

СОДЕРЖАНИЕ

Том 86, номер 12, 2022

Нанооптика, фотоника и когерентная спектроскопия

- Влияние керровской нелинейности на формирование малопериодных оптико-терагерцовых солитонов
А. А. Калинович, И. Г. Захарова, С. В. Сазонов 1678
- Структурированные оптотермические ловушки
С. П. Котова, Н. Н. Лосевский, А. М. Майорова, Е. В. Разуева, С. А. Самагин 1685
- Исследование рассеяния света на эмульсии воды в масле с целью контроля содержания воды в несмешивающейся жидкости
А. И. Пономарев, О. А. Заякин, С. П. Котова, Н. Н. Лосевский, Т. Н. Сапцина 1690
- Динамика предельно коротких импульсов в оптически анизотропной среде с примесными двухуровневыми системами в рамках подхода Глаубера
М. Б. Белоненко, Н. Н. Конобеева 1694
- Рассеяние предельно короткого импульса на углеродной нанотрубке
Н. Н. Конобеева, М. Б. Белоненко 1700
- Графеновые наноленты, модифицированные примесными атомами бора, как основа для двумерных фотонных кристаллов
И. В. Запороцкова, С. В. Борознин, М. Б. Белоненко, Е. С. Дрючков, Ю. В. Бутенко 1704
- Вращение плоскости поляризации трехмерного предельно короткого импульса в анизотропном фотонном кристалле из углеродных нанотрубок
Ю. В. Двужилова, И. С. Двужилов, Т. Б. Шилов, И. А. Челныцев, М. Б. Белоненко 1708
- Исследование возможности управления показателями преломления и отражения в слоистых структурах с дефектами
К. Ю. Вережкина, И. Ю. Вережкин, В. В. Яцышен, М. Б. Белоненко 1713
- Температурная зависимость люминесценции апконверсионных наночастиц $\text{YVO}_4:\text{Yb}$, Er в диапазоне 285–325 K
А. Г. Шмелев, Д. К. Жарков, А. В. Леонтьев, В. Г. Никифоров, Д. Н. Петров, М. А. Крылов, Х. Э. Клавихо, В. С. Лобков 1719
- Особенности оптического детектирования магнитного резонанса в наноалмазах
А. В. Леонтьев, Д. К. Жарков, А. Г. Шмелев, В. Г. Никифоров, В. С. Лобков, Е. О. Митюшкин, М. Х. Алькатани 1724
- Поляризация люминесценции апконверсионных единичных наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$
Д. К. Жарков, В. Г. Никифоров, А. Г. Шмелев, А. В. Леонтьев, Е. О. Митюшкин, Н. М. Лядов, Н. И. Нургазизов, А. П. Чукланов, А. В. Пашкевич, В. С. Лобков 1727
- Температурные зависимости структурно-чувствительных полос в ИК-спектрах поливинилхлорида
Д. И. Камалова, О. А. Кочурова, М. Э. Сибгатуллин 1731
- Спектральные свойства фталоцианина алюминия, иммобилизованного на подложках из серебряных нанопроволок
Е. В. Китущина, Е. П. Кожина, А. А. Пирязев, С. А. Бедин, А. В. Лобанов 1736
- Особенности зарядового отклика сегнетоэлектрических полимеров при использовании графен-содержащих электродов
В. В. Кочервинский, М. А. Шапелина, С. А. Бедин, С. А. Баскаков, Ю. М. Шульга 1742

Распределение механических напряжений вокруг пор трековых мембран при их растяжении	
<i>В. Н. Гумирова, И. В. Разумовская, А. В. Наумов</i>	1746
Гигантская анизотропия ширины линий эпр центров Mn^{2+} в узкощелевых полупроводниках $Pb_{1-x}Mn_xS$ и $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$)	
<i>В. А. Уланов, Р. Р. Зайнуллин, И. В. Яцык, Р. И. Калимуллин, А. М. Синицин, Т. А. Н. Хушея</i>	1751
Структура и параметры магнитных взаимодействий в примесных центрах Nb^{4+} в кристалле BaF_2 : данные ЭПР	
<i>В. А. Уланов, Р. Б. Зарипов, Р. Р. Зайнуллин, Р. И. Калимуллин</i>	1757
Оптимизация параметров структуры нановолновода из $LiNbO_3$ с периодической поляризацией для генерации сверхширокополосных бифотонов в ближнем инфракрасном диапазоне	
<i>О. А. Ермишев, М. А. Смирнов, А. Ф. Хайруллин, Н. М. Арсланов</i>	1764
Неадиабатический режим быстрой квантовой памяти на атомно-резонаторной системе, реализуемый оптимальным включением контролирующего поля	
<i>Ю. А. Харламова, Н. М. Арсланов, С. А. Моисеев</i>	1770

