda$.

Для планарных и осесимметричных систем размеры диафрагм r_k определяются из условий

$$U_C(z_k, r_k) = \pm U_R$$

или, что то же самое, из условий

$$F(z_k, r_k) = U_R$$

(мультипольно-сегментированные диафрагмы рассмотрены далее).

Дополнительные диафрагмы с нулевым или почти нулевым потенциалом могут устанавливаться в точках

$$z_{k+1/2} = \pi(k + 1/2) / \lambda,$$

в которых осциллирующая функция $\cos(\lambda z)$ обращается в нуль. Размеры $r_{k+1/2}$ дополнительных диафрагм удобно определять из условий

$$G(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = U_R,$$

что обеспечивает гладкий профиль канала транспортировки и способствует комбинированию потенциалов $U_C(z, r)$ и $U_S(z, r)$ в рамках единой системы электродов.

Рассмотрим планарный, осесимметричный или мультипольный электрический потенциал $U_S(z, r)$, заданный с помощью второй формулы (32) и обеспечивающий осевое распределение

$$U_S(z, 0) = f(z) \sin(\lambda z)$$

вдоль оси $r = 0$.

Теперь тонкие диафрагмы, задающие рассматриваемое электрическое поле, должны располагаться в точках

$$z_{k+1/2} = \pi(k + 1/2) / \lambda,$$

т.е. в точках локальных минимумов и максимумов осевого распределения.

Для планарных и осесимметричных систем размеры диафрагм $r_{k+1/2}$ определяются из условий

$$U_S(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = \pm U_R, \text{ т.е. } G(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = U_R.$$

Дополнительные диафрагмы с нулевым или почти нулевым потенциалом могут устанавливаться в точках $z_k = \pi k / \lambda$, в которых осциллирующая функция $\sin(\lambda z)$ обращается в нуль. Размеры r_k дополнительных диафрагм удобно определять из условий $F(z_k, r_k) = U_R$, что обеспечивает гладкий профиль канала транспортировки и способствует комбинированию в рамках единой системы электродов потенциалов $U_C(z, r)$ и $U_S(z, r)$.

Необходимо отметить, что при использовании комбинированного набора диафрагм, размещенных в точках (z_k, r_k) и $(z_{k+1/2}, r_{k+1/2})$, можно создавать как электрическое поле с электрическим потенциалом $U_C(z, r)$ (либо $U_S(z, r)$), так и произвольную линейную комбинацию этих потенциалов в рамках единой системы электродов. Для этого следует изменять напряжения, приложенные к диафрагмам.

При вычислении размеров диафрагм для мультипольных систем следует учитывать, что трехмерный мультипольный электрический потенциал связан с мультипольным множителем $W(z, r) = U_C(z, r)$ соотношением (22). Кроме того, вместо криволинейных

мультипольных диафрагм с формой, определяемой как сечения в соответствующих точках оси эквипотенциальных поверхностей, для аналитических электрических потенциалов $U_c(z, r)$ либо $U_s(z, r)$ можно использовать мультипольно-сегментированные круговые диафрагмы.

Условия для определения радиуса диафрагм принимают вид

$$r_k^m F(z_k, r_k) = \gamma U_R \text{ и } r_{k+1/2}^m F(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = \gamma U_R,$$

где γ – нормированная первая гармоника при разложении краевого условия для мультипольно-сегментированной круговой диафрагмы в ряд Фурье.

Вклад старших гармоник разложения краевого условия в ряд Фурье в окрестности оси симметрии, вдали от краев электродов, незначителен, так что ими можно пренебречь.

Радиочастотные воронки общего вида с неравномерно расположенными электродами

В данном разделе рассматриваются аналитические формулы для планарных, осесимметричных и мультипольных электростатических полей, которые обеспечивают на оси OZ разрабатываемого устройства потенциалы вида

$$U_c(x, y, z)|_{x=0, y=0} = U_c^0(z) = f(z) \cos[h(z)], \quad (45)$$

$$U_s(x, y, z)|_{x=0, y=0} = U_s^0(z) = f(z) \sin[h(z)], \quad (46)$$

где $h(z)$ – монотонная функция, определяющая точки расположения электродов, а функция $f(z)$ меняется вдоль оси устройства медленно, по сравнению с быстро осциллирующими функциями $\cos[h(z)]$ и $\sin[h(z)]$.

Исследование планарных, осесимметричных или мультипольных рядов Шерцера применительно к условиям Коши (45), (46) подсказывает, что решение (которое существует и является единственным) следует искать в виде

$$\begin{aligned} U_c(z, r) &= F(z, r) \cos[h(z)] + G(z, r) \sin[h(z)], \\ U_s(z, r) &= F(z, r) \sin[h(z)] - G(z, r) \cos[h(z)], \\ F(z, 0) &= f(z), \quad G(z, 0) = 0. \end{aligned} \quad (47)$$

Действительно, рассмотрим модифицированные ряды Шерцера, адаптированные к формулам (47):

$$U_c(z, r) = \sum_{k=0, \infty} (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!} \{ \cos[h(z)] F_k(z) + \sin[h(z)] G_k(z) \}, \quad (48)$$

$$U_s(z, r) = \sum_{k=0, \infty} (-1)^k \frac{r^{2k}}{(2k)!} \{ \sin[h(z)] F_k(z) - \cos[h(z)] G_k(z) \}. \quad (49)$$

Подстановка выражений (48) и (49) в соответствующие уравнения Лапласа показывает, что коэффициенты рядов Шерцера (48) и (49) одинаковы и удовлетворяют одним и тем же рекуррентным соотношениям. Для мультипольного уравнения Лапласа (23) эти рекуррентные соотношения имеют вид

$$\begin{cases} F_0(z) = f(z), \quad G_0(z) = 0, \\ F_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)(k+m+1)} [F_k''(z) - h'(z)^2 F_k(z) + 2h'(z)G_k'(z) + h''(z)G_k(z)], \\ G_{k+1}(z) = \frac{1}{4(k+1)(k+m+1)} [G_k''(z) - h'(z)^2 G_k(z) - 2h'(z)F_k'(z) - h''(z)F_k(z)], \end{cases} \quad (50)$$

Для планарного уравнения Лапласа (1) искомые рекуррентные соотношения получаются из формул (50) как частный случай $m = -1/2$. Для осесимметричного уравнения Лапласа (17) искомые рекуррентные соотношения получаются из формул (50) как частный случай $m = 0$.

Подстановка выражений (47) непосредственно в соответствующие уравнения Лапласа и раздельное обращение в нуль каждого из сгруппированных множителей при синусах и косинусах приводят к задаче Коши на оси $r = 0$ для системы двух линейных эллиптических уравнений в частных производных, которые заданы относительно двух неизвестных функций: $F(z, r)$ и $G(z, r)$. Для мультипольного уравнения Лапласа (23) эта система уравнений имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial F}{\partial r} - h'(z)^2 F + 2h'(z) \frac{\partial G}{\partial z} + h''(z) G = 0, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} + \frac{(2m+1)}{r} \frac{\partial G}{\partial r} - h'(z)^2 G - 2h'(z) \frac{\partial F}{\partial z} - h''(z) F = 0, \\ F(z, 0) = f(z), \frac{\partial F(z, 0)}{\partial r} = 0, \\ G(z, 0) = 0, \frac{\partial G(z, 0)}{\partial r} = 0. \end{cases} \quad (51)$$

Для планарного уравнения Лапласа (1) система уравнений получается из формул (51) как частный случай $m = -1/2$. Для осесимметричного уравнения Лапласа (17) система уравнений получается из формул (51) как частный случай $m = 0$.

Пусть вещественные функции $f(z)$ и $h(z)$ аналитически продолжены на комплексную плоскость, в результате чего получаются симметризованные функции комплексной переменной:

$$\begin{aligned} f(z) &\rightarrow f(x+iy) = u(x, y) + iv(x, y), \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}, \end{aligned} \quad (52)$$

$$u(z, 0) = f(z), \quad v(z, 0) = 0, \quad u(z, -r) = u(z, r), \quad v(z, -r) = -v(z, r),$$

$$\begin{aligned} h(z) &\rightarrow h(x+iy) = p(x, y) + iq(x, y), \\ \frac{\partial p}{\partial x} &= \frac{\partial q}{\partial y}, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = -\frac{\partial q}{\partial x}, \end{aligned} \quad (53)$$

$$p(z, 0) = h(z), \quad q(z, 0) = 0, \quad p(z, -r) = p(z, r), \quad q(z, -r) = -q(z, r).$$

С помощью прямой подстановки можно убедиться, что с учетом соотношений (52) и (53) для пар функций вида

$$\begin{cases} U_c(x, y) = u(x, y) \cos[p(x, y)] \operatorname{ch}[q(x, y)] + v(x, y) \sin[p(x, y)] \operatorname{sh}[q(x, y)], \\ V_c(z, r) = v(x, y) \cos[p(x, y)] \operatorname{ch}[q(x, y)] - u(x, y) \sin[p(x, y)] \operatorname{sh}[q(x, y)]; \end{cases} \quad (54)$$

$$\begin{cases} U_s(x, y) = u(x, y) \sin[p(x, y)] \operatorname{ch}[q(x, y)] - v(x, y) \cos[p(x, y)] \operatorname{sh}[q(x, y)], \\ V_s(z, r) = v(x, y) \sin[p(x, y)] \operatorname{ch}[q(x, y)] + u(x, y) \cos[p(x, y)] \operatorname{sh}[q(x, y)] \end{cases} \quad (55)$$

выполняются соотношения Коши – Римана.

Это означает, что функции

$$U_c(x, y) + i V_c(x, y) \text{ и } U_s(x, y) + i V_s(x, y) \quad (55a)$$

являются симметризованными аналитическими функциями комплексной переменной.

Здесь стоит отметить, что при условии симметризованности функций

$$u(x, y) + iv(x, y) \text{ и } p(x, y) + iq(x, y),$$

в симметризованном характере функций (54) и (55) можно убедиться непосредственной проверкой.

Вследствие симметризованности функций (55a), функции $U_c(z, r)$ и $U_s(z, r)$ являются симметризованными решениями двумерного уравнения Лапласа (1), которые обеспечивают требуемое поведение потенциалов (45), (46) на оси симметрии $r = 0$.

Из равенств (47), после подстановки в них функций (54), (55), получаем решение задачи Коши (51) при $m = -1/2$, которое соответствует планарному уравнению Лапласа (1):

$$\begin{cases} F(z, r) = u(z, r) \cos[h(z) - p(z, r)] \operatorname{ch}[q(z, r)] - \\ -v(z, r) \sin[h(z) - p(z, r)] \operatorname{sh}[q(z, r)], \\ G(z, r) = u(z, r) \sin[h(z) - p(z, r)] \operatorname{ch}[q(z, r)] + \\ +v(z, r) \cos[h(z) - p(z, r)] \operatorname{sh}[q(z, r)]. \end{cases} \quad (56)$$

Путем использования формулы Уиттекера – Ватсона (20) получаем решение задачи Коши (51) при $m = 0$, которое соответствует осесимметричному уравнению Лапласа (17):

$$\begin{cases} F(z, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \{u(z, r \cos \varphi) \cos[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{ch}[q(z, r \cos \varphi)] - \\ -v(z, r \cos \varphi) \sin[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{sh}[q(z, r \cos \varphi)]\} d\varphi, \\ G(z, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \{u(z, r \cos \varphi) \sin[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{ch}[q(z, r \cos \varphi)] + \\ +v(z, r \cos \varphi) \cos[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{sh}[q(z, r \cos \varphi)]\} d\varphi. \end{cases} \quad (57)$$

После применения формулы Дугалла (28) получаем точно так же решение задачи Коши (51) с произвольным индексом $m > 0$, которое соответствует мультипольному уравнению Лапласа (23):

$$\begin{cases} F(z, r) = \frac{2m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^{\pi/2} \{u(z, r \cos \varphi) \cos[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{ch}[q(z, r \cos \varphi)] - \\ -v(z, r \cos \varphi) \sin[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{sh}[q(z, r \cos \varphi)]\} \sin^{2m}(\varphi) d\varphi, \\ G(z, r) = \frac{2m!/\sqrt{\pi}}{\Gamma(m+1/2)} \int_0^{\pi/2} \{u(z, r \cos \varphi) \sin[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{ch}[q(z, r \cos \varphi)] + \\ +v(z, r \cos \varphi) \cos[h(z) - p(z, r \cos \varphi)] \operatorname{sh}[q(z, r \cos \varphi)]\} \sin^{2m}(\varphi) d\varphi. \end{cases} \quad (58)$$

Размещение основных и вспомогательных диафрагм для ионной воронки с неравномерно расположенными электродами. По аналогии со случаем равномерно расположенных электродов для планарного, осесимметричного или мультипольного электрического потенциала $U_c(z, r)$, заданного с помощью первой формулы (47), его распределение вдоль оси $r = 0$ определяется формулой

$$U_c(z, 0) = f(z) \cos[h(z)],$$

где функция $h(z)$ монотонна и имеет достаточно большой диапазон значений.

Тонкие диафрагмы должны располагаться в точках локальных минимумов и максимумов осевого распределения, т.е. в точках z_k , которые представляют собой решения



алгебраических уравнений $h(z_k) = \pi k/\lambda$. В силу высказанных предположений о свойствах функции $h(z)$, такие решения существуют и являются единственными при любых, интересующих нас значениях индекса k .

Размеры планарных и осесимметричных диафрагм r_k определяются из условий

$$U_C(z_k, r_k) = \pm U_R, \text{ т. е. } F(z_k, r_k) = U_R;$$

дополнительные диафрагмы с нулевым (или почти нулевым) потенциалом можно устанавливать в точках $z_{k+1/2}$, которые есть решения алгебраических уравнений

$$h(z_{k+1/2}) = \pi(k + 1/2)/\lambda;$$

в них осциллирующая функция $\cos[h(z)]$ обращается в нуль.

Для планарного, осесимметричного или мультипольного электрического потенциала $U_S(z, r)$, заданного с помощью второй формулы (47), вдоль оси $r = 0$ обеспечивается распределение

$$U_S(z, 0) = f(z) \sin[h(z)].$$

Тонкие диафрагмы, задающие рассматриваемое электрическое поле, должны располагаться в точках $z_{k+1/2}$, для которых выполняются условия

$$h(z_{k+1/2}) = \pi(k + 1/2)/\lambda,$$

т.е. в точках локальных минимумов и максимумов осевого распределения.

Размеры диафрагм планарных и осесимметричных систем $r_{k+1/2}$ определяются из условий

$$U_S(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = \pm U_R, \text{ т. е. } G(z_{k+1/2}, r_{k+1/2}) = U_R.$$

Дополнительные диафрагмы с нулевым (или почти нулевым) потенциалом можно устанавливать в точках z_k , определяемых уравнениями $h(z_k) = \pi k/\lambda$, в которых функция $\sin[h(z)]$ обращается в нуль. Размеры r_k дополнительных диафрагм находятся из условий $F(z_k, r_k) = U_R$, что обеспечивает гладкий профиль канала транспортировки и способствует комбинированию потенциалов $U_C(z, r)$ и $U_S(z, r)$ в рамках единой системы электродов.

Использование комбинированного набора диафрагм, размещенных в точках (z_k, r_k) и $(z_{k+1/2}, r_{k+1/2})$, позволяет создавать как электрическое поле с электрическим потенциалом $U_C(z, r)$ либо $U_S(z, r)$, так и произвольную линейную комбинацию этих потенциалов в рамках единой системы электродов. Для этого необходимо изменять напряжения, приложенные к диафрагмам.

Размеры диафрагм для мультипольных систем вычисляются точно так же, как и в случае равномерно расположенных электродов.

Заключение

В работе получены аналитические выражения в квадратурах для электрических потенциалов, которые целесообразно использовать для исследования движения ионов в радиочастотных ловушках и радиочастотных воронках с прямой осью, образованных планарными, круговыми либо мультипольными диафрагмами с прямолинейным каналом транспортировки, характеризуемым сложным радиальным профилем. Профиль канала транспортировки однозначным образом определяется по осевому распределению электрического потенциала, используемого в качестве исходных данных для задачи Коши при вычислении электрических потенциалов во всем рассматриваемом пространстве. Взвешенные суммы аналитических выражений, которые соответствуют круговым и мультипольно-сегментированным диафрагмам, позволяют синтезировать электрические потенциалы для радиочастотных воронок с диафрагмами некруговой формы.

С помощью получаемых на выходе аналитических выражений можно быстро исследовать и оптимизировать поведение ионов в соответствующих радиочастотных ионных воронках, используя псевдопотенциальную модель движения ионов в высокочастотных электрических полях [44 – 46, 6, 12].

Полученные аналитические выражения для трехмерных гармонических функций с осциллирующим поведением на оси могут быть также полезными при решении ряда задач математической физики.

Благодарности

Авторы выражают свою искреннюю благодарность доктору физико-математических наук Михаилу Игоревичу Явору, главному научному сотруднику Института аналитического приборостроения РАН (г. Санкт-Петербург), за активное и деятельное участие в обсуждении рассматриваемой проблемы и указание на полезные литературные источники, использованные в данном исследовании.

Авторы с благодарностью отдают дань памяти своему учителю, доктору физико-математических наук Юрию Константиновичу Голикову, профессору Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, внесшему неоценимый вклад в развитие современной физической электроники, в том числе в решение обратных задач ионной оптики.

При проведении вычислений использовалась программа Wolfram Mathematica версии 11 (Home Edition) [47].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бердников А. С., Масюкевич С. В., Соловьев К. В., Хасин Ю. И. Электрические поля цилиндрических радиочастотных транспортирующих каналов // Научное приборостроение. 2025. Т. 35. № 3. С. 3–17.
2. Сысоев А. А., Бердников А. С., Масюкевич С. В., Соловьев К. В., Краснова Н. К. Аналитическое исследование режимов работы радиочастотных воронок в газодинамических интерфейсах тандемных трехквадрольных масс-спектрометров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 4. С. 134–145.
3. Бердников А. С., Масюкевич С. В. Аналитические потенциалы электрических полей для моделирования транспортирующих каналов с периодической структурой // Научное приборостроение. 2024. Т. 34. № 1. С. 107–116.
4. Бердников А. С., Масюкевич С. В., Помозов Т. В., Хасин Ю. И., Соловьев К. В. Аналитические потенциалы электрических полей для моделирования мультипольных радиочастотных ионных воронок с нелинейным профилем // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 2. С. 94–119.
5. Gerlich D. Inhomogeneous RF fields: A versatile tool for the study of processes with slow ions // Ng Ch.-Y., Baer M. (Eds.). State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part 1: Experiment (Book Series: Advances in Chemical Physics. Vol. LXXXII). New York: John Wiley & Sons Inc., 1992. Pp. 1–176.
6. Yavor M. I. Optics of charged particle analyzers (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 157). Amsterdam: Academic Press, 2009.
7. Bahr R. Diplom thesis. University of Freiburg, Germany, 1969 (cited by Refs. [5, 9, 10]).
8. Gerlich D. Diplom thesis. University of Freiburg, Germany, 1971 (cited by Refs. [5, 9, 10]).
9. Teloy E., Gerlich D. Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique // Chemical Physics. 1974. Vol. 4. No. 3. Pp. 417–427.
10. Gerlich D., Kaefer G. Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K // The Astrophysical Journal. 1989. Vol. 347. No. 2. Pp. 849–854.
11. Бердников А. С., Галль Н. Р. Радиочастотные транспортирующие ловушки с периодическими электродами без паразитных областей захвата // Масс-спектрометрия. 2013. Т. 10. № 4. С. 224–229.
12. Yavor M. I. Advances in optics of charged particle analyzers: Part 1. Edited by M. Hytch, P. W. Hawkes (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 232). Amsterdam: Academic Press, 2024. 220 p.
13. Shaffer S. A., Tang K., Anderson G., Prior D. C., Udseth H. R., Smith R. D. A novel ion funnel for focusing ions at elevated pressure using electrospray ionization mass spectrometry // Rapid Communications in Mass Spectrometry. 1997. Vol. 11. No. 16. Pp. 1813–1817.
14. Shaffer S. A., Prior D. C., Anderson G., Udseth H. R., Smith R. D. An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry // Analytical Chemistry. 1998. Vol. 70. No. 19. Pp. 4111–4119.

15. Shaffer S. A., Tolmachev A. V., Prior D. C., Anderson G. A., Udseth H. R., Smith R. D. Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry // *Analytical Chemistry*. 1999. Vol. 71. No. 15. Pp. 2957–2964.
16. Tolmachev A. V., Kim T., Udseth H. R., Smith R. D., Bailey T. H., Futrell J. H. Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2000. Vol. 203. No. 1–3. Pp. 31–47.
17. Kim T., Tolmachev A. V., Harkewicz R., Prior D. C., Anderson G., Udseth H. R., Smith R. D. Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel // *Analytical Chemistry*. 2000. Vol. 72. No. 10. Pp. 2247–2255.
18. Lynn E. C., Chung M.-C., Han C.-C. Characterizing the transmission properties of an ion funnel // *Rapid Communications in Mass Spectrometry*. 2000. Vol. 14. No. 22. Pp. 2129–2134.
19. Kelly R. T., Tolmachev A. V., Page J. S., Tang K., Smith R. D. The ion funnel: Theory, implementations and applications // *Mass Spectrometry Reviews*. 2010. Vol. 29. No. 2. Pp. 294–312.
20. Bao X., Zhang Q., Liang Q., et al. Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel // *Analytical Chemistry*. 2022. Vol. 94. No. 39. Pp. 13368–13376.
21. Голиков Ю. К., Краснова Н. К. Теория синтеза электростатических энергоанализаторов. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. 410 с.
22. Голиков Ю. К., Уткин К. Г., Чепарухин В. В. Расчет элементов электростатических электронно-оптических систем. Ленинград.: Изд-во ЛПИ, 1974. 80 с.
23. Голиков Ю. К., Соловьев К. В. Электростатические ионные ловушки. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2008. 152 с.
24. Бердников А. С., Веренчиков А. Н., Галь Н. Р., Кузьмин А. Г., Лапушкин М. Н., Масюкевич С. В., Титов Ю. А. Радиочастотные транспортирующие системы с периодически-ми электродами и импульсными напряжениями // *Масс-спектрометрия*. 2019. Т. 16. № 4. С. 305–322.
25. Андреева А. Д., Бердников А. С. Устройства для манипулирования заряженными частицами на основе принципа архимедова винта // *Сборник тезисов докладов IV Всероссийской конференции и V съезда Всероссийского масс-спектрометрического общества «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы» (Москва, 05–09 сентября 2011 г.)*. 2011. С. 137.
26. Андреева А. Д., Бердников А. С. Масс-спектрометрические устройства на основе радиочастотных электрических полей с архимедовыми свойствами // *Масс-спектрометрия*. 2011. Т. 8. № 4. С. 293–296.
27. Berdnikov A. S., Douglas D. J., Konenkov N. V. The pseudopotential for quadrupole fields up to $q = 0.9080$ // *International Journal of Mass Spectrometry*. 2017. Vol. 421. October. Pp. 204–223.
28. Бердников А. С., Андреева А. Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. Патент на полезную модель. RU 113611 U1, Россия. МПК H01J49/00. Заявитель и патентообладатель Бердников А. С.; № 2011119296/07; заявл. 05.05.2011; опубл. 20.02.2012.
29. Бердников А. С., Андреева А. Д. Устройство для манипулирования заряженными частицами. Патент на изобретение. RU 2465679, Россия. МПК H01J49/00. Заявитель и патентообладатель Бердников А. С.; № 2011119286/07; заявл. 05.05.2011; опубл. 27.10.2012.
30. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. Device for manipulating charged particles via field with pseudo potential having one or more local maxima along length of channel; Patent US9536721; Priority date: 05.05.2011, Application date: 04.05.2012, Publication date: 03.01.2017.
31. Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R. Device for manipulating charged particles; Patent US9812308; Priority date: 05.05.2011, Application date: 21.10.2016, Publication date: 07.11.2017.
32. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. I. // *Научное приборостроение*. 2011. Т. 21. № 2. С. 77–89.
33. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 2. Общая формула // *Научное приборостроение*. 2011. Т. 21. № 3. С. 83–96.
34. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 3. Временные сигналы, характеризующиеся «медленным» и «быстрым» временами // *Научное приборостроение*. 2011. Т. 21. № 4. С. 75–85.

35. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 4. Приборы и устройства // Научное приборостроение. 2011. Т. 21. № 4. С. 86–102.
36. Бердников А. С. Меняющийся во времени псевдопотенциал и его применение к описанию усредненного движения заряженных частиц. Ч. 5. Комментарии к общей формуле для меняющихся во времени псевдопотенциалов // Научное приборостроение. 2012. Т. 22. № 2. С. 105–111.
37. Бердников А. С. Высокочастотные электромагнитные поля с архимедовыми свойствами // Научное приборостроение. 2014. Т. 24. № 1. С. 104–127.
38. Лаврентьев М. А., Шабат Б. В. Методы теории функций комплексного переменного. Изд. 3-е, испр. М.: «Наука». Гл. ред. физико-математической лит-ры, 1965. 716 с.
39. Бернштейн С. Н. Доказательство теоремы Гильберта об аналитическом характере решений эллиптических уравнений без использования нормальных рядов // Успехи математических наук. 1941. № 8. С. 82–99.
40. Ахиезер Н. И., Петровский И. Г. Вклад С. Н. Бернштейна в теорию дифференциальных уравнений с частными производными // Успехи математических наук. 1961. Т. 16. № 2. С. 5–20.
41. Силадьи М. Электронная и ионная оптика. Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 639 с.
42. Боголюбов А. Н., Левашова Н. Т., Могилевский И. Е., Мухартова Ю. В., Шапкина Н. Е. Функция Грина оператора Лапласа. М.: Физический факультет МГУ, 2018. 187 с.
43. Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н. Курс современного анализа. Часть II. Трансцендентные функции. М.: Гос. изд-во физико-математической лит-ры, 1963. 516 с.
44. Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. 368 с.
45. Berdnikov A. S. A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. S4. Pp. 78–83.
46. Бердников А. С., Веренчиков А. Н., Кузьмин А. Г. О корректном усреднении уравнений движения ионов в высокочастотных электрических полях // Масс-спектрометрия. 2018. Т. 15. № 4. С. 233–245.
47. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing: URL: <http://wolfram.com/mathematica/>

REFERENCES

1. Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Solovyev K. V., Khasin Yu. I., Electric fields of cylindrical RF ion guides, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 35 (3) (2025) 3–17 (in Russian)
2. Sysoev A. A., Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., et al., Analytical study of operating modes of RF ion funnels in the gas dynamic interfaces of tandem triple-quadrupole mass-spectrometers, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (4) (2023) 134–145 (in Russian).
3. Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Analytical potentials of electric fields for simulation of ion guides with a periodic structure, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 34 (1) (2024) 107–116 (in Russian).
4. Berdnikov A. S., Masyukevich S. V., Pomozev T. V., et al., Analytical electric potentials for simulation of the multipole radiofrequency ion funnels with nonlinear profiles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (2) (2024) 94–119 (in Russian).
5. Gerlich D., Inhomogeneous RF fields: A versatile tool for the study of processes with slow ions, In book: Ng Ch.-Y., Baer M. (Eds.). State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part 1: Experiment (Book Series: Advances in Chemical Physics. Vol. LXXXII). John Wiley & Sons Inc., New York (1992) 1–176.
6. Yavor M. I., Optics of charged particle analyzers (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 157). Academic Press, Amsterdam (2009).
7. Bahr R., Diplom thesis, University of Freiburg, 1969 (cited by Refs. [5, 9, 10]).
8. Gerlich D., Diplom thesis, University of Freiburg., 1971 (cited by Refs. [5, 9, 10]).
9. Teloy E., Gerlich D., Integral cross sections for ion-molecule reactions. Part I. The guided beam technique, Chem. Phys. 4 (3) (1974) 417–427.



10. Gerlich D., Kaefer G., Ion trap studies of association processes in collisions of CH^{3+} and CD^{3+} with $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, D_2 and He at 80 K, *Astrophys. J.* 347 (2) (1989) 849–854.
11. Berdnikov A. S., Gall N. R., Radio frequency ion guiding traps with periodic electrodes without spurious trapping regions, *J. Anal. Chem.* 69 (13) (2014) 1285–1290.
12. Yavor M. I., *Advances in optics of charged particle analyzers: Part 1*, Ed. by M. Hytch, P. W. Hawkes, (Book Series: Advances in Imaging and Electron Physics. Vol. 232), Academic Press, Amsterdam, 2024.
13. Shaffer S. A., Tang K., Anderson G., et al., A novel ion funnel for focusing ions at elevated pressure using electrospray ionization mass spectrometry, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 11 (16) (1997) 1813–1817.
14. Shaffer S. A., Prior D. C., Anderson G., et al., An ion funnel interface for improved ion focusing and sensitivity using electrospray ionization mass spectrometry, *Anal. Chem.* 70 (19) (1998) 4111–4119.
15. Shaffer S. A., Tolmachev A. V., Prior D. C., et al., Characterization of an improved electrodynamic ion funnel interface for electrospray ionization mass spectrometry, *Anal. Chem.* 71 (15) (1999) 2957–2964.
16. Tolmachev A. V., Kim T., Udseth H. R., et al., Simulation-based optimization of the electrodynamic ion funnel for high sensitivity electrospray ionization mass spectrometry, *Int. J. Mass Spectrom.* 203 (1–3) (2000) 31–47.
17. Kim T., Tolmachev A. V., Harkewicz R., et al., Design and implementation of a new electrodynamic ion funnel, *Anal. Chem.* 72 (10) (2000) 2247–2255.
18. Lynn E. C., Chung M.-C., Han C.-C., Characterizing the transmission properties of an ion funnel, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 14 (22) (2000) 2129–2134.
19. Kelly R. T., Tolmachev A. V., Page J. S., et al., The ion funnel: Theory, implementations and applications, *Mass Spectrom. Rev.* 29 (2) (2010) 294–312.
20. Bao X., Zhang Q., Liang Q., et al., Increased sensitivity in proton transfer reaction mass spectrometry by using a novel focusing quadrupole ion funnel, *Anal. Chem.* 94 (39) (2022) 13368–13376.
21. Golikov Yu. K., Krasnova N. K., *Teoriya sinteza elektrostatičeskikh energoanalizatorov [Theory of synthesis of electrostatic energy analyzers]*, Polytechnical University Publishing House, Saint-Petersburg, 2010 (in Russian).
22. Golikov Yu. K., Utkin K. G., Cheparukhin V. V., *Rasčyot elementov elektrostatičeskikh elektronno-optičeskikh sistem [Calculation of elements of electrostatic electron-optical systems]*, Publishing House of Leningrad Polytechnical University, Leningrad, 1974 (in Russian).
23. Golikov Yu. K., Solovyev K. V., *Elektrostatičeskiye ionniye lovushki [Electrostatic ion traps]* Polytechnical University Publishing House, Saint-Petersburg, 2008 (in Russian).
24. Berdnikov A. S., Verenchikov A. N., Gall N. R., et al., Radio-frequency ion guides with periodical electrodes and pulsed voltages, *J. Anal. Chem.* 75 (14) (2020) 1758–1773.
25. Andreyeva A. D., Berdnikov A. S., *Ustroystva dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami na osnove printsipa arkhimedova vinta [Devices for manipulating charged particles based on the principle of Archimedean screw]*, Proc. of the 4-th All-Russian conf. “Mass-Spectrometry and its Applied Problems” organized by the 5-th Congress of All-Russian Mass-Spectrometry Society; Sept. 05–09, 2011, Moscow (2011) 137 (in Russian).
26. Andreyeva A. D., Berdnikov A. S., Mass spectrometric devices with Archimedean radio-frequency electric fields, *J. Anal. Chem.* 67 (13) (2012) 1034–1037.
27. Berdnikov A. S., Douglas D. J., Konenkov N. V., The pseudopotential for quadrupole fields up to $q = 0.9080$, *Int. J. Mass Spectrom.* 421 (Oct) (2017) 204–223.
28. Berdnikov A. S., Andreeva A. D., *Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami [A device for charge particle manipulation]*, Patent for utility model No. RU 113611, Russia. MPK H01J49/00. Berdnikov A. S. is a declarant and patentee. No. 2011119296/07; declar. 05.05.2011, publ. 20.02.2012 (in Russian).
29. Berdnikov A. S., Andreeva A. D., *Ustroystvo dlya manipulirovaniya zaryazhennymi chastitsami [A device for charge particle manipulation]* Invention patent No. RU 2465679, Russia. MPK H01J49/00. Berdnikov A. S. is a declarant and patentee. No. № 2011119286/07; declar. 05.05.2011, publ. 20.02.2012 (in Russian).

30. **Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R.**, Device for manipulating charged particles via field with pseudo potential having one or more local maxima along length of channel, Patent US9536721, 2017.
31. **Berdnikov A., Andreyeva A., Giles R.**, Device for manipulating charged particles, Patent US9812308, 2017.
32. **Berdnikov A. S.**, Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part. I, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (2) (2011) 77–89 (in Russian).
33. **Berdnikov A. S.**, Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 2. General expression for time-dependent pseudopotentials, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (3) (2011) 83–96 (in Russian).
34. **Berdnikov A. S.**, Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 3. Time dependent signals characterized by "slow" and "fast" characteristic time, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (4) (2011) 75–85 (in Russian).
35. **Berdnikov A. S.**, Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 4. Devices and instruments, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 21 (4) (2011) 86–102 (in Russian).
36. **Berdnikov A. S.**, Time-dependent pseudopotential and its application for description of the averaged motion of the charged particles. Part 5. Comments to a general expression for time-dependent pseudopotentials, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 22 (2) (2012) 105–111 (in Russian).
37. **Berdnikov A. S.**, High frequency electromagnetic fields with Archimedean properties, Nauchnoe priborostroenie [Scientific Instrumentation]. 24 (1) (2014) 104–127 (in Russian).
38. **Laurentiev M., Shabat B.**, Methodes de la Theorie des Fonctions d'une Variable Complexe, "Mir" D'Édition, Moscou, 1972.
39. **Bernshtein S. N.**, The proof of the Hilbert theorem on the analytical type of solution of elliptic equations without using of normal series, Russian Math. Surveys. (8) (1941) 82–99 (in Russian).
40. **Akhiezer N. I., Petrovskii I. G.**, S. N. Bernshtein's contribution to the theory of partial differential equations, Russian Math. Surveys. 16 (2) (1961) 1–15.
41. **Szilagy M.**, Electron and ion optics, Plenum Press, New York, London, 1988.
42. **Bogolyubov A. N., Levashova N. T., Mogilevskii I. E., et al.**, Funktsiya Grina operatora Laplasya [Green's function of Laplace's operator]. Publ. by Faculty of Physics of Moscow State University, Moscow, 2018 (in Russian).
43. **Whittaker E. T., Watson G. N.**, A course of modern analysis, Cambridge University Press, Cambridge, 1950.
44. **Sagdeev R. Z., Usikov D. A., Zaslavski G. M.**, Nonlinear physics: From the pendulum to turbulence and chaos (Book Ser.: Contemporary Concepts in Physics, Vol. 4), Harwood Academic Publishers, Chur, Switzerland; N. Y., 1988.
45. **Berdnikov A. S.**, A pseudo potential description of the motion of charged particles in RF fields, Microsc. Microanal. 21 (S4) (2015) 78–83.
46. **Berdnikov A. S., Kuzmin A. G., Verenchikov A. N.**, On the correct averaging of the equations of ion motion in high-frequency electric fields, J. Anal. Chem. 74 (14) (2019) 1378–1389.
47. Wolfram Mathematica: the system for modern technical computing: URL: <http://wolfram.com/mathematica/>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.
 198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31–33, лит. А.
 asberd@yandex.ru
 ORCID: 0000-0003-0985-5964



КРАСНОВА Надежда Константиновна – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.k.krasnova@mail.ru
ORCID: 0000-0002-6162-9481

МАСЮКЕВИЧ Сергей Владимирович – старший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.
serg_08@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0873-8849

ПОДОЛЬСКАЯ Екатерина Петровна – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия.

198095, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.
ek.podolskaya@gmail.com

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
k-solovyev@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3514-8577

THE AUTHORS

BERDNIKOV Alexander S.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31-33 Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
asberd@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0985-5964

KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.k.krasnova@mail.ru
ORCID: 0000-0002-6162-9481

MASYUKEVICH Sergey V.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31-33 Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
serg_08@mail.ru
ORCID: 0000-0002-0873-8849

PODOLSKAYA Ekaterina P.

Institute for Analytical Instrumentation, RAS
31-33 Ivan Chernykh St., St. Petersburg, 198095, Russia
ek.podolskaya@gmail.com

SOLOVYEV Konstantin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,

Institute for Analytical Instrumentation, RAS

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

k-solovyev@mail.ru

ORCID: 0000-0003-3514-8577

*Статья поступила в редакцию 01.06.2025. Одобрена после рецензирования 16.06.2025.
Принята 16.06.2025.*

Received 01.06.2025. Approved after reviewing 16.06.2025. Accepted 16.06.2025.

Приборы и техника физического эксперимента

Научная статья

УДК 550.343

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18407>

ПРИМЕНЕНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ МИКРОДЕФОРМАЦИЙ ЗЕМНОЙ КОРЫ

А. С. Лисовицкий¹ , В. А. Чупин¹, Л. Г. Московченко²

¹ Тихоокеанский океанологический институт им. В. И. Ильичёва
Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия;

² Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, Россия

 lisovitckii.as@poi.dvo.ru

Аннотация. В работе исследованы изменения микродеформаций земной коры с использованием методов фрактального и мультифрактального анализов. Основное внимание уделено выявлению закономерностей изменения фрактальной размерности и степенных показателей сингулярности данных, полученных экспериментально, с помощью лазерных деформографов, в периоды, предшествующие землетрясениям. Установлено, что фрактальная размерность возрастает перед сейсмическими событиями, особенно согласно данным с лазерного деформографа, расположенного на скальном основании. Анализ продемонстрировал снижение амплитуды и степенных показателей сингулярности в активные периоды. Полученные результаты подтверждают перспективность применения фрактальных методов для мониторинга микродеформаций земной коры и предсказания землетрясений.

Ключевые слова: микродеформация земной коры, самоорганизованная критичность, фрактальный анализ, лазерный деформограф

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке госбюджетной темы ТОИ ДВО РАН (г. Владивосток, Россия) № 124022100074-9 «Изучение природы линейного и нелинейного взаимодействия геосферных полей переходных зон Мирового океана и их последствий».

Для цитирования: Лисовицкий А. С., Чупин В. А., Московченко Л. Г. Применение фрактальных методов для анализа данных микродеформаций земной коры // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 101–113. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18407>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18407>

APPLICATION OF FRACTAL METHODS FOR ANALYZING THE MICRODEFORMATION DATA OF THE EARTH'S CRUST

A. S. Lisovitsky¹ , V. A. Chupin¹, L. G. Moskovchenko²

¹ V. I. Il'ichev Pacific Oceanological Institute, Vladivostok, Russia;

² Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia

 lisovitckii.as@poi.dvo.ru

Abstract. In the paper, the changes in microdeformations of the Earth's crust have been studied using methods of the fractal and multifractal analyses. Most attention was concentrated on revealing the regularities of the changes in the fractal dimension and singularity power

exponents of the data obtained experimentally using laser strainmeters during periods preceding earthquakes. The fractal dimension was found to increase before seismic events, especially according to the data from the laser strainmeter located on a bedrock base. Our analysis exhibited a decrease in the amplitude and singularity power exponents during active periods. The results obtained confirm the considerable promise of applying the fractal methods for monitoring the microdeformations of the Earth's crust and predicting earthquakes.

Keywords: microdeformation of the Earth's crust, self-organized criticality, fractal analysis, laser strainmeter

Funding: The research was supported by state budget theme “Study of the nature of linear and nonlinear interactions of geospheric fields of transition zones of the World Ocean and their consequences” (No. 124022100074-9) of V. I. Il'ichev Pacific Oceanological Institute, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Vladivostok, Russia).

For citation: Lisovitsky A. S., Chupin V. A., Moskovchenko L. G., Application of fractal methods for analyzing the microdeformation data of the Earth's crust, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 101–113. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18407>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Низкочастотные микросейсмические колебания служат ценным источником данных о геодинамических процессах в земной коре. Такие волнообразные движения представляют собой непрерывные низкоамплитудные колебаниями земной поверхности, вызванные атмосферными и океаническими процессами. Это и «тихие землетрясения», и медленные движения верхних слоев коры, а также значительные колебания атмосферного давления, циклоны, ураганы и воздействие океанских волн на береговую линию и шельф.

Земная кора служит средой, через которую распространяются сейсмические волны. Характеристики сигналов, распространяющихся в земной коре, изменяются в зависимости от ее состояния. Статистические параметры микросейсмического поля могут отражать изменения в ее свойствах, в том числе процессы, предшествующие сильным землетрясениям.

Одним из наиболее перспективных подходов к анализу таких систем следует считать применение фрактальных методов. Эти методы позволяют изучать структуру временных рядов, оценивать их сложность, а также выявлять скрытые закономерности, которые могут предшествовать катастрофическим событиям. Фрактальные характеристики, например фрактальная размерность и мультифрактальные спектры, отражают изменения в динамике системы и чувствительны к нарушениям ее равновесия.

Настоящее исследование посвящено применению методов фрактального и мультифрактального анализов для обработки показаний лазерного деформографа при изучении микродеформаций земной коры.

Основное внимание уделяется выявлению закономерностей динамики фрактальных характеристик, разработке критериев их прогностической способности и оценке их применимости для предсказания землетрясений.

Ключевым моментом данного подхода является использование данных микродеформаций земной коры, в отличие от большинства предшествующих исследований, основанных на анализе традиционных сейсмограмм или GPS-наблюдений.

Комбинированное использование метода мультифрактального детрендированного флуктуационного анализа (MF-DFA) и метода Хигучи для оценки фрактальной размерности позволило детально проанализировать структуру временных рядов и выявить закономерности, предшествующие землетрясениям.

Самоорганизованная критичность и фрактальность земной коры

Литосфера, состоящая из множества блоков, подвергается упругим напряжениям, поглощая дополнительную энергию из внешней среды и передавая ее между блоками. Когда уровень накопленной упругой энергии в литосферном блоке достигает критического значения, этот блок становится неустойчивым, что может приводить к его смещению или разрушению. Эта нестабильность характеризуется состоянием, в котором малые внешние воздействия могут вызвать значительные изменения, а система продолжает развиваться без достижения равновесия, оставаясь в состоянии, близком к критическому. Описанное поведение свойственно системам с самоорганизованной критичностью: такая система достигает состояния, в котором происходят масштабные процессы на различных уровнях, независимо от внешнего воздействия. При этом взаимодействия между элементами системы становятся чувствительными к малым изменениям, что приводит к появлению сложных и непредсказуемых событий.

Для объяснения этих явлений П. Бак, Ч. Танг и К. Визенфельд [1] предложили концепцию самоорганизованной критичности. Эта концепция описывает систему, которая в процессе своего развития приходит к состоянию, где ее поведение характеризуется фрактальностью, критической устойчивостью и масштабируемостью на различных уровнях [1].

Для дальнейшего изложения необходимо дать определения сейсмических периодов.

Сейсмически активный период – это временной интервал, включающий землетрясения с магнитудой, равной 7 и выше (по шкале Рихтера), а также несколько месяцев формирования состояния земной коры перед этим событием.

Сейсмически спокойный период – это временной интервал, в течение которого не происходят землетрясения с магнитудой выше 6 (при этом учитываются особенности расположения региона).

Фрактальные методы анализа временных рядов

Одним из основных методов фрактального анализа геофизических рядов данных является метод фрактальных длин L . Существует несколько вариантов реализации алгоритма расчета $L(n)$, где n – количество вычислений.

В частности, метод Хигучи подразумевает, что при рассмотрении ряда $Y(j)$, где $j = 1, 2, \dots, N$, для каждого $L(n)$ вычисление выполняется n раз.

Длина кривой рассчитывается по точкам, относящимся к моментам

$$m, m + n, m + 2n,$$

где $m = 1, 2, \dots, n$ (m – начальное смещение);

$$L_m(n) = \left(\sum_{i=1}^{N-m} Y(m+i \cdot n) - Y(m+(i-1) \cdot n) \right) \cdot \left[\frac{N-1}{\frac{N-m}{n} \cdot n} \right], \quad (1)$$

где $(N-1)/\{(N-m)/n\}$ – нормализующий множитель; $[(N-m)/n]$ – наибольшее целое значение, не превышающее отношение $(N-m)/n$.

Окончательно длина кривой определяется как арифметическое среднее по n значениям, каждое из которых есть $L_m(n)$.

Далее вычисляется среднее значение $\langle L(n) \rangle$ по всем m и строится зависимость $\log \langle L(n) \rangle$ от $\log(n)$. Затем эта зависимость аппроксимируется прямой линией методом наименьших квадратов.

Полученная прямая описывается уравнением

$$y = -D \cdot x + b, \quad (2)$$

где D – искомая фрактальная размерность.

Уравнение (2) мы получаем после линейной аппроксимации графика [2].

Анализ временных рядов также проводится с помощью метода MF-DFA, включающего несколько этапов [3].

I этап. Вычисляется флуктуационный профиль вида

$$Y(k) = \sum_{i=1}^k (z(i) - \bar{z}),$$

где $z(i)$ — исходный временной ряд

II этап. Профиль $Y(k)$ следует разделить на непересекающиеся сегменты s равной длины. Аналогичная процедура повторяется с противоположного конца для учета всего флуктуационного профиля.

III этап. Вычисляется локальный тренд для каждого из $2N_s$ сегментов с помощью метода наименьших квадратов. Затем определяется дисперсия $F^2(v, s)$:

$$F^2(v, s) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \left\{ Y[(v-1) \cdot s + i] - y_v(i) \right\}^2$$

для каждого сегмента v ($v = 1, 2, \dots, N_s$) и

$$F^2(v, s) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \left\{ Y[N - (v - N_s) \cdot s + i] - y_v(i) \right\}^2$$

для $v = N_s + 1, N_s + 2, \dots, 2N_s$, где $y_v(i)$ — аппроксимирующий полином в сегменте v .

IV этап. Усреднение всех сегментов для получения q -го порядка функций флуктуаций

$$F_q(s) = \left\{ \frac{1}{s} \sum_{v=1}^{2N_s} [F^2(v, s)]^{\frac{q}{2}} \right\}^2, \quad (6)$$

где q — порядок момента флуктуационного анализа (может принимать только действительные значения).

Значение обобщенного показателя Хёрста $h(0)$ соответствует логарифмическому среднему функции флуктуаций и не может быть вычислено напрямую из-за особенности в уравнении (6). В этом случае используется логарифмическая усредняющая процедура, которая имеет вид

$$F_0(s) = \exp \left[\frac{1}{4N_s} \sum_{v=1}^{2N_s} \ln F^2(v, s) \right].$$

V этап. Определение скейлингового поведения функций флуктуаций путем анализа графиков каждого из значений q , отложенных по осям $F_q(s)$ и s в логарифмическом масштабе. Определяются основные мультифрактальные характеристики: обобщенный показатель Хёрста $h(q)$, отражающий степень долгосрочной коррелированности сигнала, и степенной показатель сингулярности данных $\alpha(q)$, характеризующий степень сингулярности сигнала.

$$F_q(s) \sim s^{h(q)}, \tau(q) = h(q) \cdot q - 1, \alpha(q) = d\tau(q)/dq.$$

Экспериментальная установка

Для исследований использовались лазерные деформографы на основе интерферометра Майкельсона.

Принцип их работы следующий: луч лазера попадает в интерференционный узел. Там он разделяется с помощью полупрозрачного стекла на два луча: отраженный и прямой. Оба луча, отражаясь от плоских зеркал, возвращаются на полупрозрачное стекло и образуют интерференционную картину, изменения в которой регистрируются.

В работе используются лазерные деформографы однокоординатного типа, созданные на основе неравноплечего принципа.

Для исследования мы использовали экспериментальные данные, полученные во время четырех крупных землетрясений, чтобы изучить их фрактальные характеристики, которые могли бы указать на предстоящие сейсмические события. Эти данные представляют собой информацию, полученную с деформографов, измерявших микродеформации земной коры в течение четырех сейсмически активных периодов, во время которых произошло одно или несколько землетрясений.

Спокойным сейсмическим периодом, в течение которого не происходило землетрясений с магнитудой, превышающей 6 баллов, является временной интервал с 1 апреля по 31 июня 2017 года. Географическое расположение землетрясений и их ключевые характеристики представлены в таблице (см. также рис. 1).

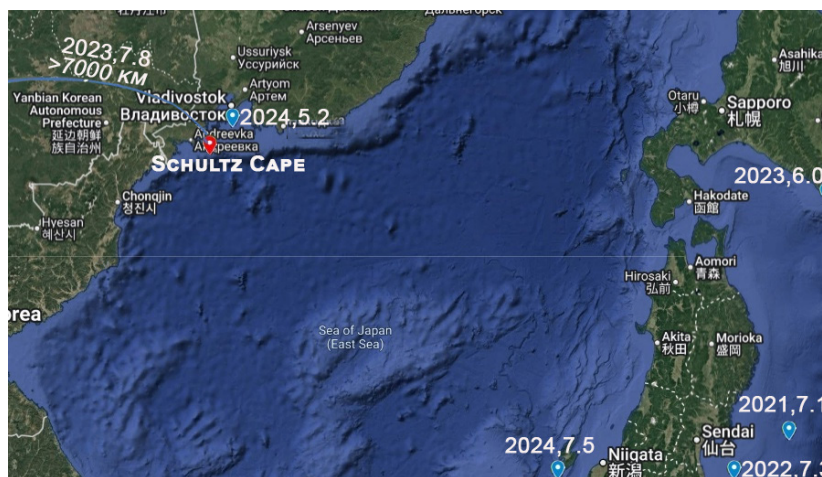


Рис. 1. Расположение, год события и магнитуда изучаемых землетрясений. Красная отметка указывает положение российского полигона «Мыс Шульца», где расположены лазерные деформографы, регистрирующие данные микродеформаций земной коры в периоды землетрясений

Таблица

Землетрясения, произошедшие в сейсмически активные периоды

Период	Дата	Расположение	Магнитуда, баллы	Глубина, км
01.10.2020 – 31.03.2021	20.03.2021	30 км от г. Исиномаки (Япония)	7,0	43
	13.02.2021	34 км от пос. Намиэ (Япония)	7,1	44
15.01 – 16.03.2022	21.01.2022	27 км от пос. Намиэ (Япония)	6,3	39
	16.03.2022	57 км от пос. Намиэ (Япония)	7,3	41
01.12.2022 – 15.02.2023	06.02.2023	г. Пазарджик (Турция)	7,8	10
	16.01.2023	о. Хоккайдо (Япония)	6,0	55
01.12.2023 – 29.02.2024	27.12.2023	залив Петра Великого (Россия, Приморский край)	5,2	410
	20.03.2021	п-ов Ното (Япония)	7,5	10

На базе Тихоокеанского океанологического института имени В. И. Ильичева Дальневосточного отделения РАН (г. Владивосток, Россия) создана Морская экспериментальная база «Мыс Шульца» (см. рис. 1), где находится аппаратно-программный комплекс, который состоит из следующих основных структурных элементов.

I. Лазерный деформограф неравноплечего варианта классического типа, который предназначен для регистрации изменения смещений участка земной коры, равного длине измерительного плеча деформографа (52,5 м), в частотном диапазоне от 10^{-3} Гц до 1 кГц с точностью до 0,01 нм.

II. Классический лазерный деформограф неравноплечего типа с длиной измерительного плеча 17,5 м.

III. Деформограф маятникового типа с длиной измерительного плеча 52,5 м, выполненный по неравноплечной схеме.

Описания других аппаратных элементов измерительного комплекса здесь не приведено, поскольку они второстепенны для данного исследования.

I и III деформографы расположены в направлении, близком к направлению север → юг, под углом 18° к меридиану, но размещены на разных параллельных площадках: I находится на песчаной поверхности, а III — на скальной. Деформограф II расположен перпендикулярно к I и III и установлен на суглинке большой плотности.

Экспериментальные данные в цифровой и аналоговой формах поступают в лабораторное помещение, где они подвергаются первичной обработке и сохраняются с созданием банка данных. Все системы, оснащенные четырьмя компьютерами, объединены в единую сеть и используют часы точного времени, обеспечивающие синхронизацию данных с точностью от 100 до 10 нс [4].

Анализ полученных данных проводился с использованием среды MatLab. В качестве выходных данных были построены графики, отражающие динамику фрактальных характеристик в исследуемые периоды. Анализ связи между искомой фрактальной размерностью D и функцией $\alpha(q)$, характеризующей степень сингулярности сигнала, выходит за рамки настоящей работы, поэтому он не проведен и будет предметом дальнейших исследований.

Результаты фрактального анализа

Анализ обработанных экспериментальных данных, полученных с деформографов I – III, привел нас к формулированию следующих результатов.

Результаты по фрактальным переменным. Во-первых, значения фрактальной размерности D повышаются перед землетрясениями; особенно ярко это выражено у данных с III деформографа (рис. 2).

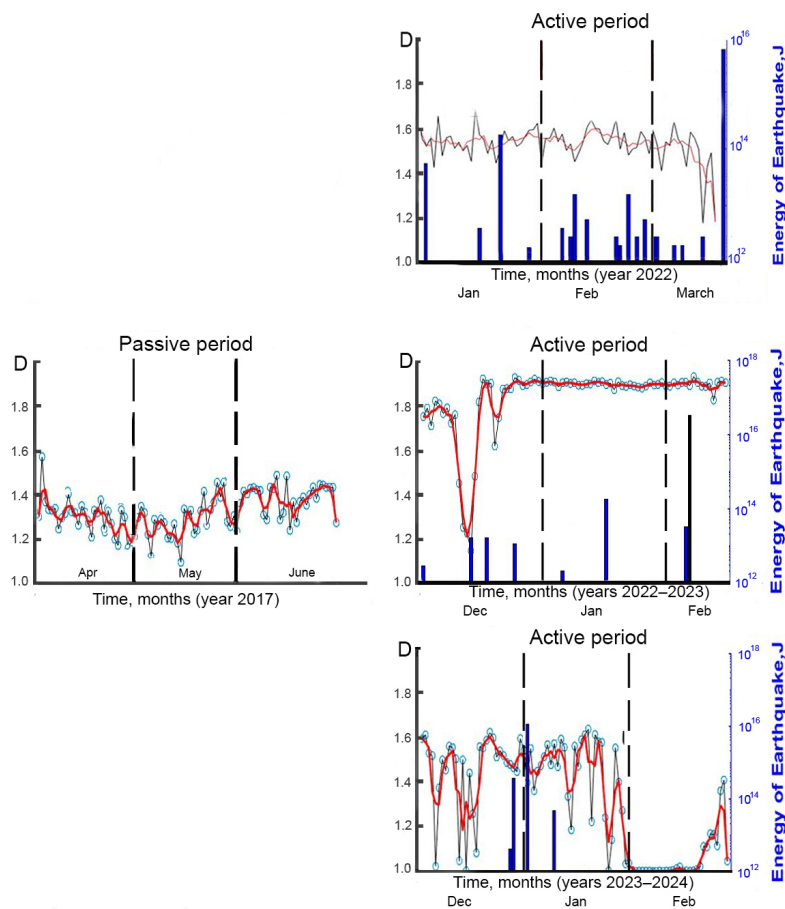


Рис. 2. Сравнение изменений фрактальной размерности D и энергии землетрясений (правые шкалы) по данным с III деформографа.

Слева — график спокойного периода, справа — графики активного.

Красные кривые относятся к данным, усредненным методом скользящего окна (его размер — 5 измерений)

Во-вторых, следует отметить поведение величины $\Delta\alpha$ – разницы между максимальным и минимальным значениями показателя сингулярности. В сейсмически активные периоды наблюдается снижение разброса этой величины и снижение ее амплитуды, по сравнению со спокойными периодами, что делает графики более гладкими. В период с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. были зафиксированы значительные изменения амплитуды и высокие значения величин, полученных со II и III деформографов (рис. 3).