Физика авроральных явлений

Утренние геомагнитные бухты в полярных широтах и их магнитосферные источники	
<i>Н. Г. Клейменова, И. В. Дэспирак, А. А. Любич, Л. М. Малышева, Л. И. Громова, С. В. Громов</i>	1776
Полярные геомагнитные возмущения и авроральные суббури в магнитную бурю 20 апреля 2020 г.	
<i>Л. И. Громова, Н. Г. Клейменова, И. В. Дэспирак, С. В. Громов, А. А. Любич, Л. М. Малышева</i>	1785
Сезонные особенности проявления фазовых флуктуаций навигационных сигналов и ошибок позиционирования в авроральной и полярной ионосфере	
<i>И. И. Шагимуратов, М. В. Филатов, И. И. Ефишов, Н. Ю. Тепеницына, Г. А. Якимова</i>	1792
Статистическая связь флюенса магнитосферных электронов с энергией более 2 МэВ с геомагнитными и межпланетными характеристиками в 1987–2021 гг.	
<i>О. Н. Крякунова, А. В. Белов, А. Ф. Яковец, А. А. Абунин, И. Л. Цепакина, Б. Б. Сейфуллина, М. А. Абунина, Н. Ф. Николаевский, Н. С. Шлык</i>	1799
Особенности структуры высыпаний дневного полярного каспа при северном межпланетном магнитном поле	
<i>В. Г. Воробьев, О. И. Ягодкина</i>	1804
Событие GLE73 (28.10.2021) в солнечных космических лучах	
<i>Ю. В. Балабин, Б. Б. Гвоздевский, А. В. Германенко, Е. А. Маурчев, Е. А. Михалко</i>	1810
Влияние пучка ускоренных электронов с энергией 1 МэВ на рост и микрофлору картофеля	
<i>Н. С. Чуликова, А. А. Малюга, У. А. Близнюк, А. П. Черняев, П. Ю. Борщеговская, С. А. Золотов, А. Д. Никитченко, Я. В. Зубрицкая, Д. С. Юров</i>	1817

Contents

Vol. 86, No. 12, 2022

Nano-Optics, Photonics, and Coherent Spectroscopy

- Effect of Kerr nonlinearity on the formation of few-cycle optical-terahertz solitons
A. A. Kalinovich, I. G. Zakharova, S. V. Sazonov 1678
- Structured optothermal traps
S. P. Kotova, N. N. Losevsky, A. M. Mayorova, E. V. Razueva, S. A. Samagin 1685
- Investigation of light scattering on water-in-oil emulsions to control the water content in an immiscible liquid
A. I. Ponomarev, O. A. Zayakin, S. P. Kotova, N. N. Losevsky, T. N. Sapsina 1690
- Dynamics of extremely short pulses in an anisotropic optical medium with two-level impurity systems in the framework of Glauber approach
M. B. Belonenko, N. N. Konobeeva 1694
- Scattering of an extremely short pulse on a carbon nanotube
N. N. Konobeeva, M. B. Belonenko 1700
- Graphene nanofilms modified with impurity boron atoms as a basis for two-dimensional photonic crystals
I. V. Zaporotskova, S. V. Boroznin, M. B. Belonenko, E. S. Drychkov, Y. V. Butenko 1704
- Rotation of the polarization plane of a three-dimensional few cycle pulse in an anisotropic photonic crystal from carbon nanotubes
Yu. V. Dvuzhilova, I. S. Dvuzhilov, T. B. Shilov, I. A. Chelnintsev, M. B. Belonenko 1708
- Study of the possibility of control of the refractive and reflection indices in layered structures with defects
K. Yu. Verevkin, I. Yu. Verevkin, V. V. Yatsyshen, M. B. Belonenko 1713
- YVO₄:Yb, Er upconversion nanoparticles relative spectral line temperature dependency in the range of 285–305 K
A. G. Shmelev, D. K. Zharkov, A. V. Leontyev, V. G. Nikiforov, D. N. Petrov, M. F. Krylov, J. E. Clavijo, V. S. Lobkov 1719
- Optically detected magnetic resonance signal features in nanodiamond samples
A. V. Leontyev, D. K. Zharkov, A. G. Shmelev, V. G. Nikiforov, V. S. Lobkov, E. O. Mityushkin, M. H. Alkahtani 1724
- Polarization of the luminescence of upconversion single YNaF₄:Yb,Tm nanoparticles
D. K. Zharkov, V. G. Nikiforov, A. G. Shmelev, A. V. Leontyev, E. O. Mityushkin, N. M. Lyadov, N. I. Nurgazizov, A. P. Chuklanov, A. V. Pashkevich, V. S. Lobkov 1727
- Temperature dependences of structure-sensitive bands in the IR spectra of polyvinyl chloride
D. I. Kamalova, O. A. Kochurova, M. E. Sibgatullin 1731
- Spectral properties of aluminum phthalocyanine immobilized on silver nanowire substrates
E. V. Kitushina, E. P. Kozhina, A. A. Piryazev, S. A. Bedin, A. V. Lobanov 1736

Features of the charge response of ferroelectric polymers when using graphene-containing electrodes <i>V. V. Kochervinskii, M. A. Shapetina, S. A. Bedin, S. A. Baskakov, Yu. M. Shulga</i>	1742
The distribution of mechanical stress around track etched membrane pores while sample elongation <i>V. N. Gumirova, I. V. Razumovskaya, A. V. Naumov</i>	1746
Giant anisotropy of the width of the EPR lines of Mn^{2+} centers in narrow-gap semiconductors $Pb_{1-x}Mn_xS$ and $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$) <i>V. A. Ulanov, R. R. Zainullin, I. V. Yatsyk, R. I. Kalimullin, A. M. Sinicin, T. A. H. Housheya</i>	1751
Structure and parameters of magnetic interactions in Nb^{4+} impurity centers in the BaF_2 crystal: EPR data <i>V. A. Ulanov, R. B. Zaripov, R. R. Zainullin, R. I. Kalimullin</i>	1757
Optimization of the parameters of the structure of a $LiNbO_3$ nanowaveguide with periodic polarization for the generation of ultrabroadband biphotons in the near infrared range <i>O. A. Ermishev, M. A. Smirnov, A. F. Khairullin, N. M. Arslanov</i>	1764
Non-adiabatic regime of fast quantum memory on an atomic resonator system implemented by optimal turn on of the control field <i>Yu. A. Kharlamova, N. M. Arslanov, S. A. Moiseev</i>	1770

Physics of Auroral Phenomena

Morning geomagnetic bays at polar latitudes and their magnetospheric sources <i>N. G. Kleimenova, I. V. Despirak, A. A. Lubchich, L. M. Malysheva, L. I. Gromova, S. V. Gromov</i>	1776
Polar geomagnetic disturbances and auroral substorms in the magnetic storm on April 20, 2020 <i>L. I. Gromova, N. G. Kleimenova, I. V. Despirak, S. V. Gromov, A. A. Lubchich, L. M. Malysheva</i>	1785
Seasonal features of phase fluctuations occurrence of navigation signals and positioning errors at auroral and polar ionosphere <i>I. I. Shagimuratov, M. V. Filatov, I. I. Efshov, N. Yu. Tepenitsyna, G. A. Yakimova</i>	1792
Statistical relationship of the fluence of magnetospheric electrons with the energy more than 2 MeV with geomagnetic and interplanetary characteristics in 1987–2021 <i>O. N. Kryakunova, A. V. Belov, A. F. Yakovets, A. A. Abunin, I. L. Tsepakina, B. B. Seifullina, M. A. Abunina, N. F. Nikolaevsky, N. S. Shlyk</i>	1799
Features of the daytime polar cusp precipitation structure during the northward interplanetary magnetic field <i>V. G. Vorobjev, O. I. Yagodkina</i>	1804
GLE73 28.10.2021 event in solar cosmic rays <i>Yu. V. Balabin, B. B. Gvozdevsky, A. V. Germanenko, E. A. Mauricev, E. A. Michalko</i>	1810
Impact of 1 MeV electron beam irradiation on phenology and microflora of potatoes <i>N. S. Chulikova, A. A. Malyuga, U. A. Bliznyuk, A. P. Chernyaev, P. Yu. Borshegovskaya, S. A. Zolotov, A. D. Nikitchenko, Ya. V. Zubritskaya, D. S. Yurov</i>	1817

Нанооптика, фотоника и когерентная спектроскопия

Редакторы тематического выпуска
чл.-корр. РАН **А. В. Наумов**
чл.-корр. РАН **А. А. Калачев**

УДК 535.03:519.06

ВЛИЯНИЕ КЕРРОВСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ НА ФОРМИРОВАНИЕ МАЛОПЕРИОДНЫХ ОПТИКО-ТЕРАГЕРЦОВЫХ СОЛИТОНОВ

© 2022 г. А. А. Калинович^{1, *}, И. Г. Захарова¹, С. В. Сазонов^{1, 2, 3}¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия²Федеральное государственное бюджетное учреждение

“Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)”, Москва, Россия

*E-mail: kalinovich@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследован процесс генерации широкополосного терагерцового излучения высокоинтенсивным оптическим импульсом длительностью в несколько периодов колебаний. На основе численного моделирования обобщенной системы Ядзимы–Ойкавы показано, что при определенных условиях процесс генерации сопровождается формированием устойчивых оптико-терагерцовых солитонов.