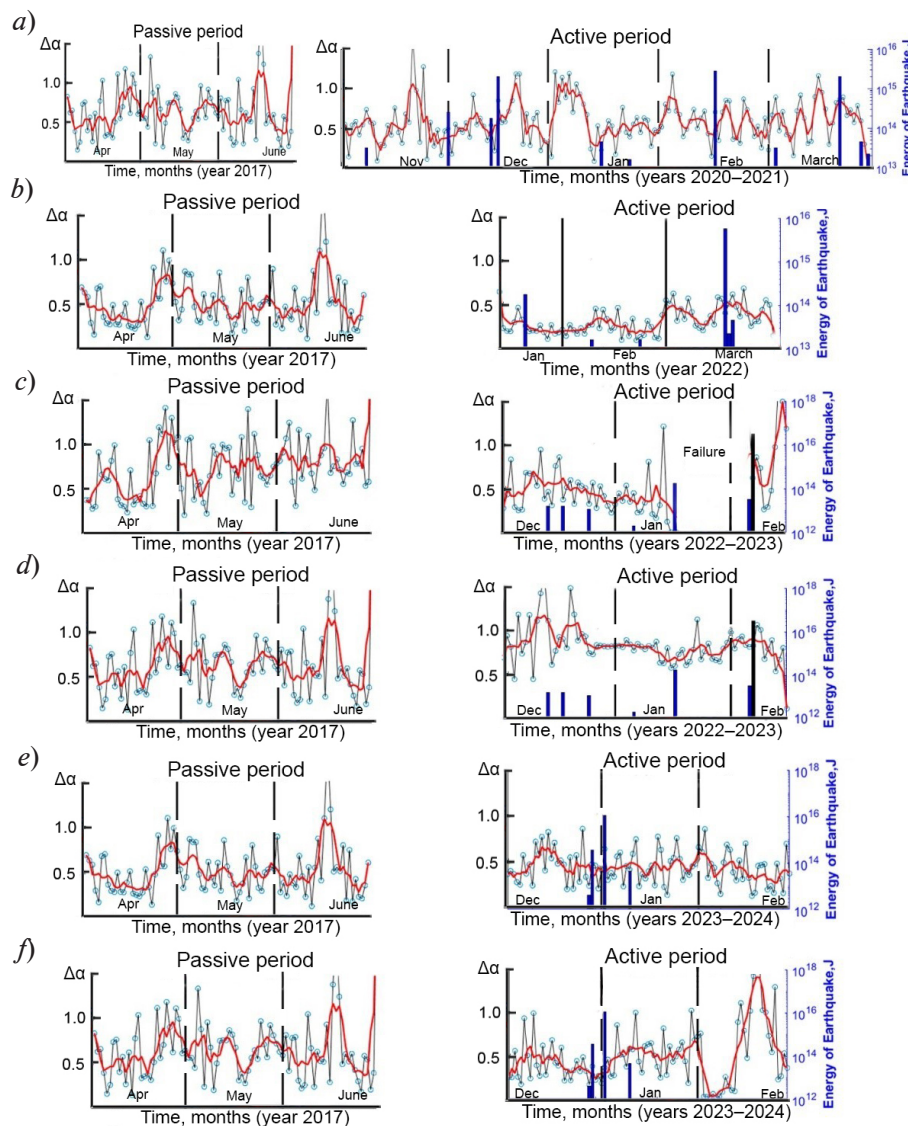


Рис. 3. Изменения ширины мультифрактального спектра $\Delta\alpha$ по всем выбранным периодам (см. таблицу) и по данным с I (*a, c*), II (*b, e*) и III (*d, f*) деформографов.

Графики спокойных периодов представлены рядом для удобства сравнения

Анализ взаимосвязи фрактальной размерности D и ширины мультифрактального спектра $\Delta\alpha$, выполненный на основе экспериментальных данных, показал наличие лишь слабой линейной корреляции между этими параметрами (рис. 4). Аппроксимация зависимости $D(\Delta\alpha)$ методом наименьших квадратов позволила оценить коэффициент детерминации $R^2 \approx 0,30$, что свидетельствует о том, что линейная модель объясняет лишь около 30% дисперсии фрактальной размерности за счет изменений ширины мультифрактального спектра. Такое наблюдение говорит о том, что изменения этих параметров отражают разные аспекты мультифрактальной структуры временных рядов микродеформаций и не всегда изменения происходят синхронно.

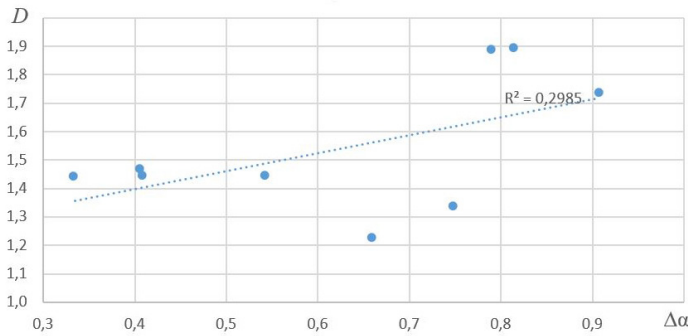


Рис. 4. Экспериментальная (точки) и аппроксимирующая (пунктирная прямая) зависимости фрактальной размерности D от ширины мультифрактального спектра $\Delta\alpha$ (R^2 – коэффициент детерминации)

В-третьих, величина минимального значения показателя сингулярности α_{\min} демонстрирует падение в периоды с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. и с 01.12.2023 по 29.02.2024 гг. С 15.01 по 16.03.2022 г. α_{\min} показывает разное поведение для данных с трех деформографов, аналогично рассчитанному для периода с 01.10.2020 по 31.03.2021 гг., хотя эта разница выражена не столь ярко.

В-четвертых, величина максимального значения степени сингулярности α_{\max} ведет себя по-разному для каждого деформографа.

Результаты по данным с деформографов. I деформограф: наблюдаются небольшие различия в поведении всех исследуемых параметров относительно спокойного периода. Средние величины параметров различаются незначительно. Однако в спокойный период наблюдается большой разброс значений параметров.

II деформограф: изменения поведения параметров выражены ярче, особенно показателя фрактальной размерности D в периоды с 01.12.2022 по 15.02.2023 и с 01.12.2023 по 29.02.2024 гг.

III деформограф: происходят значительные изменения, особенно в период с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. (рис. 5).

Результаты по выбранным периодам. В течение сейсмически активных периодов с 01.10.2020 по 31.03.2021 гг. и с 15.01 по 16.03.2022 г. произошло по два близко расположенных землетрясения значительной магнитуды (см. таблицу). Следует отметить близкие значения показателей фрактальной размерности D и ширины мультифрактального спектра $\Delta\alpha$ в эти периоды (рис. 6).

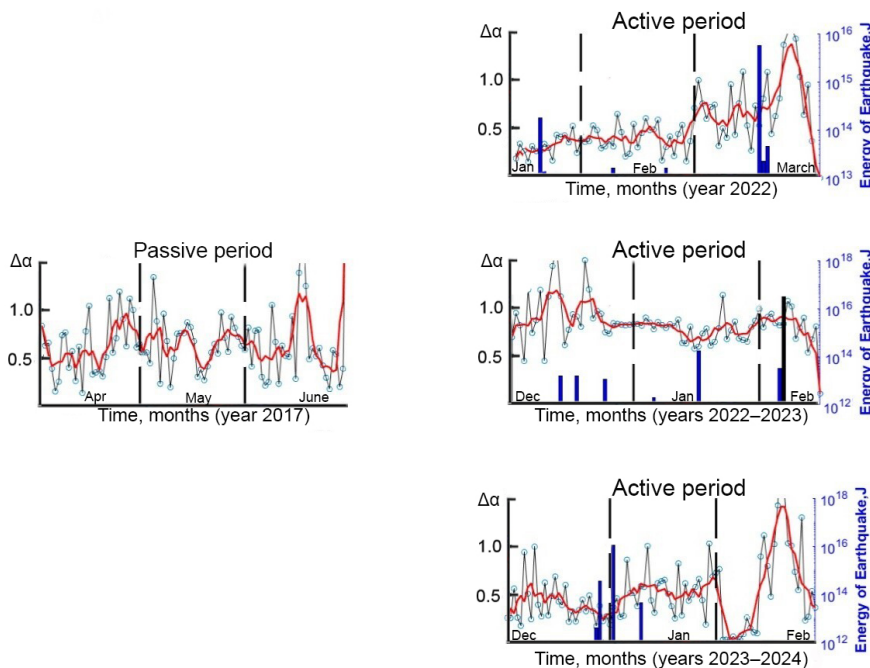


Рис. 5. Изменения ширины мультифрактального спектра $\Delta\alpha$, полученные по данным с III деформографа

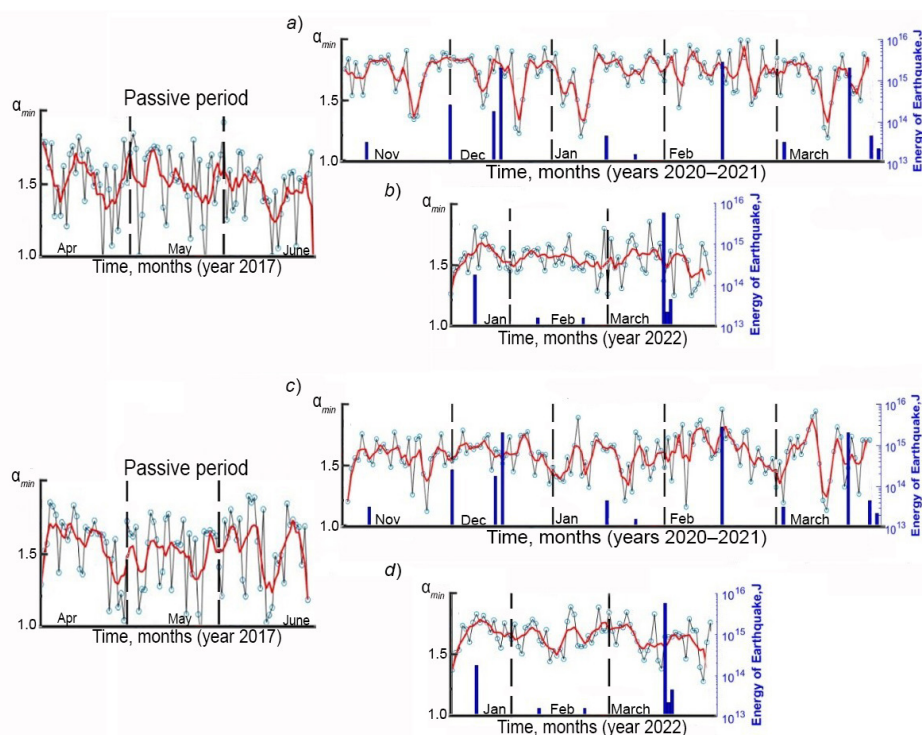


Рис. 6. Изменения α_{\min} по данным I (a, b) и II (c, d) деформографов в течение двух периодов: 01.10.2020 – 31.03.2021 и 15.01 – 16.03.2022

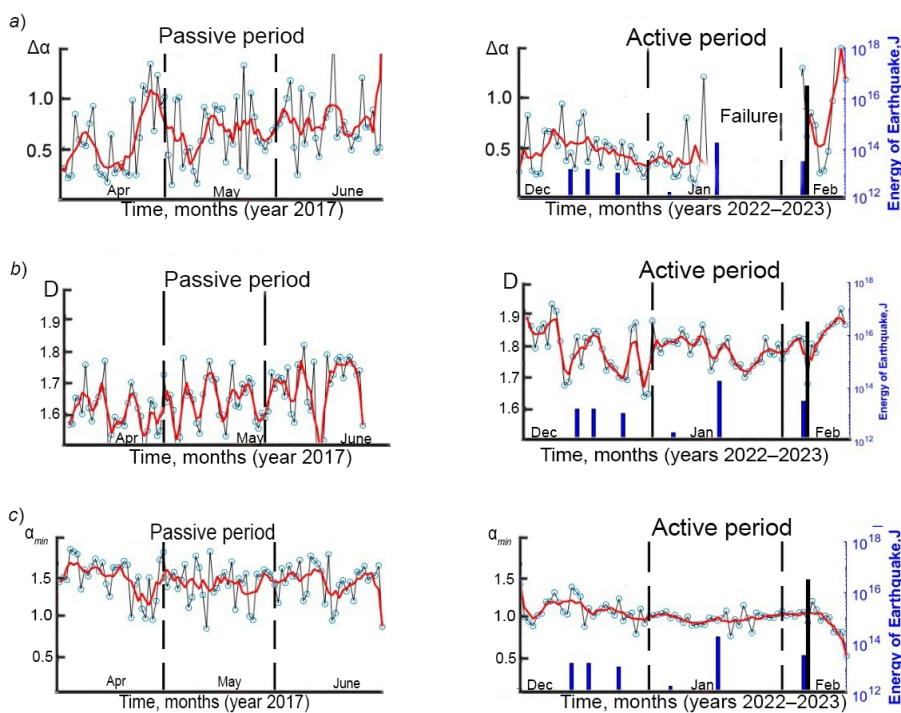


Рис. 7. Изменение параметров $\Delta\alpha$, α_{\min} и D с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. по данным с I (a), II (b) и III (c) деформографов

Функция $\alpha(q)$ вычислялась в диапазоне значений q от -5 до $+5$, с шагом $0,5$. Выбор этого диапазона позволил учесть как сильные, так и слабые флуктуации и выявить особенности мультифрактальной структуры временных рядов.

Временной период с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. характеризуется существенным изменением величин фрактальных характеристик, по сравнению со спокойным периодом и другими активными периодами. Данный факт сложно объяснить землетрясениями этого периода, которые отмечены в таблице. Предполагается, что на данные с деформографов повлияли другие сейсмические события (рис. 7).

Сейсмически активный период с 01.12.2023 по 29.02.2024 гг. интересен тем обстоятельством, что два землетрясения произошли на небольших расстояниях, близких от деформографов. Отметим, что данные, полученные во время этого периода по всем деформографам, демонстрируют одни и те же закономерности поведения.

В заключение остановимся подробнее на поведении фрактальной размерности D . В целом наблюдается тенденция к повышению фрактальной размерности D в те периоды времени, когда землетрясения «созревают». Однако точность определения величины D зависит от степени разброса точек на графиках логарифмического масштаба, которая не получила в данной работе явной оценки.

Для III деформографа (был установлен на скальном основании) изменения величины D выражены ярче: в активные периоды его значения лежат в диапазоне $1,0 < D < 1,7$, тогда как в спокойные периоды – в диапазоне $1,0 < D < 1,4$. Пики на кривых временной динамики величины D , расположенные до значения $D \approx 1,6$ и выше, могут служить индикаторами нелинейности и возможной готовности системы к качественному переходу. Значения D , близкие к единице, могут указывать на завершение текущего тренда, но такая интерпретация требует дополнительной проверки.

На рис. 8 представлена зависимость показателя D от месяца исследуемого периода в хронологическом порядке. Видно, что величина D демонстрирует разброс в пределах доверительного интервала. Представленные результаты подтверждают устойчивость изменений D в разные сейсмические периоды.

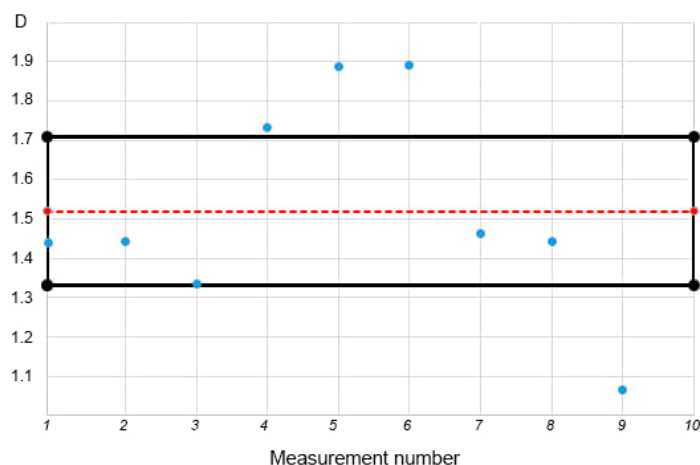


Рис. 8. Результат оценки доверительного интервала значений параметра D по среднемесячным данным III деформографа.

Черные горизонтальные линии обозначают границы 95%-го доверительного интервала для оценки D . Красная пунктирная линия соответствует номинальному (ожидаемому) значению $D = 1,51$

Заключение

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. III деформограф, расположенный на скальном основании, продемонстрировал более выраженные изменения фрактальных параметров, чем деформографы на песчаной поверхности, так как демпфирование снижает чувствительность к малым колебаниям.



2. Снижение значений показателей сингулярности $\Delta\alpha(q)$ и их разброса во время сейсмически активных периодов наблюдалось на всех деформографах. Этот результат может свидетельствовать о перестройке структуры земной коры, однако точность определения параметра $\Delta\alpha(q)$ также зависит от разброса исходных данных, который не был детально проанализирован в данной работе.

3. В периоды с 01.10.2020 по 31.03.2021 гг. и с 15.01 по 16.03.2022 г., когда произошли землетрясения в пос. Намиэ (Япония), все деформографы показали схожие изменения фрактальных характеристик. Эти изменения могут служить индикаторами подготовки сейсмических событий, однако их количественная интерпретация требует дальнейшего исследования.

4. За период с 01.12.2022 по 15.02.2023 гг. данные всех деформографов продемонстрировали аномальное поведение фрактальных характеристик, что позволяет предположить влияние землетрясения, произошедшего в то же время в Турции, или другого сейсмического события. Указанный период требует дальнейшего изучения для выявления возможных корреляций и уточнения природы выявленных аномалий.

Постоянная сейсмическая активность, не утихающая в ближней зоне размещения деформографов, затрудняет выделение полностью спокойных периодов, и может влиять на показания деформографов, а следовательно, и на интерпретацию результатов.

Представленные в настоящей работе выводы свидетельствуют о потенциальной прогностической значимости таких величин как фрактальная размерность D и ширина мультифрактального спектра $\Delta\alpha(q)$. Однако эти выводы носят предварительный характер и нуждаются в дополнительном подтверждении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bak P., Tang Ch., Wiesenfeld K. Self-organized criticality // *Physical Review A*. 1988. Vol. 38. No. 1. Pp. 364–374.
2. Higuchi T. Relationship between the fractal dimension and the power law index for a time series: A numerical investigation // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1990. Vol. 46. No. 2. Pp. 254–264.
3. Kantelhard J. W., Zschiegner S. A., Koscielny-Bunde E., Havlin S., Bunde A., Stanley H. E. Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2002. Vol. 316. No. 1–4. Pp. 87–114.
4. Долгих Г. И., Привалов В. Е. Лазерная физика. Фундаментальные и прикладные исследования. Владивосток: Изд. ООО «Рея», 2016. 352 с.
5. Любушин А. А. Анализ данных систем геофизического и экологического мониторинга. М.: Наука, 2007. 228 с.
6. Насонов А. Н., Цветков И. В., Жогин И. М., Кульнев В. В., Репина Е. М., Кириносков С. Л., Звягинцева А. В., Базарский О. В. Фракталы в науках о Земле. Воронеж: Типография ООО «Ковчег», 2018. 82 с.
7. Филатов Д. М., Любушин А. А. Оценка сейсмической опасности японских островов на основе фрактального анализа временных рядов GPS // *Физика Земли*, 2017. № 4. С. 55–66.
8. Liehr L., Massopust P. On the mathematical validity of the Higuchi method // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2020. Vol. 402. 15 January. P. 132265.
9. Mohamed H., Henares J., Peláez J., Damerджи Y. Fractal analysis of earthquake sequences in the Ibero-Maghrebian region // *Pure and Applied Geophysics*. 2019. Vol. 176. No. 4. Pp. 1397–1416.

REFERENCES

1. Bak P., Tang Ch., Wiesenfeld K., Self-organized criticality, *Phys. Rev. A*. 38 (1) (1988) 364–374.
2. Higuchi T., Relationship between the fractal dimension and the power law index for a time series: A numerical investigation, *Physica D*. 46 (2) (1990) 254–264.
3. Kantelhard J. W., Zschiegner S. A., Koscielny-Bunde E., et al., Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series, *Physica A*. 316 (1–4) (2002) 87–114.
4. Dolgikh G. I., Privalov V. E., *Lazernaya fizika. Fundamentalnye i prikladnye issledovaniya* [Laser physics. Basic and applied research], Reya Publishing, Vladivostok, 2016 (in Russian).

5. **Lyubushin A. A.**, Analiz dannykh sistem geofizicheskogo i ehkologicheskogo monitoringa [Analysis of data from geophysical and environmental monitoring systems], Nauka Publishing, Moscow, 2007 (in Russian).
6. **Nasonov A. N., Tsvetkov I. V., Zhogin I. M., et al.**, Fraktaly v naukakh o Zemle [Fractals in the Earth's sciences], "Kovcheg" Publishing, Voronezh, 2018 (in Russian).
7. **Filatov D. M., Lyubushin A. A.**, Assessment of seismic hazard of the Japanese islands based on fractal analysis of GPS time series, *Izv. Phys. Solid Earth*. 53 (4) (2017) 545–555.
8. **Liehr L., Massopust P.**, On the mathematical validity of the Higuchi method, *Phys. D*. 402 (15 Jan) (2020) 132265.
9. **Mohamed H., Henares J., Peláez J., Damerdji Y.**, Fractal analysis of earthquake sequences in the Ibero-Maghrebian region, *Pure Appl. Geophys.* 176 (4) (2019) 1397–1416.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛИСОВИЦКИЙ Артем Сергеевич – аспирант лаборатории физики геосфер Тихоокеанского океанологического института имени В. И. Ильичёва Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия.

690041, Россия, г. Владивосток, Балтийская ул., 43
lisovitckii.as@poi.dvo.ru
ORCID: 0009-0006-5255-5894

ЧУПИН Владимир Александрович – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией физики геосфер Тихоокеанского океанологического института им. В. И. Ильичёва Дальневосточного отделения РАН, г. Владивосток, Россия.

690041, Россия, г. Владивосток, Балтийская ул., 43
chupin@poi.dvo.ru
ORCID: 0000-0001-5103-8138

МОСКОВЧЕНКО Лариса Григорьевна – кандидат физико-математических наук, доцент департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий Дальневосточного федерального университета, г. Владивосток, Россия.

690950, Россия, г. Владивосток, ул. Суханова, 8
moskovchenko.lg@dvfu.ru
ORCID: 0000-0003-2621-0594

THE AUTHORS

LISOVITSKY Artem S.

V. I. Il'ichev Pacific Oceanological Institute
43 Baltiyskaya St., Vladivostok, 690041, Russia
lisovitckii.as@poi.dvo.ru
ORCID: 0009-0006-5255-5894

CHUPIN Vladimir A.

V. I. Il'ichev Pacific Oceanological Institute
43 Baltiyskaya St., Vladivostok, 690041, Russia
chupin@poi.dvo.ru
ORCID: 0000-0001-5103-8138

MOSKOVCHENKO Larisa G.

Far Eastern Federal University

8 Suhanov St., Vladivostok, 690950, Russia

moskovchenko.lg@dvfu.ru

ORCID: 0000-0003-2621-0594

*Статья поступила в редакцию 28.03.2025. Одобрена после рецензирования 19.05.2025.
Принята 26.05.2025.*

Received 28.03.2025. Approved after reviewing 19.05.2025. Accepted 26.05.2025.

Физическая электроника

Научная статья

УДК 535.34

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18408>

ВЛИЯНИЕ РАЗОГРЕВА И ДРЕЙФА ЭЛЕКТРОНОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ НА ПОГЛОЩЕНИЕ И ПРЕЛОМЛЕНИЕ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ЭЛЕКТРОННОМ АНТИМОНИДЕ ИНДИЯ

Д. А. Караулов, М. Я. Винниченко [✉], В. А. Шалыгин, Д. А. Фирсов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

[✉] mvin@spbstu.ru

Аннотация. На основе решения уравнения Френеля и кинетического уравнения Больцмана проведен расчет спектров показателя преломления и коэффициента поглощения терагерцового излучения ($\lambda = 70 - 500 \mu\text{m}$) в электронном антимолиде индия ($n\text{-InSb}$) в электрическом поле напряженностью до 200 В/см. В качестве неравновесной стационарной функции распределения электронов по состояниям использовалось распределение Ферми – Дирака, смещенное в пространстве скоростей. Показано, что изменение оптических характеристик в электрическом поле связано с разогревом и дрейфом свободных электронов. Анизотропия функции распределения электронов по состояниям в импульсном пространстве, возникающая в электрическом поле, приводит к анизотропии преломления и поглощения; изменения показателя преломления и коэффициента поглощения различны для излучения, поляризованного параллельно направлению поля и перпендикулярно ему. Выраженность этого эффекта позволяет его использовать для малоинерционной модуляции излучения терагерцового диапазона спектра.

Ключевые слова: анизотропия функции распределения, разогрев электронов, дрейф электронов, поляризация излучения, InSb

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00036), <https://rscf.ru/project/23-12-00036/>.

Для цитирования: Караулов Д. А., Винниченко М. Я., Шалыгин В. А., Фирсов Д. А. Влияние разогрева и дрейфа электронов в электрическом поле на поглощение и преломление терагерцового излучения в электронном антимолиде индия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 114–126. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18408>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18408>

THE EFFECT OF HEATING AND DRIFT OF ELECTRONS IN AN ELECTRIC FIELD ON THE ABSORPTION AND REFRACTION OF TERAHERTZ RADIATION IN ELECTRONIC INDIUM ANTIMONIDE

D. A. Karaulov, M. Ya. Vinnichenko [✉], V. A. Shalygin, D. A. Firsov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

[✉] mvin@spbstu.ru

Abstract. The calculation of the refractive index and absorption coefficient spectra has been performed for terahertz radiation ($\lambda = 70 - 500 \mu\text{m}$) in electronic indium



antimonide (*n*-InSb) placed in an electric field of up to 200 V/cm. It was done on the basis of solving the Fresnel equation and the Boltzmann kinetic one. The Fermi – Dirac distribution shifted in velocity space was used as a nonequilibrium stationary electron distribution function over states. Changes in optical characteristics obtained in an electric field were shown to be due to the heating and drift of free electrons. The anisotropy of the electron distribution function over states in momentum space, arising in an electric field, leads to anisotropy of refraction and absorption; changes in the refractive index and absorption coefficient are different for radiation polarized parallel and perpendicular to the field. This effect can be used for high-speed modulation of terahertz radiation because it is clearly pronounced.

Keywords: distribution function anisotropy, electron heating, electron drift, radiation absorption, radiation refraction, polarization of radiation, InSb

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-12-00036), <https://rscf.ru/project/23-12-00036/>.

For citation: Karaulov D. A., Vinnichenko M. Ya., Shalygin V. A., Firsov D. A., The effect of heating and drift of electrons in an electric field on the absorption and refraction of terahertz radiation in electronic indium antimonide, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 114–126. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18408>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Электрическое поле способно существенно влиять на оптические характеристики полупроводников и полупроводниковых наноструктур. Основное количество публикаций по электрооптическим исследованиям посвящено влиянию электрического поля на явления, обусловленные связанными электронами. Хорошо известны фазовые электрооптические модуляторы на основе эффекта Поккельса в таких кристаллах без центра инверсии, как арсенид галлия GaAs, теллуриды кадмия и цинка (CdTe, ZnTe), а также на основе эффекта Керра, который может наблюдаться также в centrosymmetric materials, например, в жидкостях и перовскитах [1]. Эти эффекты приводят к изменению показателя преломления полупроводника, связанного с кристаллической решеткой. Возможно также изменение коэффициента поглощения и амплитудная модуляция излучения в электрическом поле на основе эффекта Франца – Келдыша в объемных полупроводниках [2] и квантоворазмерного эффекта Штарка в структурах с пониженной размерностью [3, 4].

В отдельную группу электрооптических эффектов следует выделить явления, связанные с разогревом и дрейфом свободных носителей заряда в электрическом поле. Для отклонения системы свободных электронов от состояния равновесия требуются существенно меньшие электрические поля, чем для электронов, связанных с ионным остовом. Изотропное изменение функции распределения электронов по состояниям в импульсном пространстве в электрическом поле (разогрев электронов) приводит к модуляции показателя преломления и коэффициента поглощения на свободных электронах, не зависящей от поляризации излучения.

Анизотропия функции распределения, связанная с дрейфом электронов в электрическом поле, приводит к анизотропии оптических параметров, а именно – модуляции показателя преломления и коэффициента поглощения различаются для света, поляризованного вдоль и поперек приложенного поля. Влияние эффектов разогрева и дрейфа свободных электронов в электрическом поле особенно существенно в полупроводниках с высокой подвижностью электронов, классическим примером которых служит электронный антимонид индия *n*-InSb.

В работе [5] была экспериментально определена зависимость показателя преломления *n*-InSb от электрического поля для излучения с линейной поляризацией вдоль поля и перпендикулярно полю. Эксперименты проводились на длине волны излучения CO₂-лазера ($\lambda = 10,6$ мкм), где поглощение на свободных электронах пренебрежимо мало. Авторы обнаружили анизотропию показателя преломления, индуцированную разогревом и

дрейфом электронов. Интерпретация полученных результатов была проведена с помощью теоретической модели, использующей для неравновесной функции распределения электронов приближение смещенного распределения Максвелла – Больцмана.

В последние годы стремительно развиваются оптоэлектроника и фотоника терагерцового спектрального диапазона. В связи с этим возбуждается интерес к исследованию анизотропии комплексной диэлектрической проницаемости антимонида индия, обусловленной дрейфом горячих электронов, в терагерцовой области спектра. Для этого спектрального диапазона существенным является поглощение излучения ансамблем неравновесных электронов, и можно ожидать, что в дополнение к анизотропии показателя преломления, индуцированной разогревом электронов, появится новый эффект – анизотропия коэффициента поглощения.

Антимонид индия выбран в качестве модельного материала, поскольку для этого полупроводника достаточно надежно определена зонная структура и подробно исследованы оптические свойства, что позволяет проводить достоверное теоретическое моделирование, дающее возможность количественного сопоставления его результатов с экспериментальными данными.

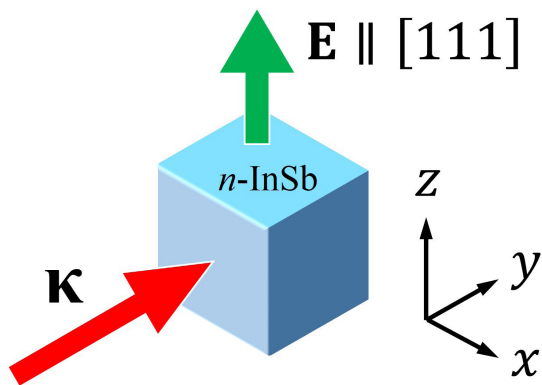
В настоящей работе приводятся результаты теоретического расчета анизотропного показателя преломления и анизотропного коэффициента поглощения излучения терагерцового спектрального диапазона (длины волн 70 – 500 мкм) в электронном антимониде индия в электрическом поле; расчет выполнен с помощью кинетического уравнения Больцмана.

В результате получены количественные характеристики эффектов анизотропии показателя преломления и коэффициента поглощения излучения, возникающих в электрическом поле. Для моделирования использована неравновесная функция распределения электронов в приближении смещенного распределения Ферми – Дирака, которое более корректно для высоких уровней легирования, чем распределение Максвелла – Больцмана, взятое в работе [5].

Расчет показателя преломления и коэффициента экстинкции

Рассмотрим взаимодействие электромагнитного излучения, характеризуемого волновым вектором \mathbf{k} , с кристаллом электронного антимонида индия n -InSb в условиях приложения электрического поля E , в соответствии со схемой, приведенной на рис. 1. Направим электрическое поле вдоль кристаллографического направления с высокой симметрией, например [111], и введем систему декартовых координат.

Для описания оптических свойств образца введем тензор диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}$, включающий вклад связанных электронов и решетки $\hat{\epsilon}_L$ и вклад свободных электронов, выраженный через тензор высокочастотной проводимости $\hat{\sigma}$:



$$\hat{\epsilon}(\omega) = \hat{\epsilon}_L + \frac{4\pi i}{\omega} \hat{\sigma}, \quad (1)$$

где ω – частота электромагнитного излучения.

Отметим, что относительно невысокое значение напряженности электрического поля, рассматриваемое в настоящей работе ($E \approx 100 - 200$ В/см), не влияет на оптические характеристики InSb, определяемые связанными электронами, и в области энергий фотонов $\hbar\omega < \epsilon_g$ тензор $\hat{\epsilon}_L$ сводится к скаляру [6]:

$$\epsilon_L = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_{TO}}\right)^2 - i \frac{\omega\gamma_{TO}}{\omega_{TO}^2}}, \quad (2)$$

Рис. 1. Схема распространения излучения с волновым вектором \mathbf{k} в образце антимонида индия n -InSb, помещенном во внешнее электрическое поле E



где ε_g – ширина запрещенной зоны InSb; $\varepsilon_0, \varepsilon_\infty$ – статическая и высокочастотная величины диэлектрической проницаемости; ω_{TO} – частота длинноволнового поперечного оптического фонона; γ_{TO} – константа затухания, связанная с временем жизни ТО-фонона τ_{TO} соотношением $\gamma_{\text{TO}} = 1/\tau_{\text{TO}}$.

Тензор высокочастотной проводимости связывает электрическое поле световой волны \mathbf{E}_ω и индуцированный ею электрический ток свободных электронов \mathbf{J}_ω :

$$J_{\omega i} = \sigma_{ij} E_{\omega j}, \quad i, j = x, y, z. \quad (3)$$

Внешнее постоянное электрическое поле E превращает антимонид индия в одноосный кристалл с оптической осью, направленной вдоль поля (в нашем случае вдоль оси z). Следовательно, тензор $\hat{\sigma}$ можно привести к диагональному виду:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \neq \sigma_{zz}$.

Это справедливо для случая отсутствия внешнего магнитного поля [7].

Преобразование уравнений Максвелла с учетом равенств (1) – (3) приводит к волновому уравнению:

$$\nabla^2 \mathbf{E}_\omega = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(4\pi \hat{\sigma} \mathbf{E}_\omega + \varepsilon_L \frac{\partial \mathbf{E}_\omega}{\partial t} \right). \quad (5)$$

Решение этого уравнения ищется в виде плоской волны:

$$\mathbf{E}_\omega(r, t) = (E_\omega \mathbf{e}_\omega) \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)], \quad (6)$$

где \mathbf{e}_ω – единичный вектор поляризации.

Волновой вектор \mathbf{k} является в общем виде комплексным, в связи с чем удобно ввести комплексный показатель преломления \tilde{n} :

$$\mathbf{k} = (\omega/c) \tilde{n} \mathbf{s}, \quad (7)$$

где \mathbf{s} – единичный вектор в направлении распространения волны, а

$$\tilde{n} = n + ik_e. \quad (8)$$

Вещественная часть комплексного показателя преломления n отвечает за фазовую скорость волны c/n , а мнимая часть k_e (коэффициент экстинкции) входит в выражение для коэффициента поглощения α :

$$\alpha = 2\omega \cdot k_e / c. \quad (9)$$

Подстановка выражения (6) в волновое уравнение (5) приводит к следующей системе уравнений:

$$\sum_j \left(\tilde{n}^2 \delta_{ij} - \tilde{n}^2 s_i s_j - i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{ij} - \varepsilon_L \delta_{ij} \right) E_{\omega j}, \quad i, j = x, y, z. \quad (10)$$

Эта однородная система уравнений имеет нетривиальное решение $(E_{\omega x}, E_{\omega y}, E_{\omega z})$ только при условии равенства нулю ее определителя:

$$\det \left(\tilde{n}^2 \delta_{ij} - \tilde{n}^2 s_i s_j - i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{ij} - \varepsilon_L \delta_{ij} \right) = 0. \quad (11)$$

Уравнение (11) относительно \tilde{n}^2 называется уравнением Френеля. Для используемой конфигурации эксперимента (см. рис. 1) уравнение Френеля имеет вид

$$\begin{vmatrix} \tilde{n}^2 - i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{xx} - \varepsilon_L & 0 & 0 \\ 0 & -i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{yy} - \varepsilon_L & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{n}^2 - i \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{zz} - \varepsilon_L \end{vmatrix} = 0. \quad (12)$$

Уравнение (12) имеет два несовпадающих решения для \tilde{n}^2 . Легко показать, что они соответствуют решениям системы (10), имеющим два направления поляризации волны: параллельное и перпендикулярное приложенному электрическому полю, причем их можно выразить через компоненты тензора диэлектрической проницаемости:

$$\mathbf{e}_\omega \parallel OZ \parallel \mathbf{E}: \quad \tilde{n}_\parallel^2 = (n_\parallel + ik_{e\parallel})^2 = \varepsilon_L + \frac{4\pi i \sigma_{zz}}{\omega} = \varepsilon_{zz} \quad (13)$$

$$\mathbf{e}_\omega \perp OZ: \quad \tilde{n}_\perp^2 = (n_\perp + ik_{e\perp})^2 = \varepsilon_L + \frac{4\pi i \sigma_{xx}}{\omega} = \varepsilon_{xx} \quad (14)$$

Согласно терминологии, принятой для анизотропных сред, волна с поляризацией $\mathbf{e}_\omega \perp \mathbf{E}$ является обыкновенной, а волна с поляризацией $\mathbf{e}_\omega \parallel \mathbf{E}$ – необыкновенной.

Выделив в соотношениях (13) и (14) вещественную и мнимую части, получаем системы уравнений для показателя преломления и коэффициента экстинкции волн двух направлений поляризации:

$$\begin{cases} n_\parallel^2 - k_{e\parallel}^2 = \text{Re } \varepsilon_{zz}, \\ 2n_\parallel k_{e\parallel} = \text{Im } \varepsilon_{zz}; \end{cases} \quad (15)$$

$$\begin{cases} n_\perp^2 - k_{e\perp}^2 = \text{Re } \varepsilon_{xx}, \\ 2n_\perp k_{e\perp} = \text{Im } \varepsilon_{xx}. \end{cases} \quad (16)$$

Решения этих систем уравнений имеют следующий вид:

$$\begin{cases} n_\parallel = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(\text{Im } \varepsilon_{zz})^2 + (\text{Re } \varepsilon_{zz})^2} + \text{Re } \varepsilon_{zz}}, \\ k_{e\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(\text{Im } \varepsilon_{zz})^2 + (\text{Re } \varepsilon_{zz})^2} - \text{Re } \varepsilon_{zz}}; \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} n_\perp = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(\text{Im } \varepsilon_{xx})^2 + (\text{Re } \varepsilon_{xx})^2} + \text{Re } \varepsilon_{xx}}, \\ k_{e\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\sqrt{(\text{Im } \varepsilon_{xx})^2 + (\text{Re } \varepsilon_{xx})^2} - \text{Re } \varepsilon_{xx}}. \end{cases} \quad (18)$$

Если выполняется условие $\sigma_{zz} \neq \sigma_{xx}$, то возникает анизотропия оптических параметров: $n_\parallel \neq n_\perp$, $k_{e\parallel} \neq k_{e\perp}$.

Микроскопический расчет оптических характеристик в электрическом поле

Для того чтобы выяснить, как электрическое поле влияет на поглощение и преломление излучения в антимониде индия, следует найти компоненты тензора высокочастотной проводимости σ_{zz} и σ_{xx} (см. формулы (13) и (14)). Распространенным подходом к определению оптических свойств кристалла, связанных со свободными электронами, является использование модели Друде [8]. Однако в этой модели трудно учесть анизотропное распределение электронов по состояниям в импульсном пространстве в электрическом поле и непараболический закон дисперсии, что необходимо для описания разогрева и дрейфа



свободных носителей заряда, индуцированных постоянным электрическим полем, которые актуальны для рассматриваемой задачи.

В настоящей работе для определения компонент тензора высокочастотной проводимости используется решение кинетического уравнения Больцмана для электронов, помещенных в постоянное электрическое поле \mathbf{E} , вызывающее разогрев и дрейф электронов, и в высокочастотное электрическое поле волны электромагнитного излучения $\mathbf{E}_\omega \exp(i\omega t)$. В приближении времени релаксации уравнение для функции распределения электронов по состояниям $f(\mathbf{k}, t)$ имеет вид [9]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{E}_\omega e^{i\omega t}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \frac{f - f_0}{\tau}, \quad (19)$$

где τ – время релаксации импульса (для упрощения полагаем его не зависящим от волнового вектора электрона \mathbf{k}), $f_0(\mathbf{k})$ – равновесная функция распределения Ферми – Дирака.

Решение уравнения (19) ищется в виде суммы стационарного (неравновесного!) члена и высокочастотной добавки:

$$f(\mathbf{k}, t) = f_s(\mathbf{k}) + f_\omega(\mathbf{k}) e^{i\omega t}. \quad (20)$$

Если принять, что межэлектронное взаимодействие является достаточно сильным, то допустимо представить стационарную функцию распределения электронов по состояниям в постоянном электрическом поле в виде распределения Ферми – Дирака $f_s(\mathbf{k})$, сдвинутого в пространстве скоростей [10]. Параметрами этой функции являются электронная температура T_e , не равная температуре решетки T_0 , и дрейфовая скорость \mathbf{v}_{dr} :

$$f_s(\mathbf{k}) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \hbar \mathbf{k} \mathbf{v}_{dr} - \varepsilon_F}{k_B T_e}\right] + 1}. \quad (21)$$

Здесь $\varepsilon(\mathbf{k})$ – закон дисперсии энергии электронов, ε_F – энергия Ферми, k_B – постоянная Больцмана.

Будем использовать изотропный кейновский закон дисперсии [11], который является хорошим приближением для антимонида индия:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_g}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_e^0 \varepsilon_g}} - 1 \right], \quad (22)$$

где m_e^0 – эффективная масса электронов на дне зоны проводимости.

Если подставить выражение (20) в уравнение (19), то можно найти член $f_\omega(\mathbf{k})$, определяющий нестационарную часть функции распределения:

$$f_\omega(\mathbf{k}) = \frac{ie\mathbf{E}_\omega}{\hbar\left(\omega + \frac{i}{\tau}\right)} \frac{\partial f_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (23)$$

Электрический ток свободных электронов \mathbf{J}_ω , индуцированный излучением, связан с высокочастотной частью функции распределения следующим образом:

$$\mathbf{J}_\omega = -e \int \mathbf{v} f_\omega(\mathbf{k}) \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = e \int \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{d\mathbf{k}} f_\omega(\mathbf{k}) \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (24)$$

где скорость электрона $\mathbf{v} = (1/\hbar)(d\varepsilon/d\mathbf{k})$.

Подставив выражение (23) в формулу (24), выполнив интегрирование по частям и сравнив результат с равенством (3), найдем компоненты тензора высокочастотной проводимости:

$$\sigma_{ii} = \frac{ie^2}{\left(\omega + \frac{i}{\tau}\right)} \int \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk_i^2} f_s(\mathbf{k}) \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (25)$$

$$\sigma_{ij} = 0, \text{ если } i \neq j, i, j = x, y, z. \quad (26)$$

Полученные выражения для σ_{zz} и σ_{xx} можно использовать для расчета поведения показателя преломления n , коэффициента экстинкции k и коэффициента поглощения α в электрическом поле для двух направлений поляризации излучения в соответствии с выражениями (13) – (18) и (9).

Результаты моделирования и их обсуждение

Для моделирования анизотропии показателя преломления, индуцированной электрическим полем, и коэффициента поглощения излучения был выбран антимонид индия n -типа с концентрацией электронов $N_e = 5,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и слабополевой подвижностью $\mu = 1,5 \cdot 10^5 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ (при температуре решетки $T_0 = 78 \text{ К}$). Для образцов из такого материала имеются экспериментальные данные по зависимостям электронной температуры и дрейфовой скорости от электрического поля [5, 9], что облегчило процедуру моделирования.

В расчетах были использованы известные параметры зонного спектра антимонида индия InSb: $m_e^0 = 0,014m_0$, $\epsilon_c(78 \text{ К}) = 0,234 \text{ эВ}$ [12] и дисперсии диэлектрической проницаемости фононов: $\epsilon_0 = 17,88$, $\epsilon_\infty = 15,68$, $\hbar\omega_{\text{ТО}} = 22,69 \text{ мэВ}$, $\tau_{\text{ТО}} = 4,1 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ [13].

Расчеты изменений показателя преломления и коэффициента поглощения излучения антимонида индия, индуцированных электрическим полем, были выполнены для температуры решетки $T_0 = 78 \text{ К}$. Для проведения вычислений необходима информация о параметрах неравновесной функции распределения в электрическом поле: ее температурной зависимости, дрейфовой скорости и положения уровня Ферми электронов, входящих в выражение (21) для функции распределения $f_s(\mathbf{k})$, а также от приложенного электрического поля. Для нахождения электронной температуры $T_e(E)$ были использованы экспериментальные результаты из статьи [5]. В этой работе были исследованы зависимости изменения показателя преломления n -InSb от величины приложенного электрического поля для длины волны излучения 10,6 мкм. Из сравнения полученных экспериментальных данных с результатами расчетов была определена зависимость разогрева электронного газа $\Delta T_e = T_e - T_0$ от электрического поля для температуры решетки, близкой к температуре кипения жидкого азота 77 К. Зависимость $\Delta T_e(E)$, полученная в результате сглаживания кривых, состоящих из экспериментальных точек, приведена на рис. 2.

Согласно результатам работы [9], для рассматриваемого материала полевая зависимость дрейфовой скорости близка к линейной в области электрических полей менее 200 В/см и может быть рассчитана как $v_{dr} \approx \mu E$, где μ – слабополевая подвижность.

Положение уровня Ферми меняется с электрическим полем. Значение ϵ_F для заданного электрического поля определялось путем нормировки стационарной функции распределения $f_s(\mathbf{k})$ на концентрацию электронов N_e , которая в области допробойных полей остается неизменной. Рассчитанная зависимость $\epsilon_F(E)$ приведена вставке рис. 2.

Удобным источником излучения для исследования влияния электрического поля на оптические характеристики материалов в терагерцовом спектральном диапазоне служат газовые лазеры непрерывного действия с оптической накачкой излучением другого лазера – на углекислом газе CO_2 , например, лазер FIRL-100 фирмы “Edinburgh Instruments” (Великобритания) [14]. Одна из наиболее интенсивных линий излучения этого

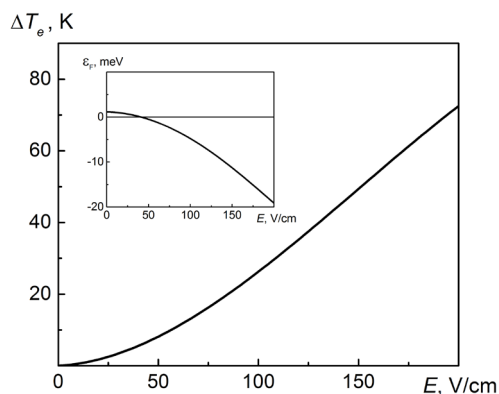


Рис. 2. Зависимость уровня разогрева электронного газа в n -InSb от напряженности приложенного электрического поля. Температура решетки $T_0 = 78 \text{ К}$, концентрация электронов $N_e = 5,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

На вставке: полевая зависимость положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости

лазера – линия с длиной волны $\lambda = 118,8$ мкм. В связи с этим были выполнены расчеты показателя преломления и коэффициента поглощения антимонида индия в электрическом поле для излучения с этой длиной волны.

Постоянное электрическое поле, направленное вдоль оси z , определяет цилиндрическую симметрию задачи, в связи с этим интегрирование в формуле (25) удобно проводить в цилиндрической системе координат (k_ρ, k_z, φ) . Связь декартовых координат с цилиндрическими выглядит следующим образом:

$$k_x = k_\rho \cos \varphi, k_y = k_\rho \sin \varphi, k_z = k_z. \quad (27)$$

Обратные соотношения:

$$k_\rho = \sqrt{k_y^2 + k_x^2}, \varphi = \arctg\left(\frac{k_y}{k_x}\right). \quad (28)$$

В цилиндрических координатах закон дисперсии (22) и неравновесная функция распределения (21) и запишутся следующим образом:

$$\varepsilon(k_\rho, k_z) = \frac{\varepsilon_g}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{2h^2(k_\rho^2 + k_z^2)}{m_e^0 \varepsilon_g}} - 1 \right], \quad (29)$$

$$f_s(k_\rho, k_z) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon(k_\rho, k_z) - \hbar k_z v_{dr} - \varepsilon_F}{k_B T_e}\right] + 1}. \quad (30)$$

В результате интегралы, определяющие компоненты тензора высокочастотной проводимости (25), имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_z^2} f_s(k_\rho, k_z) \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} &= \int \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_z^2} f_s(k_\rho, k_z) \frac{2k_\rho dk_\rho d\varphi dk_z}{(2\pi)^3} = \\ &= 2\pi \int \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_z^2} f_s(k_\rho, k_z) \frac{2k_\rho dk_\rho dk_z}{(2\pi)^3}; \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_x^2} f_s(k_\rho, k_z) \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} &= \\ = \int \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_\rho^2} \cos^2 \varphi + \frac{1}{k_\rho} \frac{\partial \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_\rho} \sin^2 \varphi \right) f_s(k_\rho, k_z) \frac{2k_\rho dk_\rho d\varphi dk_z}{(2\pi)^3} &= \\ = \pi \int \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_\rho^2} + \frac{1}{k_\rho} \frac{\partial \varepsilon(k_\rho, k_z)}{\partial k_\rho} \right) f_s(k_\rho, k_z) \frac{2k_\rho dk_\rho dk_z}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (32)$$

Интегралы (31) и (32) рассчитывались численно с использованием квадратурных формул Ньютона – Котса.

Результаты расчетов для обыкновенной ($\mathbf{e}_\omega \perp \mathbf{E}$) и необыкновенной ($\mathbf{e}_\omega \parallel \mathbf{E}$) волн представлены на рис. 3 и 4.

Физическую природу влияния электрического поля на оптические характеристики, связанные со свободными электронами, можно качественно пояснить следующим образом. Для непараболического закона дисперсии целесообразно ввести эффективную массу, зависящую от энергии электрона, следующим образом:

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i^2} = \frac{1}{m_e(\varepsilon)}, \quad i = x, y, z. \quad (33)$$

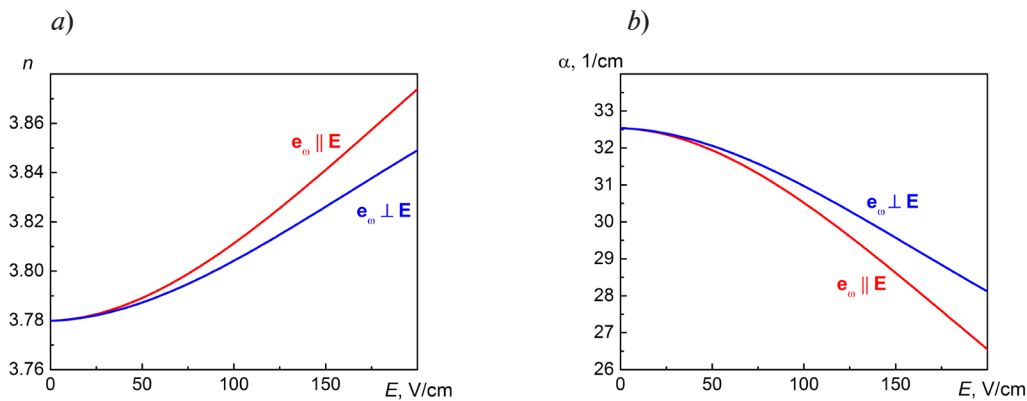


Рис. 3. Полевые зависимости показателя преломления (а) и коэффициента поглощения (b) для излучения двух взаимно ортогональных линейных поляризаций. Длина волны излучения $\lambda = 118,8$ мкм

С ростом энергии электрона эта эффективная масса увеличивается. Таким образом, интеграл в выражении (25) для компонент тензора $\hat{\sigma}$ представляет собой обратную эффективную массу, усредненную по всему ансамблю электронов с учетом неравновесной функции распределения по состояниям $f_s(\mathbf{k})$. Разогрев электронов в поле повышает среднюю энергию электронов, что приводит к увеличению средней эффективной массы и к изотропному снижению значений компонент тензора $\hat{\sigma}$. В результате преломление и поглощение излучения, связанные со свободными электронами, ослабляются. Поскольку вклад свободных электронов в показатель преломления отрицателен, полный показатель преломления возрастает по мере увеличения поля (см. рис. 3, а).

Анизотропия неравновесной функции распределения $f_s(\mathbf{k})$ в импульсном пространстве, возникающая вследствие дрейфа и разогрева электронов, приводит к двум различным значениям средней обратной эффективной массы:

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_z^2} \text{ и } \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_x^2}.$$

Это проявляется в различии показателя преломления и коэффициента поглощения для двух ортогональных поляризаций излучения (см. рис. 3, а и b).

Более полное представление о влиянии электрического поля на оптические характеристики кристалла n -InSb можно получить, если проанализировать спектры показателя преломления и коэффициента поглощения, а также степени их анизотропии в электрическом поле. Рассчитанные спектральные зависимости приведены на рис. 4.

Интересной особенностью спектра анизотропии показателя преломления ($n_{\parallel} - n_{\perp}$), индуцированной электрическим полем, является резкий максимум в области длин волн 250 – 270 мкм. Здесь же наблюдается отрицательный пик на спектральной зависимости анизотропии коэффициента поглощения ($\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$). Очевидно, эти пики связаны с низкочастотной модой плазмон-фононного резонанса, который характерен для полярных полупроводников [6]. В отсутствие внешнего электрического поля плазменная частота ω_p определяется соотношением

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 N_e}{\varepsilon_{\infty}} \left\langle \frac{1}{m_e} \right\rangle, \quad (34)$$

где угловые скобки выражают усреднение обратной эффективной массы по равновесной функции распределения Ферми – Дирака.

Если $\omega_p \ll \omega_{\text{ТО}}$ (что справедливо для рассматриваемого уровня легирования), то спектральное положение низкочастотной плазмон-фононной моды ω_- можно рассчитать по формуле [15]:

$$\omega_- \approx \omega_p \frac{\varepsilon_{\infty}}{\varepsilon_0}. \quad (35)$$

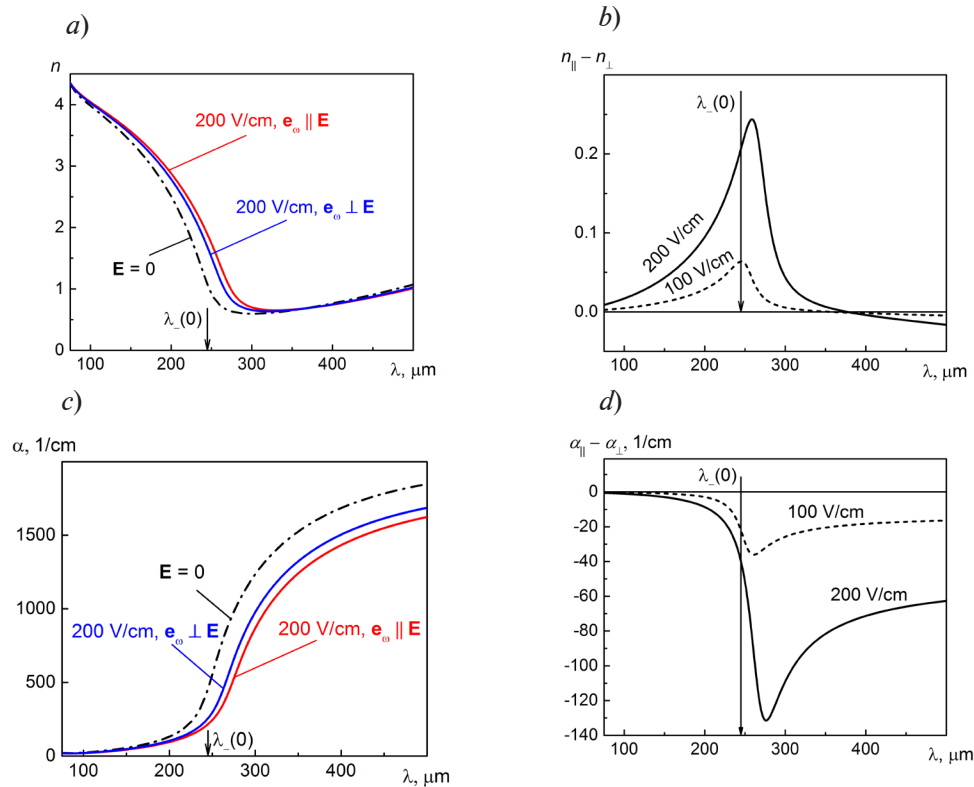


Рис. 4. Спектральные зависимости оптических параметров в равновесии ($E = 0$ В/см) и в электрических полях: a, b – спектры показателя преломления и величины его анизотропии, соответственно; c, d – спектры коэффициента поглощения и величины его анизотропии.

Вертикальные стрелки на рис. 4, b, d указывают длину волны низкочастотной плазмон-фононной моды при $E = 0$ В/см

При включении внешнего электрического поля величина $\langle 1/m_e \rangle$ увеличивается, а частоты ω_p и ω_- уменьшаются, что сопровождается длинноволновыми сдвигами спектральных кривых показателя преломления и коэффициента поглощения, причем эти сдвиги различаются для излучения, поляризованного параллельно и перпендикулярно полю (см. рис. 4, a и c). В отсутствие электрического поля спектральное положение низкочастотной плазмон-фононной моды на шкале длин волн ($\lambda_- = 2\pi c/\omega_-$) обозначено на этих рисунках как $\lambda_-(0)$. Заметим, что при заданном поле пики на спектрах анизотропии ($n_{\parallel} - n_{\perp}$) и ($\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$) наблюдаются в области нормальной дисперсии, при длинах волн, где крутизна спектральных кривых n_{\parallel} и α_{\parallel} достигает максимума.

Анализ спектров коэффициента поглощения показывает, что квадратичная зависимость коэффициента поглощения от длины волны излучения, характерная для модели Друде, наблюдается на длинах волн менее λ_- , однако только в узком спектральном интервале (100 – 200 мкм). Для более коротких волн этот закон нарушается ввиду заметного вклада в поглощение «хвоста» однофононного резонанса (см. формулы (1) и (2)).

На рис. 3 были представлены результаты расчета полевых зависимостей показателя преломления и коэффициента поглощения n -InSb на длине волны 118,8 мкм для двух ортогональных поляризаций излучения. Анализ рис. 4 позволяет заключить, что целесообразнее проводить эксперимент на длинах волн 250 – 270 мкм, где эффект выражен гораздо ярче (с точки зрения поведения анизотропии показателя преломления и коэффициента поглощения).

Заключение

Выполнен модельный расчет показателя преломления и коэффициента поглощения излучения терагерцового спектрального диапазона ($\lambda = 70 - 500$ мкм) в электронном антимониде индия, помещенного в электрическое поле. Указанные оптические характеристики по-разному меняются в электрическом поле для излучения, поляризованного

параллельно и перпендикулярно полю. Этот эффект определяется совместным действием непараболичности зоны проводимости антимонида индия и анизотропии функции распределения электронов по состояниям в импульсном пространстве, связанной с разогревом и дрейфом электронов.