DOI: 10.31857/S0367676522120134

ВВЕДЕНИЕ

Терагерцовые технологии имеют широкий спектр применения. Благодаря их быстрому развитию открываются широкие возможности для исследователей в области физики, химии, биологии, медицины и т.д. [1, 2]. Говоря о методах генерации терагерцового излучения, следует выделить метод, основанный на оптическом выпрямлении, как наиболее эффективный среди прочих [3–5]. Генерируемый терагерцовый импульс содержит приблизительно один период колебаний в соответствующем диапазоне. Это означает, что сигнал обладает свойствами чрезвычайно коротких импульсов. Таким образом, известный подход медленно меняющейся огибающей в данном случае неприменим в теоретическом анализе.

Впервые механизм оптического выпрямления был теоретически и экспериментально исследован в [3–5]. Условие синхронизма, необходимое для эффективной генерации, имеет черенковскую форму $v_g \cos \Theta = v_{ph}$. Здесь v_g – групповая скорость оптического импульса, v_{ph} – фазовая скорость терагерцового сигнала, Θ – угол между направлениями распространения оптического и терагерцового сигналов [3–5]. Хорошо известное условие резонанса Захарова–Бенни (ЗБ) $v_g = v_{ph}$ следует из условия Черенкова в коллинеарном режиме ($\Theta = 0$) [6, 7].

Для описания процесса генерации терагерцового импульса из широкополосного оптического импульса мы используем приближение медленно

меняющейся огибающей (ММО) ψ для электрического поля оптической составляющей и приближение однонаправленного распространения [8] для электрического поля E_T терагерцовой компоненты [9, 10]. Это дает нам систему двух нелинейно-связанных уравнений, аналогичную интегрируемой системе Ядзимы–Ойкавы (ЯО), полученной ранее для описания взаимодействия ионно-звуковой и ленгмюровской волн в плазме [11].

В применении к генерации широкополосной терагерцовой составляющей с помощью квази-монохроматического оптического сигнала система ЯО описывает случай резонанса ЗБ, когда собственная нелинейность терагерцовой составляющей пренебрежимо мала. Соответствующее солитонное решение представляет собой связанное стационарное состояние оптической и терагерцовой компонент со сдвигом в “красную” область несущей частоты оптического импульса [9, 10]. Данный сдвиг четко обозначает физический механизм генерации как результат распада каждого фотона оптического диапазона на терагерцовый фотон и другой “покрасневший” оптический фотон. В [12] обозначенный “красный” сдвиг был продемонстрирован экспериментально.

В [13] система ЯО была обобщена на случай интенсивного и короткого оптического сигнала с относительной длительностью всего до нескольких световых колебаний. В этом случае для оптической компоненты необходим учет групповой дисперсии третьего порядка, дисперсии квадратичной оптико-терагерцовой нелинейности и

бездисперсионной кубической (керровской) нелинейности. В то же время в данном обобщении при описании терагерцовой составляющей учтена ее дисперсия, собственная квадратичная нелинейность и квадратичная нелинейность, несущая информацию о фазе оптического импульса (фазовая нелинейность). В [13] показана интегрируемость обобщенной системы ЯО при жестких ограничениях на коэффициенты соответствующих уравнений. Там же представлено односолитонное решение данной системы.

Отмеченные выше жесткие ограничения на коэффициенты не могут быть реализованы в экспери-