Показано, что электрическое поле, напряженность которого не превышает 200 В/см, вызывает заметное изменение оптических характеристик, что стоит использовать при разработке малоинерционных электрооптических модуляторов терагерцового излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sinatkas G., Christopoulos T., Tsilipakos O., Kriezis E. E. Electro-optic modulation in integrated photonics // Journal of Applied Physics. 2021. Vol. 130. No. 1. P. 010901.
2. Oehme M., Schmid M., Kostecki K., et. al. The Franz – Keldysh effect in GeSn *p-i-n* diode // Applied Physics Letters. 2014. Vol. 104. No. 16. P. 161115.
3. Bastard G., Brum J. A., Ferreira R. Electronic states in semiconductor heterostructures (chapter) // H. Ehrenreich, D. Turnbull (Eds.) “Semiconductor heterostructures and nanostructures” (Book Series “Solid State Physics”, Vol. 44). Cambridge (USA): Academic Press, 1991. Pp. 229–415.
4. Подоскин А. А., Романович Д. Н., Шашкин И. С., Гаврина П. С., Соколова З. Н., Слипченко С. О., Пихтин Н. А. Модель управления конкуренцией замкнутых модовых структур в прямоугольных резонаторах большого размера на основе лазерных гетероструктур AlGaAs/InGaAs/GaAs // Физика и техника полупроводников. 2020. Т. 54. № 5. С. 484–489.
5. Воробьев Л. Е., Стафеев В. И., Фирсов Д. А. Влияние разогрева и дрейфа электронов на показатель преломления *n*-InSb с учетом межзонных переходов // Физика и техника полупроводников. 1984. Т. 18. № 3. С. 513–518.
6. Chandrasekhar H. R., Ramdas A. K. Nonparabolicity of the conduction band and the coupled plasmon-phonon modes in *n*-GaAs // Physical Review B. 1980. Vol. 21. No. 4. Pp. 1511–1525.
7. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. 2-е изд. М.: Наука, 1979. 432 с.
8. Ю П., Кардона М. Основы физики полупроводников. Пер. с англ. М.: Физматлит, 2002. 560 с.
9. Vorobev L. E., Komissarov V. S., Stafeev V. I. Faraday and Kerr effects of hot electrons in *n*-type InSb in the infrared (I) // Physica Status Solidi B. – Basic Solid State Physics. 1972. Vol. 52. No. 1. Pp. 25–37.
10. Hammar C., Veissclas P. Hot electron polar scattering in InSb // Physica Status Solidi B. – Basic Solid State Physics. 1967. Vol. 24. No. 2. Pp. 531–534.
11. Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. СПб.: Лань, 2025. 480 с.
12. Littler C. L., Seiler D. G. Temperature dependence of the energy gap of InSb using nonlinear optical techniques // Applied Physics Letters. 1985. Vol. 46. No. 10. Pp. 986–988.
13. Оптические свойства полупроводников (Полупроводниковые соединения типа A^{III} B^V). Под ред. Р. Уиллардсона, А. Бира. Пер. с англ. М.: Мир, 1970. 488 с.
14. FIRL–Series–Datasheet: <https://edin.becdn.net/wp-content/uploads/2024/07/FIRL-Series-Datasheet.pdf> (Дата обращения: 14.10.2025).
15. Orlov E. Yu., Melentev G. A., Shalygin V. A., Suihkonen S. Bulk plasmon-phonon polaritons in *n*-GaN // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 816. P. 012004.

REFERENCES

1. Sinatkas G., Christopoulos T., Tsilipakos O., Kriezis E. E., Electro-optic modulation in integrated photonics, J. Appl. Phys. 130 (1) (2021) 010901.
2. Oehme M., Schmid M., Kostecki K., et. al., The Franz – Keldysh effect in GeSn *p-i-n* diode, Appl. Phys. Lett. 104 (16) (2014) 161115.
3. Bastard G., Brum J. A., Ferreira R. Electronic states in semiconductor heterostructures (chapter), In book: H. Ehrenreich, D. Turnbull (Eds.) “Semiconductor heterostructures and nanostructures” (Book Ser. “Solid State Physics”, Vol. 44), Academic Press, Cambridge (USA) (1991) 229–415.



4. Podoskin A. A., Romanovich D. N., Shashkin I. S., et al., Switching control model of closed-mode structures in large rectangular cavities based on AlGaAs/InGaAs/GaAs laser heterostructures, *Semiconduct.* 54 (5) (2020) 581–586.
5. Vorob'ev L. E., Stafeev V. I., Firsov D. A., Effect of heating and drift of electrons on refractive index of n -type InSb taking into account interband transitions, *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov.* 18 (3) (1984), 513–518 (in Russian).
6. Chandrasekhar H. R., Ramdas A. K., Nonparabolicity of the conduction band and the coupled plasmon-phonon modes in n -GaAs, *Phys. Rev. B.* 21 (4) (1980) 1511–1525.
7. Agranovich V. M., Ginsburg V. L., *Crystal optics with spatial dispersion and excitons*, Springer-Verlag, Berlin, 1984.
8. Yu P. Y., Cardona M., *Fundamentals of semiconductors. Physics and materials properties*, 4-th edition, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010.
9. Vorobev L. E., Komissarov V. S., Stafeev V. I., Faraday and Kerr effects of hot electrons in n -type InSb in the infrared (I), *Phys. Status Solidi B.* 52 (1) (1972) 25–37.
10. Hammar C., Veissclas P., Hot electron polar scattering in InSb, *Phys. Status Solidi B.* 24 (2) (1967) 531–534.
11. Anselm A. I., *Introduction to semiconductor theory*, Mir Publishing, Moscow, 2015.
12. Littler C. L., Seiler D. G., Temperature dependence of the energy gap of InSb using nonlinear optical techniques, *Appl. Phys. Lett.* 46 (10) (1985) 986–988.
13. Willardson R. K., Beer A. C., *Semiconductors and semimetals. Optical properties of III–V compounds*, Academic Press, New-York and London, 1967.
14. FIRL–Series–Datasheet: <https://edin.becdn.net/wp-content/uploads/2024/07/FIRL-Series-Datasheet.pdf> (Date of access is 14.10.2025).
15. Orlov E. Yu., Melentev G. A., Shalygin V. A., Suihkonen S., Bulk plasmon-phonon polaritons in n -GaN, *J. Phys. Conf. Ser.* 816 (2017) 012004.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАРАУЛОВ Данила Андреевич – ассистент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

donil793@yandex.ru

ORCID: 0009-0002-1608-3659

ВИННИЧЕНКО Максим Яковлевич – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

mvin@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-6118-0098

ШАЛЫГИН Вадим Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

vadim_shalygin@mail.ru

ORCID: 0000-0001-6728-7286

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

firsov.da@spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-3947-4994

THE AUTHORS

KARAULOV Danila A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
donil793@yandex.ru
ORCID: 0009-0002-1608-3659

VINNICHENKO Maxim Ya.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
mvin@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-6118-0098

SHALYGIN Vadim A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vadim_shalygin@mail.ru
ORCID: 0000-0001-6728-7286

FIRSOV Dmitry A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
firsov.da@spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-3947-4994

*Статья поступила в редакцию 15.10.2025. Одобрена после рецензирования 27.10.2025.
Принята 27.10.2025.
Received 15.10.2025. Approved after reviewing 27.10.2025. Accepted 27.10.2025.*

Научная статья

УДК 53.043


DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18409>

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКЕ ПРИ КРАТКОВРЕМЕННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ИМПУЛЬСА

С. Е. Семенов¹ , Н. Т. Сударь², В. А. Пахотин¹

¹ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

 moritohayama96@gmail.com

Аннотация. Выполнены расчеты распределения электрического поля в электродной системе в виде сферического концентрического конденсатора, моделирующего микроострие на катоде, при воздействии высоковольтного импульса с крутизной фронта около 1 ГВ/с и инжекции электронов с микроострия. Показано, что при длительности переднего фронта импульса 150 – 250 нс глубина прорастания отрицательного объемного заряда (NSC) в полимер составляет 0,2 – 0,3 мкм. Электрические перенапряжения, обусловленные геометрией электродной системы и накапливающимся NSC, возникают в области накопления NSC на переднем фронте импульса. Напряженность поля у катода падает кратно при переходе с фронта на плато импульса за 100 – 200 нс.

Ключевые слова: высоковольтный импульс, объемный заряд, напряженность поля, перераспределение электрического поля

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016), а также в рамках еще одного Государственного задания (код темы FFUG-2024-0032 (№ 124031100068-0)).

Для цитирования: Семенов С. Е., Сударь Н. Т., Пахотин В. А. Распределение электрического поля в полимерной пленке при кратковременном воздействии высоковольтного импульса // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 127–138. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18409>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18409>

DISTRIBUTION OF THE ELECTRIC FIELD IN A POLYMER FILM UNDER A SHORT-TERM ACTION OF A HIGH-VOLTAGE PULSE

S. E. Semenov¹ , N. T. Sudar², V. A. Pakhotin¹

¹ Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia;

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 moritohayama96@gmail.com

Abstract. Calculations of the electric field distribution in the electrode system in the form of a spherical concentric capacitor simulating a micro-tip on the cathode were performed under the action of a high-voltage pulse with a front steepness of about 1 GV/s and electron injection from the micro-tip. The penetration depth of the negative space charge (NSC) into the polymer was shown to be 0.2–0.3 μm during a 150–250 ns pulse front edge. Electrical overvoltages

caused by the geometry of the electrode system and the accumulating NSC occurred in the NSC accumulation region at the pulse front edge. The field strength at the cathode decreased multiple times during the transition from the pulse front to its plateau in 100–200 ns.

Keywords: high voltage pulse, space charge, field strength, redistribution of the electric field

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016), as well as it was done within the framework of another State Assignment (Subject Code FFUG-2024-0032 (No. 124031100068-0)).

For citation: Semenov S. E., Sudar N. T., Pakhotin V. A., Distribution of the electric field in a polymer film under a short-term action of a high-voltage pulse, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 127–138. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18409>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

В последние годы значительное внимание стало уделяться изучению импульсной электрической прочности полимерных диэлектриков [1 – 6]. Все чаще появляются публикации, в которых рассматриваются различные аспекты воздействия импульсного напряжения на полимерные материалы, а именно – накопление в них объемного заряда [6 – 8], влияние температуры [9] и скорости возрастания напряжения на фронте импульса [10, 11]. Предлагаются и различные физические механизмы, объясняющие особенности развития импульсного пробоя в полимерах [12 – 15]. Однако физически осмысленная интерпретация экспериментальных результатов и предлагаемых моделей, по нашему мнению, невозможна без оценки величины реально достижимой напряженности электрического поля, его распределения в полимере и изменения со временем в условиях воздействия импульсного напряжения.

При проведении таких оценок следует учитывать, что полимерные диэлектрики характеризуются высокой концентрацией ловушечных состояний (ловушек), на которые захватываются заряды, инжектированные из электродов, формирующие объемный заряд. Накопление объемного заряда, в свою очередь, существенно влияет на распределение электрического поля, что ведет к ограничению инжекционного тока и возникновению локальных областей электрических перенапряжений.

Отметим здесь, что в сильном электрическом поле электроны и дырки инжектируются в полимер с микроскопических выступов на электродах, у вершин которых напряженность электрического поля F превышает среднее по образцу значение $F_{av} = U/d$ (U – напряжение на образце толщиной d).

Современные акустические методы зондирования объемного заряда и электрических полей в полимерах, к сожалению, не обеспечивают возможности измерения локализации заряда на площади поверхности образца и необходимой точности разрешения по глубине, которая при исследовании полимерных пленок микронной толщины должна быть не хуже 0,1 мкм [16]. Вследствие этого для решения данной задачи широко используются численные методы, но расчеты ограничиваются, как правило, стационарным распределением полей и зарядов [17, 18].

Цели настоящей работы – рассчитать распределения электрического поля вблизи микроострия в полимерном диэлектрике в условиях накопления в нем отрицательного объемного заряда (*англ.* Negative Space Charge (NSC)) при воздействии на полимер электрического импульса с высокой крутизной переднего фронта, а также оценить величину локальных перенапряжений, возникающих при этом у инжектирующих электродов и на границе прорастания NSC в полимер.

Постановка задачи

Микроострие на поверхности катода моделировалось электродной системой в виде сферического концентрического конденсатора, в котором электрод малого радиуса r_c

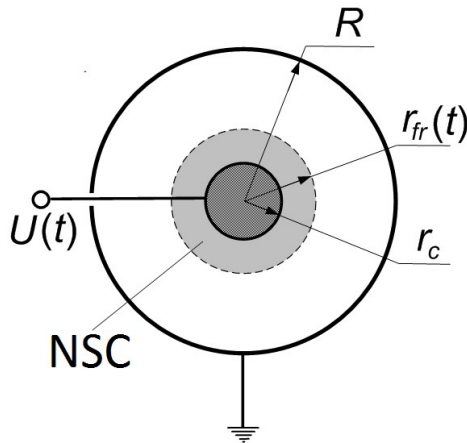


Рис. 1. Схема электродной системы в виде сферического конденсатора:

R , r_c – радиусы наружной и внутренней сфер, соответственно; $r_{fr}(t)$ – глубина прорастания отрицательного объемного заряда (NSC) в полимер к моменту времени t

рассматривался как микроострие, а сфера большего радиуса R – как анод. Схема электродной системы изображена на рис. 1. Подобная система широко применяется в качестве модели микроострия с постоянной кривизной поверхности [19].

Достоинством данной модели является простота математических уравнений, используемых для описания распределения электрического поля, а недостатком – ее неполное соответствие реальным условиям, так как она согласуется с ними лишь на расстояниях, при которых напряженность электрического поля F превосходит свое среднее значение F_{av} (под F_{av} здесь подразумевается поле в образце плоской геометрии толщиной $d = R - r_c$).

Распределение напряженности электрического поля $F(r, t)$ в межэлектродном пространстве рассматриваемой электродной системы в любой момент времени t описывается уравнением Пуассона, которое в сферических координатах имеет вид

$$\frac{d}{dr} F(r, t) + \frac{2}{r} F(r, t) = \frac{\rho(r, t)}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (1)$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость полимерного диэлектрика; ε_0 – электрическая постоянная, $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м; e – заряд электрона, $e = -1,6022 \cdot 10^{-19}$ Кл; $\rho(r, t)$ – мгновенное значение плотности NSC, определяемое концентрациями свободных электронов и электронов, захваченных в ловушки.

Поскольку электрический пробой преимущественно происходит на переднем фронте импульса и значительно реже – на плато или спаде импульса [12, 14], первостепенный интерес представляли расчеты распределения поля на временном интервале, включающем области переднего фронта и начального участка плато высоковольтного импульса. В связи с этим при расчетах принималось, что напряжение U на образце изменяется со временем следующим образом:

$$U(t) = \begin{cases} \frac{dU}{dt} t, \text{ при } t \leq \Delta \\ U_{amp}, \text{ при } t > \Delta \end{cases}. \quad (2)$$

Здесь t – время; U_{amp} , Δ – амплитуда и длительность переднего фронта импульса, соответственно.

Скорость возрастания напряжения на образце (крутизна фронта импульса) есть $dU/dt = U_{amp}/\Delta$.

В соответствии с рекомендациями статьи [20], будем полагать, что в сильном электрическом поле инжекция электронов из катода в полимерный диэлектрик обусловлена автоэлектронной эмиссией, а зависимость плотности тока этой эмиссии от напряженности поля у катода определяется уравнением Фаулера – Нордгейма.

Если считать форму потенциального барьера на границе катод-диэлектрик треугольной, то уравнение для расчета плотности инжекционного тока $j_c(t)$ можно представить как

$$j_c = \frac{e^3 F_c^2(t)}{16\pi^2 \hbar \Delta_e} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}\Delta_e^{3/2}}{3\hbar F_c(t)e}\right), \quad (3)$$

где m , кг, – масса электрона; \hbar , Дж·с, – постоянная Планка; $F_c(t)$, В/м, – напряженность поля у катода, изменяющаяся со временем; Δ_e , эВ, – высота потенциального барьера на границе катод-полимер.

Отметим здесь, что уравнение (3) является упрощенным и не учитывает снижение высоты потенциального барьера в сильном электрическом поле.

При рассмотрении инжекции электронов в полимер из металлического электрода значение Δ_e можно определить как разность между работой выхода из металлического катода и сродством к электрону A_c полимерного диэлектрика. Работа выхода для металлов составляет 2,0 – 5,5 эВ, тогда как A_c для полимерных диэлектриков оценивается в 1 – 2 эВ, что позволяет оценить значение высоты потенциального барьера Δ_e в 1 – 4 эВ. Такой результат согласуется с известными экспериментальными данными; например, значения высоты потенциального барьера на границах полиэтилентерефталата (ПЭТФ) с алюминием и медью экспериментально определены авторами статьи [21] равными 2,8 и 2,9 эВ соответственно.

Решение уравнения (1) имеет вид

$$F(r,t) = \left(\frac{r_c}{r}\right)^2 \left[F_c(t) + \frac{1}{\varepsilon\varepsilon_0 r_c^2} \int_{r_c}^r x^2 \rho(x,t) dx \right]. \quad (4)$$

Если учесть, что

$$\int_{r_c}^R F(r,t) dr = U(t), \quad (5)$$

и подставить выражение (4) в соотношение (5), то получим, что зависимость напряженности поля у катода от времени следует выражению

$$F_c(t) = \frac{RU(t)}{r_c(R-r_c)} - \frac{R}{\varepsilon\varepsilon_0 r_c(R-r_c)} \int_{r_c}^R \left[\int_{r_c}^r x^2 \rho(x,t) dx \right] \frac{dr}{r^2}, \quad (6)$$

Обозначим полный заряд, заключенный между двумя сферическими поверхностями с радиусами r_c и r к моменту времени t , как

$$q(r,t) = 4\pi \int_{r_c}^r x^2 \rho(x,t) dx. \quad (7)$$

Учитывая обозначение (7) и подставив выражение (6) в решение (4), получим:

$$F(r,t) = \frac{r_c RU(t)}{r^2(R-r_c)} - \frac{r_c R}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 r^2(R-r_c)} \int_{r_c}^R \frac{q(r,t)}{r^2} dr + \frac{q(r,t)}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 r^2}. \quad (8)$$

Зависимость (8) позволяет рассчитать распределение электрического поля в межэлектродном пространстве в любой момент времени. Отметим здесь, что отношение $U(t)/(R-r_c)$ можно рассматривать как формулу для напряженности поля в образце плоской геометрии толщиной $d = R-r_c$.

Из равенства (8) следует, что напряженность электрического поля на любом расстоянии r от катода представляет собой суперпозицию трех полей:

определяемого геометрией электродной системы (первое слагаемое);
создаваемого объемным зарядом, распределенным по всему образцу (второе слагаемое);

создаваемого NSC, распределенным в пространстве между катодом и поверхностью радиуса r (третье слагаемое).

Если рассматривать воздействие на полимер короткого электрического импульса, в течение которого электроны еще не успевают достигнуть противоположного электрода (анода) и провзаимодействовать с ним, то справедливо равенство

$$q[r_{fr}(t)] = Q(t),$$

где $Q(t)$ – полный заряд, накопившийся к моменту времени t в межэлектродном пространстве за счет инжекции электронов из катода; напомним, что $r_{fr}(t)$ – глубина проникновения электронов в полимер.

Полный заряд $Q(t)$ следует выражению

$$Q(t) = 4\pi r_c^2 \int_0^t j_c(t') dt'. \quad (9)$$

Глубина прорастания заряда в полимер к моменту времени t определяется как

$$r_{fr}(t) = \mu_{dr} \int_0^t F_{fr}(t') dt', \quad (10)$$

где $F_{fr}(t)$ – напряженность поля на границе прорастания заряда в полимер (зависит от времени); μ_{dr} – дрейфовая подвижность электронов в полимерном диэлектрике.

Значение величины μ_{dr} невелико. Даже в сильном постоянном электрическом поле (при $F_{av} \approx 10^8$ В/м) оно оценивается равным примерно 10^{-9} м²/(В·с) [22].

Точное аналитическое выражение для функции $q(r, t)$ неизвестно и вряд ли может быть установлено, поскольку требует учета скоростей захвата и опустошения электронных ловушек при любых значениях r и t .

Очевидно, что вид функции $q(r, t)$ зависит от многих факторов:

плотности инжекционного тока,
подвижности носителей заряда,
напряжения на электродах,
энергетической плотности ловушечных состояний,
длительности электрического импульса.

Однако согласно определению, функция $q(r, t)$ при $r_c \leq r \leq r_{fr}$ монотонно возрастает по мере увеличения r , причем $q(r_c, t) \equiv 0$. При $r > r_{fr}$ величина $q(r, t)$ не зависит от координаты и $q(r, t) = Q(t)$.

При кратковременном воздействии электрического импульса на полимерный диэлектрик электроны, инжектированные из катода, захватываются в ловушки, там удерживаются и формируют NSC.

Среднее время захвата электрона в ловушки выражается как

$$t_{trap} = \tau_0 \exp [E_{trap} / (k_B T)],$$

где E_{trap} – глубина ловушки, T – температура, k_B – постоянная Больцмана; τ_0 – характерное время, $\tau_0 \approx 0,1$ пс.

Если принять длительность электрического импульса равной 10 нс, то при комнатной температуре электроны будут удерживаться в ловушках глубиной более 0,3 эВ в течение всего времени действия импульса. В работе [11] показано, что при электрическом импульсе длительностью от 10 до 1000 нс и экспоненциальном распределении ловушек по глубине плотность NSC, прорастающего в полимер, можно считать постоянной. В этом случае выражение для расчета функции $q(r, t)$ примет вид

$$q(r, t) = \frac{r^3 - r_c^3}{r_{fr}^3(t) - r_c^3} Q(t). \quad (11)$$

Соотношение (11) следует рассматривать как приближение, которое можно использовать при расчетах распределения поля вблизи микроострия. Однако на практике граница прорастающего заряда не может быть столь резко выражена, а плотность распределения заряда все-таки должна зависеть от координаты. Поэтому в работе [23] функция $q(r, t)$ при $r \leq r_{fr}$ аппроксимируется степенным рядом с основанием $r - r_c$.

Чтобы использовать подобный способ аппроксимации $q(r, t)$, примем, что функция $q(r, t)$ имеет вид

$$q(r, t) = a(t)(r - r_c) + b(t)(r - r_c)^2. \quad (12)$$

Коэффициенты полинома $a(t)$ и $b(t)$ для момента времени t можно найти из условий

$$q[r_{fr}(t)] = Q(t) \text{ и } dq(r, t)/dr = 0 \text{ при } r = r_{fr}.$$

Данная аппроксимация соответствует условию, при котором плотность NSC на границе его прорастания равна нулю, и $a(t)$ и $b(t)$ определяются как

$$a(t) = -2b(t)[r_{fr}(t) - r_c],$$

$$b(t) = \frac{Q(t) - a(t)[r_{fr}(t) - r_c]}{[r_{fr}(t) - r_c]^2}. \quad (13)$$

Следует отметить, что в простейшем случае $q(r, t)$ можно аппроксимировать и более простым выражением, а именно – линейной функцией вида

$$q(r, t) = \frac{r - r_c}{r_{fr}(t) - r_c} Q(t). \quad (14)$$

Вид зависимости, определяемой соотношением (13), относится к случаю $\rho(r, t) \sim r^{-2}$, причем $\rho(r_{fr}, t) \neq 0$.

Соотношения (11), (12) и (14) при их подстановке в выражение (8) позволяют получить аналитические выражения для расчета напряженности электрического поля в межэлектродном пространстве при фиксированном значении t . Временной аргумент функции $F(r, t)$ обусловлен зависимостью от времени таких величин, как $U(t)$, $Q(t)$ и $r_{fr}(t)$, которые можно рассматривать как независимые от координаты интегральные параметры, входящие в соотношение (8). Расчет зависимости $F(r, t)$ усложняется тем, что глубина прорастания заряда в полимер $r_{fr}(t)$ связана с напряженностью поля $F_{fr}(t)$ на границе области NSC через интеграл в выражении (10).

Таким образом, процесс прорастания NSC представляет собой самосогласованную задачу. Поэтому при расчете зависимостей $F_c(t)$ и $F_{fr}(t)$ мы использовали временной пошаговый метод. Применение метода предполагало, что распределение поля и заряда неизменно в течение времени дискретизации Δt (при расчетах принималось, что $\Delta t = 1$ нс). Расчет F_c и F_{fr} на i -м шаге в момент времени t_i проводился на основании результатов расчета этих величин на предыдущем временном шаге. Интегралы в соотношениях (9) и (10), определяющие изменение во времени величин $Q(t)$ и $r_{fr}(t)$, заменялись суммами.

При расчетах учитывалось, что интенсивная автоэлектронная эмиссия из микроострия на катоде возникает по достижении некоторого критического значения напряженности электрического поля (в соответствии с уравнением (3)). Как следствие, в слабом электрическом поле электроны в полимер практически не инжектируются, NSC не накапливается и распределение электрического поля в межэлектродном пространстве определяется геометрией электродной системы (см. первое слагаемое в уравнении (8)). Поэтому первым шагом ($i = 1$) при расчете $F(r, t)$ служил не момент времени $t = 0$, соответствующий началу роста напряжения, а момент t_1 , когда напряжение на образце достигало значения $U(t_1)$, при котором возникает заметный инжекционный ток.

В качестве начальных условий для расчетов на первом временном шаге мы принимали, что

$$Q(t_1) = 0, r_{fr}(t_1) = r_c \text{ и } F_{fr}(t_1) = F_c(t_1).$$

Значение t_1 составляло 30 – 40 нс (оно зависело от амплитуды импульса и длительности его переднего фронта).

Численные расчеты были выполнены при следующих значениях параметров:

$$r_c = 0,25 \text{ мкм}, R = 2,50 \text{ мкм}, \mu_{dr} = 1 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}), \Delta_e = 2,9 \text{ эВ}, \varepsilon = 3.$$

Результаты расчетов и их обсуждение

Рассмотрим, в какой мере характер распределения заряда в образце влияет на зависимости $F_c(t)$ и $F_{fr}(t)$. Результаты расчетов этих зависимостей при $U_{amp} = 1500$ В и $\Delta = 150$ нс с использованием различных функций, аппроксимирующих функцию $q(r, t)$, представлены на рис. 2.

Изменение со временем напряженности поля $F_c(t)$ у катода представлено на рис. 2, а. Видно, что разные случаи функций, аппроксимирующих зависимость $q(r, t)$, не оказывают существенного влияния на форму зависимости $F_c(t)$. На всех кривых $F_c(t)$ можно выделить три характерных временных отрезка, возникновение которых обусловлено двумя

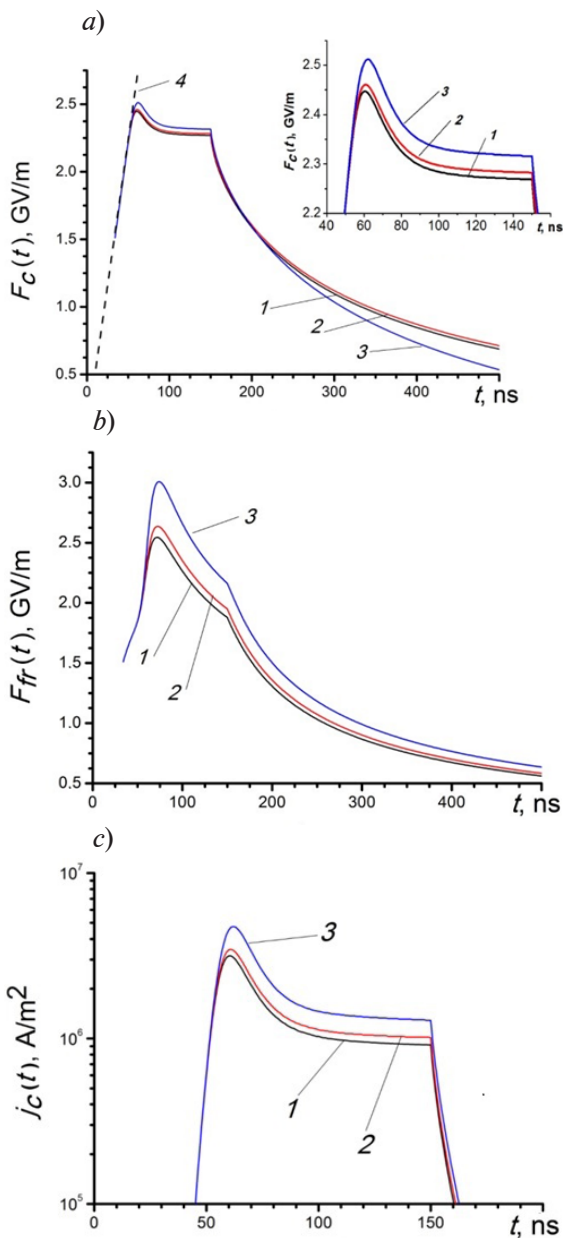


Рис. 2. Зависимости $F_c(t)$ (a), $F_{fr}(t)$ (b) и $j_c(t)$ (c), рассчитанные с помощью различных функций, аппроксимирующих $q(r,t)$: квадратичной (см. формулу (12), кривая 1), линейной (14) (кривая 2); кубической (11) (кривая 3); пунктиром 4 показано изменение $F_c(t)$ в отсутствие ограничения поля объемного заряда. На вставке: детализация начального участка кривой $F_c(t)$

к этому моменту времени область NSC успевает прорасти в полимер на глубину 0,15 – 0,25 мкм, причем наибольшая глубина этого прорастания соответствует выбору квадратичного полинома, аппроксимирующего функцию $q(r, t)$. Причина спада со временем величины F_c состоит в том, что при $t \geq \Delta$ (плато импульса) напряжение на образце перестает расти, но накопление NSC продолжается, несмотря на понижение плотности инжекционного тока (см. рис. 2, c). В итоге эффективность ограничения поля NSC повышается и значения F_c и j_c , снижаясь, стремятся к своим стационарным значениям.

конкурирующими факторами: возрастанием напряжения на образце по закону, определяемому соотношением (2), и эффекту ограничения поля областью NSC у катода.

Первый отрезок на зависимости $F_c(t)$ соответствует относительно низкой напряженности электрического поля, при которой влияние NSC на $F_c(t)$ пренебрежимо мало. Возрастание напряженности электрического поля у катода на этом временном интервале связано только с линейным ростом напряжения на образце и совпадает с зависимостью $F_c(t)$ в отсутствие NSC (пунктирная прямая 4 на рис. 2, a).

Переход ко второму временному отрезку на зависимости $F_c(t)$ происходит, когда величина F_c достигает критического значения, при котором резко возрастает ток автоэлектронной эмиссии (см. зависимость $j_c(t)$ на рис. 2, c) и в прикатодной области начинает быстро накапливаться NSC. Скорость ограничения поля NSC у катода оказывается большей, чем скорость возрастания F_c вследствие подъема напряжения на образце. На зависимости $F_c(t)$ формируется максимум. По мере накопления NSC эффективность ограничения поля этим объемным зарядом все повышается и значение величины F_c стабилизируется. Как следствие этого, стабилизируется и плотность тока $j_c(t)$ (см. рис. 2, c). На зависимостях $F_c(t)$ и $j_c(t)$ формируется плато. Масштабная вставка на рис. 2, a более наглядно демонстрирует влияние функции, аппроксимирующей $q(r, t)$, на зависимость $F_c(t)$ в режиме ограничения поля NSC у катода. Видно, что различия между кривыми 1 – 3 незначительны, но более эффективно NSC ограничивает напряженность F_c при выборе в качестве аппроксимирующей функции полинома второй степени (кривая 1, относящаяся к квадратичной функции).

Переход к третьему временному отрезку зависимости $F_c(t)$ совершается в момент времени, когда напряжение на образце перестает расти, т. е. при $t = \Delta$. На плато импульса наблюдается быстрое снижение напряженности поля у катода. Отметим, что

Зависимости $F_{fr}(t)$, построенные с использованием различных пробных функций, аппроксимирующих $q(r, t)$, представлены на рис. 2, *b*. Так же, как и рассмотренные выше зависимости $F_c(t)$, они имеют несущественные различия, и это позволяет заключить, что выбор аппроксимирующей функции, удовлетворяющей перечисленным выше требованиям, не имеет принципиального значения при расчете распределения электрического поля в рассматриваемой электродной системе.

При анализе характера зависимости $F_{fr}(t)$ следует учитывать, что накапливающийся NSC не ограничивает, а усиливает напряженность поля на границе своего прорастания. Однако область NSC непрерывно смещается вглубь полимера и, вследствие этого, компонента электрического поля, определяемая геометрией электродной системы, сокращается, поэтому характерные временные отрезки, которые формируются на кривых $F_{fr}(t)$, не столь явно выражены, как на соответствующих кривых $F_c(t)$.

Величины F_{fr} и F_c при одних и тех же значениях времени t примерно одинаковы, т. е. в прикатодной области, где накапливается NSC, распределение электрического поля близко к однородному. При $F_{av} = 666$ МВ/м (что соответствует $U_{amp} = 1500$ В) и толщине полимерной пленки 2,25 мкм, напряженность электрического поля в области накопления NSC достигает значений около 2,5 ГВ/м. Наносекунды существования поля со столь значительной напряженностью в этой области образца примерно соответствует длительности переднего фронта электрического импульса.

Известно, что крутизна переднего фронта электрического импульса оказывает заметное влияние на многие явления, наблюдаемые в полимерных диэлектриках в сильных электрических полях. Например, в пленке полиэтилентерефталата наблюдается резкий подъем пробивной напряженности образца при увеличении крутизны переднего фронта импульса [11], при этом повышается интенсивность свечения импульсной электролюминесценции указанного полимера [24]. Согласно соответствующим наблюдениям авторов статей [24, 25], свечение полимера имеет место только в момент действия фронта импульса и отсутствует во время действия его плато.

Рассмотрим влияние длительности переднего фронта импульса ($U_{amp} = 1500$ В) на зависимости $F_c(t)$ и $F_{fr}(t)$. Отметим, что здесь и далее все расчетные зависимости получены при аппроксимации функции $q(r, t)$ квадратичным полиномом (см. формулу (12)). Результаты расчетов представлены на рис. 3. Видно, что увеличение крутизны фронта импульса (за счет снижения длительности его переднего фронта при постоянной амплитуде) приводит к повышению напряженности электрического поля как у катода (см. рис. 3, *a*), так и на границе области прорастания NSC (см. рис. 3, *b*). Однако протяженность плато на зависимостях $F_c(t)$ и $F_{fr}(t)$, где напряженность поля достигает наибольших значений, сокращается. Например, при повышении крутизны фронта с 5 до 10 ГВ/с, напряженность поля в максимуме у катода возрастает с 2,30 до 2,45 ГВ/м (такое увеличение F_c приводит к росту плотности инжекционного тока с 1,2 до 3,2 МА/м²), а на фронте NSC – с 1,70 до 2,55 ГВ/м, но протяженность плато на зависимости $F_c(t)$ снижается со 190 до 100 нс, а на зависимости $F_{fr}(t)$ – со 160 до 75 нс.

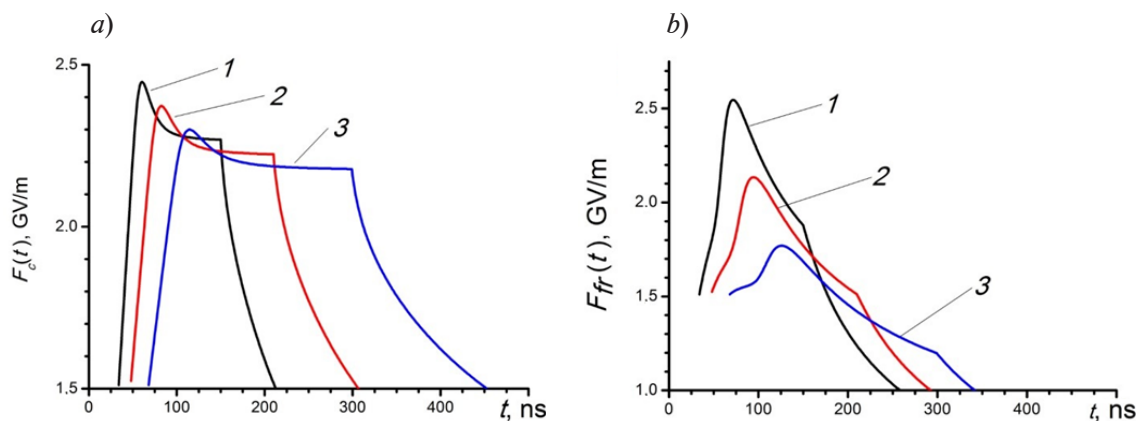


Рис. 3. Зависимости $F_c(t)$ (*a*) и $F_{fr}(t)$ (*b*), рассчитанные при $U_{amp} = 1500$ В и различных значениях крутизны фронта импульса, ГВ/с: 10 (1), 7 (2) и 5 (3)



Заключение

Таким образом, изучение динамики накопления отрицательного объемного заряда (NSC) в полимере при воздействии на него высоковольтного импульса с крутизной фронта около 1 ГВ/с и анализ изменения распределения напряженности электрического поля F , связанного с этим воздействием, позволяют заключить, что в прикатодной области этого полимера успевает сформироваться область NSC (за время порядка 100 нс), которая ограничивает напряженность поля у катода и повышает его напряженность на границе области прорастания NSC; при этом распределение напряженности электрического поля становится более однородным. Величина F в этой области полимерного диэлектрика, в несколько раз превосходящая свое среднее по образцу значение, возникает только на переднем фронте высоковольтного импульса. Сокращение длительности переднего фронта высоковольтного импульса приводит к возрастанию напряженности электрического поля в полимере в области накопления NSC, но длительность воздействия сильного электрического поля сокращается. Этот совокупный эффект может привести с одной стороны, к ускорению процессов, инициируемых в полимерном материале электрическим полем, но с другой, – к сокращению времени их воздействия на полимерный материал.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wu G. N., Wu J. D., Zhou L. R., Gao B., Zhou K., Guo X. X., Cao K. J. Microscopic view of aging mechanism of polyimide film under pulse voltage in presence of partial discharge // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2010. Vol. 17. No. 1. Pp. 125–132.
2. Zhao L., Su J., Zhang X., Pan Y. Experimental investigation on the role of electrodes in solid dielectric breakdown under nanosecond pulses // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2012. Vol. 19. No. 4. Pp. 1101–1107.
3. Wilson M. P., Given M. J., Timoshkin I. V., MacGregor S. J., Sinclair M. A., Thomas K. J., Lehr J. M. Impulse-breakdown characteristics of polymers immersed in insulating oil // IEEE Transactions on Plasma Science. 2010. Vol. 38. No. 10. Pp. 2611–2619.
4. Адамьян Ю. Э., Кривошеев С. И., Магазинов С. Г. Особенности описания импульсной электрической прочности полимерных диэлектриков // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 5. С. 48–50.
5. Ni H., Zhang Q., Guo C., Wen T. Breakdown and streamer behavior in double-layer oil-paper insulation under impulses of varying front time // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2020. Vol. 27. No. 1. Pp. 103–111.
6. Важов В. Ф., Петренко Е. В. Объемный заряд в полимерных диэлектриках при воздействии импульсного и постоянного напряжений как фактор, влияющий на время до пробоя // Физика твердого тела. 2021. Т. 63. № 5. С. 617–621.
7. Wang X., Jiang Q., Wu C., Liu S., Wu K. Space charge characteristics at the XLPE/EPDM interface under DC voltage superimposed by a repetitive impulse voltage // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2023. Vol. 30. No. 5. Pp. 2084–2091.
8. Hole S., Alquie C., Lewiner J. Measurement of space-charge distributions in insulators under very rapidly varying voltage // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 1997. Vol. 4. No. 6. Pp. 719–724.
9. Семенов С. Е. Влияние температуры на импульсную электрическую прочность полимерных пленок // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 2. С. 141–149.
10. Смирнов И. В., Морозов В. А., Лукин А. А. Экспериментальное исследование электрической прочности акриловой ленты ВНВ при квазистатическом и импульсном напряжениях // Журнал технической физики. 2018. Т. 88. № 1. С. 151–153.
11. Закревский В. А., Пахотин В. А., Сударь Н. Т. Влияние крутизны фронта импульса напряжения на электрическую прочность полимеров // Журнал технической физики. 2019. Т. 89. № 1. С. 120–125.
12. Семенов С. Е., Капралова В. М., Пахотин В. А., Сударь Н. Т. Механизм развития импульсного пробоя в полимерных пленках // Физика твердого тела. 2022. Т. 64. № 8. С. 948–954.

13. Адамьян Ю. Э., Кривошеев С. И., Магазинов С. Г. Использование модели полевой ионизации для описания импульсного пробоя твердых диэлектриков // Журнал технической физики. 2024. Т. 94. № 2. С. 223–230.
14. Петров Ю. В., Морозов В. А., Смирнов И. В., Лукин А. А. Исследование эффекта электрического пробоя диэлектрика на участке спада импульса напряжений на основе подхода инкубационного времени // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. № 12. С. 1–5.
15. Курбанов Э. Д. Об импульсном пробое диэлектрических сред // Электричество. 2009. № 6. С. 57–59.
16. Takada T. Acoustic and optical methods for measuring electric charge distributions in dielectrics // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 1999. Vol. 6. No. 5. Pp. 519–547.
17. Cisse L., Bamji S. S., Bulinski A. T. Electric field calculations for needle-plane geometry and space charge in polyethylene // IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation. 2003. Vol. 10. No. 1. Pp. 176–180.
18. Закревский В. А., Сударь Н. Т. Влияние объемного пространственного заряда на напряженность электрического поля в полимерных диэлектриках // Журнал технической физики. 1990. Т. 60. № 2. С. 66–81.
19. Ламперт М., Марк П. Инжекционные токи в твердых телах. Пер. с англ. М.: «Мир», 1973. 416 с.
20. Dissado L. A., Fothergill J. C. Electrical degradation and breakdown in polymers (IEEE Materials and Devices Series; Vol. 9). London: Peter Peregrinus Ltd., 1992. 601 p.
21. Mizutani T., Takai Y., Osawa T., Ieda M. Barrier heights and surface states of metal-polymer (PET) contacts // Journal of Physics D: Applied Physics. 1976. Vol. 9. No. 15. Pp. 2253–2259.
22. Tyutnev A., Ihksanov R., Saenko V., Ashmarin V. About charge carrier mobility in common insulating polymers. // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128. No. 22. P. 225501.
23. Бережанский В. Б., Быков В. М., Городов В. В., Закревский В. А., Сударь Н. Т. Влияние инжектированного заряда на распределение электрического поля в полимерном диэлектрике // Высокомолекулярные соединения (Серия Б). 1989. Т. 31. № 4. С. 275–281.
24. Kaneto K., Yoshino K., Kao K. C., Inuishi Y. Electroluminescence in poly (ethylene terephthalate) // Japanese Journal of Applied Physics. 1974. Vol. 13. No. 6. Pp. 1023–1024.
25. Kojima K., Takai Y., Ieda M. Electroluminescence in poly (ethylene terephthalate) (PET) I. Impulse voltage // Japanese Journal of Applied Physics. 1982. Т. 21. No. 6R. Pp. 860–864.

REFERENCES

1. Wu G. N., Wu J. D., Zhou L. R., et al., Microscopic view of aging mechanism of polyimide film under pulse voltage in presence of partial discharge, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 17 (1) (2010) 125–132.
2. Zhao L., Su J., Zhang X., Pan Y., Experimental investigation on the role of electrodes in solid dielectric breakdown under nanosecond pulses, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 19 (4) (2012) 1101–1107.
3. Wilson M. P., Given M. J., Timoshkin I. V., et al., Impulse-breakdown characteristics of polymers immersed in insulating oil, IEEE Trans. Plasma Sci. 38 (10) (2010) 2611–2619.
4. Adam'yan Y. E., Krivosheyev S. I., Magazinov S. G., Features in describing the impulse insulation strength of polymer dielectrics, Tech. Phys. Lett. 47 (3) (2021) 211–213.
5. Ni H., Zhang Q., Guo C., Wen T., Breakdown and streamer behavior in double-layer oil-paper insulation under impulses of varying front time, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 27 (1) (2020) 103–111.
6. Vazhov V. F., Petrenko E. V., Space charge in polymer dielectrics induced by pulses and DC voltages as a factor influencing the time to breakdown, Phys. Solid State. 63 (5) (2021) 770–774.
7. Wang X., Jiang Q., Wu C., et al., Space charge characteristics at the XLPE/EPDM interface under DC voltage superimposed by a repetitive impulse voltage, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 30 (5) (2023) 2084–2091.
8. Hole S., Alquie C., Lewiner J., Measurement of space-charge distributions in insulators under very rapidly varying voltage, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 4 (6) (1997) 719–724.



9. **Semenov S. E.**, The temperature effect on impulse dielectric strength of polymer films, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (2) (2024) 141–149 (in Russian).
10. **Smirnov I. V., Morozov V. A., Lukin A. A., Springhetti R.**, Experimental analysis of electrical breakdown of acrylic VHB tape under quasi-static and pulsed voltage, Tech. Phys. 63 (1) (2018) 152–154.
11. **Zakrevskii V. A., Pakhotin V. A., Sudar N. T.**, Effect of the voltage pulse front steepness on the electrical strength of polymers, Tech. Phys. 63 (12) (2018) 1814–1819.
12. **Semenov S. E., Kapralova V. M., Pakhotin V. A., Sudar N. T.**, A mechanism of pulse breakdown in polymeric films, Phys. Solid State. 64 (8) (2022) 954–960.
13. **Adam'yan Yu. E., Krivosheyev S. I., Magazinov S. G.**, Using the field ionization model to describe pulsed breakdown of solid dielectrics, Tech. Phys. 94 (2) (2024) 223–230 (in Russian).
14. **Petrov Y. V., Morozov V. A., Smirnov I. V., Lukin, A. A.**, Electrical breakdown of a dielectric on the voltage pulse trailing edge: Investigation in terms of the incubation time concept, Tech. Phys. 60 (12) (2015) 1733–1737.
15. **Kurbanov E. D.**, Ob impulsnom proboye dielektricheskikh sred [On the impulse breakdown of dielectric media], Elektrichestvo [Electricity] (6) (2009) 57–59 (in Russian).
16. **Takada T.**, Acoustic and optical methods for measuring electric charge distributions in dielectrics, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 6 (5) (1999) 519–547.
17. **Cisse L., Bamji S. S., Bulinski A. T.**, Electric field calculations for needle-plane geometry and space charge in polyethylene, IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 10 (1) (2003) 176–180.
18. **Zakrevskiy V. A., Sudar N. T.**, Vliyaniye obyemnogo prostranstvennogo zaryada na napryazhennost elektricheskogo polya v polimernykh dielektrikakh [The effect of volume space charge on the electric field strength in polymer dielectrics], Tech. Phys. 60 (2) (1990) 66–81 (in Russian).
19. **Lampert M. A., Mark P.**, Current injection in solids, Academic Press, New York, London, 1970.
20. **Dissado L. A., Fothergill J. C.**, Electrical degradation and breakdown in polymers (IEEE Materials and Devices Series; Vol. 9), Peter Peregrinus Ltd., London, 1992.
21. **Mizutani T., Takai Y., Osawa T., Ieda M.**, Barrier heights and surface states of metal-polymer (PET) contacts, J. Phys. D. Appl. Phys. 9 (15) (1976) 2253–2259.
22. **Tyutnev A., Ihksanov R., Saenko V., Ashmarin V.**, About charge carrier mobility in common insulating polymers, J. Appl. Phys. 128 (22) (2020) 225501.
23. **Berezhanskiy V. B., Bykov V. M., Gorodov V.V., et al.**, Vliyaniye inzhektirovannogo zaryada na raspredeleniye elektricheskogo polya v polimernom dielektrike [The effect of injected charge on the distribution of electric field in a polymer dielectric], Polymer Sci. Ser. B. (USSR). 31 (4) (1989) 275–281 (in Russian).
24. **Kaneto K., Yoshino K., Kao K. C., Inuishi Y.**, Electroluminescence in poly (ethylene terephthalate), Jpn. J. Appl. Phys. 13 (6) (1974) 1023–1024.
25. **Kojima K., Takai Y., Ieda M.**, Electroluminescence in poly (ethylene terephthalate) (PET) I. Impulse voltage, Jpn. J. Appl. Phys. 21 (6R) (1982) 860–864.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЕМЕНОВ Сергей Евгеньевич – младший научный сотрудник лаборатории физики прочности Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

moritohayama96@gmail.com

ORCID: 0009-0000-5779-9966

СУДАРЬ Николай Тобисович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

sudar53@mail.ru

ORCID: 0000-0001-7380-7727

ПАХОТИН Владимир Александрович – доктор технических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики прочности Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

v.pakhotin@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0002-8499-8650

THE AUTHORS

SEMENOV Sergey E.

Ioffe Institute of RAS

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

moritohayama96@gmail.com

ORCID: 0009-0000-5779-9966

SUDAR Nikolay T.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

sudar53@mail.ru

ORCID: 0000-0001-7380-7727

ПАКХОТИН Vladimir A.

Ioffe Institute of RAS

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

v.pakhotin@mail.ioffe.ru

ORCID: 0000-0002-8499-8650

Статья поступила в редакцию 24.06.2025. Одобрена после рецензирования 22.08.2025. Принята 22.08.2025.

Received 24.06.2025. Approved after reviewing 22.08.2025. Accepted 22.08.2025.

Научная статья

УДК 539.216.2

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18410>

ТРАНСФОРМАЦИЯ МОРФОЛОГИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК НИКЕЛЯ И ЦИРКОНИЯ НА ЕСТЕСТВЕННО ОКИСЛЕННЫХ КРЕМНИЕВЫХ ПОДЛОЖКАХ ПРИ ОТЖИГЕ В ВАКУУМЕ

В. Т. А. Нгуен, П. Г. Габдуллин, А. В. Архипов 

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

 arkhipov@rphf.spbstu.ru

Аннотация. В статье представлена технология получения островковых пленок никеля на поверхности окисленных кремниевых подложек методом термического деветтинга (агломерации) сплошных покрытий. Вначале сплошные пленки никеля толщиной 5 нм наносились на подложки методом магнетронного напыления. Затем, без выноса на атмосферу, производился отжиг покрытий в вакууме при температуре 450°C продолжительностью от 15 мин до 3 ч. Результатом этого было формирование на подложке изолированных металлических островков с поперечными размерами от единиц до десятков нанометров, в зависимости от времени отжига. Были определены электрические и термоэлектрические характеристики полученных островковых пленок. Попытки приготовления островковых пленок циркония с использованием той же методики не принесли успеха, так как технически реализуемая температура отжига 650°C оказалась недостаточной для агломерации покрытий из этого материала.

Ключевые слова: тонкая пленка, островковая пленка, наночастица, деветтинг пленок, никель, термоэлектрический коэффициент

Для цитирования: Нгуен В. Т. А., Габдуллин П. Г., Архипов А. В. Трансформация морфологии тонких пленок никеля и циркония на естественно окисленных кремниевых подложках при отжиге в вакууме // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 139–150. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18410>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18410>

MODIFICATION OF MORPHOLOGY OF THIN NICKEL AND ZIRCONIUM FILMS ON NATURALLY OXIDIZED SILICON SUBSTRATES BY ANNEALING IN VACUUM

V. T. A. Nguyen, P. G. Gabdullin, A. V. Arkhipov 

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

 arkhipov@rphf.spbstu.ru

Abstract. The article presents a technique for fabricating nickel island films on oxidized silicon substrates by thermal dewetting of continuous coatings. First, continuous nickel films 5 nm thick were deposited by magnetron sputtering. Then, without exposure to the atmosphere, the coatings were annealed in a vacuum at 450°C for 15–180 min. As a result, the formation of isolated metal islands was on the substrate with transverse dimensions from units to tens of nanometers, depending on the annealing time. The electrical and thermoelectrical characteristics of the produced island films were determined. Attempts to prepare zirconium island films using the same technique were unsuccessful as the technically available annealing temperature

of 650°C proved insufficient for dewetting of coatings made of this material.

Keywords: thin film, island film, nanoparticle, film dewetting, Ni, Zr, thermoelectrical coefficient

For citation: Nguyen V. T. A., Gabdullin P. G., Arkhipov A. V., Modification of morphology of thin nickel and zirconium films on naturally oxidized silicon substrates by annealing in vacuum, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 139–150. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18410>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Металлические наночастицы и кластеры находят все новые области применения в технике и медицине, благодаря своим уникальным свойствам [1 – 4]. Некоторые из их полезных качеств достаточно хорошо известны: например, способность усиливать локальные поля оптических частот за счет локального плазмонного резонанса. Другие особенности наночастиц изучены в меньшей степени. Среди них можно выделить, в частности, способность к низковольтной эмиссии электронов [5 – 10], а также возможность достижения высокой эффективности термоэлектрического преобразования [11–14].

Островковую пленку проводящего материала на плохопроводящей подложке можно классифицировать как неупорядоченный массив наночастиц, обладающих многими свойствами, присущими наночастицам. Это подтверждают результаты экспериментов по изучению эмиссионных свойств островковых пленок углерода и металлов на кремниевых подложках, проводившихся ранее в Санкт-Петербургском политехническом университете и продемонстрировавших способность таких пленок к низковольтной эмиссии электронов [15 – 18]. Однако пленки металлов (Mo, Zr, Ni), которые использовались в работах [17, 18], изначально изготавливались сплошными и приобретали островковую структуру уже в ходе эмиссионных испытаний под действием факторов, связанных с отбором эмиссионного тока. Это затрудняет интерпретацию результатов проведенных исследований.

Задача данной работы состояла в том, чтобы отработать технологию изготовления образцов островковых пленок варьируемой морфологии для продолжения опытов. В качестве материалов покрытий были выбраны цирконий и никель, пленки которых в работах [17, 18] показали способность эмитировать электроны. Преимущество циркония и никеля перед молибденом, пленки которого показали наилучшую эмиссионную способность, состоит в более низкой температуре плавления, что упрощает технологию их термической обработки. При этом для сохранения возможности сопоставления с данными работ [15 – 18] необходимо было использовать те же подложки: кремниевые пластины марки КДБ10 с сохраненным естественным оксидным слоем.

Для получения островковых пленок выбранных металлов планировалось использовать явление агломерации сплошных тонких пленок металлов, нанесенных на несмачиваемые ими диэлектрические подложки, с формированием наноразмерных капель. В англоязычной литературе для такого процесса обычно употребляется термин “solid-state dewetting” [4, 19 – 24], поскольку для его осуществления не требуется плавления материала покрытия. Он протекает под действием сил поверхностного натяжения и может вызываться, в частности, нагревом таких пленок в вакууме или в инертной (либо восстановительной) атмосфере, причем необходимая для этого температура обычно существенно (на сотни градусов) ниже температуры плавления соответствующего металла.

Помимо исследования эмиссионных свойств островковых покрытий (эта часть работы выходит за рамки предмета данной статьи), планировалось проведение начальных опытов по изучению термоэлектрических характеристик контактов металлических островков с подложкой [25]. Цель такого исследования состояла как в проверке справедливости термоэлектрической модели облегченной эмиссии электронов островковыми пленками (предложена в публикациях [18, 26]), так и в изучении возможности их использования в составе эффективных термоэлектрических преобразователей [27].



Использованные методы и материалы

Метод термической агломерации для изготовления островковых покрытий предполагает последовательное проведение двух операций:

- нанесение на поверхность подложки сплошной пленки;
- преобразование этой пленки в островковое покрытие путем отжига.

Обе операции проводились нами в ростовой камере HEX (производство компании Mantis Deposition, Великобритания) без переноса образцов через атмосферу, что позволяло избежать окисления сплошных тонких пленок до их отжига.

Сплошные пленки никеля или циркония толщиной 5 нм наносились на подложки методом магнетронного распыления мишеней из никель-ванадиевого сплава NiV или чистого циркония Zr, соответственно. Для этого использовался двухдюймовый магнетрон, входящий в состав установки HEX. Напряжение и ток разряда были 450 В и 250 мА; процесс проводился при давлении буферного газа (аргона) 10^{-3} мбар и комнатной температуре подложек. Скорость роста пленок при этом составляла $0,3 \text{ \AA}/\text{с}$. Ее определяли методом кварцевых микровесов и дополнительно контролировали по профилограммам механически поврежденных пробных образцов покрытий.

Использование мишеней из немагнитного сплава NiV (при концентрации ванадия 7 вес.%) для нанесения никелевых пленок диктовалось низкой эффективностью магнетронного распыления в отношении ферромагнетиков. Для оценки содержания ванадия в нанесенных покрытиях были проведены специальные измерения методом рентгено-спектрального микроанализа с использованием сканирующего электронного микроскопа. Ввиду низкого значения коэффициента распыления ванадия, его содержание в пленках оказалось незначительным – ниже порога чувствительности метода, который для столь тонких пленок можно оценить как 0,5 – 1,0 вес. %. Такие пленки мы далее называем никелевыми, хотя и понимаем, что они не чисто никелевые, а в них имеется небольшая (сложно определяемая и, вероятно, неоднородно распределенная) примесь ванадия.

Образцы покрытий формировались на подложках размером приблизительно 10×10 мм, вырезанных из пластин кремния марки КДБ10 с ориентацией поверхности (100). Естественный оксидный слой с поверхности подложек не удаляли, органические загрязнения снимали путем механической и ультразвуковой обработки в ацетоне с дальнейшей промывкой изопропиловым спиртом и дистиллированной водой.

Отжиг нанесенных никелевых покрытий в вакууме проводили при температуре 450°C , покрытий из циркония – при $550 - 650^\circ\text{C}$. Время отжига варьировали от 15 до 180 мин. При этом откачка ростовой камеры позволяла ограничивать давление остаточных газов на уровне не хуже 10^{-5} Торр.

Топография приготовленных образцов изучалась при помощи атомно-силового микроскопа (АСМ) NanoDST (Pacific Nanotechnology, США). Измерения проводили на атмосфере в полуконтактном режиме с зондами типа NSG10 (НТ-МДТ, Россия). Этот же микроскоп использовался при проведении термоэлектрических измерений. В данном случае на координатном столике микроскопа устанавливали элемент Пельтье, который позволял регулировать температуру образца в диапазоне $0 - 80^\circ\text{C}$. При этом образец был электрически изолирован от координатного столика, и его потенциал по отношению к зонду микроскопа (электрически соединенному с корпусом) измерялся вольтметром В7-72 (МНИПИ, Беларусь). Зонд мог приводиться в контакт с образцом при выключенной либо включенной обратной связи АСМ; во втором случае микроскоп работал в контактной моде (без вибраций). Для термоэлектрических измерений использовались зонды типа DEP01 (НТ-МДТ, Россия) с «мягким» кантилевером (2,8 Н/м) и иглой, выполненной из высокопроводящего алмаза, легированного бором. Такой зонд был выбран по результатам предварительных испытаний с зондами нескольких типов.

Электрические характеристики пленок измерялись при помощи характериографа Л2-100ТЕКО (Тестприбор, Россия). Измерения вольтамперных характеристик (ВАХ) проводили как «вдоль», так и «поперек» покрытия. При измерении сопротивления пленки зонды устанавливали на расстоянии приблизительно 2 мм друг от друга. При измерении сопротивления контакта пленки с подложкой один из зондов располагали на выбранном участке пленки, а второй – напротив первого, с другой стороны подложки.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Пленки циркония. Результат отжига циркониевых пленок в вакууме представлен на рис. 1 изображениями топографии поверхности образцов до и после отжига различной продолжительности. Можно констатировать, что в этих условиях на них нет очевидных признаков термической агломерации и покрытие остается достаточно однородным. Полная высота рельефа, как и до отжига, лишь немногим превышает 2 нм.

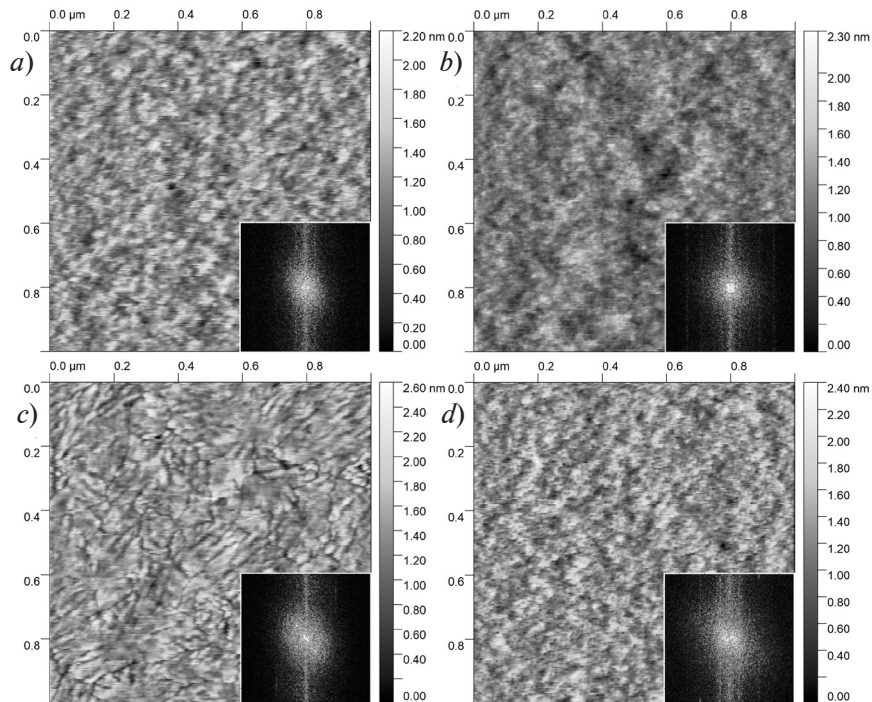


Рис. 1. АСМ-изображения топографии поверхности пленок циркония толщиной 5 нм: *a* – в свежеприготовленном состоянии; *b* – после отжига при 550°C (60 мин); *c* – при 650°C (60 мин); *d* – при 650°C (120 мин).

На вставках: двумерные Фурье-спектры АСМ-изображений

К некоторому исключению можно отнести изображение на рис. 1, *c*; оно приведено для покрытия, которое выдерживали при максимальной (доступной нам) температуре 650°C в течение одного часа. На нем различимы удлиненные кристаллиты, появление которых можно считать признаком начала агломерации покрытия. Мы пришли к такому выводу, учитывая результаты работы [28], где под действием факторов, связанных с отбором эмиссионного тока, наблюдалось формирование именно нитевидных структур при агломерации циркониевых пленок. Эти структуры по форме определенно отличались от округлых наностроек, получающихся при агломерации пленок молибдена, вызванной теми же причинами.

Однако следует признать, что аналогичных признаков начала процесса преобразования морфологии нельзя визуально наблюдать на рис. 1, *d*, полученном для покрытия, подвергнутого термообработке при той же самой температуре (650°C) в течение вдвое большего времени (2 ч). Это может свидетельствовать о значительном разбросе свойств поверхности использованных, естественно окисленных подложек, оказывающем влияние на стабильность пленок. Наличие подобного разброса отмечалось ранее по результатам экспериментов с пленками металлов [17, 18] и углерода [15, 16].

Для выявления более тонких особенностей АСМ-изображений, не определяемых визуально, был предпринят их двумерный Фурье-анализ путем применения к ним функции 2D FFT пакета Gwyddion 2.62. Перед этим исходные данные подвергались одинаковой цифровой обработке, направленной на снижение роли измерительных артефактов, таких как смещение строк из-за нестабильности состояния зонда. Полученные Фурье-спектры топографии пленок приведены на вставках на рис. 1. Можно констатировать их некоторое



уширение с повышением температуры и времени обжига, отражающее увеличение «зернистости» изображений с пространственным масштабом порядка 10 нм. Такое уширение может свидетельствовать о перестройке наноструктуры пленок, которая начинается при отжиге.

Пленки никеля. Для преобразования структуры сплошного никелевого покрытия толщиной 5 нм к островковой, оказалось достаточным его отжиг при температуре 450°C. На рис. 2, *a* приведено типичное АСМ-изображение поверхности сплошной никелевой пленки после магнетронного напыления. Рис. 2, *b – d* представляют топографию образцов после их прогрева в вакууме продолжительностью 30, 60 и 120 мин. Очевидно, что в результате прогрева происходит агломерация пленки с формированием округлых островков.

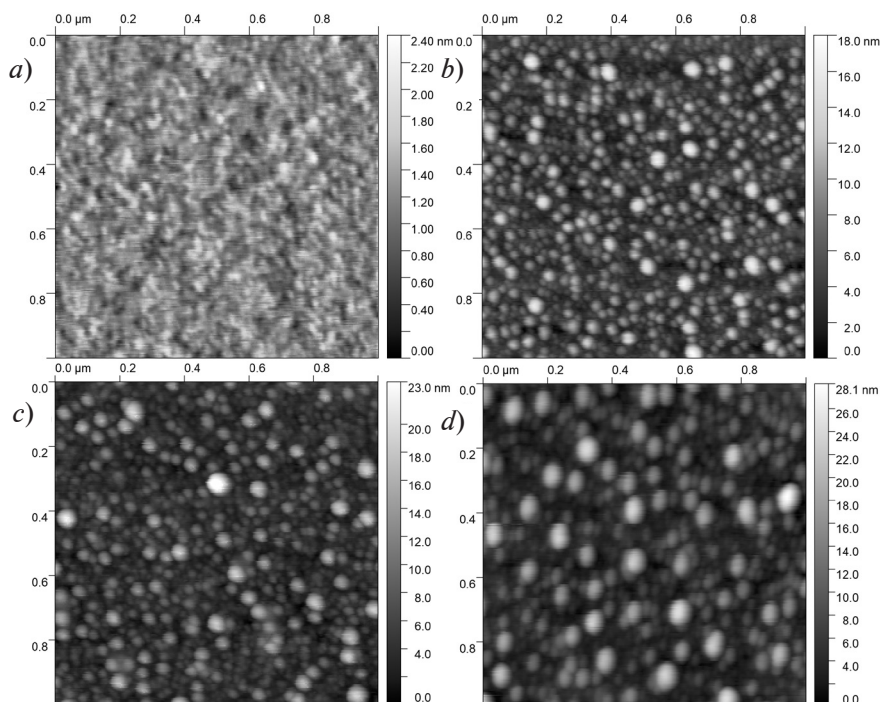


Рис. 2. АСМ-изображения топографии пленок никеля начальной толщины 5 нм: *a* – свежеприготовленные пленки; *b – d* – после отжига в вакууме при 450°C в течение 30 мин (*b*), 60 мин (*c*) и 120 мин (*d*)

Результаты статистической обработки серии АСМ-изображений топографии пленок приведены на рис. 3. Рис. 3, *a* представляет зависимости от времени отжига для стандартизованных «параметров шероховатости» (roughness parameters) поверхности пленок, вычисленных средствами пакета Gwyddion как для максимальных, так и медианных значений высоты выступающих островков. График максимальной высоты пиков (т.е. высоты самых крупных островков, отсчитываемой от медианной плоскости) показывает монотонный рост этого параметра с увеличением времени отжига; его наибольшее значение близко к 20 нм. При этом медианное значение высоты остается в диапазоне от 5 до 8 нм, что приблизительно соответствует исходной толщине покрытия.

На рис. 3, *b* и *d* представлены гистограммы значений высоты отдельных островков, а на рис. 3, *c* и *e* – гистограммы их распределения по латеральным размерам. Эти данные относятся к пленкам, подвергнутым прогреву в течение 30 и 120 мин. Большему времени отжига соответствуют более широкие распределения этих параметров, а также приблизительно 50%-й рост максимальных латеральных размеров островков по мере отжига покрытий, что типично для термической агломерации [19]. После двухчасового отжига радиус крупных островков достигал 35 – 40 нм при высоте 20 – 25 нм (см. рис. 3 *d, e*).

На рис. 4 представлены результаты измерения поверхностной проводимости покрытий. Они демонстрируют качественное изменение характера их проводимости после отжига. Пленки, не подвергавшиеся термической обработке, несмотря на малую среднюю

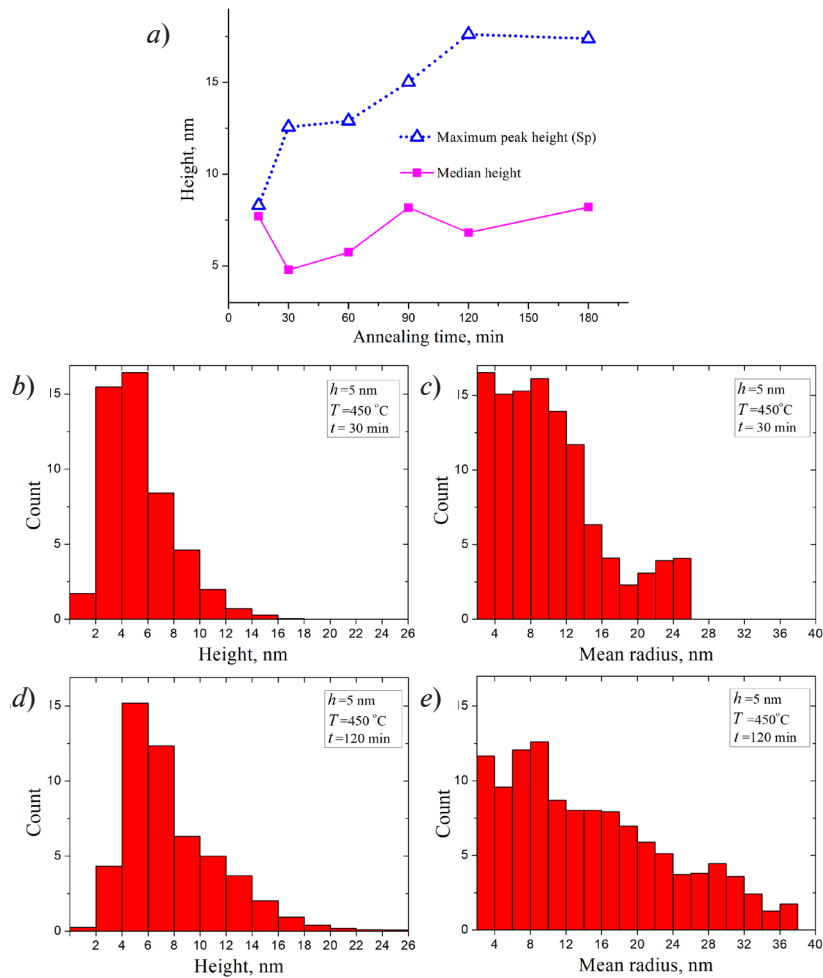


Рис. 3. Результаты обработки серии АСМ-изображений топографии пленок Ni первоначальной толщины 5 нм: *a* – зависимости параметров шероховатости поверхности образцов от времени их отжига при 450°C (символы \blacksquare , \triangle – медианные и максимальные значения высоты); *b*, *d* – распределения островков по высоте, *c*, *e* – по радиусу, для покрытий после 30 мин (*b*, *c*) и 2 ч (*d*, *e*) отжига

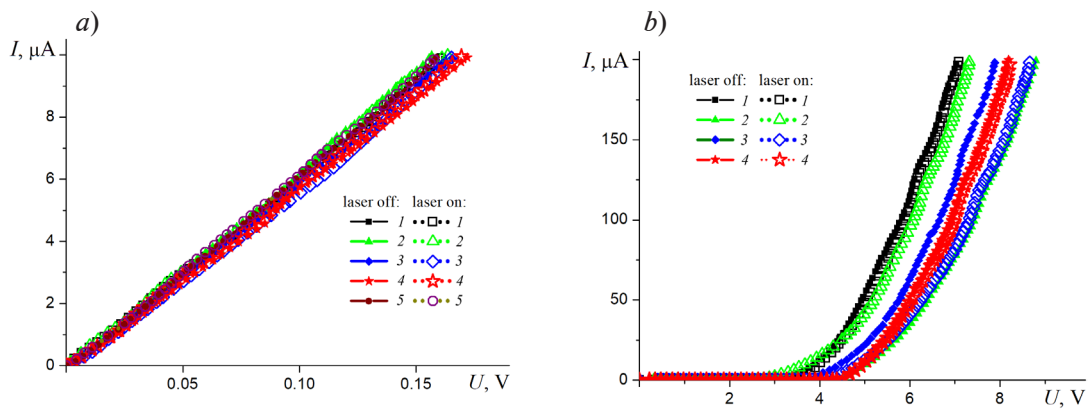


Рис. 4. Результаты измерения проводимости вдоль никелевых покрытий: *a* – не отожженного, *b* – отожженного в вакууме при 450°C в течение 60 мин. Кривые под разными номерами соответствуют разным парам точек контакта на одном образце



толщину, являются сплошными – об этом свидетельствует омический (линейный) вид вольтамперной характеристики и высокая электропроводность при малом разбросе электрических параметров (рис. 4, *a*). Вольтамперные характеристики отожженного покрытия (рис. 4, *b*) нелинейны и существенно меняются при перемещении контактов вдоль поверхности, а для получения заданной величины тока здесь требуются существенно большие напряжения. Это естественно объясняется прерыванием сплошных токовых путей по металлической пленке при ее разбиении на островки. При этом пленки ни до отжига, ни после него не обладали свойством фотопроводимости: освещение их красным светом полупроводникового лазера не приводило к изменению ВАХ (пометки “laser on/off” в легендах графиков рис. 4 означают включенный/выключенный лазер).

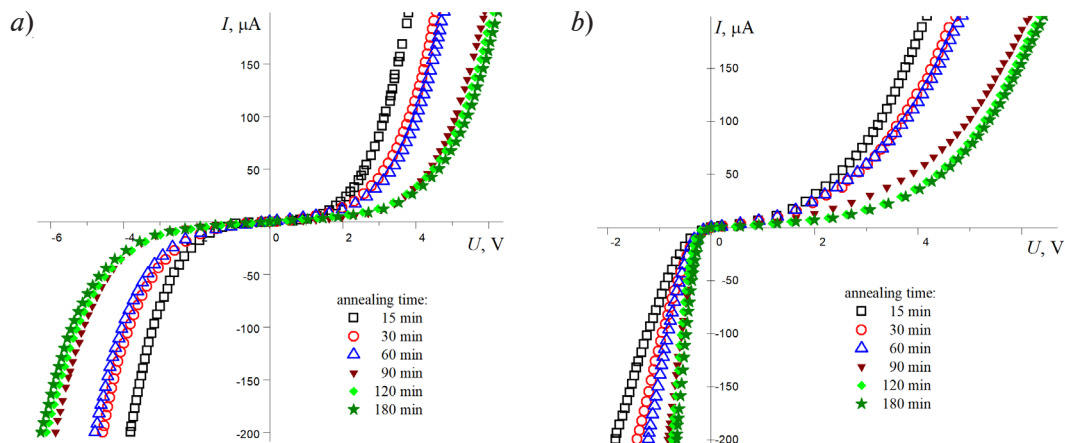


Рис. 5. ВАХ «вдоль поверхности» (*a*) и «сквозь подложку» (*b*) для образцов пленок никеля толщиной 5 нм после отжига разной продолжительности при 450°C

Рис. 5, *a* иллюстрирует изменение характеристик проводимости вдоль поверхности образцов никелевых покрытий с увеличением времени отжига. Примечательно, что ВАХ нелинейны уже при минимальном времени отжига (15 мин), что очевидно отражает уже совершившуюся к этому моменту агломерацию пленок. Нелинейный характер ВАХ островковых пленок можно объяснить как проводимостью вдоль пленки по механизму туннелирования носителей заряда между металлическими островками, так и проводимостью через подложку. При втором варианте носителям приходится дважды преодолевать интерфейс между подложкой и покрытием, частью которого является сохраненный слой диоксида кремния. Совокупность косвенных признаков говорит скорее в пользу этого (второго) предположения. Один из таких признаков – это гладкий и воспроизводимый вид ВАХ на рис. 4, *b* и 5, *a*: протекание туннельного тока по островковым пленкам обычно сопровождается их «электроформовкой» [29], которая проявляется в виде нестабильности и гистерезиса токовых зависимостей. Другим признаком можно считать относительно медленное и монотонное (с поправкой на отмеченный выше разброс свойств подложек) изменение вида ВАХ при увеличении времени отжига – в случае туннельной проводимости можно было бы ожидать более резкого изменения электропроводности вдоль поверхности при наблюдаемом расширении зазоров между островками.

Еще одним аргументом в пользу протекания тока через подложку при измерении ВАХ «вдоль поверхности» может служить вид токовых характеристик, измерившихся в направлении «сквозь подложку», между одной из точек покрытия и омическим контактом на противоположной стороне кремниевой пластины. Такие ВАХ приведены на рис. 5, *b*. Их форма асимметрична, и степень асимметрии растет с увеличением времени отжига. При этом одна из ветвей (правая) каждой из приведенных зависимостей близка по форме и количественным параметрам к симметричным ветвям ВАХ «вдоль покрытия» для соответствующего образца (см. рис. 5, *a*). Другая ветвь (левая) характеризуется большим током. Такие закономерности можно легко трактовать, если считать, что островки отожженных покрытий отделены от подложки контактами Шоттки, ВАХ которых близки к приведенным на рис. 5, *b*. При измерениях «вдоль поверхности» (см. рис. 5, *a*), на пути тока

окажутся два таких контакта, включенных встречно друг другу, и результирующая окажется симметричной – ее ветви будут соответствовать обратной ветви ВАХ контакта Шоттки. При этом зависимость формы ВАХ от длительности отжига покрытия может определяться уменьшением эффективной площади контакта по мере изоляции островков покрытия друг от друга.

Образцы покрытий и подложек затем использовались в экспериментах по определению термоэлектрических свойств их наноконтактов с зондом атомно-силового микроскопа. Измеренные значения термоэлектрического коэффициента S для наноконтакта зонда с неотожженной пленкой и с подложкой без металлического покрытия были низкими (не превышали приблизительно 4 мкВ/К). Значения коэффициента Зеебека такого порядка типичны для металлов, хотя острие используемого АСМ-зонда было изготовлено из полупроводящего легированного алмаза. Значения же коэффициента Зеебека для полупроводников, как правило, на 1 – 2 порядка выше. Этот результат подтверждает известную из литературы (см., например, статью [30]) общую закономерность: подавление термоэлектрического эффекта в микро- и наноконтактах.

Вместе с тем, опыты с островковой пленкой никеля, полученной отжигом сплошной пленки толщиной 5 нм при 450°C в течение 60 мин (см. рис. 1, с), принесли качественно иной результат. При контакте такого образца, нагретого до 65°C, с зондом, имевшим температуру окружающей среды 20°C, регистрировалась термоэлектрическая разность потенциалов величиной до 3,4 мВ, что соответствует значению коэффициента Зеебека $S \approx 75$ мкВ/К. Это превосходит типичные значения S для металлов и по порядку величины соответствует типичным значениям для легированных полупроводников. Таким образом, в данном случае существенного подавления термоэлектрического эффекта не происходило. Это может быть связано с размерными эффектами в наноструктурах никеля либо с особенностями интерфейса между островком и подложкой. Этот интерфейс обладает относительно низкой электропроводностью (ввиду наличия слоя оксида и барьера Шоттки) и при этом достаточно высоким качеством акустического контакта. Поперечный размер интерфейса составляет около 20 нм, что существенно больше размера контакта зонда АСМ с плоской пленкой или подложкой. Все это способствует эффективному преобразованию потока тепла из электронной (в островке) в фононную (в подложке) форму или обратно. Принципиальная возможность осуществления эффективного термоэлектрического преобразования в таких условиях анализировалась в недавней теоретической работе [27].

Заключение

В результате проведенного исследования, нацеленного на разработку технологии получения островковых пленок никеля на окисленных кремниевых подложках марки КДБ10, такая технология была отработана и проведена методом термической агломерации. Для достижения поставленной цели оказалось достаточным прогреть сплошные покрытия толщиной 5 нм в вакууме при температуре 450°C. Параметры технологического процесса, обнаруженные нами в литературных источниках, нельзя было использовать на практике без нашей дополнительной проверки, поскольку известно, что температура агломерации тонких пленок зависит не только от материала покрытия, но и от его толщины [24], наличия примесей [31], материала подложки [32]. По совокупности этих показателей, наиболее близкой к условиям наших экспериментов с никелем представляется работа [3], где изучалась агломерация при отжиге изначально сплошных пленок никеля толщиной 3,0 нм, нанесенных на пластины Si (100) со слоем оксида толщиной 4,5 нм. Авторы работы указывали, что разрушение сплошной структуры пленки (появление отверстий) происходило уже при температуре отжига 280°C, однако для формирования изолированных островков требовался нагрев до 450°C, а это вполне согласуется с результатами проведенных нами экспериментов.

Поперечный размер (радиус) никелевых островков, полученных в наших экспериментах, составлял от нескольких единиц до 35 – 40 нм. Тестирование электрических характеристик пленок показало, что островки электрически слабо связаны друг с другом – электрическая проводимость вдоль покрытия в основном определяется токами, протекающими через подложку, интерфейсы между островками и подложкой.



Как морфологические, так и электрические параметры покрытий можно было варьировать через изменение времени отжига. При тестировании аналогичной методики в отношении пленок циркония той же средней толщины (5 нм) оказалось, что нагрева до 650°C недостаточно для преобразования их структуры к островковой.

Первые эксперименты по определению термоэлектрических параметров nanoостровковых пленок никеля с использованием атомно-силового микроскопа показали целесообразность дальнейшего изучения таких структур для нахождения способов достижения повышенной эффективности термоэлектрического преобразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Daniel M.-C., Astruc D. Gold nanoparticles: Assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology // *Chemical Reviews*. 2004. Vol. 104. No. 1. Pp. 293–346.
2. Yeh Y.-C., Creran B., Rotello V. M. Gold nanoparticles: preparation, properties, and applications in bionanotechnology // *Nanoscale*. 2012. Vol. 4. No. 6. Pp. 1871–1880.
3. Dufourcq J., Mur P., Gordon M. J., Minoret S., Coppard R., Baron T. Metallic nano-crystals for flash memories // *Materials Science & Engineering C*. 2007. Vol. 27. No. 5–8. Pp. 1496–1499.
4. Kitsyuk E. P., Vasilevskaya Yu. O., Volovlikova O. V., Eganova E. M., Dudin A. A. Catalytic particles formation from thin nickel films for the synthesis of multi-walled carbon nanotubes // *Carbon*. 2024. Vol. 229. No. 11. P. 119509.
5. Filip V., Filip L. D., Wong H. Review on peculiar issues of field emission in vacuum nanoelectronic devices // *Solid State Electronics*. 2017. Vol. 138. December. Pp. 3–15.
6. Filip L. D., Palumbo M., Carey J. D., Silva S. R. P. Two-step electron tunneling from confined electronic states in a nanoparticle // *Physical Review B*. 2009. Vol. 79. No. 24. P. 245429.
7. Gloskovskii A., Valdaitsev D. A., Cinchetti M., et al. Electron emission from films of Ag and Au nanoparticles excited by a femtosecond pump-probe laser // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. No. 19. P. 195427.
8. Fursey G., Konorov P., Pavlov B., Yafyasov A. Dimensional quantization and the resonance concept of the low-threshold field emission // *Electronics*. 2015. Vol. 4. No. 4. Pp. 1101–1108.
9. Давидович М. В., Яфаров Р. К. Импульсные и статические автоэмиссионные ВАХ углеродных нанокластерных структур: эксперимент и его интерпретация // *Журнал технической физики*. 2019. Т. 89. № 8. С. 1282–1293.
10. Kleshch V. I., Porshyn V., Lützenkirchen-Hecht D., Obratsov A. N. Coulomb blockade and quantum confinement in field electron emission from heterostructured nanotips // *Physical Review B*. 2020. Vol. 102. No. 23. P. 235437.
11. Bergfield J. P., Solis M. A., Stafford C. A. Giant thermoelectric effect from transmission supernodes // *ACS (American Chemical Society) Nano*. 2010. Vol. 4. No. 9. Pp. 5314–5320.
12. Dubi Y., Di Ventra M. Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions // *Reviews of Modern Physics*. 2011. Vol. 83. No. 1. Pp. 131–155.
13. Karlström O., Linke H., Karlström G., Wacker A. Increasing thermoelectric performance using coherent transport // *Physical Review B*. 2011. Vol. 84. No. 11. P. 113415.
14. Sadeghi H. Quantum and phonon interference-enhanced molecular-scale thermoelectricity // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2019. Vol. 123. No. 20. Pp. 12556–12562.
15. Andronov A., Budylna E., Shkitun P., Gabdullin P., Gnuchev N., Kvashenkina O., Arkhipov A. Characterization of thin carbon films capable of low-field electron emission // *Journal of Vacuum Science & Technology B*. 2018. Vol. 36. No. 2. P. 02C108.
16. Gabdullin P., Zhurkin A., Osipov V., Besedina N., Kvashenkina O., Arkhipov A. Thin carbon films: Correlation between morphology and field-emission capability // *Diamond & Related Materials*. 2020. Vol. 105. May. P. 107805.
17. Бизяев И. С., Габдуллин П. Г., Гнучев Н. М., Архипов А. В. Низкопороговая полевая эмиссия электронов тонкими пленками металлов // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2021. Т. 14. № 1. С. 111–127.

18. **Bizyaev I., Gabdullin P., Chumak M., Babyuk V., Davydov S., Osipov V., Kuznetsov A., Kvashenkina O., Arkhipov A.** Low-field electron emission capability of thin films on flat silicon substrates: Experiments with Mo and general model for refractory metals and carbon // *Nanomaterials*. 2021. Vol. 11. No. 12. P. 3350.
19. **Thompson C. V.** Solid-state dewetting of thin films // *Annual Review of Materials Research*. 2012. Vol. 42. No. 1. Pp. 399–434.
20. **Ruffino F., Grimaldi G.** Controlled dewetting as fabrication and patterning strategy for metal nanostructures // *Physica Status Solidi A*. 2015. Vol. 212. No. 8. Pp. 1662–1684.
21. **Niekil F., Schweizer P., Kraschewski S. M., Butz B., Spiecker E.** The process of solid-state dewetting of Au thin films studied by in situ scanning transmission electron microscopy // *Acta Materialia*. 2015. Vol. 90. 15 May. Pp. 118–132.
22. **Kovalenko O., Szaby S., Klinger L., Rabkin E.** Solid state dewetting of polycrystalline Mo film on sapphire // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 139. 15 October. Pp. 51–61.
23. **Weil K. S., Mast E. S., Sprenkle V. L.** Agglomeration behavior of solid nickel on polycrystalline barium titanate // *Materials Letters*. 2007. Vol. 61. No. 28. Pp. 4993–4996.
24. **Alburquenque D., Del Canto M., Arenas C., Tejo F., Pereira A., Escrig J.** Dewetting of Ni thin films obtained by atomic layer deposition due to the thermal reduction process: Variation of the thicknesses // *Thin Solid Films*. 2017. Vol. 638. 30 September. Pp. 114–118.
25. **Трофимович К. Р., Габдуллин П. Г., Архипов А. В.** Экспериментальная установка для исследования особенностей термоэлектрического эффекта в наноструктурах // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2023. Т. 16. № 4. С. 101–117.
26. **Arkhipov A. V., Eidelman E. D., Zhurkin A. M., Osipov V. S., Gabdullin P. G.** Low-field electron emission from carbon cluster films: Combined thermoelectric/hot-electron model of the phenomenon // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2020. Vol. 28. No. 4. Pp. 286–294.
27. **Arkhipov A., Trofimovich K., Arkhipov N., Gabdullin P.** Phonon drag contribution to thermopower for a heated metal nanoisland on a semiconductor substrate // *Nanomaterials*. 2024. Vol. 14. No. 20. P. 1684.
28. **Бизяев И. С., Карасев П. А., Карабешкин К. В., Габдуллин П. Г., Архипов А. В.** Трансформация структуры тонких металлических пленок при активировании их способности к низковольтной эмиссии электронов // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. 2024. Т. 17. № 2. С. 80–93.
29. **Fedorovich R. D., Naumovets A. G., Tomchuk P. M.** Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles // *Physics Reports*. 2000. Vol. 328. No. 2–3. Pp. 73–179.
30. **Weber L., Lehr M., Gmelin E.** Reduction of the thermopower in semiconducting point contacts // *Physical Review B*. 1992. Vol. 46. No. 15. Pp. 9511–9514.
31. **Barda H., Rabkin E.** Improving the thermal stability of nickel thin films on sapphire by a minor alloying addition of gold // *Applied Surface Science*. 2019. Vol. 484. 1 August. Pp. 1070–1079.
32. **Nsimama P. D., Herz A., Wang D., Schaaf P.** Influence of the substrate on the morphological evolution of gold thin films during solid-state dewetting // *Applied Surface Science*. 2016. Vol. 388. Pt. A. Pp. 475–482.

REFERENCES

1. **Daniel M.-C., Astruc D.** Gold nanoparticles: Assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology, *Chem. Rev.* 104 (1) (2004) 293–346.
2. **Yeh Y.-C., Creran B., Rotello V. M.** Gold nanoparticles: preparation, properties, and applications in bionanotechnology, *Nanoscale*. 4 (6) (2012) 1871–1880.
3. **Dufourcq J., Mur P., Gordon M. J., et al.** Metallic nano-crystals for flash memories, *Mater. Sci. Eng. C*. 27 (5–8) (2007) 1496–1499.
4. **Kitsyuk E. P., Vasilevskaya Yu. O., Volovlikova O. V., et al.** Catalytic particles formation from thin nickel films for the synthesis of multi-walled carbon nanotubes, *Carbon*. 229 (11) (2024) 119509.
5. **Filip V., Filip L.D., Wong H.** Review on peculiar issues of field emission in vacuum nanoelectronic devices, *Solid State Electron*. 138 (Dec) (2017) 3–15.



6. **Filip L. D., Palumbo M., Carey J. D., Silva S. R. P.**, Two-step electron tunneling from confined electronic states in a nanoparticle, *Phys. Rev. B.* 79 (24) (2009) 245429.
7. **Gloskovskii A., Valdaitsev D.A., Cinchetti M., et al.**, Electron emission from films of Ag and Au nanoparticles excited by a femtosecond pump-probe laser, *Phys. Rev. B.* 77 (19) (2008) 195427.
8. **Fursey G., Konorov P., Pavlov B., Yafyasov A.**, Dimensional quantization and the resonance concept of the low-threshold field emission, *Electronics.* 4 (4) (2015) 1101–1108.
9. **Davidovich M. V., Yafarov R. K.**, Pulsed and static field emission VAC of carbon nanocluster structures: experiment and its interpretation, *Tech. Phys.* 64 (8) (2019) 1210–1220.
10. **Kleshch V. I., Porshyn V., Lützenkirchen-Hecht D., Obratsov A. N.**, Coulomb blockade and quantum confinement in field electron emission from heterostructured nanotips, *Phys. Rev. B.* 102 (23) (2020) 235437.
11. **Bergfield J. P., Solis M. A., Stafford C. A.**, Giant thermoelectric effect from transmission supernodes, *ACS Nano.* 4 (9) (2010) 5314–5320.
12. **Dubi Y., Di Ventra M.**, Colloquium: Heat flow and thermoelectricity in atomic and molecular junctions, *Rev. Mod. Phys.* 83 (1) (2011) 131–155.
13. **Karlström O., Linke H., Karlström G., Wacker A.**, Increasing thermoelectric performance using coherent transport, *Phys. Rev. B.* 84 (11) (2011) 113415.
14. **Sadeghi H.**, Quantum and phonon interference-enhanced molecular-scale thermoelectricity, *J. Phys. Chem. C.* 123 (20) (2019) 12556–12562.
15. **Andronov A., Budylna E., Shkitun P., et al.**, Characterization of thin carbon films capable of low-field electron emission, *J. Vac. Sci. Technol. B.* 36 (2) (2018) 02C108.
16. **Gabdullin P., Zhurkin A., Osipov V., et al.**, Thin carbon films: correlation between morphology and field-emission capability, *Diam. Relat. Mater.* 105 (May) (2020) 107805.
17. **Bizyaev I. S., Gabdullin P. G., Gnuchev N. M., Arkhipov A. V.**, Low-field electron emission from thin films of metals, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 14 (1) (2021) 105–120.
18. **Bizyaev I., Gabdullin P., Chumak M., et al.**, Low-field electron emission capability of thin films on flat silicon substrates: Experiments with Mo and general model for refractory metals and carbon, *Nanomater.* 11 (12) (2021) 3350.
19. **Thompson C. V.**, Solid-state dewetting of thin films, *Annu. Rev. Mater. Res.* 42 (1) (2012) 399–434.
20. **Ruffino F., Grimaldi G.**, Controlled dewetting as fabrication and patterning strategy for metal nanostructures, *Phys. Status Solidi A.* 212 (8) (2015) 1662–1684.
21. **Niekil F., Schweizer P., Kraschewski S. M., et al.**, The process of solid-state dewetting of Au thin films studied by in situ scanning transmission electron microscopy, *Acta Mater.* 90 (15 May) (2015) 118–132.
22. **Kovalenko O., Szaby S., Klinger L., Rabkin E.**, Solid state dewetting of polycrystalline Mo film on sapphire, *Acta Mater.* 139 (15 Oct) (2017) 51–61.
23. **Weil K. S., Mast E. S., Sprenkle V. L.**, Agglomeration behavior of solid nickel on polycrystalline barium titanate, *Mater. Lett.* 61 (28) (2007) 4993–4996.
24. **Alburquenque D., Del Canto M., Arenas C., et al.**, Dewetting of Ni thin films obtained by atomic layer deposition due to the thermal reduction process: Variation of the thicknesses, *Thin Solid Films.* 638 (30 Sept) (2017) 114–118.
25. **Trofimovich K. R., Gabdullin P. G., Arkhipov A. V.**, An experimental apparatus for studying the characteristics of thermoelectric effect in nanostructures, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 16 (4) (2023) 101–117 (in Russian).
26. **Arkhipov A. V., Eidelman E. D., Zhurkin A. M., et al.**, Low-field electron emission from carbon cluster films: combined thermoelectric/hot-electron model of the phenomenon, *Fuller. Nanotub. Car. N.* 28 (4) (2020) 286–294.
27. **Arkhipov A., Trofimovich K., Arkhipov N., Gabdullin P.** Phonon drag contribution to thermopower for a heated metal nanoisland on a semiconductor substrate, *Nanomater.* 14 (20) (2024) 1684.
28. **Bizyaev I. S., Karasev P. A., Karabeshkin K. V., et al.**, Transformation of the structure of thin metal films upon activation of their ability to low-voltage electron emission // *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 17 (2) (2024) 80–93 (in Russian).
29. **Fedorovich R. D., Naumovets A. G., Tomchuk P. M.**, Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles, *Phys. Rep.* 328 (2–3) (2000) 73–179.

30. Weber L., Lehr M., Gmelin E., Reduction of the thermopower in semiconducting point contacts, Phys. Rev. B. 46 (15) (1992) 9511–9514.

31. Barda H., Rabkin E., Improving the thermal stability of nickel thin films on sapphire by a minor alloying addition of gold, Appl. Surf. Sci. 484 (1 Aug) (2019) 1070–1079.

32. Nsimama P. D., Herz A., Wang D., Schaaf P., Influence of the substrate on the morphological evolution of gold thin films during solid-state dewetting, Appl. Surf. Sci. 388 (A) (2016) 475–482.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НГУЕН Ван Ту Ань – аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

anh.spbpu@gmail.com

ORCID: 0009-0004-7198-6329

ГАБДУЛЛИН Павел Гарифович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

pavel-gabdullin@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-2519-2577

АРХИПОВ Александр Викторович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

arkhipov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3321-7797

THE AUTHORS

NGUYEN Van Tu Ahn

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

anh.spbpu@gmail.com

ORCID: 0009-0004-7198-6329

GABDULLIN Pavel G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

pavel-gabdullin@yandex.ru

ORCID: 0000-0002-2519-2577

ARKHIPOV Alexander V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

arkhipov@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3321-7797

Статья поступила в редакцию 09.02.2025. Одобрена после рецензирования 19.05.2025. Принята 19.05.2025.

Received 09.02.2025. Approved after reviewing 19.05.2025. Accepted 19.05.2025.


Физическая оптика

Научная статья


УДК 535.412; 532-3

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18411>

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ СТРУКТУР, ЗАПИСАННЫХ В КОНТРНАПРАВЛЕННОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЕ НА ФОТОЭМУЛЬСИИ, ПОДВЕРГНУТОЙ УФ-ОБЛУЧЕНИЮ

С. Н. Гуляев¹ , Н. М. Ганжерли², Д. А. Ильюшина¹, И. А. Маурер²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия
 Gulyaev@rphf.spbstu.ru

Аннотация. В статье представлено экспериментальное доказательство возможности реализовать рельефно-фазовую запись голографической информации с помощью оптической схемы регистрации во встречных пучках. Ранее это было сделано только для позитивных фоторезистов, имеющих чувствительность на три порядка ниже, чем у галоидосеребряной фотоэмульсии, обладающей над ними и другими преимуществами. Экспериментально показано, что ключевыми операциями фотохимической обработки галоидосеребряных фотоэмульсий являются коротковолновое УФ-облучение фотопластинок ртутной лампой ($\lambda < 250$ нм) и их последующее кратковременное (10 с) травление в ледяной уксусной кислоте. Проанализированы механизмы формирования поверхностного рельефа в разных диапазонах регистрируемых пространственных частот и показаны существенные позитивные отличия свойств рельефно-фазовых структур на галоидосеребряных фотоэмульсиях от аналогов, записанных на фоторезисте.

Ключевые слова: контрнаправленная схема, дифракционная эффективность, галоидосеребряная фотоэмульсия, голографическая решетка, коротковолновое УФ-излучение, поверхностный рельеф

Для цитирования: Гуляев С. Н., Ганжерли Н. М., Ильюшина Д. А., Маурер И. А. Особенности формирования голографических структур, записанных в контрнаправленной оптической схеме на фотоэмульсии, подвергнутой УФ-облучению // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 151–166. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18411>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18411>

FORMATION FEATURES OF HOLOGRAPHIC STRUCTURES RECORDED IN A COUNTER-DIRECTIONAL OPTICAL SCHEME ON THE PHOTOEMULSION EXPOSED TO SHORT-WAVE UV RADIATION

S. N. Gulyaev¹ , N. M. Ganzherli², D. A. Ilyushina¹, I. A. Maurer²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

 Gulyaev@rphf.spbstu.ru

Abstract. The article presents an experimental proof that it is possible to implement relief-phase recording of holographic information using an optical registration scheme in counter-propagating beams. Previously, this was done only for positive photoresists having a sensitivity three orders of magnitude lower than that of silver-halide photographic emulsion with other advantages. It has been experimentally shown that the key operations of photochemical processing of silver halide photographic emulsions are short-wavelength UV irradiation of photographic plates with a mercury lamp ($\lambda < 250$ nm) and their subsequent short-term (10 s) etching in glacial acetic acid. The mechanisms of surface relief formation in different ranges of recorded spatial frequencies were analyzed, and significant positive differences in the properties of relief-phase structures on silver halide photographic emulsions were shown compared to their counterparts recorded on photoresist.

Keywords: counter-directional scheme, diffraction efficiency, silver halide photoemulsion, holographic grating, surface relief

For citation: Gulyaev S. N., Ganzherli N. M., Ilyushina D. A., Maurer I. A., Formation features of holographic structures recorded in a counter-directional optical scheme on the photoemulsion exposed to short-wave UV radiation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 151–166. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18411>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Голографическая схема записи во встречных пучках (контрнаправленная схема) была предложена Ю. Н. Денисюком в 1962 году [1]. Такая схема регистрации голограмм широко используется в изобразительной голографии для получения трехмерных изображений реальных объектов. Голографические структуры, полученные этим методом, являются отражающими и, в случае плоских объектного и опорного пучков, представляют собой набор параллельных плоскостей (штрихов), связанных с вариациями показателя преломления внутри светочувствительной среды (рис. 1, *a*).

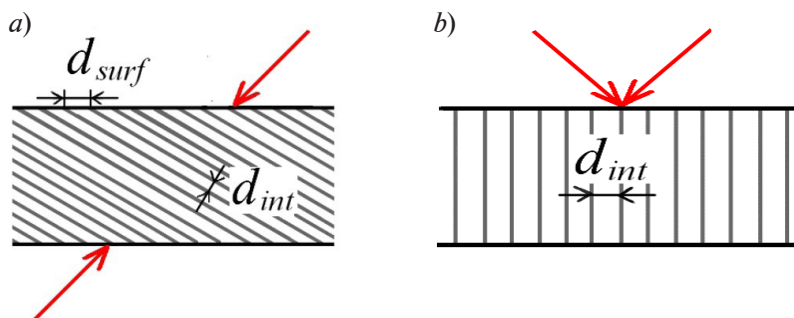


Рис. 1. Оптические схемы регистрации трехмерных изображений объекта: контрнаправленная (*a*) и схема в сходящихся лазерных пучках (*b*); d_{int} , d_{surf} – периоды внутренней голографической структуры (HS) и HS на ее поверхности, соответственно

Период внутренней голографической структуры d_{int} слабо зависит от углов падения опорного и объектного пучков света на записывающую среду и примерно равен половине длины волны света λ в светочувствительной среде $d_{int} = \lambda/2n_0$ (n_0 – средний показатель преломления светочувствительной среды). Поскольку штрихи внутренней структуры входят на поверхность под косым углом (см. рис. 1, *a*), период голографической структуры на поверхности светочувствительной среды d_{surf} существенно отличается по величине от периода внутренней структуры d_{int} . Например, в контрнаправленной схеме записи на

рис. 2, *a* лазерный пучок (объектный) является обращенным по отношению к падающему (опорному) пучку. В данном случае пространственный период решетки на поверхности можно варьировать в широких пределах за счет изменения наклона штрихов решетки внутри фотоматериала согласно формуле

$$d_{surf} = \lambda / (2 \cos \theta_0). \quad (1)$$

При этом пространственная частота голографической структуры на поверхности составляет $\nu_{surf} = 1/d_{surf}$ и изменяется в диапазоне $0 - 3175 \text{ мм}^{-1}$ (рис. 2, *b*) в зависимости от угла поворота фотопластинки θ_0 , которая помещается перед зеркалом (рис. 2, *a*). График на рис. 2, *b* соответствует случаю, когда при голографической регистрации используется гелий-неоновый лазер с длиной волны $\lambda = 0,63 \text{ мкм}$.

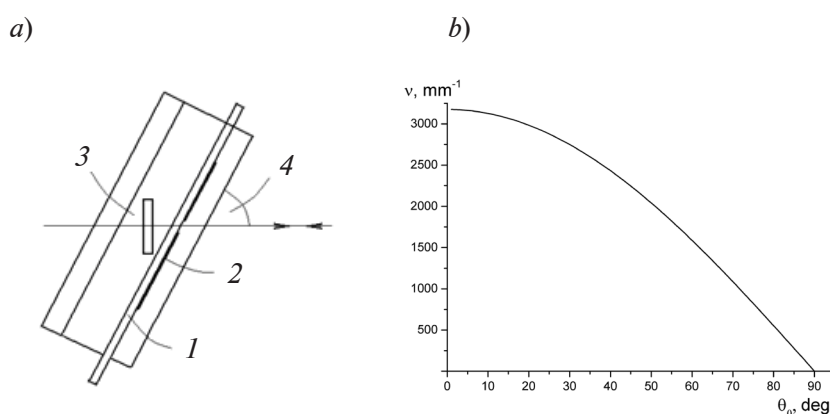


Рис. 2. Возможность варьирования поверхностной пространственной частоты SF ν : *a* – контрнаправленная схема установки; *b* – зависимость этой частоты от угла поворота фотопластинки θ_0 .

1 – фотопластинка; 2 – диафрагма, 3 – зеркало, 4 – угол поворота фотопластинки

В идеализированной голографической структуре, записанной в контрнаправленной схеме (рис. 3, *a*), поверхностный период не может реализоваться, и вся структура является чисто объемной, работающей на отражение. Однако в реальных условиях эксперимента, например, при голографической регистрации в галоидосеребряной фотоэмульсии (*англ.* silver halide photoemulsion (SHP)), искажения внутренней структуры штрихов серебряного (Ag-) изображения у поверхности светочувствительной среды (рис. 3, *b*) могут привести к существованию поверхностной решетки с оптическими свойствами, которые существенно отличаются от дифракционных свойств внутренней объемной решетки. Формирование поверхностной решетки может быть результатом изменения формы штрихов решетки вследствие неоднородности процессов фотохимической обработки по толщине SHP. Дополнительным фактором, способствующим возникновению поверхностной голографической структуры, может быть появление периодического поверхностного рельефа (рис. 3, *c*), что связано с объемом, занимаемым зернами серебра в проявленном фотоматериале, а также с переменной задубленностью (структурированностью) поверхностного слоя желатина [2]. Создать поверхностный рельеф можно и принудительно: путем внешнего избирательного воздействия на желатин светочувствительного слоя, например, коротковолновым ультрафиолетовым излучением [3].

В экспериментальных условиях особенно важно целенаправленно формировать поверхностную структуру в виде рельефа при одновременном устранении поглощающей внутренней решетки, так как это позволяет получать голографические пространственно-периодические структуры с высокой эффективностью и малой угловой селективностью, что востребовано для ряда технологических применений в оптике (рис. 3, *d*). Впервые такая методика была реализована в работе [4], где были использованы тонкие слои позитивного фоторезиста. В таком светочувствительном материале участки, наиболее засвеченные видимым светом, разрушаются в процессе проявления и растворяются в травителе (рис. 4, *a*). Штрихи внутренней решетки, изображенные на рис. 4, *a*, соответствуют

узловым плоскостям с наименьшей интенсивностью при экспонировании фоторезиста когерентным светом аргонового лазера с длиной волны 488 нм. Расстояние h от конца одного из штрихов внутренней структуры, выходящего на поверхность, до ближайшего штриха, находящегося ниже по нормали к поверхности, практически не изменяется при варьировании поверхностной пространственной частоты. Этот параметр определяет максимальную глубину травления h_{etch} . При создании рельефа с пилообразным профилем указанная глубина, составляющая около 0,22 мкм (рис. 4, *b*) после металлизации поверхности, оказывается достаточной для формирования высокоэффективных отражательных решеток с углом блеска, до сих пор широко применяющихся в спектроскопии [5].

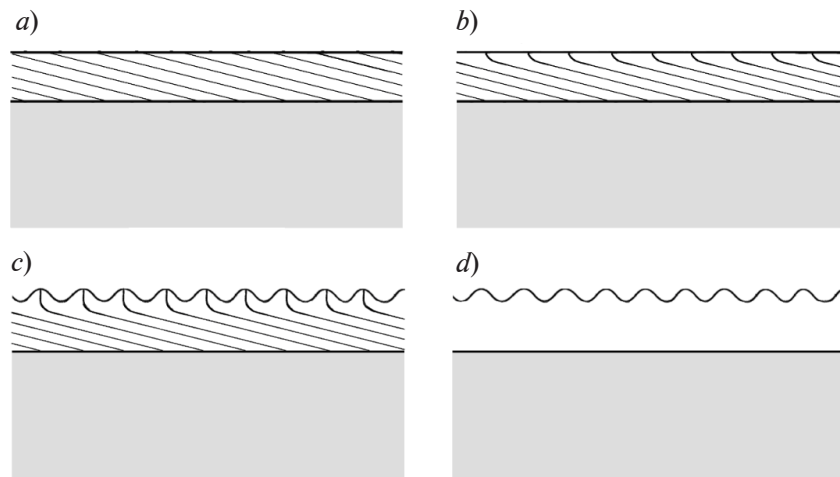


Рис. 3. Формы реализации поверхностной структуры голограммы для галоидосеребряной фотоэмульсии (SHP):

- a* – идеализированная голографическая структура; *b* – искажение внутренней структуры штрихов Ag-изображения у поверхности светочувствительной среды;
- c* – появление периодического поверхностного рельефа;
- d* – голографическая пространственно-периодическая структура с высокой эффективностью и малой угловой селективностью

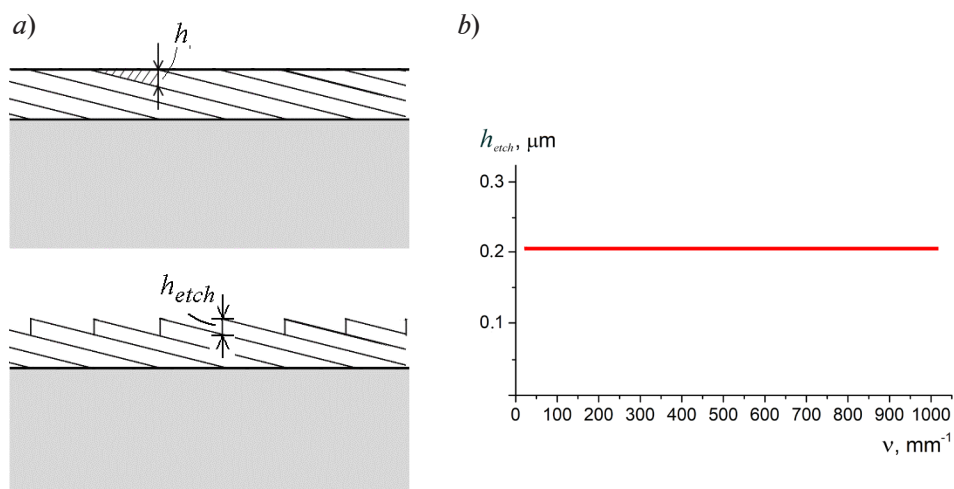


Рис. 4. Влияние травления позитивного фоторезиста на его свойства: *a* – образование рельефно-фазовой поверхностной структуры; *b* – зависимость глубины травления h_{etch} от поверхностной пространственной частоты ν



Цели и задачи исследования

В голографии широко используются желатиносодержащие светочувствительные среды: галоидосеребряная фотоэмульсия и бихромированный желатин. Воздействие УФ-излучения ближнего диапазона ($\lambda = 315 - 400$ нм) позволяет реализовать на этих средах, сочетающихся с бихроматами, разнообразные поверхностные и объемные голографические структуры за счет сшивания желатиновых макромолекул, как было продемонстрировано, например, в работе [6]. По мере уменьшения длины волны квантов ($\lambda \leq 250 - 270$ нм) характер воздействия УФ-излучения меняется на противоположный. Поглощение высокоэнергетичных фотонов вызывает разрыв химических связей в основных цепях макромолекул желатина (фотолиз, фотодеградация) в отсутствие всяких внешних сенсibilизаторов, в том числе и бихроматов. Для желатиносодержащих светочувствительных сред в режиме записи в сходящихся пучках (см. рис. 1, *b*) были разработаны методы формирования поверхностного рельефа, использующие воздействие коротковолнового УФ-излучения на желатин и последующее травление его участков, подвергшихся наибольшему фотолизу [7].

Главными технологическими стадиями фотохимической обработки, ответственными за процессы формирования поверхностного рельефа, являются следующие этапы.

На первом этапе после экспонирования фотопластинки обычное фотографическое проявление и фиксирование создают первичную голографическую структуру в виде черно-белого Ag-изображения интерференционных полос.

Второй этап связан с избирательным дублированием фотоэмульсионного слоя преимущественно в местах наибольшей плотности Ag-изображения за счет дубящего отбеливания фотопластинок в отбеливателях, содержащих бихроматы. Последующее фиксирование в растворе тиосульфата натрия $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ позволяет полностью удалить Ag-изображение из фотоэмульсионного слоя. Таким образом, в результате второго главного этапа фотохимической обработки создается голографическая структура, в которой степень задубленности желатина периодически изменяется в соответствии с зарегистрированной интерференционной картиной. Такая структура является эффективным модулятором воздействия коротковолнового УФ-излучения на желатин при облучении фотопластин ртутно-кварцевой лампой. Более задубленные (упрочненные, сшитые) участки в большей степени сопротивляются разрушающему действию высокоэнергетичных квантов УФ-излучения с длиной волны менее 250 нм из-за большого количества поперечных связей между макромолекулами желатина. Поэтому соседние, менее задубленные участки с разрушенными фрагментированными макромолекулами желатина, на третьем (главном) этапе обработки легко растворяются в подходящем растворителе, например, в воде или ледяной уксусной кислоте CH_3COOH [7]. Таким образом, при травлении можно получить глубокий рельеф с горбами, совпадающими с наиболее упрочненными (задубленными) участками, и сформировать высокоэффективную рельефно-фазовую голографическую структуру, работающую на пропускание.

В отличие от фоторезистов, обработка которых после экспонирования когерентным светом ограничивается только травлением с минимальным набуханием слоя, фотохимическая обработка SHP включает два первых главных этапа, в течение которых фотослой погружается в водные растворы и поэтому испытывает очень сильное набухание.

На третьем (главном) этапе обработки фотоэмульсии применяются, однако, методы [7], позволяющие свести степень набухания желатинового слоя к минимуму. Для этого, во-первых, используют в качестве травителя ледяную уксусную кислоту вместо воды, и, во-вторых, снижают время травления до 10 с. Поэтому описанный выше метод обработки SHP [7] в какой-то мере подобен методам обработки позитивных фоторезистов [8]. С другой стороны, светочувствительность SHP превышает светочувствительность фоторезистов почти в тысячу раз, что предопределяет удобство применения этих фотоматериалов в голографии.

В связи с вышеизложенным возник интерес к изучению возможности использовать SHP для регистрации рельефно-фазовых голографических структур не только для схемы записи в сходящихся пучках, но и для контрнаправленной схемы. Предварительные результаты таких исследований представлены в наших работах [9, 10].

Методика экспериментальных исследований

Для регистрации голографических решеток была использована оптическая схема, описанная выше (см. рис. 2, *a*), в которой отраженный от зеркала лазерный пучок (объектный) является обращенным по отношению к падающему пучку (опорному), а пространственная частота решетки устанавливается регулировкой угла поворота фотопластинки θ_0 , в соответствии с графиком на рис. 2, *b*. В экспериментах в основном использовались фотопластинки ПФГ-01, а в некоторых случаях – фотоматериал ПФГ-03М, имеющий меньший контраст первичного серебряного изображения.

Таблица 1

Голографический процесс регистрации рельефно-фазовых решеток по контраправленной схеме

Этап технологии	Производимая операция	Методическое средство
I. Экспонирование фотопластинок лазерным излучением	Образование латентного Ag-изображения интерференционных полос (косых плоскостей пучностей внутри SHP)	Фотоматериал ПФГ-01 (ПФГ-03М), He-Ne лазер (10 мВт)
II. Проявление фотопластинок (4 мин)	Образование первичной голографической структуры в виде Ag-изображения интерференционных полос	Контрастный проявитель D-19 Kodak
III. Фиксирование	Удаление галоидов серебра из фотослоя	Фиксаж на основе $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$
IV. Сушка	Обезвоживание SHP	Воздушная среда
V. Дубящее отбеливание	Избирательное дубление желатина в местах наибольшей плотности Ag-изображения (создание поперечных связей между макромолекулами с помощью ионов Cr^{3+})	Отбеливатель типа R-10 с бихроматом аммония $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$
VI. Фиксирование	Удаление солей серебра из фотослоя	Фиксаж на основе $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$
VII. Осветление	Удаление окрашивающих соединений Cr из SHP-слоя. Завершение процессов задубливания желатина	2%-й раствор Na_2SO_3
VIII. Сушка	Обезвоживание SHP	Воздушная среда
IX. Коротковолновое УФ-облучение образцов (25 мин)	Фотодеградация желатина в наименее задубленных местах фотослоя	Ртутно-кварцевая лампа ДРТ-230 (мощность 230 Вт)
X. Кратковременное травление (10 с)	Вытравливание фотодеградированных участков желатина, образование поверхностной рельефной структуры голограммы	CH_3COOH либо CH_3COOH + изопропанол ($\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$)
XI. Удаление CH_3COOH и сушка	Быстрое прерывание операции травления желатина и удаление остаточных реагентов с поверхности фотослоя	Ванны изопропанола ($\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$) + сушка в воздушной струе

В табл. 1 представлены основные стадии голографического процесса, где приведены полная фотохимическая обработка образцов, суть проводимых операций и методические средства их осуществления.

Таким образом, общей задачей фотохимической обработки фотопластинок была инициация поверхностной решетки с одновременным уничтожением внутренней голографической структуры. Основным исследуемым параметром эксперимента служила дифракционная эффективность (DE) голографических решеток, определяемая как отношение интенсивности пучка, дифрагированного в плюс-первый порядок к интенсивности падающего пучка для решетки, работающей на пропускание, при оптимальном значении



угла падения. Длина волны считывающего излучения так же, как и при регистрации, составляла 0,63 мкм.

Величина DE могла измеряться после IV (DE первичной амплитудной голографической структуры), VIII (DE рельефно-фазовой голограммы после избирательного дублирования и удаления солей серебра из желатинового слоя) и XI (DE указанной голограммы после УФ-облучения и травления) этапов обработки (см. табл. 1). Также у образцов с первичными амплитудными голографическими структурами измеряли оптическую плотность (она определяется как десятичный логарифм отношения интенсивности света, прошедшего через образец, к интенсивности падающего пучка).

Для измерения интенсивности лазерного излучения использовалась микросхема ОРТ-101 (Texas Instruments). Профили поверхностных рельефов голографических решеток исследовались на микроинтерферометре Линника МИИ-4. Высота (глубина) поверхностного рельефа h определялась как перепад между горбами и впадинами. С помощью фотографий, сделанных в дальней зоне, и измерений DE в разных порядках дифракции изучались дифракционные спектры образцов.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Дифракционная эффективность голографических структур и параметры регистрации. Измерение DE образцов голографических решеток на разных поверхностных пространственных частотах ν выявило особенности поведения светочувствительной среды, подвергнутой сложной многоступенчатой обработке. На рис. 5 представлены зависимости достигнутых величин DE голографических решеток от времени экспонирования t фотопластинок лазерным светом для широкого диапазона пространственных частот: 36 – 730 мм^{-1} . Измерения DE производились на разных этапах фотохимической обработки, указанных в предыдущем разделе.

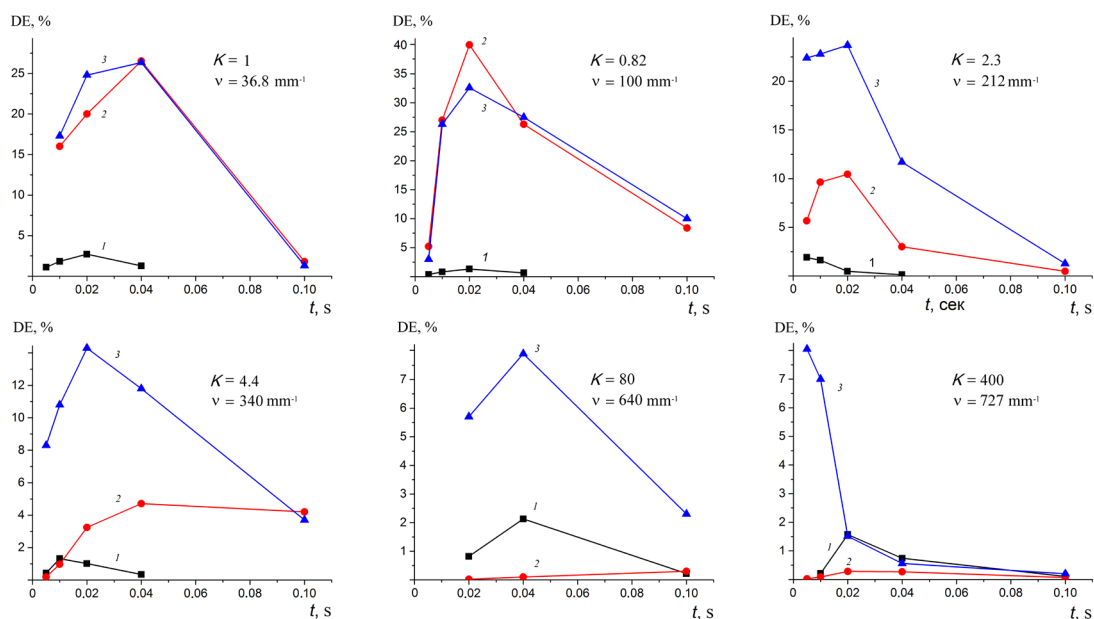


Рис. 5. Зависимости DE от времени экспонирования t лазерным излучением образцов голографических решеток в порядке возрастания поверхностных пространственных частот на разных этапах обработки фотопластинок ПФГ-01 (см. табл. 1):

1 – DE первичной амплитудной голограммы после IV этапа; 2 – DE рельефно-фазовой голограммы после VIII этапа (удаления внутренней структуры); 3 – DE рельефно-фазовой голограммы после полной обработки (XI этап)

Как видно на рис. 5, максимальная DE у первичных амплитудных голографических структур равна примерно 2% (кривые 1). Таким образом, реализация поверхностной структуры проявляется уже на стадии формирования Ag-изображения после этапов проявления и фиксирования. Максимальная DE в данном случае практически не зависит от пространственной частоты, поскольку фотоматериал ПФГ-01 обладает в отношении регистрации амплитудного Ag-изображения высокой разрешающей способностью, превышающей величину 1000 мм^{-1} .

В отношении максимальной DE рельефно-фазовых голограмм, измеренной до (кривые 2) и после (кривые 3) УФ-облучения образцов от ртутной лампы и травления, можно отметить следующее:

1) максимальные значения DE рельефно-фазовых голограмм, подвергавшихся полной процедуре обработки, соответствуют средним значениям оптической плотности первичных амплитудных структур, лежащим в пределах около $D = 0,6 - 1,5$;

2) в области сравнительно низких пространственных частот ($\nu < 100 \text{ мм}^{-1}$) максимальные значения DE образцов, не подвергавшихся и подвергавшихся УФ-облучению и последующему травлению в ледяной уксусной кислоте, практически совпадают;

3) по мере роста пространственной частоты, в области $\nu > 100 \text{ мм}^{-1}$, быстро возрастает разница между максимальными значениями DE для зависимостей 2 и 3 на рис. 5. В то же время величина DE для необлученных образцов стремится к нулю ($DE_{\text{max}} \leq 0,2 \%$ при $\nu > 727 \text{ мм}^{-1}$), DE_{max} образцов, подвергнутых УФ-облучению и протравленных в ледяной уксусной кислоте, стремится к значению $DE_{\text{max}} \approx 8 \%$;

4) последнее обстоятельство может быть охарактеризовано с помощью коэффициента усиления дифракционной эффективности K , который равен отношению максимального значения DE после воздействия на фотопластинки УФ-излучения и травления в CH_3COOH к значению DE до применения операций облучения и травления при одном и том же времени экспонирования когерентным излучением t . Значение K для DE_{max} приводится на каждом графике рис. 5;

5) обнаружена особенность, отличающая процедуру обработки зарегистрированных по контрнаправленной схеме решеток от аналогичной процедуры, применяемой для решеток, записанных в сходящихся пучках. Особенность состоит в том, что при регистрации голографических структур на фотоматериале ПФГ-01 по схеме в сходящихся пучках обеспечиваются существенные значения коэффициента усиления $K = 200 - 500$ на пространственной частоте $\nu = 1200 \text{ мм}^{-1}$, если в качестве травителя использовать 50%-й раствор ледяной уксусной кислоты CH_3COOH в изопропанолу $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ [9]. В то же время при записи по контрнаправленной схеме на высоких пространственных частотах, превышающих 500 мм^{-1} , более или менее значительные величины DE и K для образцов, прошедших полную обработку, достигаются только при использовании в качестве травителя ледяной уксусной кислоты, не разбавленной изопропанолом. Это обстоятельство отражено в табл. 2, где величины DE_{max} и K представлены как функции от концентрации травящего раствора ледяной уксусной кислоты CH_3COOH в изопропанолу $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$.

Профили поверхностного рельефа и дифракционные спектры голографических структур. Существенную информацию о характере голографических структур, прошедших полную обработку, включающую УФ-облучение и травление, несут угловые зависимости DE образцов. Так, например, для образца с пространственной частотой около 900 мм^{-1} полуширина угловой зависимости DE составляет приблизительно 40° , что, согласно теории Когельника, соответствует толщине дифрагирующей структуры менее 1 мкм . Эта величина составляет незначительную долю от полной толщины фотоэмульсии ПФГ-01, равной $6 - 7 \text{ мкм}$. С учетом этого обстоятельства, а также ввиду того, что внутренняя структура в значительной степени была нивелирована после операции VI (см. табл. 1), мы были вправе рассматривать полученные структуры как чисто фазовые тонкие рельефные голограммы (это подтвердилось в ходе дальнейших исследований).

С помощью микроинтерферометра Линника МИИ-4 мы способны получать отчетливые профили поверхностного рельефа во всем диапазоне исследуемых пространственных частот. Важно отметить, что абсолютные значения высоты пространственного рельефа h_{max} резко возрастают при уменьшении пространственной частоты ниже 150 мм^{-1} . При этом операции УФ-облучения и травления практически не приводят к увеличению



Таблица 2

Зависимость параметров образцов рельефно-фазовых голографических решеток от технологии обработки фотослоев

ν , мм ⁻¹	Концентрация раствора CH ₃ COOH в изопропанолe C ₃ H ₈ O, %	DE _{max} , %	Значение K
566	25	0,65	3,8
550	50	0,47	6,7
551	50	0,74	2,1
551	50	1,13	2,2
566	100	5,20	403
639	100	7,90	285
727	100	8,05	> 402

Обозначения: ν – регистрируемая пространственная частота; DE_{max} – максимально достигнутая величина дифракционной эффективности, K – коэффициент усиления DE_{max}.

высоты поверхностного рельефа (рис. 6). Таким образом, на низких пространственных частотах рельеф формируется уже в результате водной обработки образцов, и вклад заключительных операций УФ-облучения и травления незначителен.

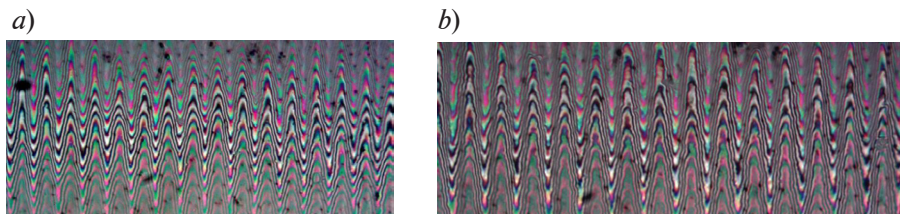


Рис. 6. Вид интерферограмм поверхностного рельефа образца ($\nu = 100$ мм⁻¹): значения высоты пространственного рельефа $h_{max} = 0,87$ мкм (a) и $0,94$ мкм (b) до (a) и после (b) УФ-облучения и травления, т. е. после VIII и XI операций обработки (см. табл. 1)

Большие значения высоты поверхностного рельефа ($h_{max} \approx 1$ мкм), достигнутые на низких пространственных частотах ($\nu \leq 100$ мм⁻¹), сопоставимы со значениями глубины поверхностного рельефа, получаемыми для чисто рельефных голограмм, которые регистрируются в оптической схеме со сходящимися пучками [2, 3]. Это обстоятельство резко отличает результаты, достигнутые для галоидосеребряной фотоэмульсии, от таковых, получаемых для позитивных фоторезистов, у которых h_{max} не превышает $0,22$ мкм [4].

Резкое возрастание глубины поверхностного рельефа при понижении пространственной частоты регистрируемых голографических решеток подтверждается фактом перераспределения световой энергии в дифракционных спектрах (порядках дифракции). При понижении пространственной частоты, в области значений около 212 мм⁻¹ наблюдается выравнивание интенсивностей нулевого и первых порядков дифракции (рис. 7, a).

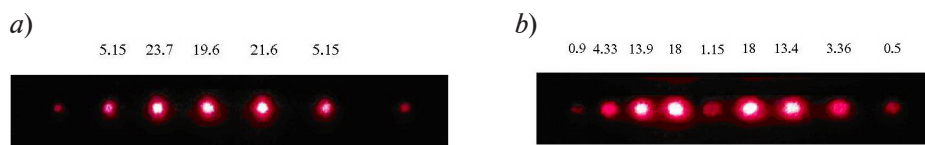


Рис. 7. Фотографии дифракционных спектров образцов при нормальном падении освещающего лазерного пучка для значений пространственных частот $\nu = 212$ мм⁻¹ (a) и 100 мм⁻¹ (b). Числа над световыми пятнами показывают значения DE (в %)

Дальнейшее увеличение глубины поверхностного рельефа на сравнительно низких пространственных частотах значительно снижает долю нерассеянного света (нулевой порядок) и приводит к перекачке световой энергии в высшие порядки дифракции (рис. 7, *b*). Наименьшая доля интенсивности энергии нулевого порядка на пространственной частоте 100 мм^{-1} составляет 1 – 3 %.

Дифракционные спектры для пространственных частот 100 и 212 мм^{-1} (см. рис. 7), а также интерферограммы (см. рис. 6) показывают, что профили поверхностного рельефа в этой области пространственных частот носят симметричный квазисинусоидальный характер. Эксперименты показали, что это обстоятельство справедливо и в области более высоких пространственных частот. В качестве примера на рис. 8 приведена интерферограмма профиля поверхностного рельефа на пространственной частоте $\nu = 550 \text{ мм}^{-1}$ для фотоматериала ПФГ-03М.

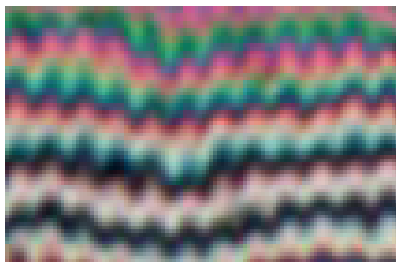


Рис. 8. Интерферограмма профиля рельефа для пространственной частоты $\nu = 550 \text{ мм}^{-1}$ (фотоматериал ПФГ-03М)

Симметризация профиля поверхностного рельефа в широкой области пространственных частот – это характерная черта галогосеребряной фотоэмульсии (ШР), отличающей ее свойства от свойств позитивных фоторезистов, которые используются для формирования асимметричных пилообразных рельефов при голографической регистрации в контрнаправленной схеме. Только при очень низких пространственных частотах, в диапазоне $30 - 40 \text{ мм}^{-1}$, удалось зафиксировать у некоторых образцов асимметричный пилообразный профиль

рельефа (рис. 9, *a*), который приводил к асимметричному распределению интенсивности света в дифракционном спектре (см. рис. 9, *b*).

Квазисинусоидальный характер профиля поверхностного рельефа практически во всей области пространственных частот подтверждается непосредственными вычислениями ДЕ по процедурам теории тонких голограмм в широко известном приближении Рамана – Ната. Например, для сравнительно высокой пространственной частоты 550 мм^{-1} и фотоматериала ПФГ-03М профили поверхностного рельефа можно измерить согласно интерференционной картине на рис. 8. Значения высоты рельефа h для каждой конкретной точки образца заметно разнятся, поэтому вычисление этой величины производилось по результатам восьми измерений для смежных горбов и впадин. Полученное среднее значение глубины рельефа h оказалось равным $0,067 \text{ мкм}$. Согласно теории тонких рельефных голограмм, ДЕ для 1-го порядка дифракции описывается в случае синусоидальной формы рельефа следующей формулой:

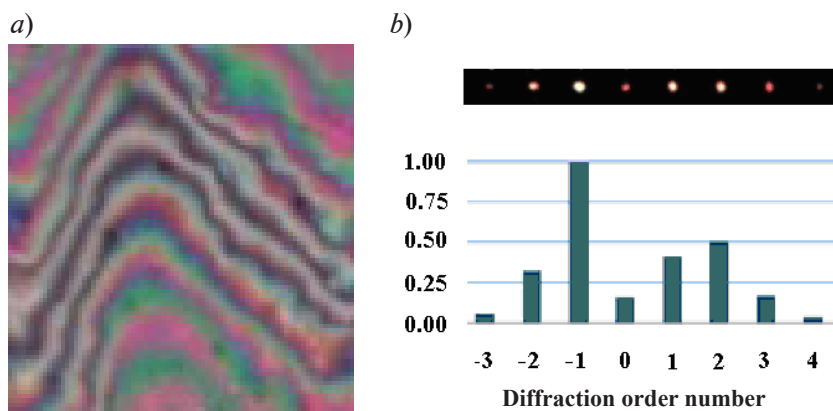


Рис. 9. Пример интерферограммы пилообразного профиля рельефа для низкой пространственной частоты ($\nu = 36,4 \text{ мм}^{-1}$) (*a*), фотография дифракционного спектра с номерами порядков дифракции и распределение относительной интенсивности света по порядкам дифракции (*b*)

$$\eta = J_1^2 \left(\frac{\pi h (n_0 - 1)}{\lambda} \right) \cdot 100\%, \quad (2)$$

где J_1 – функция Бесселя первого рода первого порядка; λ – длина волны лазерного излучения, $\lambda = 0,63$ мкм; h – высота поверхностного рельефа; n_0 – средний показатель преломления желатина, $n_0 = 1,53$.

Для высоты рельефа $h = 0,067$ мкм, DE, вычисленная по формуле (2), должна составлять 0,78%; из этого следует, что полученные экспериментальные значения DE, лежащие в диапазоне 0,70 – 0,74 %, а также соответствующие расчетные значения совпадают с точностью примерно 10 %. Отсюда можно сделать вывод, что дифракция света на образце обусловлена поверхностной рельефной структурой.

Аналогичные результаты были получены для основного фотоматериала ПФГ-01, который использовался в данной работе, и для более низкой пространственной частоты $\nu = 212$ мм⁻¹, когда значения высоты рельефа увеличились более чем в 6 раз, по сравнению с предыдущим случаем. На этот раз значения высоты рельефа h и DE измерялись в трех точках образца: *A*, *B* и *C*, удаленных друг от друга на значительные расстояния (табл. 3).

Анализ данных, приведенных в табл. 3, позволяет заключить, что экспериментально измеренные значения DE хорошо соответствуют теоретическим, вычисленным по формуле (2).

Таблица 3

Сравнение экспериментальных и расчетных значений DE

Точка измерения	<i>h</i> , мкм	Значение DE, %	
		Экспериментальное	Расчетное (см. ф-лу (2))
<i>A</i>	0,42	22,43	19,9 – 23,7
<i>B</i>	0,46	25,21	
<i>C</i>	0,36	17,95	
Среднее значение	0,41	21,86	

Как было отмечено выше, максимальная DE образцов на фотоматериале ПФГ-01, прошедших полную обработку в области высоких пространственных частот (свыше 500 мм⁻¹), стремится к значению около 8% (см. рис. 5). Согласно теории тонких пропускающих голограмм с синусоидальным профилем рельефа, для этого случая имеется возможность рассчитать значение глубины поверхностного рельефа h с помощью формулы (2). При этом получается значение $h \approx 0,22$ мкм, примерно совпадающее с оцененной максимальной глубиной рельефа для контрнаправленной схемы голографической записи при использовании позитивных фоторезистов.

Таким образом, дифракционные свойства голографических структур, описанные в данном разделе, хорошо объясняются в рамках теории тонких голограмм в приближении Рамана – Ната.

Пространственно-частотные характеристики и механизмы формирования поверхностного рельефа

На основе экспериментальных данных были построены пространственно-частотные характеристики, отражающие зависимости максимальной DE до и после УФ-облучения образцов (рис. 10, *a*) от пространственной частоты, а на рис. 10, *b* даны аналогичные зависимости для коэффициента усиления *K*. В данном случае значения *K* получаются путем деления значений DE кривой 2 на таковые кривой 1 (см. рис. 10, *a*).

Анализ данных на рис. 10, *a* позволяет отметить существенное различие пространственно-частотных характеристик рельефно-фазовых голографических структур, DE которых была

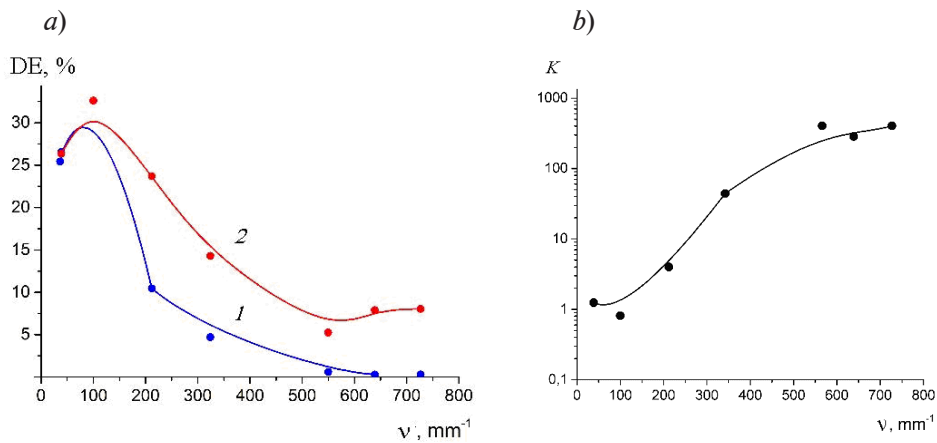


Рис. 10. Зависимости максимальной ДЕ образцов от пространственной частоты ν после VIII (кривая 1) и XI (кривая 2) этапов обработки (см. табл. 1) (а), а также коэффициент усиления K как функция пространственной частоты (б)

измерена на разных стадиях фотохимической обработки. Образцы, не подвергшиеся воздействию УФ-излучения и операции травления, испытывают сильное набухание в водных растворах вследствие водных этапов обработки (см. операции I – VII, табл. 1). Такое набухание в конечном итоге оказывает решающее действие на формирование поверхностного рельефа при сушке (см. операцию VIII в табл. 1).

Для этих образцов единственным механизмом, ответственным за высокие значения ДЕ, и, следовательно, большие глубины поверхностного рельефа на сравнительно низких пространственных частотах ($\nu < 150$ мм⁻¹), следует считать перетягивание объемов набухшего желатина в процессе сушки мокрого коллоида к наиболее задубленным участкам, соответствующим местам наибольшей плотности Ag-изображения в первичной амплитудной голограмме [2]. Механизм формирования поверхностного рельефа, связанный с возникновением сил натяжения в сохнувшем коллоиде, как и в случае записи в сходящихся пучках [3], при использовании контрнаправленной схемы регистрации оказался способным обеспечить большие глубины поверхностного рельефа (около 1 мкм) и максимальную ДЕ, равную 30 – 40%. Этот результат подтверждает предсказания теории тонких голограмм для различных форм поверхностного рельефа на низких пространственных частотах. Описанный механизм характеризуется быстрым спадом пространственно-частотной характеристики на пространственных частотах свыше 100 мм⁻¹, что вызывается действием сил поверхностного натяжения, сглаживающих поверхностный рельеф [11]. Согласно работе [11], силы поверхностного натяжения стремятся минимизировать площадь поверхности тела, поэтому увеличение площади поверхности высушенного фотоэмульсионного слоя при повышении пространственной частоты и постоянной высоте поверхностного рельефа возможно только до достижения некоторой пороговой величины ν_{thr} . При достаточно большом значении пространственной частоты механические напряжения, вводимые поверхностным натяжением, преодолевают силы сцепления между молекулами желатина и способны частично сгладить поверхностный рельеф. Если считать, что при $\nu > \nu_{thr}$ площадь S участка поверхностной голографической структуры остается постоянной, то можно вычислить значение высоты h поверхностного рельефа на заданной пространственной частоте ν из равенства $S(\nu) = S(\nu_{thr})$, или иначе из уравнения

$$\nu \int_0^{\frac{1}{\nu}} \sqrt{1 + \pi^2 h^2 \nu^2 \cos^2 2\pi \nu x} \cdot dx = \text{const}, \quad (3)$$

где x – пространственная координата на поверхности фотослоя, перпендикулярная штрихам решетки.

Рис. 11, а позволяет сравнить экспериментальную пространственно-частотную характеристику (см. кривую 1 на рис. 10, а) с теоретической, рассчитанной на основе положений работы [11]. На первом этапе, с помощью формулы (2) определялась высота рельефа



h для одной из точек на спаде экспериментальной пространственно-частотной характеристики; при этом считалось, что форма профиля поверхностного рельефа – квазисинусоидальная, согласно выкладкам предыдущего раздела. В частности, выбиралась точка, соответствующая пространственной частоте 212 мм^{-1} . Далее, по-прежнему считая форму профиля поверхностного рельефа синусоидальной, мы вычисляли относительную площадь поверхности участка фотоэмульсионного слоя, являющуюся константой (const) в уравнении (3). Далее, если производить вычисления в обратном порядке по краткой схеме $S = \text{const} \rightarrow h \rightarrow J(\dots) \rightarrow \eta$, то можно получить расчетные значения DE для всех пространственных частот. Хорошее совпадение экспериментальной пространственно-частотной характеристики с расчетной (см. рис. 11, *a*) подтверждает гипотезу о формировании рельефа за счет сил, возникающих при сушке мокрого набухшего коллоида – желатина.

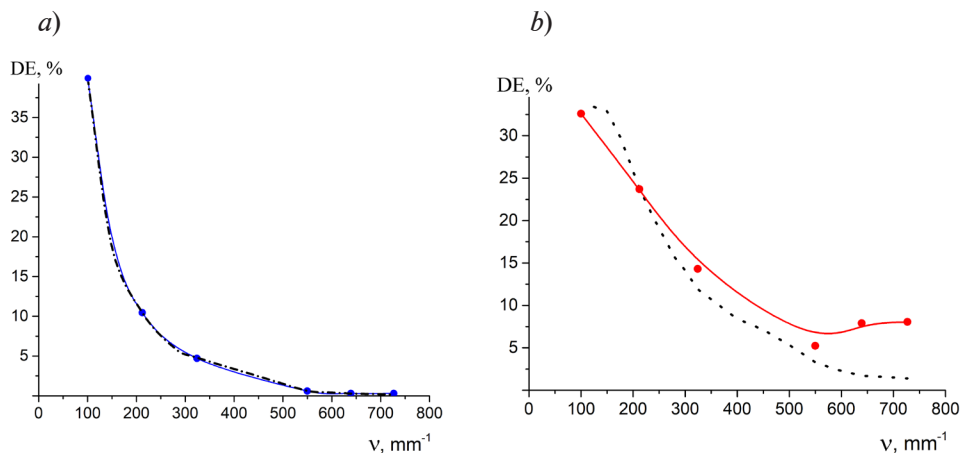


Рис. 11. Экспериментальные (сплошные цветные линии) и теоретические (пунктирные черные линии) пространственно-частотные характеристики DE образцов на разных стадиях: до операций УФ-облучения и травления (*a*), а также после полной обработки, включающей указанные операции (*b*)

После проведения заключительных операций УФ-облучения и травления в ледяной уксусной кислоте, начинает действовать совершенно иной механизм формирования поверхностного рельефа, связанный с вытравливанием фотодegradировавших участков желатина. Прежде всего, это проявляется на зависимости коэффициента усиления K от пространственной частоты (см. рис. 10, *b*). Из этого графика следует, что новый механизм образования рельефа начинает превалировать над прежним на частотах свыше 200 мм^{-1} , достигая значений K порядка нескольких сотен. Преобладание нового механизма связано с тем, что удалось свести к минимуму вредное действие сил поверхностного натяжения, сглаживающее поверхностный рельеф на высоких пространственных частотах. С этой целью были приняты специальные меры, позволившие снизить степень набухания желатина на стадии окончательной обработки (травление), в соответствии с работой [12]. В качестве растворителя была выбрана ледяная уксусная кислота, вызывающая меньшее набухание желатина, чем вода, а время травления было уменьшено до 10 с. Теоретические положения, развитые для описания пространственно-частотной характеристики образцов, не прошедших полную обработку после операций УФ-облучения и травления, становятся неприменимыми (см. рис. 11, *b*), поскольку теоретическая кривая существенно отклоняется от экспериментальной, будучи рассчитана, как и ранее, с помощью уравнения (3) на основе исходной пространственной частоты 212 мм^{-1} . Реальная пространственно-частотная характеристика образцов, прошедших полную обработку, простирается значительно дальше в область высоких пространственных частот.

Заключение

Характерной особенностью голографической структуры, записанной в контрнправленной оптической схеме, является выход на поверхность штрихов (плоскостей)

внутренней решетки под косым углом. Для фоторезистов это приводит к тому, что глубина травления $h_{etch} \approx 0,21 - 0,22$ мкм (см. рис. 4, *b*) не зависит от регистрируемой пространственной частоты и форма рельефа пилообразна и асимметрична (см. рис. 4, *a*). Если сравнивать галоидосеребряные фотоэмульсии (SHP) с фоторезистами, то можно найти как сходство, так и существенные различия в свойствах голографических структур, записанных в контрнаправленной схеме. Различия состоят как в большой разнице между значениями толщины (SHP – около 7 мкм, а слои фоторезистов – менее 1 мкм), так и в существенно большей подверженности SHP сильному набуханию при обработке.

На низких пространственных частотах в образовании поверхностного рельефа принимает участие значительная часть толщины SHP. Совокупное действие сил натяжения внутри фотоэмульсионного слоя и сил поверхностного натяжения симметризует профиль поверхностного рельефа и позволяет получать большие значения h_{max} (около 1 мкм), которые сопоставимы со значениями h_{max} для рельефно-фазовых голограмм на SHP, регистрируемых в сходящихся пучках [3]. Такая ситуация схематично демонстрируется на рис. 3, *c*, на котором внутренняя косоугольная голографическая структура выпрямляется на поверхности и рельеф приобретает квазисинусоидальный характер. Асимметричный характер рельефа, присущий фоторезистам, для SHP был получен только на некоторых образцах со сверхнизкой пространственной частотой ($\nu < 40$ мм⁻¹) и является скорее исключением, чем правилом. На высоких пространственных частотах ($\nu > 500$ мм⁻¹) высота поверхностного рельефа h , вычисленная через DE, стремится к величине 0,22 мкм, т. е. к значению глубины травления h_{etch} , характерному для фоторезистов. Это обусловлено чисто поверхностным механизмом формирования рельефа, связанного с быстрым поглощением коротковолнового УФ-излучения в желатине и коротким временем травления, когда внутренняя голографическая структура не затронута последними стадиями обработки. Однако и в этом случае, в отличие от фоторезистов, для SHP происходит симметризация поверхностного рельефа, по всей видимости, за счет остаточного набухания желатина.

Таким образом, в работе показано, что включение в процедуру обработки фотопластинок ПФГ-01 операции облучения фотоэмульсии коротковолновым УФ-излучением значительно расширяет область регистрируемых пространственных частот, в которой можно получать значимые величины DE пропускающих голографических решеток. Достигнутые глубины поверхностного рельефа вполне достаточны для создания высокоэффективных рельефно-фазовых голографических структур, работающих на пропускание в области низких пространственных частот. На более высоких пространственных частотах голографические структуры, записанные в контрнаправленной оптической схеме, могут быть эффективно использованы на отражение после металлизации поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисюк Ю. Н. Об отображении оптических свойств объекта в волновом поле рассеянно-го им излучения // Доклады Академии наук СССР. 1962. Т. 144. № 6. С. 1275–1278.
2. Smith H. M. Photographic relief images // Journal of the Optical Society of America. 1968. Vol. 58. No. 4. Pp. 533–539.
3. Гуляев С. Н., Ратушный В. П. Свойства рельефно-фазовых голограмм, полученных при обработке фотопластинок коротковолновым ультрафиолетовым излучением и двухступенчатом отбеливании // Оптический журнал. 2003. Т. 70. № 2. С. 45–49.
4. Sheridan N. K. Production of blazed holograms // Applied Physics Letters. 1968. Vol. 12. No. 9. Pp. 316–318.
5. Павлычева Н. К. Дифракционные решетки для спектральных приборов. Обзор // Оптический журнал. 2022. Т. 89. № 3. С. 28–41.
6. Calixto S., Piazza V., Garnica G. Surface profile studies of photoinduced gratings made with DCG films with optional papain development // Gels. 2022. Vol. 8. No. 2. P. 102.
7. Архипов А. В., Ганжерли Н. М., Гуляев С. Н., Маурер И. А. Рельефно-фазовые высоко-частотные голографические решетки на содержащих желатин светочувствительных слоях // Оптический журнал. 2023. Т. 90. № 3. С. 38–47.
8. Моро У. Микролитография. В двух частях. Пер. с англ. М.: Мир, 1990. Часть 1 – 605 с. Часть 2 – 632 с.



9. Gulyaev S. N., Ganzherli N. M., Iyushina D. A., Maurer I. A. Influence of ultraviolet irradiation on the formation of surface holographic structures recorded in a counter-directional recording scheme on photoemulsion layers // Proceedings of 2024 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). October 17–18, 2024. Saint Petersburg, Russia. Pp. 454–456.

10. Ганжерли Н. М., Гуляев С. Н., Ильюшина Д. А., Маурер И. А. Схема записи во встречных пучках для получения рельефно-фазовых голографических решеток, работающих на пропускание // Оптика и спектроскопия. 2024. Т. 132. № 9. С. 908–910.

11. Гуляев С. Н. Формирование поверхностного рельефа голографических структур, полученных при воздействии коротковолнового УФ-излучения на фотоэмульсию // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Основной выпуск. 2008. № 3 (59). С. 105–114.

12. Ганжерли Н. М., Гуляев С. Н., Маурер И. А. Совершенствование технологии изготовления рельефных голографических решеток на бихромированном желатине, облученных коротковолновым УФ-излучением // Оптика и спектроскопия. 2021. Т. 129. № 10. С. 1276–1279.

REFERENCES

1. Denisjuk Yu. N., The manifestation of the optical properties of an object in the wave field of the radiation it scatters, Dokl. Akad. Nauk SSSR. 144 (6) (1962) 1275–1278 (in Russian).

2. Smith H. M., Photographic relief images, J. Opt. Soc. Am. 58 (4) (1968) 533–539.

3. Gulyaev S. N., Ratushnyi V. P., Properties of relief-phase holograms produced by processing photographic plates with short wavelength UV radiation and with two-stage bleaching, J. Opt. Technol. 70 (2) (2003) 105–108.

4. Sheridan N. K., Production of blazed holograms, Appl. Phys. Lett. 12 (9) (1968) 316–318.

5. Pavlycheva N. K., Diffraction gratings for spectral devices (Review), J. Opt. Technol. 89 (3) (2022) 142–150.

6. Calixto S., Piazza V., Garnica G., Surface profile studies of photoinduced gratings made with DCG films with optional papain development, Gels. 8 (2) (2022) 102.

7. Arkhipov A. V., Ganzherli N. M., Gulyaev S. N., Maurer I. A., High-frequency relief-phase holographic gratings on gelatin containing photosensitive media, J. Opt. Technol. 90 (3) (2023) 125–130.

8. Moreau W. M., Positive photoresists, In book: W. M. Moreau, “Semiconductor lithography: Principles, practices and materials” (Part of the book series: “Microdevices (MDPF)”), Springer, New York, USA (1988) 29–34.

9. Gulyaev S. N., Ganzherli N. M., Iyushina D. A., Maurer I. A., Influence of ultraviolet irradiation on the formation of surface holographic structures recorded in a counter-directional recording scheme on photoemulsion layers, Proc. 2024 Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), Oct. 17–18, 2024. St. Petersburg, Russia. (2024) 454–456.

10. Ganzherli N. M., Gulyaev S. N., Iyushina D. A., Maurer I. A., Recording scheme in counterbeams for obtaining relief-phase holographic gratings working in transmission, Opt. Spectrosc. 132 (9) (2024) 908–910.

11. Gulyaev S. N., Formation of the surface relief of holographic structures obtained by exposing photoemulsion to short-wave UV radiation, Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. (3 (59)) (2008) 105–114 (in Russian).

12. Ganzherli N. M., Gulyaev S. N., Maurer I. A., Improvement of the technology for manufacturing relief holographic gratings on dichromated gelatin irradiated with short-wave UV radiation, Opt. Spectrosc. 130 (13) (2022) 2011–2013.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГУЛЯЕВ Сергей Николаевич – кандидат физико-математических наук, ведущий инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Gulyaev@rphf.spbstu.ru

ORCID: 0000-0003-0549-0961

ГАНЖЕРЛИ Нина Мануиловна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
nina.holo@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0002-2933-2135

ИЛЬЮШИНА Дарина Алексеевна – студентка Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ilyushina.da@edu.spbstu.ru

МАУРЕР Ирина Анатольевна – кандидат технических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
maureririna@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9385-4221

THE AUTHORS

GULYAEV Sergey N.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Gulyaev@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0003-0549-0961

GANZHERLI Nina M.
Ioffe Institute of RAS
26 Polytekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
nina.holo@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0002-2933-2135

ILYUSHINA Darina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ilyushina.da@edu.spbstu.ru

MAURER Irina A.
Ioffe Institute of RAS
26 Polytekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
maureririna@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9385-4221

*Статья поступила в редакцию 23.05.2025. Одобрена после рецензирования 10.06.2025.
Принята 10.06.2025.*

Received 23.05.2025. Approved after reviewing 10.06.2025. Accepted 10.06.2025.

Физическое материаловедение

Научная статья

УДК 564.163.2

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18412>

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ФУЛЛЕРЕНОЛА НА ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА КОМПОЗИТНЫМИ ПЛЕНКАМИ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Е. А. Никитина¹, В. М. Капралова¹, Н. Т. Сударь¹□,
В. И. Герасимов¹, С. А. Утаев²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

² Каршинский государственный университет, г. Карши, Узбекистан
□ sudar53@mail.ru

Аннотация. Представлено исследование влияния добавок фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$ различной концентрации на оптические свойства пленок поливинилового спирта (ПВС). Установлено, что добавка даже небольшой концентрации фуллеренола приводит к значительному поглощению света в УФ-области спектра. По мере увеличения концентрации фуллеренола с 1 до 10 масс.% граница пропускания света композитными пленками ПВС: $C_{60}(OH)_{44}$ смещается от 230 к 440 нм. Для ряда длин волн рассчитана зависимость коэффициента экстинкции (КЭ) от концентрации фуллеренола в пленках; при повышении концентрации $C_{60}(OH)_{44}$ от 1 до 3 масс.% КЭ снижается, но далее его значение стабилизируется. Показано, что поглощение света в изученных объектах связано с возбуждением молекул фуллеренола при непрямым переходах НОМО → LUMO. Согласно оценке, значение зазора НОМО – LUMO составляет $2,2 \pm 0,3$ эВ и мало зависит от концентрации фуллеренола.

Ключевые слова: поливиниловый спирт, фуллеренол, коэффициент экстинкции, оптический спектр, энергетический зазор

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Для цитирования: Никитина Е. А., Капралова В. М., Сударь Н. Т., Герасимов В. И., Утаев С. А. Влияние добавок фуллеренола на поглощение света композитными пленками на основе поливинилового спирта // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 167–176. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18412>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18412>

INFLUENCE OF FULLERENOL DOPANT ON LIGHT ABSORPTION BY POLYVINYL ALCOHOL-BASED COMPOSITE FILMS

Е. А. Nikitina¹, V.M. Kapralova¹, N.T. Sudar¹□,
V. I. Gerasimov¹, S. A. Utaev²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Karshi State University, Karshi, Uzbekistan
□ sudar53@mail.ru

Abstract. The study of the effect of fullereneol ($C_{60}(OH)_{44}$) dopant of different concentrations on the optical properties of polyvinyl alcohol (PVA) films has been presented. The addition of even a small concentration of fullereneol was found to lead to significant light absorption in the UV spectral range. As the concentration of fullereneol increased from 1 to 10 wt.%, the light transmission edge of the PVA : $C_{60}(OH)_{44}$ composite films shifted from 230 to 440 nm. The dependences of the extinction coefficient (EC) on the fullereneol concentration in the films were calculated for several wavelengths; these curves decreased with $C_{60}(OH)_{44}$ concentration increasing from 1 to 3 wt.%, but then EC values stopped decreasing. The light absorption in the studied samples was shown to be caused by the fullereneol molecules' excitation during indirect HOMO \rightarrow LUMO transitions. The E_g value estimated from their spectra, was 2.2 ± 0.3 eV and depended little on the fullereneol concentration.

Keywords: polyvinyl alcohol, fullereneol, extinction coefficient, optical spectrum, energy gap

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2023-0016).

For citation: Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T., Gerasimov V. I., Utaev S. A., Influence of fullereneol dopant on light absorption by polyvinyl alcohol-based composite films, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 167–176. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18412>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

В настоящее время полимерные композиционные материалы широко применяются в электронике в качестве конструкционных и функциональных материалов. Среди всего многообразия полимеров особый интерес представляют водорастворимые полимеры, в частности поливиниловый спирт (ПВС). Его отличают невысокая стоимость, экологическая безопасность, прозрачность, хорошие диэлектрические характеристики и отличные пленкообразующие свойства. ПВС – это термопластичный аморфно-кристаллический полимер, в котором области с высокой степенью упорядочения и плотной упаковкой молекул (кристаллиты) беспорядочно ориентированы внутри аморфных областей [1]. Композитные материалы на основе ПВС предполагается использовать при изготовлении органических полевых транзисторов [2], тонкопленочных поляризаторов [3], полимерных аппретов [4], оптоэлектронных устройств [5].

Введение в ПВС даже небольшого количества допанта может привести к существенному изменению его физических свойств. Значительный интерес представляют добавки, не ухудшающие водорастворимость ПВС, например водорастворимые полигидроксильные производные фуллерена – фуллеренолы [6 – 8]. Благодаря наличию в молекулах фуллеренола и ПВС гидроксильных групп, между ними возникают водородные связи [6]. Установлено [8], что при концентрациях водного раствора фуллеренола, близкой к его предельной растворимости в воде (58,9 мг/мл [9]), он имеет тенденцию формировать кластеры в матрице из ПВС, в результате чего композитный материал обнаруживает особенности, присущие чистому фуллеренолу. Определение концентрации фуллеренола, при которой начинают проявляться такие особенности, представляется важной задачей как в практическом, так и научном планах. Здесь следует отметить, что тенденция к образованию агрегатов молекул наблюдается не только в композитном материале ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$, но и в фуллерене C_{60} , внедренном в матрицу полиметилметакрилата (ПММА). Агрегаты, которые образуются при этом в ПММА, обладают определенной степенью упорядоченности, однако она далека, тем не менее, от упорядоченности кристаллической фазы [10]. По мнению авторов статьи [10], подобные явления связаны с сегрегацией молекул фуллерена в процессе образования пленки при испарении растворителя.

Целью настоящего исследования являлся анализ влияния на оптические свойства пленок ПВС добавки в них водного раствора фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$ различной концентрации.

Методика эксперимента

Объектами исследования в данной работе служили пленки, изготовленные из ПВС марки 16/1 (ГОСТ 10779-78). 5%-й водный раствор ПВС приготавливали посредством растворения ПВС в дистиллированной воде при температуре 85 °С. В полученный раствор ПВС добавляли водные растворы фуллеренола разной концентрации. При изготовлении композитных пленок использовался фуллерен, синтезированный по методике, описанной в статье [11]. Композитные пленки изготавливали методом полива смеси на поверхность стекла (чашка Петри диаметром 9 см) с последующим высушиванием на воздухе при комнатной температуре. Было изготовлено 7 образцов композитной пленки ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$ с различной концентрацией фуллеренола (см. таблицу) и один контрольный образец пленки ПВС без фуллеренола. После изготовления все пленки сначала выдерживали в термостате при температуре 120 °С в течение 2 ч, а затем они медленно охлаждались до комнатной температуры в течение 8 ч. Весь процесс термической обработки пленок производили в вакууме при давлении около 10 Па.

Таблица

Характеристика изготовленных образцов пленок ПВС+фуллерен

Толщина, мкм	79±1	54±1	73±3	59±3	76±5	74±1	85±2	68±2
Концентрация фуллеренола, масс. %	0,0	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	5,0	10,0

Оптические спектры пропускания пленок в диапазоне длин волн 190 – 1100 нм измеряли с помощью спектрофотометра СФ-56.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены оптические спектры пропускания $T(\lambda)$ (T – коэффициент пропускания, λ – длина волны света) исследуемых пленок. Видно, что пленка ПВС без добавки фуллеренола характеризуется прозрачностью не только в видимой, но и в ближней ультрафиолетовой (УФ) области спектра. Полосу, наблюдаемую в ПВС на длине волны 280 нм, можно отнести к образованию в полимере структур вида $-\text{CH}=\text{CH}-)_2\text{CO}-$ [12].

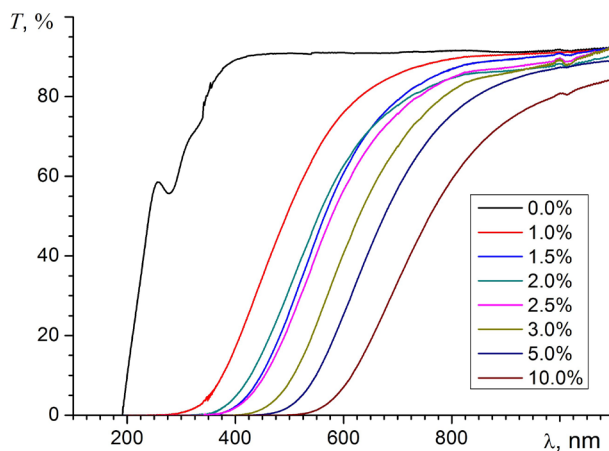


Рис. 1. Спектры пропускания образцов пленок чистого ПВС и композитов ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$ при различной концентрации фуллеренола

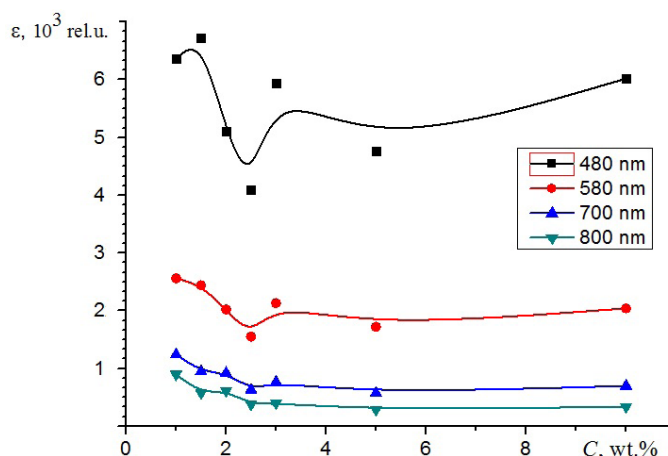


Рис. 2. Зависимости коэффициента экстинкции композитных пленок ПВХ : $C_{60}(OH)_{44}$ от концентрации фуллеренола при различных значениях длины световой волны λ

Добавка в ПВХ даже небольшого количества фуллеренола приводит к окрашиванию пленки в желто-коричневый цвет и сопровождается значительным возрастанием поглощения света в УФ-области спектра. При этом на рассматриваемых зависимостях $T(\lambda)$ отсутствуют какие-либо характерные полосы поглощения. Отметим, что возникновению желтой окраски полимерной пленки сопутствует появление поглощения в синей области спектра. По мере увеличения концентрации фуллеренола в композитной пленке ее цвет становится все более насыщенным, с преобладанием коричневых тонов, а граница пропускания все более и более смещается в длинноволновую область спектра.

При сравнении ослабления света композитными пленками ПВХ : $C_{60}(OH)_{44}$ различной толщины рассмотрим влияние концентрации фуллеренола на их коэффициент экстинкции, определив его как

$$\varepsilon(\lambda) = -\lg[T(\lambda)]/lC, \quad (1)$$

где l , мкм, – толщина пленки; C , масс.%, – концентрация фуллеренола.

Зависимости $\varepsilon(C)$ представлены на рис. 2. Они были рассчитаны с помощью соотношения (1) и зависимостей $T(\lambda)$ для различных длин волн. Видно, что на длинах волн 700 и 800 нм эти кривые – гладкие, причем значения величины ε , найденные при меньших λ , несколько выше, чем на волнах большей длины. Следует отметить снижение коэффициента экстинкции при увеличении концентрации $C_{60}(OH)_{44}$ с 1 до 3% и стабилизацию его значения при большей концентрации фуллеренола. Значения коэффициента, определенные на длинах волн 580 и 480 нм, характеризуются как существенно большими значениями коэффициента экстинкции, так и их значительным разбросом в интервале концентраций фуллеренола 2 – 3 %.

Мы полагаем, что наблюдаемая особенность кривой $\varepsilon(C)$ при концентрации фуллеренола $C = 2 - 3 \%$ вызвана концентрационно-зависимой агрегацией с образованием кластеров молекул фуллеренола. На начальной стадии формирования кластеров их размеры достаточно малы и по мере увеличения концентрации фуллеренола в растворе трансформируются случайным образом; поэтому коэффициент экстинкции, зависящий от размеров кластера, также изменяется случайным образом. По достижении определенной концентрации молекул фуллеренола можно говорить о некотором среднем размере кластеров, который уже не зависит или мало зависит от указанной концентрации при дальнейшем ее увеличении.

Помутнения пленок с повышением концентрации допанта визуально не наблюдалось. Это дает основание утверждать, что снижение интенсивности светового потока, проходящего сквозь пленку (а, следовательно, и величины коэффициента экстинкции ε) связано с поглощением световой энергии, а не ее рассеянием в композитной пленке.



Для определения энергетического зазора между уровнями высшей занятой молекулярной орбитали (НОМО) и низшей незанятой МО (LUMO) в органических структурах (краткое название – «зазор НОМО – LUMO»), в том числе и в полимерных композитных материалах, часто используется следующее соотношение [5, 13 – 15]:

$$(hv/l) \cdot \ln(1/T) = B(hv - E_g)^p, \quad (2)$$

где h – постоянная Планка; ν – частота световой волны; B – константа, не зависящая от энергии квантов света hv ; E_g – энергетический зазор НОМО – LUMO, $E_g = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{НОМО}}$ ($E_{\text{НОМО}}$, E_{LUMO} – энергии уровней НОМО и LUMO соответственно); p – константа, определяющая характер оптического перехода НОМО → LUMO (определяет фундаментальное поглощение).

При разрешенном прямом переходе значение $p = 1/2$, а при непрямом переходе, связанном с испусканием или поглощением фонона, $p = 2$ [15].

Соотношение (2) определяет энергетический зазор на основании данных о коэффициенте пропускания $T(\lambda)$. Из него следует, что значение E_g можно найти через экстраполяцию линейной части графика

$$[(hv/l) \cdot \ln(1/T)]^{1/p} \quad (3)$$

к нулевому значению.

В работе [5] соотношение (2) было использовано для расчета E_g в пленках ПВС, модифицированного экстрактом из листьев черного чая. Авторы статьи [5] получили, что значение E_g при $p = 1/2$ (т. е. в предположении о реализации прямых переходов) для чистого ПВС составило 5,38 эВ. При добавлении в водный раствор, содержащий 1 г ПВС, 10 мл экстракта чая величина E_g снизилась до 3,1 эВ и в дальнейшем уменьшалась по мере увеличения объема добавляемого экстракта. При добавлении 60 мл экстракта значение E_g составило 1,85 эВ. По мнению авторов статьи [5], раствор чайного экстракта содержит достаточное количество сопряженных двойных связей, гидроксильных, карбоксильных групп, полифенолов и конъюгатов полифенолов, которые способствуют образованию комплексов с полярными группами ПВС, что и приводит к снижению величины E_g для молекул ПВС.

Тенденция к снижению величины E_g при добавлении в ПВС иодида натрия NaI была установлена и в работе [15]. Оценки величины E_g с использованием соотношения (2) в этой работе были выполнены в предположении о возможности как прямых, так и не прямых переходов. Для чистого ПВС значение E_g , определенное при $p_1 = 1/2$, составляло 5,4 эВ, а при $p_2 = 2$ составляло 4,9 эВ. Для композитной пленки ПВС : NaI (90 : 10) авторы получили значения 5,10 и 4,65 эВ соответственно, а при увеличении концентрации NaI в композите ПВС : NaI (70 : 30) значение E_g уменьшилось до 4,90 эВ для прямых переходов и до 4,40 эВ для не прямых.

Таким образом, увеличение концентрации допанта в ПВС всегда сопровождается снижением значения E_g , определяемого по формуле (2).

В настоящей работе на основании спектров светопропускания чистого ПВС и композитных пленок ПВС : C₆₀(OH)₄₄ с разной концентрацией фуллеренола были рассчитаны величины E_g в предположении о возможности как прямых, так и не прямых переходов.

На рис. 3 в качестве примера представлены расчетные зависимости величин $[(hv/l) \cdot \ln(1/T)]^2$ и $[(hv/l) \cdot \ln(1/T)]^{1/2}$ (см. формулу (3)) от энергии квантов света hv (рис. 3, а и б, соответственно) для чистого ПВС и продемонстрировано определение E_g для этого полимера. Для прямых переходов полученное значение E_g составило $5,7 \pm 0,2$ эВ (здесь и далее наличие ошибки при определении E_g обусловлено выбором числа точек при линейной экстраполяции), а для не прямых – $5,6 \pm 0,2$ эВ.

В пределах погрешности значения E_g оказываются практически идентичными, поэтому их нельзя использовать для обоснования выбора доминирующего перехода. Вместе с тем, полученные значения E_g хорошо согласуются с известными из литературы данными о разрыве НОМО – LUMO в ПВС [5, 15].

Аналогичным способом были найдены значения E_g в пленках ПВС, допированных фуллеренолом, но вследствие ограниченного числа точек, по которым осуществлялась

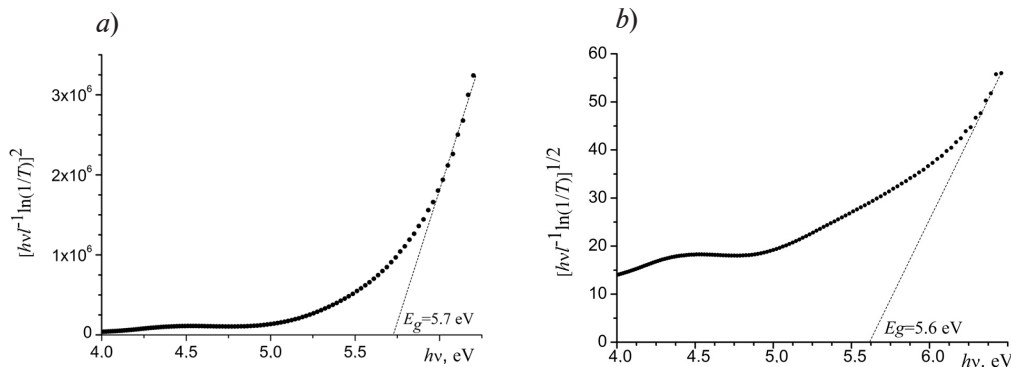


Рис. 3. Пример расчетных зависимостей величины (3) при значениях $p_1 = 1/2$ (a) и $p_2 = 2$ (b) для пленки из чистого поливинилового спирта. Точечные касательные прямые показывают способ нахождения значений E_g

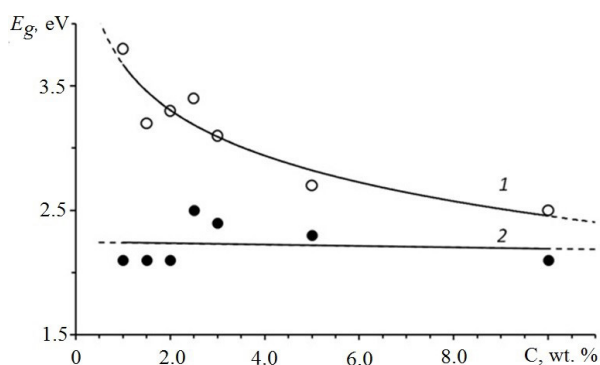


Рис. 4. Расчетные зависимости разрыва НОМО–LUMO в композитных пленках ПВС от концентрации фуллеренола для прямых (1) и непрямых (2) типов переходов НОМО→LUMO. Данные получены на основе экспериментов по оптическому пропусканию образцов

линейная аппроксимация, погрешность при определении E_g возросла до $\pm 0,3$ эВ.

Зависимость E_g от концентрации фуллеренола в композитных пленках ПВС: $C_{60}(OH)_{44}$ в предположении о возможности реализации как прямых, так и непрямых переходов НОМО → LUMO представлена на рис. 4.

Видно, что значения E_g , определенные в предположении о двух типах переходов, существенно различаются по величине, что особенно заметно при значениях концентрации допанта ниже 5%. Вместе с тем, вне зависимости от предполагаемого типа перехода, полученные значения E_g для композитного материала существенно ниже такового, найденного для чистого ПВС. Если величины E_g , найденные для прямых переходов, обнаруживают тенденцию к снижению при повышении концентрации фуллеренола,

то для непрямых переходов такого поведения зависимости не наблюдается и величины E_g примерно одинаковы при всех концентрациях допанта.

Прежде чем перейти к дальнейшему анализу результатов, представленных на рис. 4, отметим, что ПВС представляет собой молекулярную твердую субстанцию, образованную посредством водородных (слабых) межмолекулярных связей, поэтому макромолекулы ПВС в конденсированной фазе сохраняют свою индивидуальность. При изготовлении композитных пленок ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$ мы брали смесь водных растворов ПВС и фуллеренола и не применяли каких-либо специальных методов, которые бы инициировали сшивку макромолекул, поэтому между молекулами ПВС и фуллеренола не могло возникнуть сильных ковалентных связей [6]. В нашем случае между молекулами доминируют водородные связи, которые значительно слабее ковалентных и не способны существенным образом трансформировать электронную структуру как молекул ПВС, так и фуллеренола. Как следствие этого, положение энергетических уровней НОМО и LUMO, определяющих величину E_g , сохраняется неизменным. Во всяком случае, снижение величины E_g молекул ПВС при их взаимодействии с молекулами фуллеренола не должно быть столь значительным, как это следует из данных на рис. 4 для прямых переходов НОМО → LUMO.

По нашему мнению, поглощение света композитными пленками ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$ не связано с возбуждением молекул ПВС, обладающих модифицированной электронной структурой ввиду их взаимодействия с молекулами допантов, а вызвано непрямыми переходами НОМО → LUMO в молекулах фуллеренола, для которых значение E_g составляет примерно 2,2 эВ и мало зависит от концентрации допанта.



К сожалению, в литературе отсутствуют какие-либо данные об электронной структуре фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$, но известны результаты теоретических расчетов электронного спектра и оценки величины E_g для фуллеренола с меньшим числом гидроксильных групп ($C_{60}(OH)_{26}$), для которого значение E_g было определено равным около 1,95 эВ [16]. Для изолированной молекулы фуллерена C_{60} величина щели запрещенных энергий (зазор НОМО – LUMO) составляет 1,9 эВ [17], что в пределах погрешности измерений совпадает с величиной E_g , определенной нами в данной работе.

Заключение

В настоящей работе представлены результаты измерений поглощения света пленками ПВС, допированными молекулами фуллеренола $C_{60}(OH)_{44}$. Установлено, что добавка даже небольшой концентрации фуллеренола приводит к значительному поглощению света в УФ-области спектра. По мере увеличения концентрации фуллеренола от 1 до 10 масс.% граница пропускания света композитных пленок ПВС : $C_{60}(OH)_{44}$ смещается от 230 к 440 нм. При увеличении концентрации фуллеренола от 1 до 3% коэффициент экстинкции снижается, и при больших концентрациях допанта остается практически неизменным. Можно предположить, что молекулы фуллеренола образуют кластеры и, начиная с некоторого размера кластеров (он должен увеличиваться по мере роста концентрации допанта), величина зазора НОМО – LUMO (E_g) молекул фуллеренола в кластерах практически перестает изменяться и становится близкой к соответствующим значениям в конденсированном состоянии; другими словами, величина коэффициента экстинкции стабилизируется и прекращает возрастать при увеличении концентрации допанта, несмотря на продолжающийся рост размеров кластеров.

Поглощение света в изученных композитных пленках скорее всего связано с возбуждением молекул фуллеренола при непрямах переходах НОМО → LUMO. Значение зазора НОМО – LUMO E_g , найденное на основании измеренных спектров пропускания образцов пленок, составляет $2,2 \pm 0,3$ эВ, согласно нашей оценке, и мало зависит от концентрации фуллеренола в композитной пленке.

Благодарность

Авторы выражают глубокую признательность Татьяне Фёдоровне Ивановой, ведущему специалисту Высшей школы электроники и микросистемной техники СПбПУ Петра Великого, за помощь в изготовлении образцов полимерных пленок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Розенберг М. Э. Полимеры на основе винилацетата. Ленинград: Химия, 1983. 176 с.
2. Nawaz A., Hümmelgen I. A. Poly (vinyl alcohol) gate dielectric in organic field-effect transistors // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2019. Vol. 30. No. 6. Pp. 5299–5326.
3. Лихоманова С. В., Зубцова Ю. А., Каманина Н. В. Поляризационные свойства йодно-поливинилспиртовых поляризаторов, сенсibilизированных оксидом графена // Оптический журнал. 2023. Т. 90. № 7. С. 101–106.
4. Смирнов Ю. Н., Арбузов А. А., Штефан И. Н., Лесничая В. А., Мурадян В. Е. Полимерные аппреты, содержащие водорастворимые производные фуллерена // Журнал прикладной химии. 2011. Т. 84. № 10. С. 1729–1733.
5. Aziz S. B. Modifying poly (vinyl alcohol) (PVA) from insulator to small-bandgap polymer: A novel approach for organic solar cells and optoelectronic devices // Journal of Electronic Materials. 2016. Vol. 45. No. 1. Pp. 736–745.
6. Пенькова А. В., Пиотровский Л. Б., Маркелов Д. А., Семисалова А. С. Производные фуллерена как нанодобавки для полимерных композитов // Успехи химии. 2017. Т. 86. № 6. С. 530–566.
7. Никитина Е. А., Капралова В. М., Сударь Н. Т., Студзинский В. М., Герасимов В. И. Электрические и оптические свойства нанокompозитного материала на основе поливинилового спирта и фуллеренола // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 3. С. 76–86.

8. Карпунин А. Е. Радиоспектроскопические и оптические исследования структуры, сформированной фуллеренолом в полимерной матрице // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций. Санкт-Петербург, 19 – 24 ноября 2018 г. С. 91–93.

9. Kokubo K., Matsubayashi K., Tategaki H., Takada H., Oshima T. Facile synthesis of highly water-soluble fullerenes more than half-covered by hydroxyl groups // ACS Nano. 2008. Vol. 2. No. 2. Pp. 327–333.

10. Гинзбург Б. М., Меленевская Е. Ю., Новоселова А. В., Поздняков А. О., Поздняков О. Ф., Редков Б. П., Шириева О. А. Структура фуллерена C_{60} в матрице полиметилметакрилата // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2004. Т. 46. № 2. С. 295–303.

11. Kratschmer W., Lamb L. D., Fostiropoulos K., Huffman D. R. Solid C_{60} : a new form of carbon // Nature. 1990. Vol. 347. 27 September. Pp. 354–358.

12. Сперанская Т. А., Тарутина Л. И. Оптические свойства полимеров. Л.: Химия, 1976. 136 с.

13. Aziz S. B., Hussein S., Hussein A. M., Saeed S. R. Optical characteristics of polystyrene based solid polymer composites: Effect of metallic copper powder // International Journal of Metals. 2013. Vol. 1. 12 December. P. 123657.

14. Yakuphanoglu F., Sekerci M., Balaban A. The effect of film thickness on the optical absorption edge and optical constants of the Cr (III) organic thin films // Optical Materials. 2005. Vol. 27. No. 8. Pp. 1369–1372.

15. Bhargav P. B., Mohan V. M., Sharma A. K., Rao V. N. Structural, electrical and optical characterization of pure and doped poly (vinyl alcohol)(PVA) polymer electrolyte films // International Journal of Polymeric Materials. 2007. Vol. 56. No. 6. Pp. 579–591.

16. Guirado-Lopez R. A., Rincyn M. E. Structural and optical properties of highly hydroxylated fullerenes: Stability of molecular domains on the C_{60} surface // The Journal of Chemical Physics. 2006. Vol. 125. No. 15. P. 154312.

17. Макарова Т. Л., Захарова И. Б. Электронная структура фуллеренов и фуллеритов // Ленинград: Наука. Ленинградское отделение, 2001. 72 с.

REFERENCES

1. Rozenberg M. E., Polimery na osnove vinilatsetata [Polymers based on vinyl acetate], Khimiya Publishing, Leningrad, 1983 (in Russian).

2. Nawaz A., Hümmelgen I. A., Poly (vinyl alcohol) gate dielectric in organic field-effect transistors, J. Mater. Sci. Mater. Electron. 30 (6) (2019) 5299–5326.

3. Likhomanova S. V., Zubtsova Yu. A., Kamanina N. V., Polarization properties of iodine-polyvinyl alcohol polarizers sensitized with graphene oxide, J. Opt. Technol. 90 (7) (2023) 101–106.

4. Smirnov Y. N., Arbuzov A. A., Shtefan I. N., et al., Polymeric dressing formulations containing water-soluble fullerene derivatives, Russ. J. Appl. Chem. 84 (10) (2011) 1821–1825.

5. Aziz S. B., Modifying poly (vinyl alcohol) (PVA) from insulator to small-bandgap polymer: A novel approach for organic solar cells and optoelectronic devices, J. Electron. Mater. 45 (1) (2016) 736–745.

6. Penkova A. V., Markelov D. A., Acquah S. F., et al., Fullerene derivatives as nano-additives in polymer composites, Russ. Chem. Rev. 86 (6) (2017) 530–566.

7. Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T., et al., Electrical and optical properties of a nanocomposite based on polyvinyl alcohol and fullerene, St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics. 74 (3) (2024) 76–86 (in Russian).

8. Карпунин А. Е., Радиоспектроскопические и оптические исследования структуры, сформированной фуллеренолом в полимерной матрице [Radiospectroscopic and optical studies of structure formed by fullerene in the polymeric matrix], Science Week in SPbPU. Proc. Sci. Conf. with Int. Participation, Institute of Physics, Nanotechnology and Telecommunications, Nov. 19–24, 2018, St. Petersburg (2018) 91–93 (in Russian).

9. Kokubo K., Matsubayashi K., Tategaki H., et al., Facile synthesis of highly water-soluble fullerenes more than half-covered by hydroxyl groups, ACS Nano. 2 (2) (2008) 327–333.

10. Ginzburg B. M., Pozdnyakov A. O., Shepelevskii A. A., et al., Structure of fullerene C_{60} in a poly(methyl methacrylate) matrix, Polymer Sci. 46 (2) (2004) 169–175.



11. Kratschmer W., Lamb L. D., Fostiropoulos K., Huffman D. R., Solid C₆₀: a new form of carbon, Nature. 347 (27 Sept) (1990) 354–358.
12. Speranskaya T. A., Tarutina L. I., Opticheskiye svoystva polimerov [Optical properties of polymers], Khimiya Publishing, Leningrad, 1976 (in Russian).
13. Aziz S. B., Hussein S., Hussein A. M., Saeed S. R., Optical characteristics of polystyrene based solid polymer composites: Effect of metallic copper powder. Int. J. Met. 1 (12 Dec) (2013) 123657.
14. Yakuphanoglu F., Sekerci M., Balaban A., The effect of film thickness on the optical absorption edge and optical constants of the Cr (III) organic thin films, Opt. Mater. 27 (8) (2005) 1369–1372.
15. Bhargav P. B., Mohan V. M., Sharma A. K., Rao V. N., Structural, electrical and optical characterization of pure and doped poly (vinyl alcohol)(PVA) polymer electrolyte films, Int. J. Polym. Mater. 56 (6) (2007) 579–591.
16. Guirado-Lopez R. A., Rincyn M. E., Structural and optical properties of highly hydroxylated fullerenes: stability of molecular domains on the C₆₀ surface, J. Chem. Phys. 125 (15) (2006) 154312.
17. Makarova T. L., Zakharova I. B., Elektronnaya struktura fullerenov i fulleritov [Electronic structure of fullerenes and fullerites], Nauka Publishing. Leningrad branch, Leningrad, 2001 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НИКИТИНА Елизавета Александровна – аспирантка *Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
eanikitina26@icloud.com
ORCID: 0000-0003-1394-2681

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – кандидат физико-математических наук, доцент *Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kapralova2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9050-4453

СУДАРЬ Николай Тобисович – доктор физико-математических наук, профессор *Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sudar53@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7380-7727

ГЕРАСИМОВ Виктор Иванович – кандидат технических наук, доцент *Высшей школы механики и процессов управления Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
viger53@rambler.ru
ORCID: 0009-0004-2167-0019

УТАЕВ Собир Ачилович – доктор философии (PhD) по техническим наукам, заведующий кафедрой промышленной инженерии *Каршинского государственного университета, г. Карши, Узбекистан.*

180103, Узбекистан, г. Карши, ул. Кучабат, 17
utaev.s@list.ru
ORCID: 0000-0003-0377-8929

THE AUTHORS

NIKITINA Elizaveta A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
eanikitina26@icloud.com
ORCID: 0000-0003-1394-2681

KAPRALOVA Viktoria M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kapralova2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9050-4453

SUDAR Nicolay T.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sudar53@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7380-7727

GERASIMOV Viktor I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
viger53@rambler.ru
ORCID: 0009-0004-2167-0019

UTAEV Sobir A.

Karshi State University
17 Kuchabog St., Karshi, 180103, Uzbekistan
utaev.s@list.ru
ORCID: 0000-0003-0377-8929

*Статья поступила в редакцию 10.06.2022. Одобрена после рецензирования 08.07.2022.
Принята 08.07.2022.*

Received 10.06.2022. Approved after reviewing 08.07.2022. Accepted 08.07.2022.

Научная статья

УДК 539.126.3, 539.125.4, 539.125.46

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18413>

**ВОЗМОЖНОСТИ ИЗМЕРЯТЬ СВОЙСТВА
ИДЕНТИФИЦИРОВАННЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ АДРОНОВ
В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР КСЕНОНА С НЕПОДВИЖНОЙ
ВОЛЬФРАМОВОЙ МИШЕНЬЮ ПРИ ЭНЕРГИИ 2,5А ГэВ
В ДЕТЕКТОРЕ MPD НА УСКОРИТЕЛЕ NICA**

Я. А. Бердников¹, Д. А. Иванищев^{1,2} , Д. О. Котов¹, М. В. Малаев¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константина
НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина, Россия

 ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru

Аннотация. В работе исследованы возможности измерять свойства идентифицированных заряженных легких адронов (π^\pm - и K^\pm -мезонов, а также протонов) в столкновениях ядер ксенона Xe с неподвижной мишенью из вольфрама W при кинетической энергии налетающего пучка $E_{kin} = 2,5A$ ГэВ с помощью экспериментальной установки (ЭУ) MPD на ускорителе NICA. Получены оценки чистоты восстанавливаемого спектра в ЭУ MPD, эффективности восстановления спектров в ЭУ MPD и дифференциальных спектров по поперечному импульсу для исследуемых легких адронов. Оценки вычислены как зависимости от поперечного импульса для различных интервалов по центральности столкновений Xe + W в центральной области быстрот посредством модельных расчетов. Использовался подход на основе σ -параметризации информации об идентификации частиц в ЭУ MPD.

Ключевые слова: столкновение ядер, рождение, адрон, ускоритель NICA, детектор MPD

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2025-0009).

Для цитирования: Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В. Возможности измерять свойства идентифицированных заряженных адронов в столкновениях ядер ксенона с неподвижной вольфрамовой мишенью при энергии 2,5А ГэВ в детекторе MPD на ускорителе NICA // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 177–189. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18413>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18413>

FEASIBILITY TO MEASURE THE PROPERTIES OF IDENTIFIED CHARGED HADRONS IN COLLISIONS OF XENON NUCLEI WITH A FIXED TUNGSTEN TARGET AT AN ENERGY OF 2.5A GeV IN THE MPD DETECTOR AT THE NICA COLLIDER

Ya. A. Berdnikov ¹, D. A. Ivanishchev ^{1, 2} , D. O. Kotov ¹, M. V. Malaev ¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRC «Kurchatov Institute», St. Petersburg, Russia

 ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru

Abstract. We report results on a feasibility study of measuring the properties of identified charged light hadrons (π^\pm and K^\pm mesons as well as protons) in collisions of Xe nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV using the MPD detector at the NICA collider. The evaluations of the purity of the reconstructed spectrum in the MPD detector, reconstruction efficiency of the spectra in the MPD detector and the transverse momentum spectra for the π^\pm , K^\pm mesons and protons were made. The evaluations were obtained depending on the transverse momentum for different intervals of centrality of Xe + W collisions in the central rapidity range using model calculations. We used an approach based on σ -parameterization of particle identification information in the MPD detector.

Keywords: nuclei collision, production, hadron, NICA collider, MPD detector

Funding: The reported study was carried out within the framework of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2025-0009).

For citation: Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., Malaev M. V., Feasibility to measure the properties of identified charged hadrons in collisions of xenon nuclei with a fixed tungsten target at an energy of 2.5A GeV in the MPD detector at the NICA collider, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 177–189. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18413>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Исследование процессов, происходящих при столкновениях тяжелых релятивистских ядер, и особенностей образования ядерной среды в таких столкновениях является одним из наиболее важных направлений в физике высоких энергий [1, 2]. Уже почти 40 последних лет на различных ускорительных комплексах по всему миру ставят эксперименты по изучению ядерного вещества в экстремальных условиях при больших значениях барионных плотностей и/или температур. Наиболее значимым открытием в этой области стало обнаружение сильновзаимодействующей кварк-глюонной плазмы (КГП), ведущей себя как идеальная жидкость, на Релятивистском коллайдере тяжелых ионов (*англ.* Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC)) в Брукхейвенской национальной лаборатории (BNL, США) и на Большом адронном коллайдере (*англ.* Large Hadron Collider (LHC)) в Европейской организации по ядерным исследованиям (CERN, Швейцария) в столкновениях тяжелых ядер при энергии столкновения на нуклон-нуклонную пару в системе центра масс $\sqrt{s_{NN}} = 0,1 - 5$ ТэВ [3, 4]. Более детальный анализ экспериментальных данных, накопленных ранее на Протонном суперсинхротроне (*англ.* Super Proton Synchrotron (SPS)) в Европейской организации по ядерным исследованиям, также подтвердил образование кварк-глюонной плазмы в столкновениях тяжелых ядер при энергии $\sqrt{s_{NN}}$, примерно равной 17 ГэВ [5].



Полученные результаты свидетельствуют о существовании перехода из адронной материи в КГП при критической температуре, примерно равной 170 МэВ, и почти нулевой барионной плотности; такой переход был предсказан теоретически с помощью ряда моделей [3, 4]. Для построения фазовой диаграммы состояния сильно взаимодействующего ядерного вещества в областях малых температур и больших барионных плотностей ($\sqrt{S_{NN}} = 2 - 15$ ГэВ), а также для поиска теоретически предсказанной критической точки фазового перехода, на Релятивистском коллайдере тяжелых ионов была запущена программа сканирования по энергии событий столкновения ядер [6]. На сегодняшний день не удалось экспериментально обнаружить искомую критическую точку. В ближайшее время более детальное исследование фазовой диаграммы в этой области будет проводиться на ускорительном комплексе Европейского исследовательского центра ионов и антипротонов (*англ.* Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR)) в Центре по изучению тяжелых ионов имени Гельмгольца (GSI, Германия) [7], на Высокоинтенсивном ускорителе тяжелых ионов (*англ.* High Intensity heavy ion Accelerator Facility (HIAF)) в Институте современной физики (IMP, Китай) [8] и на Сверхпроводящем коллайдере протонов и тяжелых ионов (*англ.* Nuclotron-based Ion Collider fAcility (NICA)), находящемся в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна Московской области, Россия) [9] после ввода их в эксплуатацию.

Для изучения ядерной среды, образующейся в столкновениях тяжелых релятивистских ядер при малых температурах и больших барионных плотностях, на ускорителе NICA предположительно в следующем году начнется эксперимент с многофункциональным детектором (*англ.* Multi-Purpose Detector (MPD)) [9]. Эксперимент MPD будет работать как в режиме сталкивающихся пучков ускорителя NICA, так и в режиме с неподвижной мишенью.

Свойства среды, образующейся в столкновениях тяжелых релятивистских ядер, определяют косвенно посредством регистрации частиц, рождающихся в таких столкновениях, в экспериментальной установке и измерения их свойств различными детекторными системами. Например, особенности протекания адронной фазы измеряют путем регистрации короткоживущих адронных резонансов [1, 2, 10], а систематическое исследование рождения частиц с разным кварковым составом, барионным числом, массой, странностью и т.п. позволяет определять и описывать процессы, протекающие в плотной и горячей ядерной среде [1, 11]. Особый интерес представляют такие заряженные легкие адроны, как пионы, каоны, протоны и антипротоны [11]. Данные частицы рождаются в изобилии в столкновениях тяжелых релятивистских ядер. Эти частицы можно довольно легко идентифицировать, например, по их траектории движения в магнитном поле, энергетическим потерям в газовых детекторах, по квадрату массы или скорости, измеренной времяпролетной и трековой системами, и/или энерговыделению в адронном калориметре.

Заряженные пионы и каоны являются мезонами, а (анти)протоны – барионами. Заряженные пионы состоят из двух самых легких кварков ($ud, d\bar{u}$), и измерение их свойств является базовым для сравнения с другими частицами. Заряженные каоны ($u\bar{s}, s\bar{u}$) обладают странностью, и их масса почти в четыре раза больше массы пионов. Протоны (uud) состоят из трех легких кварков, и их масса почти в два раза больше массы каонов [12].

Систематическое экспериментальное исследование инвариантных спектров по поперечному импульсу p_T и поперечной массе m_T заряженных адронов, их выходов и факторов ядерной модификации преследует следующие цели:

определить свойства горячей и плотной ядерной среды в момент ее распада на конечные адроны;

проверить достижение системой теплового и химического равновесия;

оценить динамику реакции, в том числе коллективные эффекты при продольном и поперечном расширении файerbола.

Чтобы проследить динамику реакции, прибегают к анализу формы инвариантных спектров по поперечному импульсу p_T и среднего значения $\langle p_T \rangle$ этого импульса.

Форма указанных спектров чувствительна к механизмам рождения частиц в различных кинематических областях, а также к взаимовлиянию радиального потока и рекомбинации партонов при промежуточных поперечных импульсах.

Анализ формы инвариантных спектров по поперечной массе позволяет установить температуру кинетической заморозки и среднюю скорость коллективного потока частиц. Изучение поведения факторов ядерной модификации обеспечивает возможность оценивать степень выраженности коллективных эффектов, по сравнению с более легкими сталкивающимися системами при той же энергии столкновения.

Для сравнения особенностей рождения частиц, например исследования эффекта избыточного выхода барионов по отношению к мезонам, используют такой параметр, как отношение их выходов. Измерение свойств каонов позволяет вникать в суть эффекта избыточного выхода странности в столкновениях тяжелых ионов [11].

Как и в других экспериментах по определению свойств плотной и горячей ядерной материи, измерение особенностей рождения идентифицированных заряженных легких адронов составляет неотъемлемую часть физической программы эксперимента MPD. До ввода в эксплуатацию экспериментальной установки MPD и начала эксперимента проводятся подготовительные работы по выстраиванию оптимальных методов измерений и оценке их применимости. Ввиду отсутствия даже первичных экспериментальных данных, такие работы базируются на выполнении модельных расчетов.

Цели настоящего исследования – разработать методику восстановления дифференциальных спектров по поперечному импульсу идентифицированных заряженных легких адронов (π^\pm - и K^\pm -мезонов, а также протонов p), а затем на ее основе оценить возможность измерения свойств этих адронов в столкновениях ядер ксенона Xe с неподвижной мишенью из вольфрама W при кинетической энергии налетающего пучка $E_{kin} = 2,5A$ ГэВ, где A , а.е.м., – атомная масса ядра.

Такие измерения предполагается проводить на экспериментальной установке MPD в области центральных быстрот, причем необходимо находить связь этих свойств с центральностью столкновений.

Экспериментальная установка MPD и методика модельного расчета

Особенности экспериментальной установки. Функционирование этой установки оптимизировано для исследования актов столкновения тяжелых релятивистских ионов в условиях большой множественности заряженных частиц в конечном состоянии. Для столкновений тяжелых ядер на ускорителе NICA плотность множественности $dN_{ch}/d\eta$ достигает значений 100 – 200 в области малых быстрот. Здесь N_{ch} – количество заряженных частиц в конечном состоянии, η – псевдобыстрота.

Согласно плану, эта установка должна обладать широким аксептансом и беспрецедентным импульсным, пространственным, временным и энергетическим разрешением, в особенности в области малых поперечных импульсов. Траектории и импульсы заряженных частиц будут измеряться во времяпроекционной камере (*англ.* Time Projection Chamber (TPC)), расположенной в однородном магнитном поле с индукцией 0,5 Тл, создаваемом цилиндрическим соленоидальным сверхпроводящим магнитом. В детекторе TPC будет создана возможность идентифицировать заряженные частицы путем измерения их энергетических потерь (dE/dx) в рабочем газе детектора, состоящем из смеси аргона и метана (90 % Ar и 10 % CH₄). Заряд частицы и импульс будут измеряться по параметрам искривления траектории заряженной частицы в магнитном поле. Вдоль траектории трека заряженной частицы детектор TPC должен будет измерять до 53 точек. Импульсное разрешение детектора TPC в области малых поперечных импульсов в столкновениях тяжелых ядер будет составлять 1,5 – 3,5 %. Детектор TPC сможет дифференцировать адроны: отличать пионы от каонов (в пределах двух среднеквадратичных отклонений) в диапазоне импульсов до 0,7 ГэВ/с, а каоны от протонов – до 1,2 ГэВ/с. Дополнительная идентификация заряженных частиц будет осуществляться времяпролетным детектором (*англ.* Time-Of-Flight (TOF)) по признаку времени пролета частиц. Идентификация пионов и каонов детектором TOF будет возможна только для частиц с значениями поперечного импульса p_T свыше 150 и 350 МэВ/с соответственно. В текущей конфигурации магнитного поля только пионы и протоны с таким поперечным импульсом смогут достичь детектора TOF. Последний обеспечит измерение времени пролета для заряженных частиц с типичным разрешением около 80 пс. В сочетании с восстановлением трека и измерением импульса и заряда в детекторе TPC, детектор TOF позволит различать заряженные частицы путем



измерения их скорости β или квадрата их массы m^2 . Кроме того, применение детектора TOF позволит расширить область значений поперечных импульсов, в которой возможна дифференциация адронов, а именно – отличать пионы от каонов и каоны от протонов, обладающих p_T до 1,5 ГэВ/с и 2,5 ГэВ/с соответственно.

Подробная информация о физической программе будущего эксперимента MPD, а также описание детекторных подсистем, входящих в экспериментальную установку, приведены в статье [9].

Возможности ускорительного комплекса NICA позволят проводить эксперименты по сбору данных от столкновений тяжелых ионов как в варианте со встречными пучками частиц, так и в варианте с одним пучком частиц и неподвижной мишенью.

В данной работе рассматривается вариант работы ускорителя с неподвижной мишенью, поскольку предполагается, что такой вариант будет реализован после ввода детектора MPD в эксплуатацию. В качестве налетающего пучка частиц планируется использовать ядра ксенона Xe, а закрепленной мишенью будет служить вольфрам (мишень будет изготовлена из вольфрамовых проволок). Кинетическая энергия налетающего пучка составит $E_{kin} = 2,5A$ ГэВ, что соответствует энергии столкновения в системе центра масс $\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ. Мишень будет зафиксирована перпендикулярно оси Z на расстоянии 85 см от геометрического центра экспериментальной установки MPD в сторону налетающего пучка (ось Z коллинеарна направлению движения налетающего пучка).

Методика модельного расчета. С учетом вышеописанных условий, моделирование столкновений ядер ксенона и вольфрама (Xe + W) для рассматриваемой конфигурации проводилось с помощью программного пакета UrQMD [13], который наиболее популярен среди генераторов событий для диапазона энергии столкновений, реализуемых на ускорителе NICA. Важно отметить, что эксперимент с конфигурацией столкновений ядер Xe + W влечет за собой смещение области центральных быстрот y в системе центра масс (CMS) относительно той же области в лабораторной системе координат ($\Delta y = 0,986$). При моделировании это требовало специального учета. Необходимо добавить, что в настоящей работе использовалась выборка столкновений ядер Xe + W размером 15 млн. событий.

Полномасштабное моделирование откликов детекторных подсистем на взаимодействие частиц, рожденных в смоделированных столкновениях ядер Xe + W, с веществом экспериментальной установки MPD, а также восстановление треков заряженных частиц проводилось в рамках программного пакета MpdRoot [9], основанного на программных пакетах ROOT и Geant4. Программный пакет MpdRoot написан на языке программирования C++ и служит основным инструментом эксперимента MPD как для моделирования работы детекторных подсистем, так и для анализа данных, которые будут получены экспериментально.

В соответствии с целью работы, представленной выше во Введении, восстановление спектров в области центральных быстрот особо важно выполнить в максимально широком диапазоне значений поперечного импульса. При этом было выбрано семь интервалов по центральности.

Поскольку спектры рождения при таких относительно небольших энергиях столкновения ($\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ) получаются очень мягкими (основная доля частиц рождается с малыми значениями поперечного импульса), восстановление сигнала в области малых значений поперечного импульса становится наиважнейшей и актуальной задачей. Помимо этого, при рассматриваемой конфигурации столкновений ядер наблюдается асимметрия в рождении положительно и отрицательно заряженных адронов. Например, в случае каонов выход отрицательно заряженных частиц значительно подавлен по отношению к выходу положительно заряженных каонов, однако для пионов асимметрии не наблюдается. Выход антипротонов при данной энергии столкновения практически равен нулю. С учетом описанной ситуации эти расчеты выполнялись отдельно для положительно заряженных частиц и для отрицательно заряженных.

Как было отмечено выше, в рассматриваемой конфигурации столкновений происходит смещение системы центра масс относительно лабораторной системы координат. Особый интерес в нашей работе представляла область центральных быстрот в системе центра масс. Но поскольку данная область близка к границам геометрического акцептанса детектора TPC, наблюдалась значительная неоднородность в доступном фазовом пространстве

(в координатах $p_T - y$) при восстановлении свойств заряженных легких адронов. В связи с этим для анализа был выбран асимметричный диапазон быстрот ($-0,5 < y_{\text{CMS}} < 0,0$), а также введены дополнительные ограничения на минимальное значение поперечного импульса для восстанавливаемых частиц.

В данной работе предлагается новый подход к восстановлению инвариантных спектров по поперечному импульсу заряженных легких адронов (π^\pm , K^\pm и p) на основе σ -параметризации информации об идентификации частиц в детекторах ТРС и TOF. Данный метод не требует глубокого систематического изучения и позволяет быстро получать первые физические результаты сразу после начала сбора экспериментальных данных.

В то же время предложенный подход имеет свои недостатки и ограничения, особенно в области высоких значений поперечного импульса, и в этом случае может использоваться как дополнение к другим методикам восстановления спектров идентифицированных заряженных легких адронов.

Такой подход состоит в следующем. На начальном этапе анализа из всех восстановленных треков заряженных частиц рассматриваемого столкновения ядер отбираются треки заряженных частиц, удовлетворяющие критериям отбора по количеству точек, восстановленных в детекторе ТРС, и по расстоянию минимального сближения восстановленного трека с вершиной взаимодействия в этом столкновении (это расстояние от вершины взаимодействия до наиболее близкой к ней точке восстановленного трека лимитировалось специально заданным значением).

Пороги данных критериев отбора предварительно оптимизируются с целью сведения к минимуму числа ложных восстановленных треков, а также для подавления вклада в сигнал вторичных частиц (при условии приемлемых потерь сигнальных частиц).

Для отбора адронов разного типа (π^\pm , K^\pm и p) проводились четыре квазинезависимые процедуры. Для протонов и заряженных пионов (первые две процедуры) была следующая последовательность действий.

Первая процедура (назовем ее условно « π^\pm , p , ТРС + TOF»). Для отбора на каждую частицу налагалось требование, чтобы вероятность ее идентификации в детекторе ТРС не выходила за пределы двух среднеквадратичных отклонений σ от базового значения вероятности, заданного анализируемому типу адрона. Если у трека из детектора ТРС в детектор TOF имелось продолжение, то для этого анализируемого типа применялся дополнительный критерий отбора 2σ (аналогичный предыдущему), но информация извлекалась из детектора TOF.

Вторая процедура (назовем ее условно « π^\pm , p , TOF + ТРС»). Для отбора на каждую частицу налагалось требование, чтобы вероятность ее идентификации одновременно в детекторах ТРС и TOF не выходила за пределы двух среднеквадратичных отклонений от базового значения вероятности, заданного анализируемому типу адронов.

Для отбора другого типа адронов – заряженных каонов применялись еще две процедуры, условно названные нами « K^\pm , ТРС + TOF» и « K^\pm , TOF + ТРС».

Третья процедура (« K^\pm , ТРС + TOF»). Для отбора на каждую частицу также налагалось требование, чтобы вероятность ее идентификации в детекторе ТРС не выходила за определенные пределы, но не двух, а одного среднеквадратичного отклонения от базового значения вероятности, заданного анализируемому типу адронов. Кроме того, применялся дополнительный критерий отбора 3σ , так называемый «вето-критерий», запрещающий частице быть протоном, пионом мюоном. Отбирались заряженные частицы, вероятность идентифицировать которые как протон, пион, электрон или мюон в детекторе ТРС лежит за пределами трех среднеквадратичных отклонений от базового значения вероятности, заданного запретным адронам: протону, пиону, электрону или мюону.

Четвертая процедура (« K^\pm , TOF + ТРС»). Она аналогична процедуре (K^\pm , ТРС + TOF), однако вето-критерий накладывался на информацию, полученную от детектора TOF, а не от ТРС.

Описанные процедуры проводились отдельно для положительно и отрицательно заряженных частиц.

На рис. 1 представлены полученные результаты по эффективности ε восстановления спектров идентифицированных заряженных адронов с помощью разработанной методики для наиболее центральных столкновений ядер ксенона с вольфрамовой мишенью:



Хе + W. Функция эффективности восстановления в зависимости от поперечного импульса $\varepsilon(p_T)$ рассчитывалась в виде отношения числа отобранных заряженных адронов определенного типа к их полному числу, сгенерированному в генераторе событий.

Анализ данных на рис. 1 позволяет заключить, что спектры заряженных каонов восстанавливаются менее эффективно, чем спектры пионов и протонов. Значительная примесь пионов, а также электронов и их античастиц приводит к меньшей величине эффективности восстановления спектров заряженных каонов, особенно в области малых значений поперечного импульса. Снижение эффективности восстановления спектров идентифицированных заряженных легких адронов в области малых значений поперечного импульса обусловлено акцептансом детектора TPC и повышенными требованиями к качеству восстанавливаемых треков.

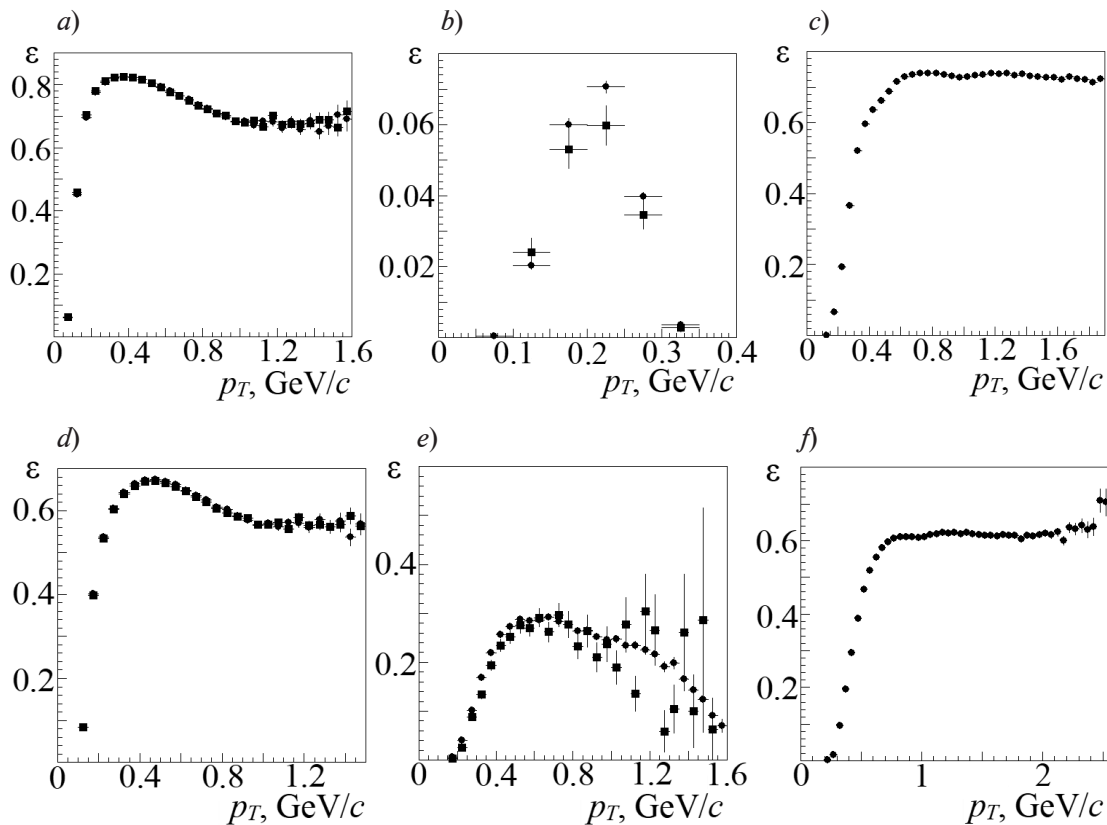


Рис. 1. Расчетные зависимости от поперечного импульса эффективности восстановления спектров π^\pm - (a, d) и K^\pm - (b, e) мезонов, а также протонов (c, f) с помощью MPD по процедурам (π^\pm, p , TPC + TOF) (a, c), (K^\pm , TPC + TOF) (b), (π^\pm, p , TOF + TPC) (d, f) и (K^\pm , TOF + TPC) (e).

Вычислены для столкновений ядер Хе с мишенью W при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ и рожденных частиц, отрицательно (■) и положительно (●) заряженных

В результате измерений были получены промежуточные спектры пионов, каонов и протонов (зависимости выхода рожденных в столкновениях легких адронов от поперечного импульса). В ходе анализа этих спектров строились графики зависимости их чистоты ρ от величины поперечного импульса. Величина ρ есть доля правильно идентифицированных сигнальных частиц в полученном спектре (идентификация проведена на основе первичной информации Монте-Карло об анализируемых треках).

На рис. 2 представлены зависимости от поперечного импульса p_T чистоты ρ идентифицированных заряженных легких адронов, полученные через применение разработанных процедур для наиболее центральных столкновений Хе + W. Из этих данных можно заключить, что у протонов не наблюдается каких-либо существенных примесей во всем диапазоне значений поперечного импульса, доступном для анализа. Налицо та же картина при восстановлении спектров отрицательно заряженных пионов. Что же касается

положительно заряженных пионов, то их спектр остается чистым вплоть до значений поперечного импульса p_T , равных около 0,8 ГэВ/с и 1,2 ГэВ/с, когда применяли процедуры $(\pi^\pm, p, \text{TPC} + \text{TOF})$ и $(\pi^\pm, p, \text{TOF} + \text{TPC})$, соответственно. При более высоких значениях поперечного импульса вклады протонов и каонов в спектр становятся весомыми. В случае восстановления спектров заряженных каонов вклады в спектр от других частиц наблюдаются в областях как малых значений поперечного импульса (электроны, пионы), так и его промежуточных и больших значений (пионы).

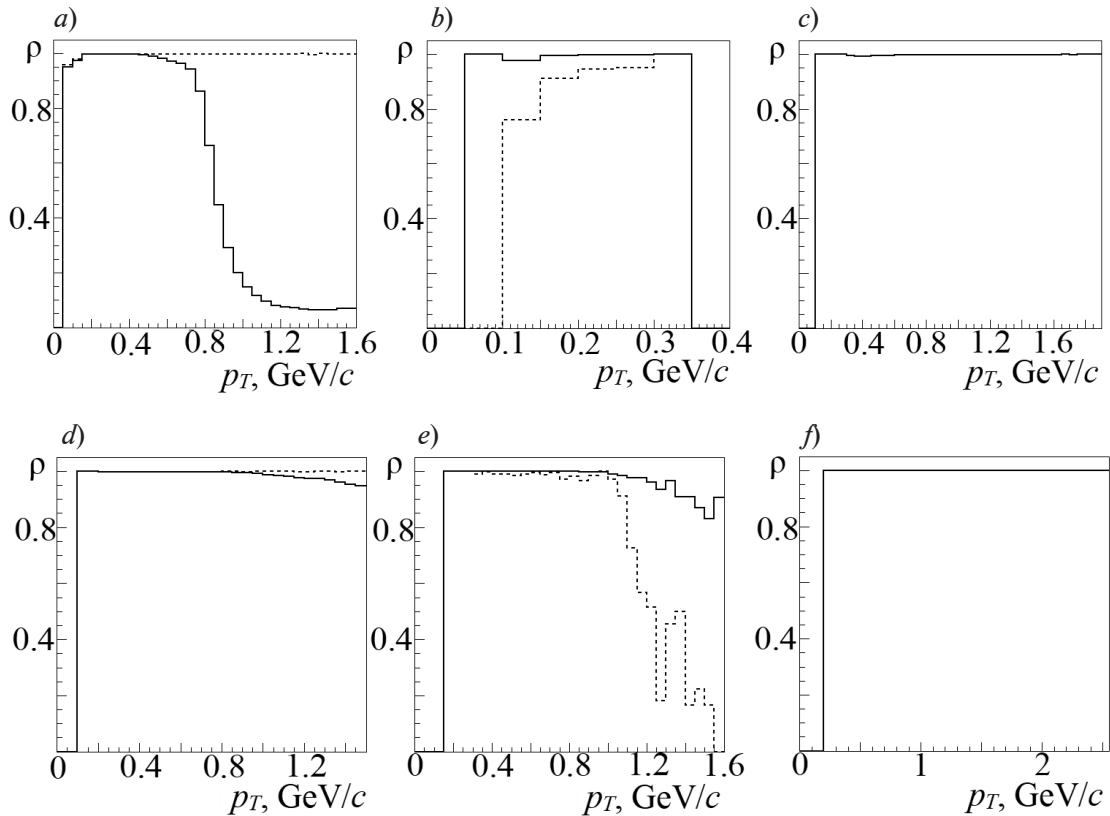


Рис. 2. Расчетные зависимости от поперечного импульса чистоты ρ восстанавливаемых спектров π^\pm - (*a, d*) и K^\pm - (*b, e*) мезонов, а также протонов (*c, f*), полученные по процедурам $(\pi^\pm, p, \text{TPC} + \text{TOF})$ (*a, c*), $(K^\pm, \text{TPC} + \text{TOF})$ (*b*), $(\pi^\pm, p, \text{TOF} + \text{TPC})$ (*d, f*) и $(K^\pm, \text{TOF} + \text{TPC})$ (*e*). Вычислены для столкновений ядер Xe с мишенью W при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ и рожденных частиц, отрицательно (пунктирные линии) и положительно (сплошные линии) заряженных

Для восстановления финальных спектров идентифицированных заряженных легких адронов требовалась чистота спектров не менее 95 % для пионов и протонов, а также не менее 90 % для каонов, с целью минимизации в будущем систематических погрешностей измерений. Такое требование влечет за собой сужение диапазона значений поперечного импульса, в котором восстанавливаемый спектр удовлетворяет всем условиям разработанной методики. Дополнительно пришлось ввести ограничение на минимальное значение поперечного импульса в связи с неоднородностью фазового пространства восстановленных треков частиц, доступного для анализа.

После выполнения всех описанных критериев и ограничений выход рассматриваемых идентифицированных заряженных легких адронов определялся как количество восстановленных адронов. Выходы заряженных адронов корректировались с учетом эффективности восстановления и чистоты отбора для получения дифференциального выхода заряженного адрона по следующей формуле [14]:

$$\frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{N(p_T)}{N_{ev} \varepsilon(p_T) \rho(p_T) \Delta p_T \Delta y},$$

где y – быстрая π^{\pm} , K^{\pm} -мезонов или протонов; p_T , ГэВ/с, – их поперечный импульс; Δp_T , ГэВ/с, Δy – диапазоны поперечных импульсов и быстрот, в пределах которых определяется их выход $N(p_T)$; $\varepsilon(p_T)$ – эффективность восстановления спектров поперечных импульсов; $\rho(p_T)$ – чистота восстанавливаемых спектров; N_{ev} – число анализируемых столкновений Xe + W.

В итоге из двух восстановленных спектров, полученных в результате проведения квазинезависимых процедур, путем объединения получался финальный дифференциальный спектр (в зависимости от значений поперечного импульса). В области перекрытия двух спектров выбирался спектр с меньшими значениями относительных статистических погрешностей.

Результаты расчетного восстановления спектров

На рис. 3 представлены дифференциальные спектры заряженных пионов, каонов и протонов, полученные в виртуальных столкновениях Xe + W при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ в разных диапазонах центральности столкновения; эти спектры были восстановлены с помощью специально разработанной методики, описанной выше. На этом же рисунке для сравнения представлены реальные спектры по поперечному импульсу для исследуемых

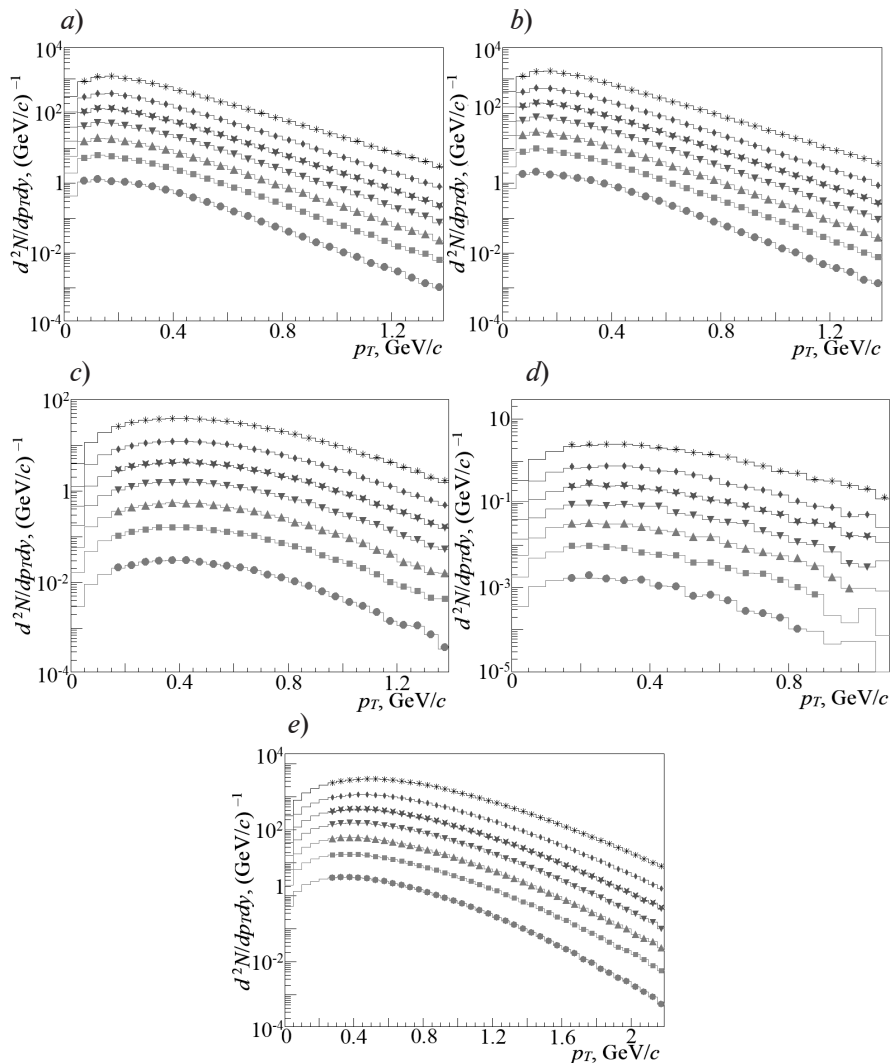


Рис. 3. Восстановленные спектры по поперечному импульсу (символы) и аналогичные спектры, первоначально смоделированные генератором событий (линии) для π^+ (a), π^- (b), K^+ (c), K^- (d) мезонов и протонов p (e) в диапазоне быстрот $-0,5 < y_{CMS} < 0$.

Восстановлены для столкновений ядер Xe + W при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 2,87$ ГэВ и семи интервалов по центральности, %: 0 – 10 (*), 10 – 20 (♦), 20 – 30 (*), 30 – 40 (▼), 40 – 50 (▲), 50 – 60 (■) и 60 – 90(•).

Для наглядности спектры показаны на одном графике (поэтому соответственно увеличены)

адронов, смоделированные генератором событий. Видно, что для спектров характерно подобие, что однозначно свидетельствует о правильности применения разработанной в работе методики анализа.

Эта методика позволяет измерять спектры рассматриваемых легких адронов:

заряженных пионов π^\pm в области центральных быстрот при $p_T > 0,05$ ГэВ/с, что соответствует примерно 96 % от общего выхода положительно (отрицательно) заряженных пионов;

заряженных каонов K^\pm при $p_T > 0,15$ ГэВ/с, что соответствует примерно 93 (89) % от общего выхода положительно(отрицательно) заряженных каонов;

протонов p при $p_T > 0,25$ ГэВ/с, что соответствует примерно 89 % от общего выхода протонов.

Представленная методика обладает простотой и преимуществом использования минимального числа модельно-зависимых поправок, требующих систематического изучения, а также дает возможность быстро получать результаты при наличии экспериментальных данных.

Представленные результаты демонстрируют, что разработанная методика позволяет восстанавливать спектры в области значений поперечного импульса, необходимых для анализа интегральных выходов, средних значений поперечного импульса, аппроксимации спектров различными функциями для определения температуры кинетической заморозки и средней скорости коллективного потока частиц, а также для получения других термодинамических параметров.

Заключение

Таким образом, в статье представлены результаты исследования возможности измерять свойства π^\pm , K^\pm -мезонов и протонов в столкновениях ядер ксенона с неподвижной мишенью из вольфрама при кинетической энергии налетающего пучка $E_{kin} = 2,5A$ ГэВ с помощью экспериментальной установки на ускорителе NICA.

На основе модельных расчетов получены оценки основных параметров процесса в зависимости от поперечного импульса, таких как чистоты восстанавливаемого спектра в экспериментальной установке MPD, эффективности восстановления спектров в этой установке и спектров по поперечному импульсу для π^\pm , K^\pm -мезонов и протонов.

Установлено, что накопление более 15 млн. рассматриваемых столкновений достаточно для идентификации и восстановления свойств заряженных адронов с удовлетворительной точностью для изучения рождения π^\pm , K^\pm -мезонов и протонов в широкой области поперечных импульсов в области центральных быстрот с интервалом 10% для центральных и полуцентральных столкновений, а также с интервалом 30% для периферийных.

Представленная в статье методика восстановления спектров идентифицированных заряженных адронов достаточно проста и требует использования минимального числа модельно-зависимых поправок. Показано, что методика позволяет восстанавливать спектры, подходящие для получения интегральных выходов, средних значений поперечного импульса и термодинамических параметров на их основе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов А. Ю. Возможности измерять свойства $\phi(1020)$ -мезона в столкновениях ядер висмута при энергии 9,2 ГэВ в ускорителе NICA на экспериментальной установке MPD // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 1. С. 129–141.
2. Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Малаев М. В., Рябов А. Ю. Возможности измерять свойства заряженных $K^*(892)$ -мезонов и $\Sigma(1385)$ -барионов в столкновениях ядер висмута при энергии 9,2 ГэВ в ускорителе NICA на экспериментальной установке MPD // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 2. С. 119–131.
3. Adcox K., Adler S. S., Afanasiev S., et al. (PHENIX Collaboration). Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration // Nuclear Physics A. 2005. Vol. 757. No. 1–2. Pp. 184–283.



4. Acharya S., Adamová D., Adler A., et al. (ALICE Collaboration). The ALICE experiment: a journey through QCD // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. No. 8. P. 813.
5. Adhikary H., Adrich P. Search for a critical point of strongly-interacting matter in central 40Ar + 45Sc collisions at 13 A – 75 A GeV/c beam momentum // The European Physical Journal C. 2024. Vol. 84. No. 7. P. 741.
6. Taranenko A. Results from the RHIC Beam Energy Scan // EPJ Web of Conferences. 2017. Vol. 164. 05 December. P. 06005.
7. Ablaizimov T., Abuhoza A., Adak R. P. T., et al. Challenges in QCD matter physics – The scientific programme of the Compressed Baryonic Matter experiment at FAIR // The European Physical Journal A. 2017. Vol. 53. No 3. P. 60.
8. Zhou X., Yang J., the HIAF project team. Status of the high-intensity heavy-ion accelerator facility in China // AAPPS Bulletin. 2022. Vol. 32. November 08. P. 35.
9. Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al. Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA // The European Physical Journal A. 2022. Vol. 58. No. 7. P. 140.
10. Ivanishchev D., Kotov D., Malaev M., Riabov V., Riabov Y. Resonance reconstruction in the MPD // Particles. 2021. Vol. 4. No. 1. Pp. 29–36.
11. Abdulameer N. J., Acharya U., Adare A. Identified charged-hadron production in $p + \text{Al}$, $^3\text{He} + \text{Au}$, and $\text{Cu} + \text{Au}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV and in $\text{U} + \text{U}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 193$ GeV // Physical Review C. 2024. Vol. 109. No. 5. P. 054910.
12. Workman R. L., Burkert V. D., Crede V., et al. (Particle Data Group and Others). Review of particle physics // Progress of Theoretical and Experimental Physics. 2022. Vol. 2022. No. 8. P. 083C01.
13. Bleicher M., Zabrodin E., Spieles C., et al. Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model // Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics. 1999. Vol. 25. No. 9. P. 1859–1896.
14. Бердников Я. А., Иванищев Д. А., Котов Д. О., Рябов В. Г., Рябов Ю. Г. Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 3 (129). С. 134–139.

REFERENCES

1. Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al., Feasibility to measure the properties of $\phi(1020)$ meson in collisions of bismuth nuclei at an energy of 9.2 GeV in the NICA collider using the MPD experimental setup, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (1) (2025) 129–141 (in Russian).
2. Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al., Feasibility to measure the properties of charged $K^*(892)$ mesons and $\Sigma(1385)$ baryons in collisions of bismuth nuclei at an energy of 9.2 GeV in the NICA collider using the MPD experimental setup, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (2) (2025) 119–131 (in Russian).
3. Adcox K., Adler S. S., Afanasiev S. V., et al. (PHENIX Collaboration), Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus–nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX Collaboration, Nucl. Phys. A. 757 (1–2) (2005) 184–283.
4. Acharya S., Adamová D., Adler A., et al. (ALICE Collaboration), The ALICE experiment: a journey through QCD, Eur. Phys. J. C. 84 (8) (2024) 813.
5. Adhikary H., Adrich P., Search for a critical point of strongly-interacting matter in central 40Ar + 45Sc collisions at 13 A – 75 A GeV/c beam momentum, Eur. Phys. J. C. 84 (7) (2024) 741.
6. Taranenko A., Results from the RHIC Beam Energy Scan, EPJ Web Conf. 164 (05 Dec) (2017) 06005.
7. Ablaizimov T., Abuhoza A., Adak R. P. T., et al. Challenges in QCD matter physics – The scientific programme of the Compressed Baryonic Matter experiment at FAIR, Eur. Phys. J. A. 53 (3) (2017) 60.
8. Zhou X., Yang J., the HIAF project team, Status of the high-intensity heavy-ion accelerator facility in China, AAPPS Bull. 32 (1) (2022) 35.

9. Abgaryan V., Acevedo Kado R., Afanasyev S. V., et al., Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA, Eur. Phys. J. A. 58 (7) (2022) 140.

10. Ivanishchev D., Kotov D., Malaev M., et al., Resonance reconstruction in the MPD, Particles. 4 (1) (2021) 29–36.

11. Abdulameer N. J., Acharya U., Adare A., Identified charged-hadron production in $p + \text{Al}$, $^3\text{He} + \text{Au}$, and $\text{Cu} + \text{Au}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV and in $\text{U} + \text{U}$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 193$ GeV, Phys. Rev. C. 109 (5) (2024) 054910.

12. Workman R. L., Burkert V. D., Crede V., et al. (Particle Data Group and Others), Review of particle physics, Prog. Theor. Exp. Phys. 2022 (8) (2022) 083C01.

13. Bleicher M., Zabrodin E., Spieles C., et al., Relativistic hadron-hadron collisions in the ultra-relativistic quantum molecular dynamics model, J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys. 25 (9) (1999) 1859–1896.

14. Berdnikov Ya. A., Ivanishchev D. A., Kotov D. O., et al., K_s^0 -mesons production in $d + \text{Au}$ collisions at center-of-mass energy of 200 GeV per nucleon pair, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (129)) (2011) 134–139 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

yberdnikov1947@gmail.com

ORCID: 0000-0003-0309-5917

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург; ученый секретарь отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru

ORCID: 0000-0003-3298-3702

КОТОВ Дмитрий Олегович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Dmitriy.kotov@gmail.com

ORCID: 0000-0002-3395-0454

МАЛАЕВ Михаил Владимирович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Высшей школы фундаментальных физических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Mmalayev@gmail.com

ORCID: 0009-0001-9974-0169

THE AUTHORS

BERDNIKOV Yaroslav A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

yberdnikov1947@gmail.com

ORCID: 0000-0003-0309-5917

IVANISHCHEV Dmitry A.

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of NRS “Kurchatov Institute”
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanishchev_da@pnpi.nrcki.ru
ORCID: 0000-0003-3298-3702*

КОТОВ Dmitry O.

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Dmitriy.kotov@gmail.com
ORCID: 0000-0002-3395-0454*

МАЛАЕВ Mikhail V.

*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Mmalayev@gmail.com
ORCID: 0009-0001-9974-0169*

*Статья поступила в редакцию 24.05.2025. Одобрена после рецензирования 10.06.2025.
Принята 10.06.2025.
Received 24.05.2025. Approved after reviewing 10.06.2025. Accepted 10.06.2025.*

Радиофизика

Научная статья

УДК 681.785.57

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18414>

НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКОН С ПОМОЩЬЮ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ТОМОГРАФИИ

**З. А. Еровенко¹, А. А. Маркварт¹, А. В. Петров¹,
М. А. Бисярин², Л. Б. Лиокумович¹, Н. А. Ушаков¹** □

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия;

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

□ n.ushakoff@spbstu.ru

Аннотация. В работе представлен нетрадиционный подход к обработке интерференционных сигналов оптической когерентной томографии (ОКТ), позволяющий добиться кратного улучшения ее продольной пространственной разрешающей способности. Предложенный метод основан на использовании алгоритма спектральной оценки root-MUSIC. Определены параметры этого алгоритма, которые обеспечивают нахождение координат отражателей внутри исследуемого образца. В ходе проведенных теоретических и численных оценок определены и сформулированы требования к обеспечению сверхразрешения алгоритмом root-MUSIC. Проверка эффективности предложенного метода проведена путем измерения геометрических параметров поперечных сечений многомодовых и одномодовых оптических волокон. Экспериментальные результаты подтвердили многократное улучшение пространственной разрешающей способности ОКТ.

Ключевые слова: волоконно-оптический датчик, оптическая когерентная томография, root-MUSIC, сверхразрешение, параметрическая оценка спектра

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-10095, <https://rscf.ru/project/23-72-10095/>.

Для цитирования: Еровенко З. А., Маркварт А. А., Петров А. В., Бисярин М. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. Неразрушающий контроль оптических волокон с помощью оптической когерентной томографии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 190–205. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18414>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18414>

NONDESTRUCTIVE TESTING OF OPTICAL FIBERS USING THE OPTICAL COHERENCE TOMOGRAPHY

**Z. A. Erovenko¹, A. A. Markvart¹, A. V. Petrov¹,
M. A. Bisyarin², L. B. Liokumovich¹, N. A. Ushakov¹** □

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

□ n.ushakoff@spbstu.ru

Abstract. The paper presents a nonconventional approach to processing the interference signals of the optical coherence tomography (OCT) that allows for multiple improvements of the longitudinal spatial resolution of an image obtained. This technique is based on using the root-MUSIC spectral estimation algorithm. The parameters of this algorithm ensuring the

accurate determination of the reflector coordinates within a sample have been found. In the course of the theoretical and numerical assessments carried out, the requirements for providing the superresolution by the root-MUSIC algorithm were defined and formulated. In order to evaluate the effectiveness of the proposed method experimentally, the cross-section geometric parameters of multimode and single-mode optical fibers were measured. The obtained results confirmed the validity of the approach that was put forward.

Keywords: optical fiber sensor, optical coherence tomography, root-MUSIC, superresolution; parametric spectral estimation

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (grant No. 23-72-10095), <https://rscf.ru/project/23-72-10095/>.

For citation: Erovenko Z. A., Markvart A. A., Petrov A. V., Bisyarin M. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., Nondestructive testing of optical fibers using the optical coherence tomography, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 190–205. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18414>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Развитие и повсеместное внедрение фотоники привело к революционным изменениям в различных областях науки и техники, например в инфокоммуникационных технологиях и системах связи, сенсорных технологиях для инспекции объектов энергетики и строительных сооружений, а также в медицинской диагностике. Оптическое волокно – это неотъемлемая часть современной инфраструктуры, которая служит как средой передачи информации, так и чувствительным элементом различных датчиков. Наряду с прогрессом фотоники, возникла необходимость располагать возможностью неразрушающего контроля компонентов волоконно-оптических систем, для того чтобы осуществлять их диагностику и поддерживать их работоспособность; указанные системы включают оптические волокна в составных волоконно-оптических трактах, а также волноводы в фотонных интегральных схемах.

В качестве средств диагностики различных оптических волноведущих сред часто применяются оптические рефлектометры [1], однако они позволяют локализовать грубые дефекты [2] и не позволяют визуализировать дефект, тем более – заданную область волокна, например соединение двух волокон. Методы диагностики преформ [3, 4] имеют относительно низкую пространственную разрешающую способность и непригодны для диагностики оптических волокон без существенной доработки. Современные волоконно-оптические сварочные аппараты дают возможность визуализации места сварки лишь после нее, однако наблюдаемое изображение часто носит качественный характер и не содержит достаточного объема информации для интерпретации результата в случае соединения волокон разного типа.

Детальная визуализация места сварки различных волокон представляет собой довольно актуальную задачу при разработке волоконно-оптических датчиков на основе межмодовых интерферометров. При этом для такой визуализации целесообразно использовать методы фотоники, ввиду их возможности интегрирования непосредственно в производственный процесс и отсутствия необратимого воздействия на исследуемый объект.

Оптическая когерентная томография (ОКТ) [5] – это один из передовых инструментов исследования различных материалов и прозрачных объектов, который позволяет получать их трехмерные изображения. ОКТ-паттерны создаются на основе так называемых *A*-сканов, которые отображают распределения коэффициента отражения и рассеяния падающего лазерного излучения по глубине образца. По результатам перемещения зондирующего светового пучка по поверхности образца и объединения полученных при этом *A*-сканов, соответствующих различным продольным сечениям образца, формируют двух- и трехмерные изображения (*B*- и *C*-сканы). В последнее время наиболее широко

распространен спектральный вариант ОКТ: в этом случае A -сканы рассчитываются как дискретное преобразование Фурье от спектральных интерференционных сигналов, получаемых при интерференции света опорной волны с рассеянным и отраженным светом внутри образца.

Основным применением ОКТ в настоящее время стала биомедицинская диагностика, которая включает такие направления, как офтальмология, эндоскопическая визуализация, определение характеристик тканей и другие [6]. Также в ряде работ сообщалось о применении данного метода для контроля оптических систем [7], тестирования полупроводниковых приборов [8], мониторинга процесса аддитивного производства [9]. Известно об использовании ОКТ для измерения диаметра сердцевины многомодовых оптических волокон [10], которое зачастую выполняется другими способами [11, 12].

Как и у любого устройства визуализации, пространственная разрешающая способность δz есть крайне значимый параметр для ОКТ-системы. Поскольку в ОКТ-системах продольная (в направлении распространения зондирующего пучка) и поперечная (перпендикулярная указанному направлению) компоненты пространственной разрешающей способности определяются разными факторами, они могут существенно различаться, как неодинаковы и методы их улучшения. В спектральной ОКТ продольная компонента зависит от ширины спектрального диапазона $\Delta\lambda$, в котором выполняется измерение интерференционного сигнала [13]. Связь продольной разрешающей способности с параметрами спектрального диапазона, в котором измеряется интерференционный сигнал, описывается выражением

$$\Delta z = m(\lambda_0)^2 / (2\Delta\lambda), \quad (1)$$

где λ_0 – центральная длина волны используемого спектрального диапазона; m – коэффициент пропорциональности, который зависит от формы спектра источника излучения (обычно $m \approx 1$).

Стандартные телекоммуникационные оптоэлектронные компоненты наиболее распространены и доступны для реализации оптических измерительных систем, которые работают в спектральных диапазонах с центральными длинами волн 1,30 и 1,55 мкм. Типовые перестраиваемые лазеры и суперлюминесцентные диоды, работающие в указанных диапазонах, обеспечивают ширину спектрального диапазона $\Delta\lambda$ до 80 – 100 нм. Если принять во внимание формулу (1), то результирующая продольная пространственная разрешающая способность таких ОКТ-систем может лежать в интервале от 8,5 до 15 мкм. В то же время для таких задач, как неразрушающий контроль волоконно-оптических компонентов и фотонных интегральных схем, требования по пространственной разрешающей способности составляют единицы микрометров и менее.

Однако улучшить разрешение за счет простого увеличения ширины спектрального диапазона $\Delta\lambda$ невозможно, поскольку свойства доступных оптических источников и влияние хроматической дисперсии материала накладывают определенные ограничения на эту ширину [13, 14].

Формирование A -скана эквивалентно задаче оценки спектра полигармонического сигнала. Следовательно, различные методы, такие как MUSIC и ESPRIT, известные своей способностью обеспечивать сверхразрешение [15 – 17], могут повысить качество ОКТ-изображений. Однако, как показано в статье [18], предлагаемое улучшение будет иметь некоторые фундаментальные ограничения, связанные с отношением сигнал/шум интерференционного сигнала.

В данной работе предлагается повышение продольной пространственной разрешающей способности спектральной ОКТ-системы путем усовершенствованной методики обработки сигналов.

Преимущество предлагаемого метода продемонстрировано через визуализацию сердцевины различных оптических волокон, в том числе одномодовых. Предлагаемый подход открывает путь к расширению применимости ОКТ в приложениях с высокими требованиями к пространственному разрешению, например, при визуализации клеточной структуры в биологии, при тестировании фотонных интегральных схем и во многих других (некоторые в настоящее время даже трудно предсказать).

Обработка интерференционных сигналов для получения улучшенной пространственной разрешающей способности

В данной работе использована следующая модель интерференционного сигнала. Исследуемый объект является прозрачным, в нем отсутствуют рассеивающие центры, распределенные по объему; свет внутри объекта отражается от N границ между слоями, различными по своим свойствам. Каждый j -й слой характеризуется показателем преломления n_j и толщиной L_j . При сложении волн когерентного излучения, отраженных внутри образца, имеет место интерференция света с опорной волной высокой интенсивности. Если предполагать, что отражения внутри образца – слабые, то интерференцией между целевыми волнами можно пренебречь.

Для описанной модели спектральный интерференционный сигнал можно записать в следующем виде:

$$S(\lambda) = I_0 + \sum_{i=1}^N I_i + 2 \sum_{i=1}^N \sqrt{I_0 I_i} \cos \left(2k \sum_{j=1}^i n_j L_j + \varphi_i \right), \quad (2)$$

где n_j, L_j – показатель преломления и толщина j -го слоя, соответственно; k – волновое число, $k = 2\pi/\lambda$; I_0, I_i – величины интенсивности падающего света и отраженного от i -й границы; N – количество границ; φ_i – фазовый сдвиг волны, возникающий при отражении от i -й границы (при нормальном падении и диэлектрических поверхностях он равен 0 или π).

Необходимо учитывать, что величины I_i, n_i и φ_i могут зависеть от длины волны когерентного излучения λ .

Целью применения ОКТ в данном случае является оценка внутренней структуры исследуемого объекта, а именно – оптических расстояний $n_j L_j$. Как видно из формулы (2), задача формирования A -скана эквивалентна задаче оценки спектра полигармонического сигнала. Самый простой способ реализации такой оценки заключается в вычислении дискретного преобразования Фурье измеренного интерференционного сигнала S . Однако при этом продольная пространственная разрешающая способность ОКТ оказывается лимитированной классическими ограничениями, которые описываются формулой (1).

С другой стороны, в работах [19, 20] было показано, что такие методы спектральной оценки, как метод root-MUSIC, обеспечивают возможность достижения сверхразрешения [15, 16] и, следовательно, могут улучшать продольную пространственную разрешающую способность ОКТ. Также в статье [21] было показано, что погрешности оценки метода root-MUSIC могут приближаться к фундаментальной границе Рао – Крамера, что делает этот метод привлекательным для эффективной оценки оптических расстояний в ОКТ-изображениях.

Когда сигнал, описываемый формулой (2), рассматривается как функция длины волны света λ , пространственные частоты ω_i его интерференционных компонент связаны с разницей OPD_{*i*} оптических путей компонент следующим образом:

$$\omega_i = k_0^2 \text{OPD}_i / (2\pi), \quad (3)$$

где k_0 – центр диапазона волновых чисел, на котором измеряется спектральный интерференционный сигнал.

Следовательно, после оценки пространственных частот методом root-MUSIC разности оптических путей можно найти следующим образом:

$$\text{OPD}_i = L_i n_i = 2\pi \omega_i / k_0^2. \quad (4)$$

Важной частью алгоритма root-MUSIC является оценка количества сигнальных компонент целевого сигнала N , необходимая в случаях, когда это число неизвестно. Эта оценка обычно делается путем анализа собственных векторов и собственных значений ковариационной матрицы обрабатываемого сигнала с применением различных информационных критериев [22 – 24], а также эмпирических методов [17]. В результате такого анализа пространство собственных векторов можно разделить на два подпространства: сигнальное и шумовое. Для известной размерности сигнального подпространства N' , оно образуется собственными векторами, соответствующими наибольшему собственным значениям.

Однако на практике применения ОКТ-систем интерференционный сигнал может содержать некоторый уровень шума, способный повлиять на точность оценки количества сигнальных компонент. В связи с этим необходимо исследовать, как отличие количества сигнальных компонент N' , заданное в методе root-MUSIC, от истинного количества сигнальных компонент N , влияет на точность оценки частот сигнальных компонент.

С целью такого исследования был смоделирован набор полигармонических сигналов, для каждого из которых случайным образом были выбраны такие параметры, как количество сигнальных компонент N , их частоты f_i , амплитуды A_i и уровень аддитивного шума σ .

Для того чтобы не оставить без контроля сложность моделируемых сигналов, максимальное количество сигнальных компонент не превышало определенной заданной величины $N_{\max} = 20$. В каждом сгенерированном сигнале количество его компонент было принято случайной величиной с равномерным распределением от 1 до N_{\max} .

Частоты сигнальных компонент также считались случайными величинами с равномерным распределением от нуля до половины частоты дискретизации f_s ; амплитуды подчинялись логарифмически нормальному распределению с параметрами $\mu = 0$ и $\sigma = 3$; стандартное отклонение аддитивного шума было принято случайной величиной с логарифмически равномерным распределением между значениями 10^{-7} и 10^{-4} . Количество отсчетов в моделируемых сигналах составило $M = 512$, что близко к практическим значениям. Полный набор состоял из 1 тыс. сигналов, каждый из которых характеризовался случайными параметрами.

Для определения погрешностей оценки частот сигнальных компонент методом root-MUSIC было необходимо сопоставить значения частот, найденных этим методом, с значениями частот сигнальных компонент. Если предположить, что отношение сигнал/шум (SNR) обрабатываемого сигнала имеет относительно высокое значение и, следовательно, ошибки нахождения частот сигнальных компонент относительно невелики, то задачу нахождения указанного соответствия можно сформулировать в довольно простой форме.

А именно, следует вычислить матрицу квадратов невязок ΔF_{ie} между истинными значениями частот f_i и их оценочными значениями f_e' :

$$\Delta F_{ie} = (f_i - f_e')^2. \quad (5)$$

Столбцы матрицы (5) соответствуют истинным значениям, а ее строки – оценочным. К данной матрице мы применили венгерский алгоритм [25], благодаря чему были найдены позиции определенных элементов матрицы. Сумма этих элементов должна оказаться минимальной при условии, что из каждой строки и каждого столбца этой матрицы выбирается только один элемент. Поскольку все найденные элементы были взяты из уникальных строк и столбцов и тем самым общая ошибка была сведена к минимуму, искомое соответствие между моделируемыми сигнальными компонентами и оцененными частотами гарантированно является достаточно точным. Общая ошибка оценки частоты (сумма всех элементов матрицы, выбранных венгерским алгоритмом) была использована в качестве показателя качества работы алгоритма root-MUSIC при заданных условиях.

Метод root-MUSIC был использован для всех моделируемых сигналов, благодаря чему мы получали оценки частот их компонентов. При этом размерность сигнального пространства (служит важным параметром метода root-MUSIC), изменялась в диапазоне от 1 до $N_{\max} = 20$. Стоит уточнить, что количество компонент, частоты которых подвергались оценке, соответствовало размерности сигнального пространства и имело максимальное значение N_{\max} . На такой основе каждый сигнал обрабатывали алгоритмом root-MUSIC, в котором отклонение ΔN предполагаемой размерности сигнального подпространства от истинного ($\Delta N = N' - N$) варьировали в некотором диапазоне, с максимальным абсолютным значением отклонения около $N_{\max} = 20$. Зависимость $\sum[(\Delta f)^2](\Delta N)$ – суммы \sum квадратов ошибок нахождения частот сигнальных компонент $(\Delta f)^2$ методом root-MUSIC от отклонения ΔN предполагаемой размерности сигнального подпространства от истинного показана на рис. 1.

Полученная зависимость имеет характерные особенности: меньшая ошибка при отклонении значений количества составляющих сигнала $\Delta N < 0$, резкий рост ошибки вблизи $\Delta N = 0$, а затем почти постоянный уровень при $\Delta N > 0$. Относительно высокое значение

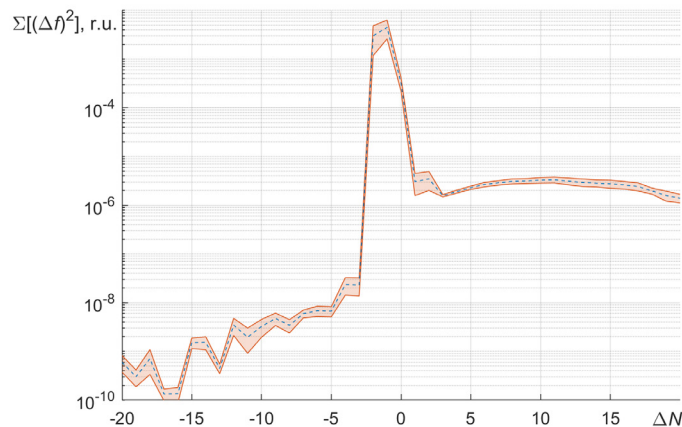


Рис. 1. Зависимость суммы квадратов ошибок нахождения частот сигнальных компонент $\Sigma[(\Delta f)^2]$ от ΔN – отклонения размерности сигнального подпространства от истинного. Представлены: кривая среднего значения ошибки (пунктирная линия) и размытая цветная кривая отклонения от этого среднего на величину среднеквадратического отклонения

ошибки при $\Delta N > 0$ обусловлено тем, что анализируется сумма квадратов всех ошибок и большие погрешности частот отдельных компонентов вносят гораздо больший вклад, чем меньшие.

Когда отклонение количества сигнальных компонент ΔN оказывается отрицательным, метод root-MUSIC идентифицирует только компоненты с наибольшими амплитудами. Для этих компонент отношение сигнал/шум (SNR), соответственно, было самым высоким (поскольку уровень шума был одинаковым для всех частотных компонент в одном сигнале), а это приводило к наименьшим ошибкам. В то время как root-MUSIC идентифицировал большее количество компонент при значениях ΔN , приближающихся к нулю, амплитуды компонент и значения SNR понижались, а соответствующие ошибки оценки частоты возрастали, что отражалось в резком увеличении ошибок. Тот факт, что для некоторых сигналов наблюдалось резкое увеличение погрешности вблизи точки $\Delta N = 0$, говорит о вероятности неправильной оценки составляющей сигнала (ее частота может сильно отличаться от истинной) под влиянием шума. Это указывает на то, что в практических ситуациях с большим разбросом амплитуд сигнальных компонент, когда существует вероятность низких значений SNR, предпочтительно слегка завышать размерность сигнального подпространства, если необходимо идентифицировать все компоненты. Однако применение такой меры может потребовать дополнительной идентификации компонент, с тем чтобы исключить ложные компоненты и оставить правильно идентифицированные.

Дополнительно было промоделировано влияние размерности сигнального подпространства на возможность улучшения продольной пространственной разрешающей способности ОКТ. Параметры численного эксперимента были аналогичны указанным выше, основные отличия состояли в меньшем количестве интерференционных компонент (их было всего две). Амплитуды компонент были одинаковы, разницу частот варьировали от $0,05f_s/M$ до $1,00f_s/M$ (величина f_s/M при пересчете на разность оптических путей в формуле (2) соответствует пределу разрешающей способности при обработке с помощью быстрого преобразования Фурье (см. формулу (1))). Численные эксперименты проводили для трех значений SNR: 40, 60 и 80 дБ. Размерность сигнального подпространства выбиралась равной 2, 4, 10, 20, 50, 100, 200. Для каждой комбинации разницы частот компонент сигнала, значения отношения сигнал/шум и размерности сигнального подпространства вычисления повторялись с 30 различными реализациями шума для оценки среднеквадратического отклонения найденных значений частот компонент сигнала σ_f . В случае различия между истинным и найденным значениями частот менее σ_f , алгоритм root-MUSIC признавался работоспособным. Наименьшая разность частот Δf , при которой реализовывалась работоспособность алгоритма root-MUSIC, служила оценкой разрешающей способности, достижимой в данных условиях. Зависимости нормированной

величины $\Delta f/(f_s/M)$ от размерности сигнального подпространства N' при разных значениях SNR приведены на рис. 2.

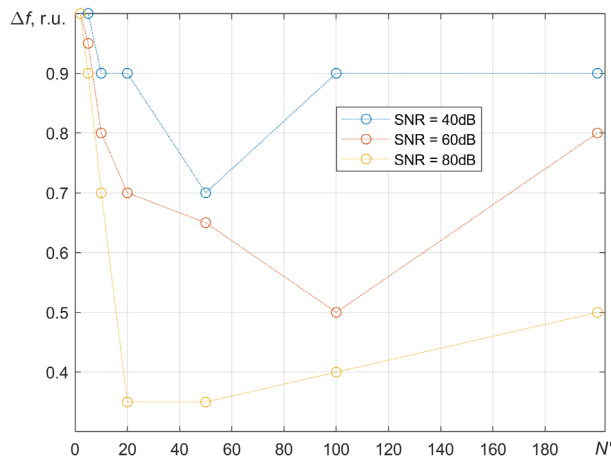


Рис. 2. Зависимости нормированной величины разрешающей (по частоте) способности метода root-MUSIC от размерности сигнального подпространства для разных значений отношения сигнал/шум (SNR)

Как видно из результатов численного эксперимента, оптимальное значение размерности сигнального подпространства зависит от SNR, однако значения от 50 до 100 обеспечивают улучшение разрешающей способности измерений, по сравнению с обработкой при помощи быстрого преобразования Фурье при всех значениях SNR, при которых проводился численный эксперимент.

Экспериментальная реализация метода

Спектральные интерференционные сигналы регистрировались при помощи опросного устройства для волоконно-оптических датчиков NI PXIe-4844, включающего перестраиваемый лазер и фотоприемники. Оптоэлектронная часть опросного устройства аналогична устройству Micron Optics si155-EV-04-1510-1590-0010-NO, имеющего следующие характеристики:

- спектральный диапазон $\lambda = 1,51 - 1,59$ мкм (центральная длина волны $\lambda_0 = 1,55$ мкм, ширина диапазона $\Delta\lambda = 80$ нм);
- выходная оптическая мощность $P_0 = 60$ мВт в каждом канале;
- частота измерения интерференционных сигналов – 10 Гц.

Как показали наши дополнительные измерения [26], эквивалентная мощность шума (NEP) фотодетекторов, используемых в опросном устройстве, составляет 80 пВт во всей рабочей полосе фотоприемника (около 1 МГц), относительные шумы интенсивности лазера (RIN) имеют уровень –50 дБ во всем диапазоне частот.

В роли зонда ОКТ-системы выступал одномодовый волоконно-оптический патчкорд с волокном SMF-28. Зонд подключался прямо к одному из каналов опросного устройства. Использовалась конфигурация ОКТ с общим путем, в которой отражение от торца подводящего оптического волокна создает опорную волну, отраженную от границы волокно – воздух. Интерференция этой опорной волны со световыми волнами, отраженными от неоднородностей исследуемого объекта, приводит к формированию интерференционных сигналов. Как волоконный зонд ОКТ, так и исследуемые образцы волокон были установлены на микропозиционеры Standa 7TF2, обеспечивающие точность перемещения на уровне единиц микрометров.

Оценка работоспособности системы

Уровень шума интерференционного сигнала оценивали для известных параметров опросного устройства NI PXIe-4844 с использованием модели [27]. Если пренебречь



расходимостью светового пучка, выходящего из ОКТ-зонда, и предположить, что три волны с наибольшими амплитудами, отраженные от границ раздела стекло – воздух (торец волоконно-оптического зонда ОКТ и обе границы тестируемого волокна), выступают основным фактором, влияющим на интенсивность отраженных волн, то можно легко оценить аддитивный шум интерференционного сигнала. Такой шум рассчитывается как

$$\sigma_{add} \approx 3 R_{Fa} P_0 \text{RIN} + \text{NEP}, \quad (6)$$

где P_0 – выходная оптическая мощность; RIN – относительные шумы интенсивности лазера; NEP – эквивалентная мощность шума фотодетекторов; R_{Fa} – коэффициент отражения Френеля на границе раздела стекло – воздух.

Коэффициент отражения следует выражению

$$R_{Fa} = [(n_{fiber} - n_{air}) / (n_{fiber} + n_{air})]^2, \quad (7)$$

где n_{fiber} , n_{air} – показатели преломления волокна и воздуха, соответственно.

В спектральном диапазоне 1,55 мкм значение R_{Fa} составляет около 3,5%, что приводит к уровню аддитивного шума $\sigma_{add} \approx 1,5$ нВт.

Для правильной оценки амплитуд интерференционных компонент необходимо учесть расходимость световых волн, что, однако, является относительно сложной задачей, если принять во внимание кривизну отражающих поверхностей и возможное угловое смещение.

Таким образом, мы сознательно получили завышенную оценку амплитуд интерференционных компонент, поскольку пренебрегли расходимостью пучка, понимая, что на практике значения амплитуд будут в несколько раз меньше.

В контексте текущей работы отражения на границе между сердцевиной и оболочкой тестируемого оптического волокна являются самыми слабыми. Для одномодовых волокон с разницей показателей преломления сердцевины и оболочки около 10^{-3} френелевское отражение составляет $R_{cc} \approx 1,2 \cdot 10^{-7}$, что на пять порядков меньше отражения от границы волокна и воздуха: $R_{Fa} \approx 0,035$.

Если объединить все приведенные выше расчеты, то не исключена вероятность получить завышенную оценку значения SNR для самой слабой интерференционной компоненты, которую можно выразить в следующем виде:

$$\text{SNR} = [2 R_{cc} R_{Fa} (P_0)^2] / (\sigma_{add})^2. \quad (8)$$

Для параметров, перечисленных выше, формула (8) приводит к оценке SNR в 10 дБ для интерференционных компонент, образованных волнами, отраженными от границы между сердцевиной и оболочкой. К сожалению, границы Крамера – Рао для полигармонических сигналов нельзя выразить в явном виде, поэтому они были рассчитаны численно в соответствии с процедурой в статье [18]. При этом в интерференционном сигнале предполагалось наличие четырех интерференционных компонент со следующими значениями амплитуд A_i и разностей оптических путей L_i :

$$A_1 = A_4 = 3,5 \text{ мкВт}, A_2 = A_3 = 6,5 \text{ нВт}, \\ L_1 = 30 \text{ мкм}, L_2 = 115 \text{ мкм}, L_3 = 127 \text{ мкм}, L_4 = 212 \text{ мкм}.$$

В этих условиях наилучшей достижимой разрешающей способностью оценки расстояния от торца волоконного ОКТ-зонда до границы между сердцевиной и оболочкой оказывается значение $\sigma_{Lcc} \approx 1,2$ нм.

Следует отметить, что в ходе приведенных выше умозаключений было сделано несколько допущений, поэтому значение 1,2 нм может оказаться слишком оптимистичной оценкой. Более того, вычисленное выше значение есть мера минимального обнаруживаемого изменения расстояния от волоконного зонда ОКТ до границы между сердцевиной и оболочкой волокна, а не пространственной разрешающей способностью, характеризующей минимальное различие разностей оптических путей независимо разрешимых интерференционных компонент. Более того, наилучшая работоспособность алгоритма goot-MUSIC достигается в случае достаточно большой разницы между частотами сигнальных компонент, которые можно определять традиционными методами обработки, а не в режиме сверхразрешения.

Приведенная выше оценка σ_{Lcc} может использоваться и для оценки наличия паразитных механических колебаний исследуемого объекта. Для этого необходимо измерять перемещение основных отражателей, например, путем оценки аргументов основных интерференционных компонент, как это часто делается в спектральной интерферометрии и фазочувствительной ОКТ [28, 29]. При существенном превышении уровня измеренных вибраций над величиной σ_{Lcc} следует осуществить компенсацию паразитных вибраций.

Результаты измерений

Нами были проведены измерения поперечного профиля коэффициента отражения когерентного излучения для двух образцов волокон:

многомодового волокна, покрытого слоем полимера и обладающего ступенчатым профилем показателя преломления (марка Thorlabs FG050LGA);

одномодового волокна SMF-28 без покрытия.

Взаимное расположение волокон (зондирующего и тестируемого) схематично показано на рис. 3. Исследуемое оптическое волокно крепилось в микропозиционере горизонтально, ОКТ-зонд также располагался горизонтально, направление зонда в азимутальной плоскости выбиралось таким образом, чтобы амплитуда наблюдаемого интерференционного сигнала была максимальной. Интерференционные сигналы регистрировались при перемещении ОКТ-зонда по высоте и соответствовали различным сечениям исследуемого волокна; это позволяло визуализировать его поперечное сечение в виде двумерного скана (*B*-скан). Величина шага при перемещении ОКТ-зонда составляла 2 мкм.



Рис. 3. Схематическое изображение взаимного расположения исследуемого волокна и ОКТ-зонда (в их поперечных сечениях):

ОКТ-SP — зонд ОКТ-системы; TF — тестируемое волокно. Вертикальная стрелка указывает направление перемещения зонда, синие стрелки — направления отраженных световых волн

Как было установлено в процессе численного моделирования, для эффективной работы алгоритма root-MUSIC требуется высокое значение SNR обрабатываемого сигнала. Для улучшения SNR в условиях оснащения наших экспериментов, для каждой позиции ОКТ-зонда измерялось 200 интерференционных сигналов. Перед применением алгоритма root-MUSIC вначале мы определяли фазы основных интерференционных компонент, образованных волнами, отраженными от границ между наружной оболочкой оптического волокна и окружающим воздухом. Затем вычисляли среднеквадратическое отклонение позиции исследуемого

волокна относительно позиции ОКТ-зонда. Во всех случаях это отклонение составляло от 1 до 2 нм, что близко к приведенному выше значению разрешающей способности разности оптических путей $\sigma_{Lcc} \approx 1,2$ нм. Такое соотношение свидетельствовало об отсутствии паразитных механических флуктуаций в экспериментальной установке.

Следующий шаг состоял в усреднении интерференционных сигналов для улучшения величины SNR. Все приведенные далее результаты были получены с размерностью сигнального подпространства в алгоритме root-MUSIC, равной 50. Наш выбор избыточной размерности сигнального подпространства определялся высокой разрешающей способностью, реализуемой в данном случае, а также простотой идентификации ложных компонент сигнала, находимых методом root-MUSIC за счет предсказуемой структуры исследуемого объекта.

С точки зрения требований к ОКТ-системе, наиболее простой задачей представляется визуализация структуры многомодового волокна, ввиду относительно большой разницы между показателями преломления сердцевины и оболочки, а также большого диаметра сердцевины. Часть *B*-скана многомодового волокна с неснятым полимерным покрытием показана на рис. 4, *a*. Изображение было получено путем применения быстрого преобразования Фурье к интерференционным сигналам; интенсивность отраженного сигнала от определенной области образца показана цветом соответствующей точки изображения. Результаты обработки интерференционных сигналов с помощью метода root-MUSIC



показаны в виде круговых маркеров, наложенных на карту интенсивности. Следует отметить, что на рисунке присутствует большое количество маркеров.

Все методы спектральной интерферометрии, включая ОКТ, определяют разность оптических путей интерферирующих волн. Поскольку показатель преломления кварца $n_{fiber} \approx 1,46$ отличается от показателя преломления воздуха $n_{air} \approx 1,00$, а в контексте данной работы важно было определить геометрические параметры внутренней структуры кварцевых оптических волокон, числовые значения по вертикальной оси были пересчитаны из разностей оптических путей делением на $n_{fiber} \approx 1,46$. Слабо заметные отражения на глубинах около 320 и 800 мкм соответствуют наружным границам полимерного покрытия, более сильные отражения на глубинах около 480 и 600 мкм соответствуют границам оболочки волокна и полимерного покрытия.

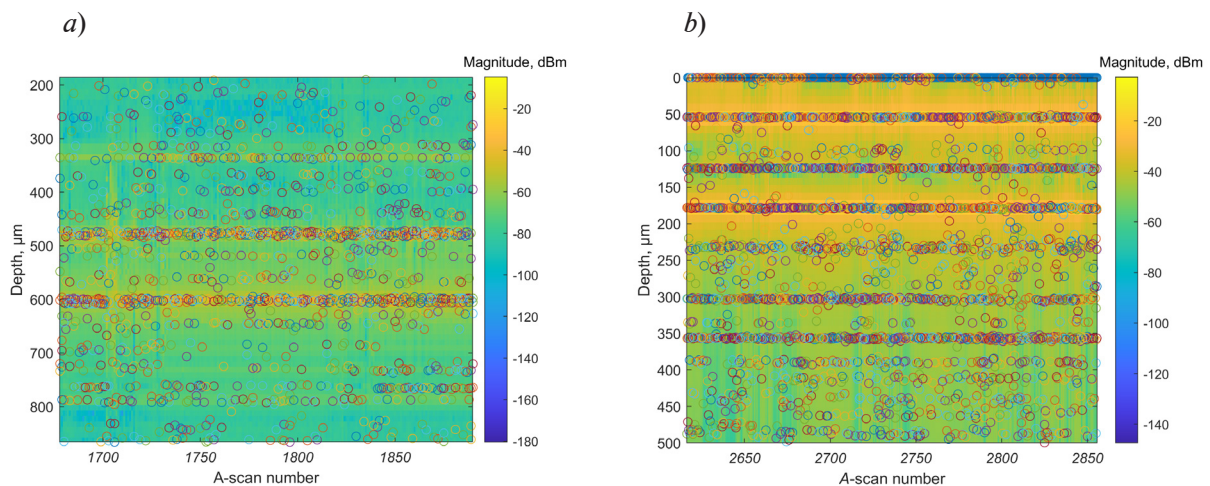


Рис. 4. Сравнение *B*-сканов многомодового волокна с полимерным покрытием (а) и одномодового без покрытия (б):

вычисленных с использованием быстрого преобразования Фурье (цветовые карты интенсивности) и методом root-MUSIC с размерностью сигнала подпространства, равной 50 (круглые маркеры)

Анализ изображений на рис. 4, а показывает, что границы волокна четко просматриваются сквозь полимерное покрытие, однако сердцевину волокна невозможно точно идентифицировать из-за сильного рассеяния света внутри полимерного покрытия. Интерференционные сигналы с номерами *A*-сканов от 1800 до 1900 были нами усреднены, что привело к подавлению этого рассеяния благодаря его случайному характеру. *A*-скан, полученный таким образом, показан на рис. 5, а. Видно, что усреднение подавляет влияние рассеяния и позволяет успешно идентифицировать границы между сердцевиной и оболочкой волокна с помощью алгоритма root-MUSIC. Наша оценка диаметра сердцевины, которая составила 49,9 мкм (выполнена по результатам обработки алгоритмом root-MUSIC), практически совпадает с его истинным значением, равным 50,0 мкм.

Аналогичные измерения были выполнены для одномодового волокна. На рис. 4, б показан фрагмент *B*-скана поперечного сечения стандартного одномодового волокна SMF-28.

Так же, как и для сигналов от многомодового волокна, изображение было получено путем применения быстрого преобразования Фурье к интерференционным сигналам, в то время как результаты обработки интерференционных сигналов методом root-MUSIC показаны в виде круговых маркеров. Отражения на глубинах около 50 и 175 мкм соответствуют поверхности волокна, на глубине около 130 мкм – границам между сердцевиной и оболочкой. Анализ изображений на рис. 4, б опять показывает, что эти границы нельзя разрешить с помощью классического метода вычисления *A*-сканов на основе быстрого преобразования Фурье. Чтобы улучшить SNR обрабатываемого интерференционного сигнала, мы провели усреднение сигналов с номерами от 2730 до 2830, после чего интерференционный сигнал с улучшенным SNR был обработан с использованием алгоритма

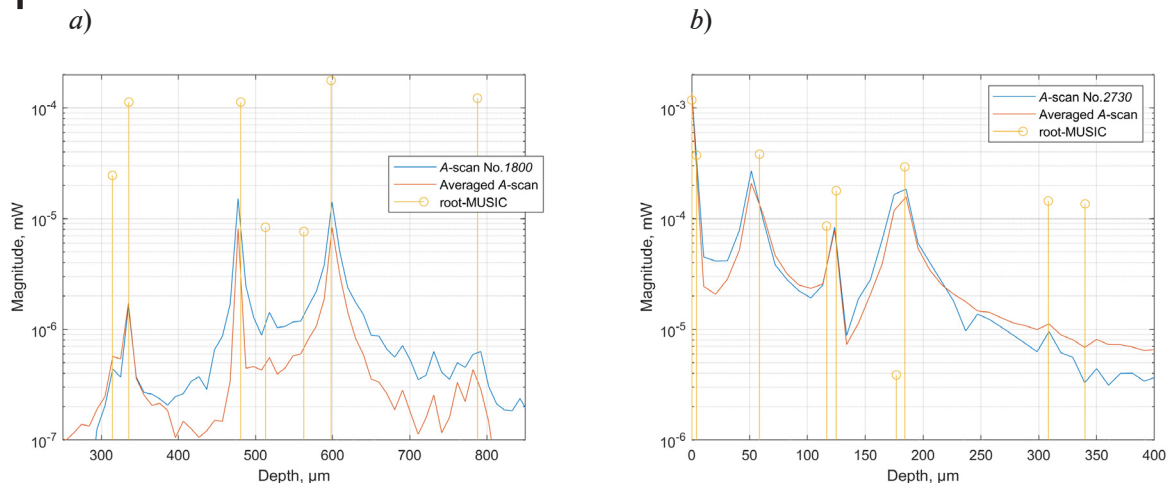


Рис. 5. Сравнение *A*-сканов многомодового волокна с полимерным покрытием (*a*) и одномодового без покрытия (*b*):

полученных для интерференционных сигналов (ИС) № 1800 (*a*) и № 2730 (*b*) (синие кривые); для усредненных ИС с номерами от 1800 до 1900 (*a*) и с номерами от 2730 до 2830 (*b*) (красные кривые), а также результатов обработки усредненных ИС методом root-MUSIC с размерностью сигнального подпространства, равной 50 (*a*, *b*) (желтые вертикали)

root-MUSIC. Соответствующие *A*-сканы сопоставлены на рис. 5, *b*, где представлены исходный и усредненный *A*-сканы и результат обработки последнего с помощью алгоритма root-MUSIC.

Следует также отметить, что экспериментально измеренный аддитивный шум в интерференционных сигналах был равен 0,8 нВт в случае однократного отражения от оптоволоконного зонда ОКТ. Когда свет, отраженный от тестируемого одномодового волокна, был зафиксирован ОКТ-зондом, уровень аддитивного шума достиг значения 1,3 нВт, что очень близко к аналитической оценке в 1,5 нВт. Это незначительное расхождение, скорее всего, связано с расходимостью светового пучка и, следовательно, меньшей долей шумов интенсивности лазера в аддитивный шум интерференционного сигнала.

После усреднения 100 интерференционных сигналов суммарный шум снизился с 1,30 до 0,15 нВт, что указывает на почти полное отсутствие корреляции между реализациями шума и доказывает, что усреднение большого числа сигналов может привести к дальнейшему улучшению разрешения, однако за счет снижения скорости измерения.

Амплитуда интерференционных компонент, соответствующих световым волнам, отраженным от поверхности раздела сердцевина-оболочка одномодового волокна, оказалась близкой к значению 15 нВт, обеспечивая тем самым значение SNR около 17 дБ, что было гораздо выше ожидаемого. Для того чтобы разрешить две интерференционные компоненты, которые различались по разности оптических путей на 8 мкм (что соответствует 11,7 мкм на воздухе), потребовалось почти 10-кратное улучшение значения SNR. Это указывает на необходимость проведения дальнейших исследований влияния величины SNR, паразитной модуляции интерференционных компонент и близости их расположения на работоспособность метода root-MUSIC (однако это выходит за рамки настоящей статьи).

Следует также отметить, что использование избыточной размерности подпространства сигнала в алгоритме root-MUSIC привело к выявлению некоторых побочных компонент, вызванных шумами и несовершенством экспериментальной установки. Например, дублирование интерференционных компонент на границах волокна было вызвано круглой формой поперечного сечения оптического волокна и, следовательно, не единственной разницей оптических путей между интерферирующими волнами, а скорее некоторыми разными вариантами путей, которые могли бы пройти отраженные волны, и, следовательно, диапазоном разницы оптических путей между отраженными и опорными волнами. Этот паразитный эффект можно устранить через оптимизацию характеристик волоконного ОКТ-датчика, в том числе фокусировки выходного светового пучка. Для повышения общей производительности метода ОКТ может потребоваться оптимизация параметров фокусирующей линзы для каждой отдельной измерительной задачи.



Заключение

В работе предложен новый подход к неразрушающему контролю внутренней структуры оптического волокна, который может быть весьма востребован в процессах изготовления волоконно-оптических датчиков, волоконно-оптических устройств ввода излучения в волокно и вывода из него, а также других компонентов волоконной и интегральной фотоники.

Экспериментально продемонстрированы возможности визуализации сердцевин как одномодового волокна, так и многомодового, покрытого полимерным слоем толщиной более 0,1 мм, с использованием оптической когерентной томографии и алгоритма goot-MUSIC для построения *A*-сканов.

Важной особенностью предложенного метода является использование в системе оптической когерентной томографии типовой (относительно) телекоммуникационной оптоэлектронной компонентной базы.

В ходе проведенных теоретических и численных оценок определены и сформулированы требования для обеспечения сверхразрешения алгоритмом goot-MUSIC. Кроме того, применение этого алгоритма для обработки интерференционных сигналов оптической когерентной томографии позволяет автоматизировать сегментацию полученных изображений, упростить их интерпретацию, а главное – обеспечивает улучшение пространственного разрешения.

Предложенный подход планируется использовать для визуализации мест сварки одномодового и многомодового волокон при создании волоконно-оптических датчиков физических величин на основе межмодовых интерферометров. Проблема состоит в том, что зачастую интерференционные сигналы от таких датчиков отличаются от предсказанных теоретически. Наиболее перспективный способ ее решения – это оптимизация режима сварки двух различающихся волокон, а для этого нужно получать количественную информацию о распределении показателя преломления этих волокон в местах сварки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lobach I. A., Fotiadi A. A., Yatseev V. A., Konstantinov Y. A., Barkov F. L., Claude D., Kambur D. A., Belokrylov M. E., Turov A. T., Korobko D. A. Newest methods and approaches to enhance the performance of optical frequency-domain reflectometers // *Sensors*. 2024. Vol. 24. No. 16. P. 5432.
2. Пономарев Р. С., Константинов Ю. А., Белокрылов М. Е., Шевцов Д. И., Карнаушкин П. В. Автоматизированный инструмент рефлектометрического исследования пироэлектрического эффекта в протонообменных канальных волноводах на основе ниобата лития // *Приборы и техника эксперимента*. 2022. Т. 65. № 5. С. 96–106.
3. Konstantinov Y. A., Turov A. T., Latkin K. P., Claude D., Azanova I. S. A non-destructive study of optical, geometric and luminescent parameters of active optical fibers preforms // *Optics*. 2024. Vol. 5. No. 1. Pp. 176–194.
4. Vladimirova D., Pervadchuk V., Konstantinov Y. Manufacture of microstructured optical fibers: Problem of optimal control of silica capillary drawing process // *Computation*. 2024. Vol. 12. No. 5. P. 86.
5. Podoleanu A. G. Fiber optics, from sensing to non invasive high resolution medical imaging // *Journal of Lightwave Technology*. 2010. Vol. 28. No. 4. Pp. 624–640.
6. Fujimoto J., Swanson E. The development, commercialization, and impact of optical coherence tomography // *Investigative Ophthalmology & Visual Science*. 2016. Vol. 57. No. 9. Pp. OCT1 – OCT13.
7. Gong Zh., Yu Ch., Guo D., Ding Zh., Li P. Three-dimensional optical coherence digital-null deformography of multi-refractive-surface optics with nanometer sensitivity // *Optics Express*. 2022. Vol. 30. No. 23. Pp. 42069–42085.
8. Ozaki N., Ishida K., Nishi T., Ohsato H., Watanabe E., Ikeda N., Sugimoto Y. OCT with a visible broadband light source applied to high-resolution nondestructive inspection for semiconductor optical devices (Chapter 10) // M. R. Wang (Editor). “Optical coherence tomography and its non-medical applications”. USA: IntechOpen, 2020. Available from: <http://dx.doi.org/10.5772/int>

9. **Opitz J., Porstmann V., Schreiber L., et al.** Optical coherence tomography as monitoring technology for the additive manufacturing of future biomedical parts // Meyendorf N., Ida N., Singh R., Vrana J. (Eds.). "Handbook of nondestructive evaluation 4.0". Cham, Switzerland: Springer International Publishing, 2022. Pp. 859–881.
10. **Saccon F. A. M., Muller M., Fabris J. L.** Optical fiber characterization by optical coherence tomography // Proceedings of the International Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC 2009). 3–6 November, 2009. Belem, Brazil. Pp. 625–628.
11. **Henaio R. H., Pomarico J. A., Russo N. A., Torroba R., D., Trivi M.** Multimode optical fiber core measurement by speckle correlation // Optical Engineering. 1996. Vol. 35. No. 1. Pp. 26–30.
12. **Golnabi H.** Fiber core size determination from power measurements in a fiber-to-fiber design // Microwave and Optical Technology Letters. 2011. Vol. 53. No. 6. Pp. 1225–1229.
13. **Drexler W.** Ultrahigh-resolution optical coherence tomography // Journal of Biomedical Optics. 2004. Vol. 9. No. 1. Pp. 47–74.
14. **Ушаков Н. А., Маковецкая Т. А., Маркварт А. А., Ликумович Л. Б.** Теоретические основы квантовой спектральной оптической когерентной томографии с частотным сканированием // Письма в ЖЭТФ. 2023. Т. 117. № 1. С. 29–36.
15. **Li Y., Zhao K., Zhao J., Wang J., Wright R., Buric M., Chen K. P.** Super-resolution demodulation for fiber sensor arrays based on the MUSIC algorithm // Optics Letters. 2022. Vol. 47. No. 10. Pp. 2390–2393.
16. **Langoju R., Patil A., Rastogi P.** Super-resolution Fourier transform method in phase shifting interferometry // Optics Express. 2005. Vol. 13. No. 18. Pp. 7160–7173.
17. **Ushakov N., Markvart A., Liokumovich L.** Singlemode-multimode-singlemode fiber-optic interferometer signal demodulation using MUSIC algorithm // Photonics. 2022. Vol. 9. No. 11. P. 879.
18. **Rife D. C., Boorstyn R. R.** Multiple tone parameter estimation from discrete time observations // Bell System Technical Journal. 1976. Vol. 55. No. 9. Pp. 1389–1410.
19. **Schmidt R. O.** Multiple emitter location and signal parameter estimation // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1986. Vol. 34. No. 3. Pp. 276–280.
20. **Rao B. D., Hari K. V. S.** Performance analysis of Root-Music // IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing. 1989. Vol. 37. No. 12. Pp. 1939–1949.
21. **Stoica P., Nehorai A.** MUSIC, maximum likelihood, and Cramér-Rao bound: further results and comparisons // IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing. 1990. Vol. 38. No. 12. Pp. 2140–2150.
22. **Wax M., Kallath T., Kailath T.** Detection of signals by information theoretic criteria // IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing. 1985. Vol. 33. No. 2. Pp. 387–392.
23. **Zhao L. C., Krishnaiah P. R., Bai Z. D.** On detection of the number of signals in presence of white noise // Journal of Multivariate Analysis. 1986. Vol. 20. No. 1. Pp. 1–25.
24. **Stoica P., Selen Y.** Model-order selection // IEEE Signal Processing Magazine. 2004. Vol. 21. No. 4. Pp. 36–47.
25. **Munkres J.** Algorithms for the assignment and transportation problems // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. 1957. Vol. 5. No. 1. Pp. 32–38.
26. **Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B.** Enhancing the resolution limits of spectral interferometric measurements with swept-wavelength interrogation by means of a reference interferometer // Applied Optics. 2015. Vol. 54. No. 19. Pp. 6029–6036.
27. **Ushakov N. A., Liokumovich L. B.** Resolution limits of extrinsic Fabry – Perot interferometric displacement sensors utilizing wavelength scanning interrogation // Applied Optics. 2014. Vol. 53. No. 23. Pp. 5092–5099.
28. **Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B.** Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry – Perot interferometric sensors // IEEE Sensors Journal. 2020. Vol. 20. No. 19. Pp. 11302–11312.
29. **Li P., Shen T. T., Johnstone M., Wang R. K.** Pulsatile motion of the trabecular meshwork in healthy human subjects quantified by phase-sensitive optical coherence tomography // Biomedical Optics Express. 2013. Vol. 4. No. 10. P. 2051.



REFERENCES

1. **Lobach I. A., Fotiadi A. A., Yatseev V. A., et al.**, Newest methods and approaches to enhance the performance of optical frequency-domain reflectometers, *Sensors*. 24 (16) (2024) 5432.
2. **Ponomarev R. S., Konstantinov Yu. A., Belokrylov M. E., et al.**, An automated instrument for reflectometry study of the pyroelectric effect in proton-exchange channel waveguides based on lithium niobate, *Instrum. Exp. Tech.* 65 (5) (2022) 787–796.
3. **Konstantinov Y. A., Turov A. T., Latkin K. P., et al.**, A non-destructive study of optical, geometric and luminescent parameters of active optical fibers preforms, *Optics*. 5 (1) (2024) 176–194.
4. **Vladimirova D., Pervadchuk V., Konstantinov Y.**, Manufacture of microstructured optical fibers: Problem of optimal control of silica capillary drawing process, *Comput.* 12 (5) (2024) 86.
5. **Podoleanu A. G.**, Fiber optics, from sensing to non invasive high resolution medical imaging, *J. Light. Technol.* 28 (4) (2010) 624–640.
6. **Fujimoto J., Swanson E.**, The development, commercialization, and impact of optical coherence tomography, *Invest. Ophthalmol. Vis. Sci.* 57 (9) (2016) OCT1 – OCT13.
7. **Gong Zh., Yu Ch., Guo D., et al.**, Three-dimensional optical coherence digital-null deformography of multi-refractive-surface optics with nanometer sensitivity, *Opt. Express*. 30 (23) (2022) 42069–42085.
8. **Ozaki N., Ishida K., Nishi T., et al.**, OCT with a visible broadband light source applied to high-resolution nondestructive inspection for semiconductor optical devices (Chapter 10), In book: M. R. Wang (Editor). “Optical coherence tomography and its non-medical applications”, IntechOpen, 2020. Available from: <http://dx.doi.org/10.5772/int>.
9. **Opitz J., Porstmann V., Schreiber L., et al.**, Optical coherence tomography as monitoring technology for the additive manufacturing of future biomedical parts, In book: Meyendorf N., Ida N., Singh R., Vrana J. (Eds.). “Handbook of nondestructive evaluation 4.0”. Springer International Publishing, Cham, Switzerland (2022) 859–881.
10. **Saccon F. A. M., Muller M., Fabris J. L.**, Optical fiber characterization by optical coherence tomography, *Proc. Int. Microwave and Optoelectronics Conf. (IMOC 2009)*. 3–6 Nov. 2009. Belem, Brazil (2009) 625–628.
11. **Henao R. H., Pomarico J. A., Russo N. A., et al.**, Multimode optical fiber core measurement by speckle correlation, *Opt. Eng.* 35 (1) (1996) 26–30.
12. **Golnabi H.**, Fiber core size determination from power measurements in a fiber-to-fiber design, *Microwave Opt. Technol. Lett.* 53 (6) (2011) 1225–1229.
13. **Drexler W.**, Ultrahigh-resolution optical coherence tomography, *J. Biomed. Opt.* 9 (1) (2004) 47–74.
14. **Ushakov N. A., Makovetskaya T. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B.**, Theoretical foundations of quantum spectral-domain optical coherence tomography with frequency scanning, *JETP Lett.* 117 (1) (2023) 24–31.
15. **Li Y., Zhao K., Zhao J., et al.**, Super-resolution demodulation for fiber sensor arrays based on the MUSIC algorithm, *Opt. Lett.* 47 (10) (2022) 2390–2393.
16. **Langoju R., Patil A., Rastogi P.**, Super-resolution Fourier transform method in phase shifting interferometry, *Opt. Express*. 13 (18) (2005) 7160–7173.
17. **Ushakov N., Markvart A., Liokumovich L.**, Singlemode-multimode-singlemode fiber-optic interferometer signal demodulation using MUSIC algorithm, *Photonics*. 9 (11) (2022) 879.
18. **Rife D. C., Boorstyn R. R.**, Multiple tone parameter estimation from discrete time observations, *Bell Syst. Tech. J.* 55 (9) (1976) 1389–1410.
19. **Schmidt R. O.**, Multiple emitter location and signal parameter estimation, *IEEE Trans. Antennas Propag.* 34 (3) (1986) 276–280.
20. **Rao B. D., Hari K. V. S.**, Performance analysis of Root-Music, *IEEE Trans. Acoust. Speech Signal Process.* 37 (12) (1989) 1939–1949.
21. **Stoica P., Nehorai A.**, MUSIC, maximum likelihood, and Cramér-Rao bound: further results and comparisons, *IEEE Trans. Acoust. Speech Signal Process.* 38 (12) (1990) 2140–2150.
22. **Wax M., Kallath T., Kailath T.**, Detection of signals by information theoretic criteria, *IEEE Trans. Acoust. Speech Signal Process.* 33 (2) (1985) 387–392.
23. **Zhao L. C., Krishnaiah P. R., Bai Z. D.**, On detection of the number of signals in presence of white noise, *J. Multivar. Anal.* 20 (1) (1986) 1–25.

24. Stoica P., Selen Y., Model-order selection, IEEE Signal Process. Mag. 21 (4) (2004) 36–47.
25. Munkres J., Algorithms for the assignment and transportation problems, SIAM J. Appl. Math. 5 (1) (1957) 32–38.
26. Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B., Enhancing the resolution limits of spectral interferometric measurements with swept-wavelength interrogation by means of a reference interferometer, Appl. Opt. 54 (19) (2015) 6029–6036.
27. Ushakov N. A., Liokumovich L. B., Resolution limits of extrinsic Fabry – Perot interferometric displacement sensors utilizing wavelength scanning interrogation, Appl. Opt. 53 (23) (2014) 5092–5099.
28. Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B., Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry – Perot interferometric sensors, IEEE Sens. J. 20 (19) (2020) 11302–11312.
29. Li P., Shen T. T., Johnstone M., Wang R. K., Pulsatile motion of the trabecular meshwork in healthy human subjects quantified by phase-sensitive optical coherence tomography, Biomed. Opt. Express. 4 (10) (2013) 2051.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЕРОВЕНКО Зоя Андреевна – ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zoia199306@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9196-8038

МАРКВАРТ Александр Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
markvart_aa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

ПЕТРОВ Александр Викторович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexandr-petroff1994@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5216-6588

БИСЯРИН Михаил Александрович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры радиофизики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9
bisyarin@spbu.ru
ORCID: 0000-0003-3891-1339

ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429



УШАКОВ Николай Александрович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

THE AUTHORS

EROVENKO Zoya A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zoya199306@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9196-8038

MARKVART Aleksandr A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
markvart_aa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

PETROV Aleksandr V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexandr-petroff1994@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-5216-6588

BISYARIN Mikhail A.

St. Petersburg State University
7–9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia
m.bisyarin@spbu.ru
ORCID: 0000-0003-3891-1339

LIOKUMOVICH Leonid B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429

USHAKOV Nikolai A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

*Статья поступила в редакцию 02.05.2025. Одобрена после рецензирования 14.05.2025.
Принята 14.05.2025.*

Received 02.05.2025. Approved after reviewing 14.05.2025. Accepted 14.05.2025.

Научная статья

УДК 535.3, 535-15, 535.417

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18415>

ОТКЛИК МЕЖМОДОВОГО ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕРОМЕТРА С SMSMS-СТРУКТУРОЙ ПРИ СПЕКТРАЛЬНОМ ОПРОСЕ НА ИЗМЕНЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

Л. Д. Завалишина¹, А. А. Маркварт¹□, А. Э. Зарипов¹,
М. А. Бисярин², Л. Б. Лиокумович¹, Н. А. Ушаков¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого;

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

□ markvart_aa@spbstu.ru

Аннотация. Исследовано функционирование межмодового волоконно-оптического интерферометра со структурой “Singlemode-Multimode-Singlemode-Multimode-Singlemode” (SMSMS) при его спектральном опросе в *C*-диапазоне длин волн. Таким интерферометром можно измерять показатель преломления *n* внешней среды путем создания интерференции между фундаментальной и оболочечными модами в этой структуре. Представлены теоретические выражения для расчета спектральной характеристики (СХ) интерферометра, рассчитаны моды этой структуры, проанализировано поведение интерференционных компонент СХ, относящихся к попарной интерференции фундаментальной и оболочечных мод одномодового волокна при изменении *n*. Проведена оценка методических погрешностей измерения *n* внешней среды, которая состояла из раствора глицерина в дистиллированной воде. Минимальная ошибка определения *n* составила $1,7 \cdot 10^{-4}$ в диапазоне $n = 1,32 - 1,36$, что соответствует изменению концентрации глицерина в воде на 0,13% в диапазоне от 0 до 25%.

Ключевые слова: межмодовый волоконный интерферометр, SMSMS, датчик показателя преломления, дискретное преобразование Фурье

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-72-10095.

Для цитирования: Завалишина Л. Д., Маркварт А. А., Зарипов А. Э., Бисярин М. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. Отклик межмодового волоконно-оптического интерферометра с SMSMS-структурой при спектральном опросе на изменение показателя преломления внешней среды // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 206–220. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18415>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Research article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18415>

THE RESPONSE OF AN INTERMODAL FIBER-OPTIC INTERFEROMETER WITH SMSMS STRUCTURE IN CASE OF SPECTRAL INTERROGATION TO CHANGES IN THE REFRACTIVE INDEX OF THE EXTERNAL ENVIRONMENT

L. D. Zavalishina¹, A. A. Markvart¹□, A. E. Zaripov¹,
M. A. Bisyarin², L. B. Liokumovich¹, N. A. Ushakov¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

² St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

□ markvart_aa@spbstu.ru

Abstract. The operation of an intermode fiber-optic interferometer with “Singlemode-Multimode-Singlemode-Multimode-Singlemode” (SMSMS) structure during its spectral interrogation in the C -wavelength range has been studied. The refractive index n of the external environment can be measured using this device by providing the interference between fundamental and cladding modes in this structure. The theoretical expressions for calculating the spectral characteristic (SC) of the interferometer were presented, the structures’ modes were obtained, the behavior of the SC interference components related to the pairwise interference between the fundamental and cladding modes of a single-mode fiber when n changing was analyzed. The methodological errors of n measuring the external environment were estimated. The minimum error in n determining was $1.7 \cdot 10^{-4}$ in the n range from 1.32 to 1.36, which corresponds to a 0.13% change in the range of glycerol concentration from 0 to 25% in the water solution.

Keywords: intermode fiber optic interferometer, SMSMS, refractive index sensor, discrete Fourier transform

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 23-72-10095).

For citation: Zavalishina L. D., Markvart A. A., Zaripov A. E., Bisyarin M. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., The response of an intermodal fiber-optic interferometer with SMSMS structure in case of spectral interrogation to changes in the refractive index of the external environment, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 206–220. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18415>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Измерение показателя преломления внешней среды является важной и актуальной задачей, имеющей широкое применение в самых разных областях промышленности, науки и других сферах человеческой деятельности. Это и нефтегазовая промышленность, и создание различных сооружений, и оптическое приборостроение, и медицина, а также многое другое.

Волоконно-оптические датчики показателя преломления – это наиболее привлекательный тип датчиков благодаря его высокой точности, компактному размеру, долговечности, гибкости, биосовместимости, электровзрывобезопасности, а также устойчивости к электромагнитным помехам, химической коррозии и радиации. Такие датчики показателя преломления могут быть построены на разных принципах. Непосредственное получение информации о показателе преломления на заданной длине волны реализуется путем измерения коэффициента отражения на границе торца оптоволоконного зонда и измеряемой жидкости [1, 2].

Однако в некоторых прикладных задачах не требуется определять сам показатель преломления жидкости, а необходимо лишь измерить концентрацию определенного вещества (аналита) в растворе либо ее изменение. В этом случае часто применяются спектральные методы опроса волоконно-оптических датчиков, построенных на основе поверхностного плазмонного резонанса [3 – 5], интерферометра Фабри – Перо [6], межмодовых интерферометров с одномодовым подключением [7 – 19]. Эти методы заключаются в измерении спектра отражения или пропускания волоконно-оптического датчика, т.е. зависимости от длины волны коэффициента отражения оптического излучения от датчика либо его прохождения через датчик. Такую зависимость для удобства изложения далее будем называть спектральной характеристикой (СХ) датчика.

При изменении концентрации аналита в растворе изменяется дисперсионная зависимость показателя преломления раствора, что приводит к изменению СХ датчика. В частности, в случае датчика на поверхностном плазмонном резонансе смещается длина волны резонанса; в случаях датчиков на интерферометре Фабри – Перо и межмодовом интерферометре изменяются разности фаз интерферирующих волн и, как следствие, изменяются частоты и начальные фазы квазигармонических компонент СХ. Следует отметить, что описанные устройства называют датчиками показателя преломления, несмотря

на необходимость калибровки таких датчиков под конкретный аналит в растворе. Разрешающая способность измерения концентрации аналита в веществе обычно приводится в пересчете на минимальное изменение показателя преломления раствора на одной из длин волн диапазона, которое можно достоверно зафиксировать. Типичные значения изменения указанного показателя преломления для волоконно-оптических датчиков составляет от 10^{-4} до 10^{-9} RIU (*англ.* Refractive Index Unit).

Среди перечисленных датчиков показателя преломления наиболее простым в изготовлении, но и наименее исследованным (тем не менее) можно считать датчик на основе межмодового интерферометра с одномодовым подключением. Эти интерферометры формируются путем сварки подводящих одномодовых оптических волокон с одной или несколькими секциями оптических волокон разных типов и/или волокон, обладающих разной геометрической конфигурацией [7 – 19]. Примерами таких оптоволоконных структур служат SNS-структура (Singlemode-No core-Single mode) [9 – 11], SMSMS-структура (Singlemode-Multimode-Singlemode-Multimode-Singlemode) [12 – 15], структура из подводящего одномодового волокна, приваренной одномодовой секции со сдвигом и второго подводящего одномодового волокна [16, 17] и др. Такие структуры имеют два подводящих одномодовых волокна, и их СХ измеряется «на проход». Благодаря зеркальной симметрии можно изготовить аналогичные по свойствам структуры с зеркалом, одним подводящим одномодовым волокном и измерением СХ «на отражение» [17, 18]. При этом вдвое уменьшается длина чувствительной секции.

Принцип измерения параметров внешней среды вышеперечисленными интерферометрами заключается в том, что фазовый набег мод, возбуждаемых в чувствительной секции интерферометра, зависит от показателя преломления внешней среды. В структуре SNS таковыми служат моды волокна без сердцевины, а в SMSMS-структуре – оболочечные моды стандартного одномодового волокна в центральной секции, возбуждаемые за счет коротких (несколько десятков микрометров) многомодовых вставок. При этом типичная длина чувствительной секции составляет от нескольких до десятков сантиметров. Таким образом, результирующий интерференционный сигнал зависит от показателя преломления внешней среды.

Несмотря на множество научных публикаций на тему применения таких интерферометров для измерения параметров внешней среды, большинство из них носит экспериментальный характер. В некоторых работах приводятся в дополнение к эксперименту и численные расчеты распространения света в интерферометрах, выполненные в таких программах, как “BeamProp” с помощью метода “Beam Propagation Method” [18, 19] и “Comsol Wave Optics Toolbox” с помощью метода “Beam Envelope” [11]. Однако такие расчеты не позволяют выявлять причины возникновения наблюдаемых спектральных характеристик интерферометров и находить пути повышения чувствительности интерферометров к изменению параметров внешней среды.

Для проведения такого анализа необходимо выполнять расчет всех мод (или наиболее значимых), которые распространяются в каждой из секций интерферометра, что представляет собой довольно трудоемкую задачу ввиду большого количества таких мод. Например, на длине волны 1,55 мкм в стандартном одномодовом волокне SMF-28, при осесимметричном возбуждении, имеется 46 направляемых оболочечных мод. Кроме того, в большинстве известных авторам работах обработка спектральных характеристик интерферометров осуществляется путем отслеживания позиций экстремумов вдоль шкалы длин волн. Однако в общем случае их поведение при изменении параметров внешней среды может оказаться в значительной мере нелинейным. Причина заключается в том, что СХ состоит из множества синусоид, число которых равно числу попарных комбинаций мод. Например, в волокне SMF-28 на длине волны 1,55 мкм таких комбинаций аж 1081 и они сильно перекрывают друг друга по частоте осцилляций. Более того, поскольку разные моды по-разному чувствительны к изменению показателя преломления, частоты и начальные фазы этих синусоид изменяются по-разному.

Таким образом, результирующая СХ в общем случае очень сложна и трудно предсказуема. Этот факт делает разработку такого датчика необычайно головоломной задачей, даже при использовании более продвинутых алгоритмов обработки сигналов.

Настоящая работа посвящена проведению такого расчета интерферометра и анализу эффективности цифровой обработки его спектральной характеристики. В качестве примера мы исследовали межмодовый волоконный интерферометр с одномодовым подключением на основе отражательной SMSMS-структуры.

Первый раздел статьи включает два подраздела. В первом из них представлена схема интерферометра, во втором – теоретические выражения для расчета его спектральной характеристики в условиях изменения концентрации analyта в растворе. Во втором разделе поясняются особенности применения дискретного преобразования Фурье к обработке спектральной характеристики интерферометра. В третьем разделе приведены итоговые расчеты интерферометра.

Спектральная характеристика межмодового волоконно-оптического интерферометра на основе отражательной SMSMS-структуры

Схема интерферометра. Рассматриваемый в работе межмодовый волоконный интерферометр на основе указанной отражательной структуры состоит из подводящего (input) одномодового оптоволокна (Singlemode Fiber (SMF)), вставки длиной в несколько десятков микромметров из многомодового оптоволокна (MultiMode Fiber (MMF)) с большим, чем у одномодового, диаметром сердцевины, секции из одномодового волокна длиной в несколько десятков сантиметров, чувствительной к изменению показателя преломления внешней среды и зеркала на торце этой секции (рис. 1).

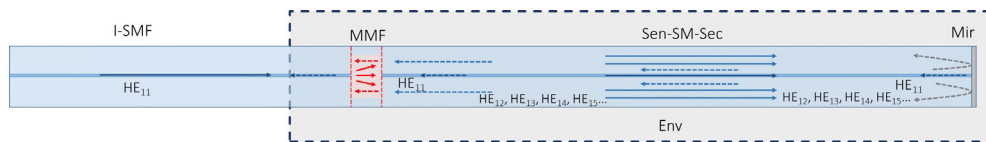


Рис. 1. Схема отражательной SMSMS-структуры:

I-SMF – подводящее одномодовое оптоволокно; MMF – многомодовое оптоволокно;
Sen-SM-Sec – чувствительная одномодовая секция; Mir – зеркало; Env – внешняя среда;
 HE_j – обозначения мод; стрелки указывают направления распространения мод

Мода подводящего световода HE_{11} возбуждает несколько мод короткого многомодового световода (MMF), которые в свою очередь позволяют добиться расходимости светового пучка, что необходимо для возбуждения оболочечных мод в чувствительном одномодовом световоде (Sen-SM-Sec). Они распространяются до зеркала (Mir) на торце световода и возвращаются обратно к многомодовой вставке (MMF), в которой опять же возбуждают несколько мод, формирующих в сечении торца подводящего одномодового волокна (I-SMF) сложное распределение электрического поля, которое есть результат суперпозиции полей пришедших мод. Интенсивность возбуждаемой этим распределением фундаментальной моды HE_{11} подводящего одномодового волокна зависит от разности фаз мод, которые распространяются в интерферометре, и должна меняться при изменении показателя преломления n внешней среды (Env).

Измеренная зависимость интенсивности света, отраженного от интерферометра и нормированная на интенсивность входного излучения, от длины волны есть спектральная характеристика интерферометра, или, в данном случае, фактическая зависимость его коэффициента отражения от длины волны.

Расчетные теоретические выражения. Для расчета спектральной характеристики (СХ) интерферометра мы использовали матричный подход, который учитывает многомодовый характер распространения света в обеих секциях интерферометра.

Коэффициент отражения интерферометра равен квадрату модуля от последовательного произведения нескольких матриц. Произведение включает следующие множители:

матрицы, состоящие из коэффициентов возбуждения мод в началах секций;

матрица, отражающая распространение мод вдоль многомодовой секции и содержащая постоянные распространения этих мод;

матрица, отражающая распространение фундаментальной и оболочечных мод вдоль чувствительной одномодовой секции и содержащая постоянные распространения этих мод, а также фазовый сдвиг на π при отражении от зеркала.

В этом случае выражение для коэффициента отражения интерферометра будет иметь следующий вид:

$$R = \left| A_{11,1q}^{SM,MM} e^{-j\beta_{1q}^{MM} L_{MM}} A_{1q,1p}^{MM,SM} e^{-2j\beta_{1p}^{SM} L_{Sen} - j\pi} A_{1p,1q}^{SM,MM} e^{-j\beta_{1q}^{MM} L_{MM}} A_{1q,11}^{MM,SM} \right|^2, \quad (1)$$

где q – радиальный индекс осесимметричной HE_{1q} моды в MMF-световоде (см. рис. 1); p – радиальный индекс (номер) осесимметричной HE_{1p} моды в световоде I-SMF ($p = 1$ для фундаментальной моды, $p > 1$ для оболочечных мод HE_{1p}); λ – длина световой волны; L_{MM} , L_{Sen} – величины длины световодов MMF и Sen-SM-Sec, соответственно; β_{1q}^{MM} , β_{1p}^{SM} – матрицы постоянных распространения мод HE_{1q} в световоде MMF и HE_{1p} в Sen-SM-Sec, соответственно; $A_{11,1q}^{SM,MM}$ – матрица коэффициентов возбуждения мод HE_{1q} MM световода MMF фундаментальной модой HE_{11} подводящего световода I-SMF; $A_{1q,1p}^{MM,SM}$ – матрица коэффициентов возбуждения фундаментальной моды HE_{11} и оболочечных мод HE_{1p} чувствительного световода Sen-SM-Sec модами HE_{1q} световода MMF; $A_{1p,1q}^{SM,MM}$ – матрица коэффициентов возбуждения мод HE_{1q} световода MMF фундаментальной модой HE_{11} и оболочечными модами HE_{1p} чувствительного световода Sen-SM-Sec; $A_{1q,11}^{MM,SM}$ – матрица коэффициентов возбуждения фундаментальной моды HE_{11} модами световода HE_{1q} световода MMF.

Матрицы постоянных распространения мод в световодах MMF и Sen-SM-Sec с обозначениями MM и SM имеют диагональный вид:

$$\beta_{1q}^{MM} = \begin{pmatrix} \beta_{11}^{MM} & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \beta_{1q}^{MM} \end{pmatrix}, \quad \beta_{1p}^{SM} = \begin{pmatrix} \beta_{11}^{SM} & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \beta_{1p}^{SM} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Коэффициенты возбуждения мод находим путем вычисления интеграла перекрытия по следующей формуле:

$$a_{1p,1q}^{SM,MM} = \frac{\left| \int \mathbf{E}_{1p}^{SM*} \cdot \mathbf{E}_{1q}^{MM} dS \right|}{\sqrt{\int |\mathbf{E}_{1p}^{SM}|^2 \cdot dS \int |\mathbf{E}_{1q}^{MM}|^2 \cdot dS}}, \quad (3)$$

где \mathbf{E}_{1p}^{SM} , \mathbf{E}_{1q}^{MM} – векторные поперечные модовые функции (их комплексные амплитуды) возбуждающей моды HE_{1p} чувствительного одномодового волокна Sen-SM-Sec и возбуждаемой моды вставки многомодового волокна MMF (см. рис. 1); dS – элемент площадки торца оптического волокна; звездочкой помечен оператор комплексного сопряжения.

Матрицы коэффициентов возбуждения записываются следующим образом:

$$A_{1p,1q}^{SM,MM} = \begin{pmatrix} a_{11,11}^{SM,MM} & a_{11,12}^{SM,MM} & \dots & a_{11,1Q}^{SM,MM} \\ a_{12,11}^{SM,MM} & \dots & & a_{12,1Q}^{SM,MM} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{1P,11}^{SM,MM} & a_{1P,12}^{SM,MM} & \dots & a_{1P,1Q}^{SM,MM} \end{pmatrix}, \quad A_{1q,1p}^{MM,SM} = \begin{pmatrix} a_{11,11}^{MM,SM} & a_{11,12}^{MM,SM} & \dots & a_{11,1P}^{MM,SM} \\ a_{12,11}^{MM,SM} & \dots & & a_{12,1Q}^{MM,SM} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{1Q,11}^{MM,SM} & a_{1P,12}^{MM,SM} & \dots & a_{1Q,1P}^{MM,SM} \end{pmatrix} = A_{1p,1q}^{SM,MMH}, \quad (4)$$

$$A_{11,1q}^{SM,MM} = \begin{pmatrix} a_{11,11}^{SM,MM} & a_{11,12}^{SM,MM} & \dots & a_{11,1Q}^{SM,MM} \end{pmatrix}, \quad A_{1q,11}^{MM,SM} = \begin{pmatrix} a_{11,11}^{MM,SM} \\ a_{12,11}^{MM,SM} \\ \vdots \\ a_{1Q,11}^{MM,SM} \end{pmatrix} = A_{11,1q}^{SM,MMH},$$



где P – количество рассматриваемых фундаментальной и оболочечных мод чувствительного одномодового волокна Sen-SM-Sec; Q – количество рассматриваемых мод вставки из многомодового волокна; верхним индексом H обозначена операция эрмитова сопряжения матрицы.

Применение дискретного преобразования Фурье к обработке спектральной характеристики интерферометра

Следует отметить, что многомодовая вставка имеет длину в несколько десятков микрометров (это на четыре порядка меньше длины чувствительной одномодовой секции), поэтому осциллирующую часть спектральной характеристики интерферометра можно приближенно записать следующим образом:

$$S(\lambda) \approx \bar{S}(\lambda) + \sum_{\eta=1}^P \sum_{\mu=p+1}^P s_{1\eta,1\mu}(\lambda) \cdot \cos[\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda)], \quad (5)$$

где η, μ – номера компонент осесимметричных интерферирующих мод $HE_{1\eta}$ и $HE_{1\mu}$ чувствительного одномодового волокна SMF.

Выражение (5) представляет собой сумму уровня $\bar{S}(\lambda)$, не зависящего от разности фаз, и косинусоидальных компонент с амплитудами $s_{1\eta,1\mu}(\lambda)$ и аргументами в виде разности фаз мод $HE_{1\eta}$ и $HE_{1\mu}$; эта разность фаз следует выражению

$$\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda) = 2L_{\text{Sen}}[\beta_{1\eta}(\lambda) - \beta_{1\mu}(\lambda)],$$

которое фактически равно волновому числу $k_0 = 2\pi/\lambda$, умноженному на разность оптических путей мод:

$$n_{1\eta}^{\text{eff}}(\lambda) \cdot 2L_{\text{Sens}} - n_{1\mu}^{\text{eff}}(\lambda) \cdot 2L_{\text{Sens}},$$

где $n_{1\eta}^{\text{eff}}, n_{1\mu}^{\text{eff}}$ – эффективные показатели преломления мод с номерами η и μ .

Число таких компонент равно количеству попарных комбинаций мод HE_{1p} , равному $(C_p)^2$.

Если зависимость $\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda)$ в используемом спектральном окне $\Delta\lambda$ близка к линейной, а амплитуды $s_{1\eta,1\mu}$ почти не зависят от длины волны, то косинусоидальные компоненты спектральной характеристики можно рассматривать как гармонические.

Тогда аргумент косинуса в формуле (5) можно описать следующим выражением:

$$\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda) \approx \Omega_{1\eta,1\mu} \cdot \lambda + \Theta_{1\eta,1\mu}, \quad (6)$$

и спектральную характеристику в данном спектральном окне можно рассматривать как сумму гармонических компонент с пространственными частотами $\Omega_{1\eta,1\mu}$ и начальными фазами $\Theta_{1\eta,1\mu}$. Тогда демодуляцию сигнала интерферометра можно свести к задаче оценки частот и фаз полигармонической спектральной характеристики.

При измерении СХ интерферометра система опроса регистрирует набор отсчетов S_i , причем i – номер отсчета, указывающий длину волны света в вакууме, т.е. $S_i = S(\lambda_i)$ в спектральном окне $\Delta\lambda$ с шагом $\Delta\lambda$ и центром диапазона сканирования длины волны λ_0 .

Пусть N – общее количество отсчетов, тогда законы изменения длины волны во втором случае можно записать в виде

$$\lambda_i = \lambda_0 + [i - (N - 1)/2] \cdot \Delta\lambda,$$

где i меняется от 0 до $N - 1$, а интервал сканирования $\Delta\lambda = \Delta\lambda \cdot (N - 1)$.

В этом случае задача демодуляции спектральной характеристики интерферометра сводится к задаче оценки частот и фаз гармонических компонент следующей числовой последовательности:

$$v(i) = w(i) \left\{ \bar{S}_i + \sum_{\eta=1}^P \sum_{\mu=p+1}^P s_{1\eta,1\mu} \cos[\omega_{1\eta,1\mu} \cdot i + \theta_{1\eta,1\mu}] \right\}, \quad (7)$$

где $w(i)$ – используемое весовое окно; $\omega_{1\eta,1\mu}$ – круговые частоты гармонических компонент числовой последовательности (измеряются в рад), $\theta_{1\eta,1\mu}$, рад, – начальные фазы.

Круговые частоты задаются следующими выражениями [20]:

$$\omega_{1\eta,1\mu} = \Delta_\lambda \Omega_{1\eta,1\mu}, \quad (8)$$

$$\theta_{1\eta,1\mu} = [\lambda_0 - \Delta\lambda / 2] \cdot \Omega_{1\eta,1\mu} + \Theta_{1\eta,1\mu}. \quad (9)$$

Частоты (8) можно находить путем определения позиций максимумов модуля Фурье-образа числовой последовательности $\nu(i)$, а приращения фаз $\Delta\theta_{1\eta,1\mu}$ – путем вычисления приращений аргументов Фурье-образа ровно в соответствующем максимуме либо путем такого вычисления Фурье-образа $\Delta\psi(\omega_i)$ на фиксированных частотах ω_i в области соответствующих максимумов.

При этом в случае использования симметричного весового окна $w(i)$ выражение для расчета $\Delta\psi(\omega_i)$ записывается в следующем виде:

$$\Delta\psi(\omega_i) = \lambda_0 \cdot \Delta\Omega_{1\eta,1\mu} + \Delta\Theta_{1\eta,1\mu}. \quad (10)$$

Непосредственно точки Фурье-образа числовой последовательности можно находить путем расчета дискретного преобразования Фурье (DFT). Для увеличения заполнения Фурье-образа точками перед использованием DFT последовательность $\nu(i)$ можно дополнить нулями [20]. Также для снижения ошибок в оценке частот и фаз целесообразно применять вместо прямоугольного окна специальные окна, например, окна Хана, Хэмминга, Блэкмана, Чебышева и др. [20].

Таким образом, при изменении показателя преломления внешней среды будут изменяться постоянные распространения интерферирующих мод, что приведет к изменению пространственных частот $\Omega_{1\eta,1\mu}$ и начальных фаз $\Theta_{1\eta,1\mu}$ СХ, что отразится в изменении положения соответствующих максимумов Фурье-образа регистрируемой СХ и в изменении аргументов Фурье-образа в областях этих максимумов.

Результаты расчета интерферометра и обработки его спектральных характеристик с помощью дискретного преобразования Фурье

Численное моделирование было проведено для следующих характеристик интерферометра (см. рис. 1):

диапазон значений длины световой волны $\lambda = 1,51 - 1,59$ мкм, шаг $\Delta\lambda = 0,16$ нм;

модель одномодового волокна SMF-28 включала сердцевину из кварца диаметром 8,2 мкм (кварц легирован 3,5% германия) и оболочку из кварца диаметром 125 мкм;

модель многомодового волокна Thorlabs GIF625 включала сердцевину из кварца диаметром 62,5 мкм (кварц легирован 8,5% германия в центре сечения сердцевины) и оболочку из кварца диаметром 125 мкм;

длина секции MMF $L_{MM} = 50$ мкм;

длина чувствительной секции Sen-SM-Sec $L_{Sen} = 27$ см;

внешняя среда состояла из раствора глицерина в дистиллированной воде в диапазоне массовых концентраций 0 – 25 % при температуре 23°C.

Для численного расчета световодов необходима информация о дисперсионных зависимостях показателей преломления сердцевины, оболочки и внешней среды (их зависимости от световой длины волны). Для расчета дисперсионных зависимостей кварца с примесями оксида германия при температуре 23°C были использованы подходы, предложенные в работах [21 – 23]. Для расчета дисперсионной зависимости воды при такой же температуре использовались данные из работ [24, 25], а глицерина – из работы [26]. Для расчета дисперсионной зависимости раствора глицерина в воде было использовано предположение о линейной зависимости его показателя преломления от массовой доли глицерина в растворе [27]. Соответствующие зависимости представлены на рис. 2.

Численное моделирование световодов интерферометра было проведено путем численного решения волнового уравнения методом конечных элементов для электрического поля в заданной частотной области. При этом на заданной частоте численно решалось уравнение Гельмгольца для электрического поля, а затем искалось решение в виде волны. Были рассчитаны распределения полей и эффективные показатели преломления

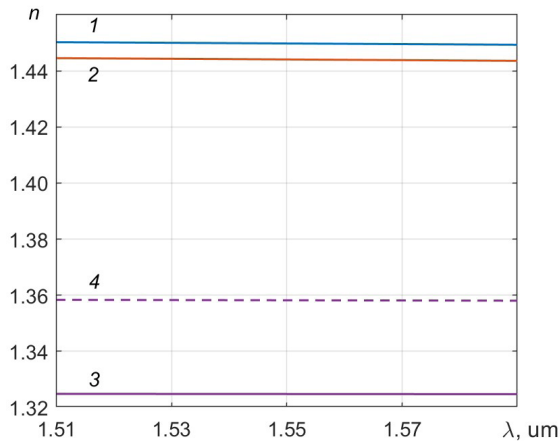


Рис. 2. Дисперсионные зависимости показателей преломления сред, входящих в рассматриваемую SMSMS-структуру: 1 – сердцевина волокна, 2 – его оболочка, 3 – водная внешняя среда, 4 – 25%-й водный раствор глицерина (также моделируемая внешняя среда)

фундаментальной моды и первых 15 осесимметричных оболочечных мод типа HE_{1p} световода Sen-SM-Sec в заданных диапазонах длин волн и концентраций глицерина в воде, а также все распространяющиеся осесимметричные моды HE_{1q} сердцевины световода MMF в количестве семи штук.

Распределения электрических полей некоторых из них представлены для волокон MMF и Sen-SM-Sec на рис. 3, а и б, соответственно. Затем были рассчитаны коэффициенты возбуждения мод (рис. 3, с). Установлено, что 99,9 % энергии моды подводящего одномодового волокна I-SM передается модам сердцевины многомодовой вставки и 99,8 % энергии этой моды далее передается фундаментальной моде и первым 15 осесимметричным оболочечным модам чувствительного световода Sen-SM-Sec. Полученный результат говорит о достаточности выбранного количества оболочечных мод одномодового волокна для описания поведения SMSMS-структуры, рассматриваемой в работе.

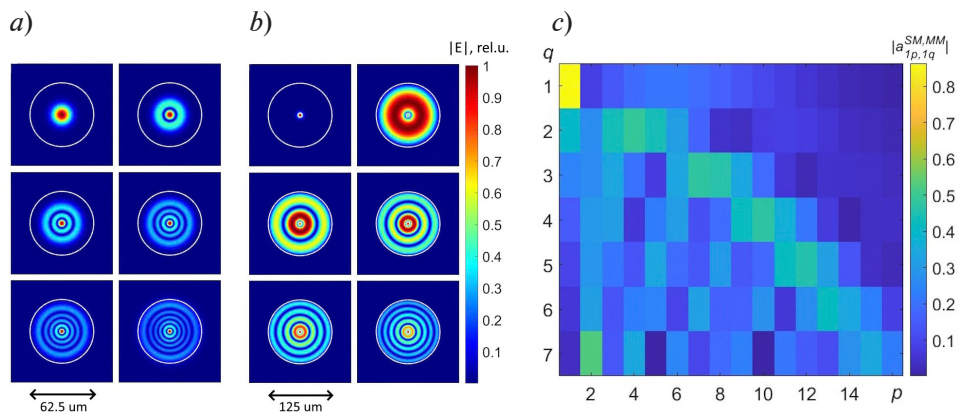


Рис. 3. Рассчитанные распределения напряженности электрических полей первых шести мод HE_{1q} световодов MMF (а) и Sen-SM-Sec (б), а также коэффициенты возбуждения $|a_{1p,1q}^{SM,MM}|$ мод HE_{1p} в световоде Sen-SM-Sec модами HE_{1q} световода MMF (с)

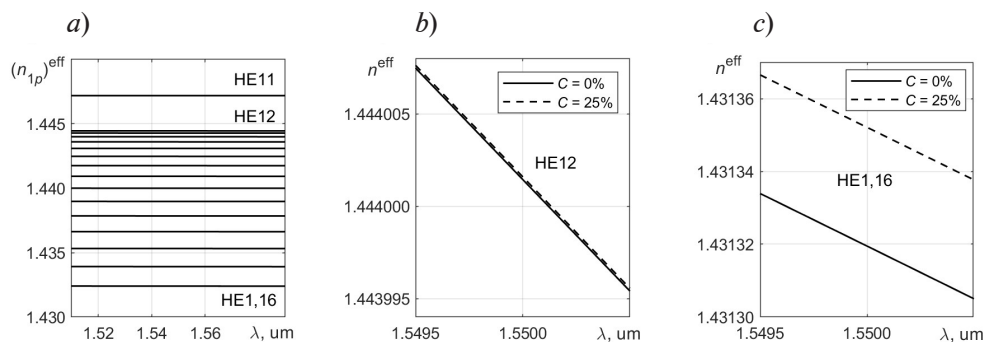


Рис. 4. Зависимости эффективного показателя преломления $(n_{1p})^{eff}$ набора мод HE_{1p} световода Sen-SM-Sec от световой длины волн (а), а также увеличенные фрагменты этих зависимостей (n^{eff}) для мод HE_{12} (б) и $HE_{1,16}$ (с), построенные для чистой воды ($C = 0\%$) и водного раствора глицерина ($C = 25\%$)

На рис. 4, *a* представлены рассчитанные зависимости эффективного показателя преломления мод HE_{lp} световода Sen-SM-Sec от длины световой волны. На рис. 4, *b* и *c* приведены эти зависимости для мод $HE_{1,2}$ и $HE_{1,16}$, соответственно для чистой воды и 25%-го водного раствора глицерина. Видно, что с увеличением номера моды возрастает ее чувствительность к изменению концентрации глицерина.

Как упоминалось выше, интерференционные компоненты спектральных характеристик определяются аргументами косинуса в выражении (5) $\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda)$. Установлено, что в рассматриваемой структуре наиболее значимы компоненты, относящиеся к интерференции фундаментальной моды с оболочечными ($\eta = 1, \mu = 2 - 16$). На рис. 5 даны эти зависимости для воды и 25%-го водного раствора глицерина. Видно, что некоторые из них довольно близки к линейным, а некоторые – заметно нелинейные; последнее приведет к тому, что такие интерференционные компоненты будут скорее всего в СХ как гармонические, с более глубокой частотной модуляцией.

Далее для каждой из компонент (несмотря на небольшую нелинейность некоторых из них) была проведена аппроксимация величины $\Delta\Phi_{1\eta,1\mu}(\lambda)$ линейной функцией для нахождения частот $\Omega_{1\eta,1\mu}$ и начальных фаз $\Theta_{1\eta,1\mu}$ соответствующих гармонических компонент. После этого по формулам (8) и (9) были рассчитаны приращения частот ($\Delta\omega_{1\eta,1\mu}$) и фаз ($\Delta\theta_{1\eta,1\mu}$) гармонических компонент числовой последовательности $\nu(i)$ при изменении концентрации глицерина в воде. Результаты расчетов представлены на рис. 6. Как и ожидалось, сигнал интерференции фундаментальной и оболочечной мод оказался все более чувствительным к изменению концентрации глицерина с увеличением номера оболочечной моды.

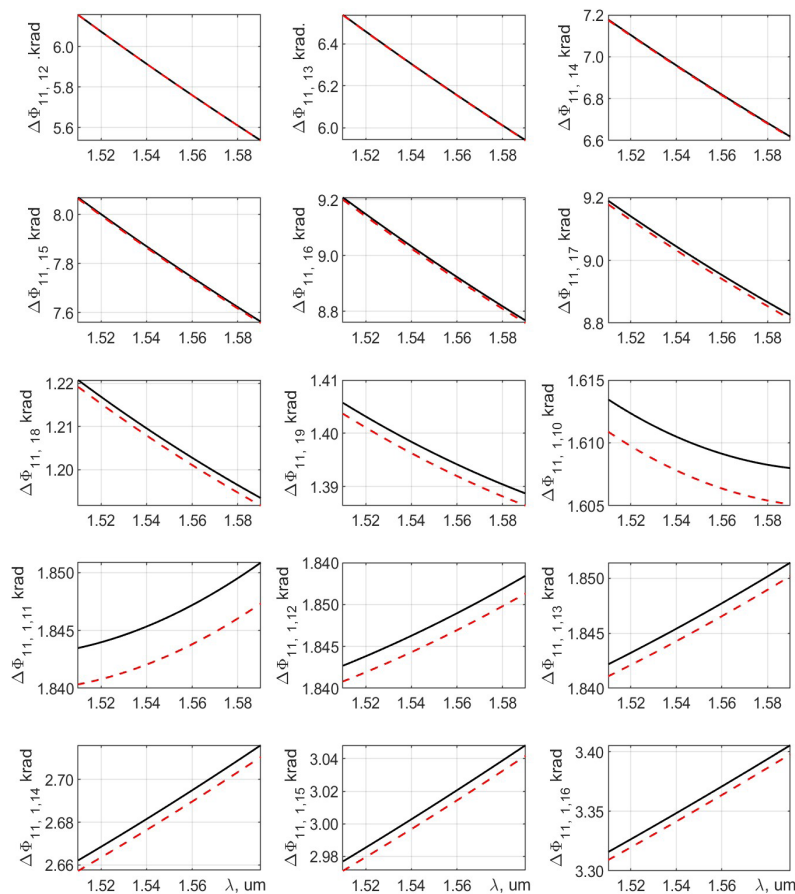


Рис. 5. Зависимости разности фаз $\Delta\Phi_{11,1\mu}$ между модами HE_{11} от длины световой волны λ чувствительного волокна Sen-SM-Sec, построенные для чистой воды (сплошные линии) и 25%-го водного раствора глицерина (пунктиры)

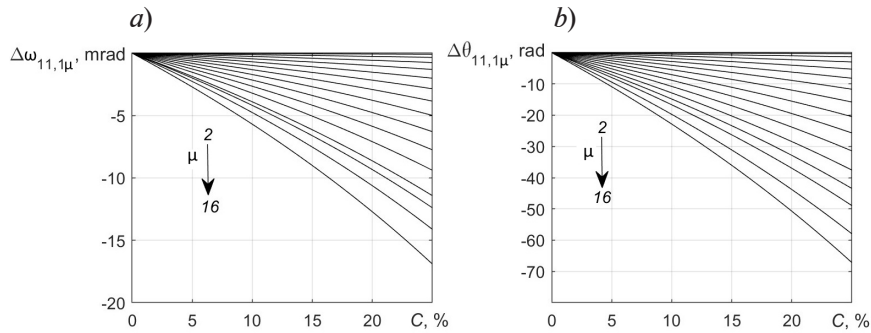


Рис. 6. Зависимости приращения частот $\Delta\omega_{11,\mu}$ (a) и фаз $\Delta\theta_{11,\mu}$ (b) гармонических компонент числовой последовательности $\nu(i)$ от концентрации C глицерина в воде; стрелки указывают изменение μ

На заключительном этапе были рассчитаны спектральные характеристики интерферометра при различных концентрациях глицерина в водном растворе (рис. 7). Видно, что они имеют сложный осциллирующий характер. На рис. 8 приведены модули Фурье-образов спектральных характеристик, вычисленные с помощью DFT, с дополнением СХ нулями и применением окна Хана с указанием позиций частот $\omega_{11,\mu}$ для 15 гармонических интерференционных компонент, соответствующих парам мод $HE_{11} - HE_{1\mu}$ ($\mu = 2 - 16$). Анализ данных на рис. 8 позволяет заключить, что компонентам с номерами $\mu = 5, 6, 8, 9, 12, 15, 16$ однозначно соответствуют максимумы Фурье-образа. Стоит отметить, что максимумы заметно уширены ввиду отличия зависимостей $\Delta\Phi_{11,\mu}(\lambda)$ от линейных, что можно интерпретировать как наличие частотной модуляции гармонических компонент. Позиции пар компонент с $\mu = 2$ и $\mu = 3$, $\mu = 4$ и $\mu = 14$, $\mu = 7$ и $\mu = 13$, $\mu = 10$ и $\mu = 11$ расположены очень близко друг к другу, и, как видно на рисунке, их отклики в Фурье-образе накладываются друг на друга и интерферируют. Также искажение формы максимумов вызвано эффектом спектрального просачивания в DFT (взаимное влияние боковых лепестков компонент). Кроме того, на все перечисленные компоненты оказывают влияние компоненты от пар мод $HE_{1\eta} - HE_{1\mu}$ с номерами $\eta \neq 1$, но, как мы убедились, их амплитуда на порядок меньше, поэтому их влияние менее значительно. Все

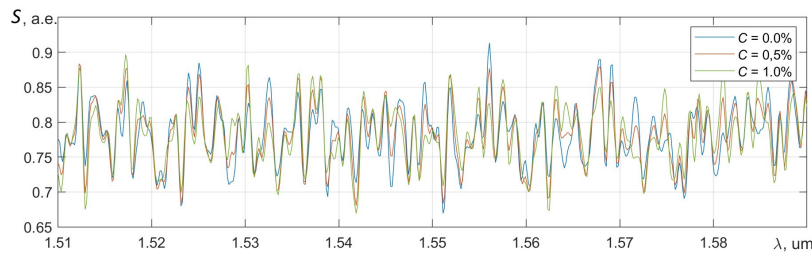


Рис. 7. Рассчитанные спектральные характеристики SMSMS-структуры для трех значений концентрации C глицерина в водном растворе

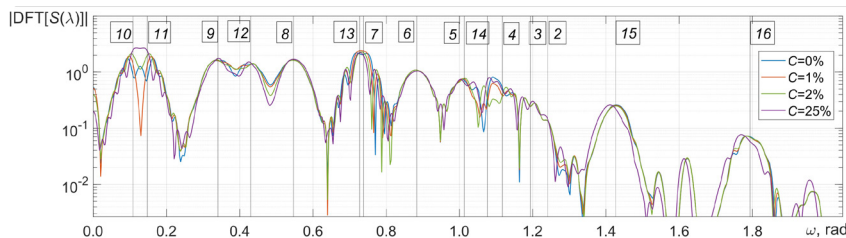


Рис. 8. Рассчитанные модули Фурье-образов числовых последовательностей $\nu(i)$ спектральных характеристик SMSMS-структуры для четырех значений концентрации C глицерина в водных растворах.

Положения $\omega_{11,\mu}$ 15 гармонических интерференционных компонент, соответствующих парам мод $HE_{11} - HE_{1\mu}$, для μ от 2 до 16 указаны вертикальными тонкими линиями с номерами μ в квадратиках

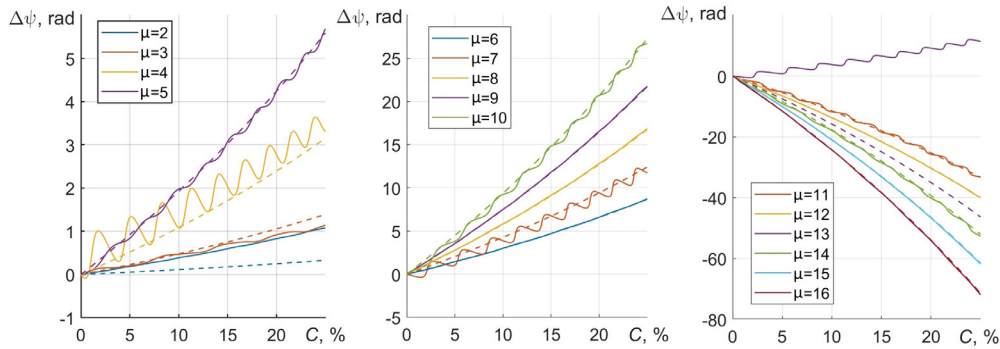


Рис. 9. Концентрационные зависимости приращения аргументов $\Delta\psi(\omega_i)$ DFT, полученные двумя способами: из рассчитанных спектральных характеристик для компонент $HE_{11}-HE_{1\mu}$ (сплошные линии) и по формуле (10) (пунктиры) (C – концентрация глицерина в водном растворе).

Для наглядности даны три графика для трех групп значений номера μ

указанные нежелательные эффекты ведут к появлению методической погрешности определения приращений начальных фаз гармонических компонент последовательности $\nu(i)$ спектральной характеристики, которые будут рассмотрены далее.

Таблица

Расчетные результаты для параметров чувствительности Фурье-образа интерферометра

μ	$\Delta\psi/\Delta C$, рад/%	$\Delta\psi/\Delta n$, рад/RIU	ΔC , %	Δn , 10^{-3} RIU
2	0,013	9,8	57,0	76,0
3	0,056	41,6	4,80	6,40
4	0,130	94,4	6,60	8,80
5	0,220	167	0,67	0,90
6	0,350	260	0,13	0,18
7	0,500	371	2,13	2,85
8	0,670	501	0,16	0,22
9	0,870	650	0,14	0,19
10	1,100	816	0,69	0,92
11	-1,330	-998	0,57	0,76
12	-1,600	-1184	0,13	0,17
13	-1,850	-1386	31,0	42,0
14	-2,080	-1557	0,60	0,80
15	-2,460	-1840	0,13	0,18
16	-2,860	-2137	0,18	0,24

Обозначения: μ – номер интерференционной компоненты; $\Delta\psi/\Delta C$, $\Delta\psi/\Delta n$ – величины чувствительности аргумента Фурье-образа к концентрации глицерина в водном растворе и к показателю преломления на длине волны 1,55 мкм; ΔC , Δn – методические погрешности определения концентрации глицерина и показателя преломления оптоволокна.

На рис. 9 приведены результаты расчета приращений аргументов $\Delta\psi(\omega_i)$ DFT от рассчитанных СХ при изменении концентрации глицерина в воде от 0 до 25%. Также приведены результаты расчетов ожидаемых значений $\Delta\psi(\omega_i)$ (см. формулу (10)) для случая полного отсутствия каких-либо источников методической погрешности. Для компонент с номерами $\mu = 2 - 5, 7, 10, 14, 16$ присутствуют заметные осциллирующие методические ошибки, типичные при применении DFT к оценке начальных фаз компонент полигармонического сигнала.

Необходимо отметить, что при обработке с помощью DFT, для компонент с $\mu = 1 - 10$, обладающих частотами $\omega_{11,\mu} < 0$, выбирались их зеркальные аналоги так же с $\omega_{11,\mu} < 0$, поэтому соответствующие им приращения $\Delta\psi(\omega_i) > 0$ (в отличие от приращений фаз $\Delta\theta_{11,\mu}$, представленных на рис. 6).

В таблице приведены итоговые расчетные результаты для всех рассматриваемых компонент: чувствительности аргументов Фурье-образа к концентрации $\Delta\psi/\Delta C$, рад/%, пересчитанные из них значения чувствительности аргументов Фурье-образа к показателю преломления раствора на длине волны 1,55 мкм $\Delta\psi/\Delta n$, рад/RIU, методические погрешности определения концентрации глицерина в растворе ΔC , %, и показателя преломления Δn . Наименьшие ошибки определения концентрации глицерина и показателя преломления составили значения примерно 0,13% и $1,7 \cdot 10^{-4}$ RIU, соответственно (выделены жирным шрифтом).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Xu W., Huang X. G., Pan J. S. Simple fiber-optic refractive index sensor based on Fresnel reflection and optical switch // *IEEE Sensors Journal*. 2012. Vol. 13. No. 5. Pp. 1571–1574.
2. Brientin A., Leduc D., Gaillard V., Girard M., Lupi C. Numerical and experimental study of a multimode optical fiber sensor based on Fresnel reflection at the fiber tip for refractive index measurement // *Optics & Laser Technology*. 2021. Vol. 143. November. P. 107315.
3. Гушин М. Г., Гагарина Д. О., Плясов С. А., Варганян Т. А. Создание и определение чувствительности волоконно-оптического рефрактометра на основе поверхностного плазмонного резонанса // *Оптика и спектроскопия*. 2021. Т. 129. № 9. С. 1212–1216.
4. Казанский Н. Л., Бутт М. А., Дегтярев С. А., Хонина С. Н. Достижения в разработке плазмонных волноводных датчиков для измерения показателя преломления // *Компьютерная оптика*. 2020. Т. 44. № 3. С. 295–318.
5. Мамичев Д. А., Кузнецов И. А., Маслова Н. Е., Занавескин М. Л. Оптические сенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса для высокочувствительного биохимического анализа // *Молекулярная медицина*. 2012. № 6. С. 19–27.
6. Pevac S., Donlagic D. Miniature fiber-optic Fabry–Perot refractive index sensor for gas sensing with a resolution of 5×10^{-9} RIU // *Optics Express*. 2018. Vol. 26. No. 18. Pp. 23868–23882.
7. Wang K., Dong X., Köhler M. H., Kienle P., Bian Q., Jakobi M., Koch A. W. Advances in optical fiber sensors based on multimode interference (MMI): A review // *IEEE Sensors Journal*. 2020. Vol. 21. No. 1. Pp. 132–142.
8. Chapalo I., Stylianou A., Mégret P., Theodosiou A. Advances in optical fiber speckle sensing: A comprehensive review // *Photonics*. 2024. Vol. 11. No. 4. P. 299.
9. Mar-Abundis N., Fuentes-Rubio Y. A., Domínguez-Cruz R. F., Guzmán-Sepúlveda J. R. Sugar detection in aqueous solution using an SMS fiber device // *Sensors*. 2023. Vol. 23. No. 14. P. 6289.
10. Li Y., Liu Z., Jian S. Multimode interference refractive index sensor based on coreless fiber // *Photonic Sensors*. 2014. Vol. 4. March. Pp. 21–27.
11. Khanikar T., Karki D., Su Y. D., Naeem K., Ohodnicki P. Multimode interference-based fiber optic sensors using single mode/no-core/single mode (SNS) configuration // *Proceedings of SPIE*. Vol. 13044: Optical Waveguide and Laser Sensors III. Lieberman R. A., Sanders G. A., Buric M. P. (Eds.). 2024. 27 June. Pp. 114–122.
12. Ma Y., Qiao X., Guo T., Wang R., Zhang J., Weng Y., Rong Q., Hu M., Feng Zh. Mach – Zehnder interferometer based on a sandwich fiber structure for refractive index measurement // *IEEE Sensors Journal*. 2012. Vol. 12. No. 6. Pp. 2081–2085.
13. Xiong R., Meng H., Yao Q., Huang B., Liu Y., Xue H., Tan Ch., Huang X. Simultaneous measurement of refractive index and temperature based on modal interference // *IEEE Sensors Journal*. 2014. Vol. 14. No. 8. Pp. 2524–2528.
14. Wo J., Sun Q., Li X., Zhang J., Liu D., Shum P. A compact all fiber refractive index sensor based on modal interference // *Proceedings of IEEE Sensors*. 2012. 1 October. Pp. 1–4.
15. Юсупова Л. И., Иванов О. В. Интерферометры на основе вставок оптических волокон с тонкой сердцевиной SM600 и SM450 // *Радиотехника*. 2019. Т. 83. № 9. С. 74–78.
16. Duan D. W., Rao Y. J., Xu L. C., Zhu T., Wu D., Yao J. In-fiber Mach–Zehnder interferometer formed by large lateral offset fusion splicing for gases refractive index measurement with high sensitivity // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2011. Vol. 160. No. 1. Pp. 1198–1202.
17. Tian Z., Yam S. S., Loock H. P. Single-mode fiber refractive index sensor based on core-offset attenuators // *IEEE Photonics Technology Letters*. 2008. Vol. 20. No. 16. Pp. 1387–1389.
18. Zhang Y., Zhou A., Qin B., Deng H., Liu Z., Yang J., Yuan L. Refractive index sensing characteristics of single-mode fiber-based modal interferometers // *Journal of Lightwave Technology*. 2014. Vol. 32. No. 9. Pp. 1734–1740.
19. Wang P., Brambilla G., Ding M., Semenova Y., Wu Q., Farrell G. Investigation of single-mode–multimode–single-mode and single-mode–tapered-multimode–single-mode fiber structures and their application for refractive index sensing // *Journal of the Optical Society of America B*. 2011. Vol. 28. No. 5. Pp. 1180–1186.
20. Oppenheim A. V., Schaffer R. W. Discrete-time signal processing. Pearson New International Edition. London: Pearson Education Limited, 2014. 1047 p.

21. **Tripathi S. M., Kumar A., Varshney R. K., Tripathi S. M., Kumar A., Varshney R. K., Kumar Y. B. P., Marin E., Meunier J. P.** Strain and temperature sensing characteristics of single-mode–multimode–single-mode structures // *Journal of Lightwave Technology*. 2009. Vol. 27. No. 13. Pp. 2348–2356.
22. **Tripathi S. M., Kumar A., Kumar M., Bock W. J.** Temperature-insensitive fiber-optic devices using multimode interference effect // *Optics Letters*. 2012. Vol. 37. No. 22. Pp. 4570–4572.
23. **Markel V. A.** Introduction to the Maxwell Garnett approximation: tutorial // *Journal of the Optical Society of America A*. 2016. Vol. 33. No. 7. Pp. 1244–1256.
24. **Kedenburg S., Vieweg M., Gissibl T., Giessen H.** Linear refractive index and absorption measurements of nonlinear optical liquids in the visible and near-infrared spectral region // *Optical Materials Express*. 2012. Vol. 2. No. 11. Pp. 1588–1611.
25. **Abbate G., Bernini U., Ragozzino E., Somma F.** The temperature dependence of the refractive index of water // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1978. Vol. 11. No. 8. P. 1167.
26. **Nyakuchena M., Juntunen C., Shea P., Sung Y.** Refractive index dispersion measurement in the short-wave infrared range using synthetic phase microscopy // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2023. Vol. 25. No. 34. Pp. 23141–23149.
27. **Takamura K., Fischer H., Morrow N. R.** Physical properties of aqueous glycerol solutions // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2012. Vol. 98–99. November. Pp. 50–60.

REFERENCES

1. **Xu W., Huang X. G., Pan J. S.**, Simple fiber-optic refractive index sensor based on Fresnel reflection and optical switch, *IEEE Sens. J.* 13 (5) (2012) 1571–1574.
2. **Brientin A., Leduc D., Gaillard V., et al.**, Numerical and experimental study of a multimode optical fiber sensor based on Fresnel reflection at the fiber tip for refractive index measurement, *Opt. Laser Technol.* 143 (Nov) (2021) 107315.
3. **Gushchin M. G., Gagarinova D. O., Plyastsov S. A., Vartanyan T. A.**, Development and determination of sensitivity of a fiber-optic refractometer based on surface plasmon resonance, *Optics and Spectroscopy*. 129 (9) (2021) 1212–1216 (in Russian).
4. **Kazanskiy N. L., Butt M. A., Degtyarev S. A., Khonina S. N.**, Achievements in the development of plasmonic waveguide sensors for measuring the refractive index, *Computer Optics*. 44 (3) (2020) 295–318 (in Russian).
5. **Mamichev D. A., Kuznetsov I. A., Maslova N. E., Zanaevskiy M. L.**, Optical sensors based on surface plasmon resonance for high-sensitive biochemical analysis, *Molecular Medicine*. (6) (2012) 19–27 (in Russian).
6. **Pevec S., Donlagic D.**, Miniature fiber-optic Fabry-Perot refractive index sensor for gas sensing with a resolution of 5×10^{-9} RIU, *Opt. Express*. 26 (18) (2018) 23868–23882.
7. **Wang K., Dong X., Köhler M. H., et al.**, Advances in optical fiber sensors based on multimode interference (MMI): A review, *IEEE Sens. J.* 21 (1) (2020) 132–142.
8. **Chapalo I., Stylianou A., Mégret P., Theodosiou A.**, Advances in optical fiber speckle sensing: A comprehensive review, *Photonics*. 11 (4) (2024) 299.
9. **Mar-Abundis N., Fuentes-Rubio Y. A., Domínguez-Cruz R. F., Guzmán-Sepúlveda J. R.**, Sugar detection in aqueous solution using an SMS fiber device, *Sensors*. 23 (14) (2023) 6289.
10. **Li Y., Liu Z., Jian S.**, Multimode interference refractive index sensor based on coreless fiber, *Photon. Sens.* 4 (March) (2014) 21–27.
11. **Khanikar T., Karki D., Su Y. D., et al.**, Multimode interference-based fiber optic sensors using single mode/no-core/single mode (SNS) configuration, *Proc. SPIE*. Vol. 13044: Optical Waveguide and Laser Sensors III; Lieberman R. A., Sanders G. A., Buric M. P. (Eds.). 27 June (2024) 114–122.
12. **Ma Y., Qiao X., Guo T., et al.**, Mach – Zehnder interferometer based on a sandwich fiber structure for refractive index measurement, *IEEE Sens. J.* 12 (6) (2012) 2081–2085.
13. **Xiong R., Meng H., Yao Q., et al.**, Simultaneous measurement of refractive index and temperature based on modal interference, *IEEE Sens. J.* 14 (8) (2014) 2524–2528.
14. **Wo J., Sun Q., Li X., et al.**, A compact all fiber refractive index sensor based on modal interference, *Proc. IEEE Sens.* (1 Oct) (2012) 1–4.
15. **Yusupova L. I., Ivanov O. V.**, Interferometers based on insertions of thin-core optical fibers SM600 and SM450, *J. Radioengineering*. 83 (9) (2019) 74–78 (in Russian).



16. Duan D. W., Rao Y. J., Xu L. C., et al., In-fiber Mach–Zehnder interferometer formed by large lateral offset fusion splicing for gases refractive index measurement with high sensitivity, *Sens. Actuators B-Chem.* 160 (1) (2011) 1198–1202.
17. Tian Z., Yam S. S., Loock H. P., Single-mode fiber refractive index sensor based on core-offset attenuators, *IEEE Photon. Technol. Lett.* 20 (16) (2008) 1387–1389.
18. Zhang Y., Zhou A., Qin B., et al., Refractive index sensing characteristics of single-mode fiber-based modal interferometers, *J. Light. Technol.* 32 (9) (2014) 1734–1740.
19. Wang P., Brambilla G., Ding M., et al., Investigation of single-mode–multimode–single-mode and single-mode–tapered–multimode–single-mode fiber structures and their application for refractive index sensing, *J. Opt. Soc. Am. B.* 28 (5) (2011) 1180–1186.
20. Oppenheim A. V., Schaffer R. W., *Discrete-time signal processing.* Pearson New Int. Ed., Pearson Education Limited, London, 2014.
21. Tripathi S. M., Kumar A., Varshney R. K., et al., Strain and temperature sensing characteristics of single-mode–multimode–single-mode structures, *J. Light. Technol.* 27 (13) (2009) 2348–2356.
22. Tripathi S. M., Kumar A., Kumar M., Bock W. J., Temperature-insensitive fiber-optic devices using multimode interference effect, *Opt. Lett.* 37 (22) (2012) 4570–4572.
23. Markel V. A., Introduction to the Maxwell Garnett approximation: Tutorial, *J. Opt. Soc. Am. A.* 33 (7) (2016) 1244–1256.
24. Kedenburg S., Vieweg M., Gissibl T., Giessen H., Linear refractive index and absorption measurements of nonlinear optical liquids in the visible and near-infrared spectral region, *Opt. Mater. Express.* 2 (11) (2012) 1588–1611.
25. Abbate G., Bernini U., Ragozzino E., Somma F., The temperature dependence of the refractive index of water, *J. Phys. D. Appl. Phys.* 11 (8) (1978) 1167.
26. Nyakuchena M., Juntunen C., Shea P., Sung Y., Refractive index dispersion measurement in the short-wave infrared range using synthetic phase microscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25 (34) (2023). 23141–23149.
27. Takamura K., Fischer H., Morrow N. R., Physical properties of aqueous glycerol solutions, *J. Pet. Sci. Eng.* 98–99 (Nov) (2012) 50–60.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАВАЛИШИНА Любовь Дмитриевна – стажер-исследователь научной лаборатории волоконной оптики Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
l.zavalishina9121@mail.ru
ORCID: 0009-0009-2008-7266

МАРКВАРТ Александр Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
markvart_aa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

ЗАРИПОВ Артур Эдуардович – студент Института электроники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
artur-zaripov-2001@list.ru

БИСЯРИН Михаил Александрович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры радиофизики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия.

199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9
bisyarin@spbu.ru
ORCID: 0000-0003-3891-1339

ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

leonid@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5988-1429

УШАКОВ Николай Александрович – доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

n.ushakoff@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3480-2779

THE AUTHORS

ZAVALISHINA Liubov D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

l.zavalishina9121@mail.ru

ORCID: 0009-0009-2008-7266

MARKVART Aleksandr A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

markvart_aa@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-8080-0830

ZARIPOV Artur E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

artur-zaripov-2001@list.ru

ORCID: 0009-0002-1689-6940

BISYARIN Mikhail A.

St. Petersburg State University

7–9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia

m.bisyarin@spbu.ru

ORCID: 0000-0003-3891-1339

LIOKUMOVICH Leonid L. B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

leonid@spbstu.ru

ORCID: 0000-0001-5988-1429

USHAKOV Nikolai A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

n.ushakoff@spbstu.ru

ORCID: 0000-0002-3480-2779

Статья поступила в редакцию 07.05.2025. Одобрена после рецензирования 14.05.2025. Принята 14.05.2025.

Received 07.05.2025. Approved after reviewing 14.05.2025. Accepted 14.05.2025.

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ**

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»**

ТОМ 18, № 4, 2025

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11.12.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В. К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А. Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А. С. Колгатина – переводчик
Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 552-62-16

Сайт <https://physmath.spbstu.ru/>

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

Подписано в печать 30.12.2025 г. Дата выхода в свет 28.02.2026 г.

Формат 60x84/8. Печать цифровая.

Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .

Цена: Бесплатно.

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного ИЦ "ИКИ",
в Издательско-полиграфическом центре
Санкт-Петербургского политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ
в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
Физико-математические науки»

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание ISSN 2304-9782 (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 1.1.8., 1.1.9., 1.3.2., 1.3.3., 1.3.4., 1.3.5., 1.3.6., 1.3.7., 1.3.8., 1.3.11., 1.3.19.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word**.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без знаков переноса. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться **ДОСРОЧНО**.

Е-mail: physics@spbstu.ru,

Тел. редакции 8 (812) 552-62-16.

Сайт журнала: <https://physmath.spbstu.ru/>