ментальных условиях. Поэтому в настоящей работе процесс генерации широкополосного терагерцового сигнала мощным оптическим импульсом длительностью в несколько колебаний исследуется с помощью численного моделирования, без упомянутых ограничений на коэффициенты.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Обобщенная система ЯО, описывающая представленный во Введении процесс генерации, при выполнении условия ЗБ имеет вид [13]:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{z}} &= -\frac{k_2}{2} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial \bar{\tau}^2} + i \frac{k_3}{6} \frac{\partial^3 \bar{\Psi}}{\partial \bar{\tau}^3} + a \bar{E}_T \bar{\Psi} - ib \bar{\Psi} \frac{\partial \bar{E}_T}{\partial \bar{\tau}} - i \mu \bar{E}_T \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\tau}} + \varepsilon |\bar{\Psi}|^2 \bar{\Psi}, \\ \frac{\partial \bar{E}_T}{\partial \bar{z}} &= \alpha \frac{\partial^3 \bar{E}_T}{\partial \bar{\tau}^3} - \beta \bar{E}_T \frac{\partial \bar{E}_T}{\partial \bar{\tau}} - \sigma \frac{\partial}{\partial \bar{\tau}} |\bar{\Psi}|^2 + iq \frac{\partial}{\partial \bar{\tau}} \left(\bar{\Psi}^* \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\tau}} - \bar{\Psi} \frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial \bar{\tau}} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\bar{\tau} = t - \bar{z}/v_g = t - \bar{z}/v_T$, $\alpha = \frac{\pi}{c} \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial \omega^2} \right)_{\omega=0}$, $\beta = \frac{4\pi \chi^{(2)}(0;0)}{c}$, $\sigma = \frac{4\pi \chi^{(2)}(\omega, -\omega)}{cn_T}$, $q = \frac{4\pi}{c} \left(\frac{\partial \chi^{(2)}}{\partial \omega_1} \right)_{\omega_1=\omega, \omega_2=\omega}$, $k_2 = \frac{2\pi}{c} \left(2 \frac{\partial \chi}{\partial \omega} + \omega \frac{\partial^2 \chi}{\partial \omega^2} \right)$, $k_3 = \frac{2\pi}{c} \left(3 \frac{\partial^2 \chi}{\partial \omega^2} + \omega \frac{\partial^3 \chi}{\partial \omega^3} \right)$, $a = \frac{4\pi \omega}{c} \chi^{(2)}(\omega, 0)$, $b = \frac{4\pi}{c} \chi^{(2)}(\omega, 0)$, $\mu = \frac{4\pi}{c} \times \left(\chi^{(2)}(\omega, 0) + \omega \frac{\partial}{\partial \omega} \chi^{(2)}(\omega, 0) \right)$, $\varepsilon = \frac{6\pi \omega}{c} \times \chi^{(3)}(\omega, \omega, -\omega) \chi$, $\chi^{(2)}$ и $\chi^{(3)}$ – линейная, квадратичная и кубическая восприимчивости соответственно, ω – несущая частота оптического импульса, n_T – терагерцовый показатель преломления, c – скорость света в вакууме.

В правой части первого уравнения (1) первые два слагаемых описывают дисперсию групповой скорости (ДГС) второго и третьего порядков соответственно оптической компоненты. Третье слагаемое описывает квадратичную оптико-терагерцовую нелинейность, а четвертое и пятое слагаемые – дисперсию данной нелинейности. Последнее слагаемое соответствует керровской нелинейности.

В правой части второго уравнения системы (1) первые два слагаемых описывают соответственно собственные дисперсию и нелинейность терагерцовой компоненты. Третье, квадратично-нелинейное, слагаемое играет ключевую роль в генерации терагерцового сигнала. Последнее слагаемое соответствует упомянутой во Введении фазовой нелинейности [14].

Отметим, что при $k_3 = b = \mu = \alpha = \beta = q = 0$ (1) переходит в систему ЯО.

При численном моделировании используем систему (1) в нормированном виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial z} &= i D_{k_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} + D_{k_3} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial \tau^3} - i E_T \Psi - \frac{1}{N} \Psi \frac{\partial E_T}{\partial \tau} - \frac{2}{N} E_T \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + i \gamma |\Psi|^2 \Psi, \\ \frac{\partial E_T}{\partial z} &= \frac{1}{4N^2} \frac{\partial^3 E_T}{\partial \tau^3} - \frac{1}{N} E_T \frac{\partial E_T}{\partial \tau} - D_\sigma \frac{\partial}{\partial \tau} |\Psi|^2 + \frac{i}{N} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \tau} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Поскольку одна из наших целей состоит в том, чтобы проследить зависимость протекающих процессов от длительности импульса, мы ввели в (2) параметр $N = \omega \tau_0$, определяющий количество осцилляций. В (2) введены также нормированные параметры $\bar{\Psi} = \Psi \Psi_0$, $\bar{E} = E_T \Psi_0$, Ψ_0 – пиковая амплитуда оптического сигнала на входе, $\bar{\tau} = \tau \tau_0$, $\bar{z} = z l_{nl}$, $l_{nl} = 1/(a \Psi_0)$, $D_{k_2} = \text{sign}(k_2) \frac{l_{nl}}{l_{dis2}}$,

$D_{k_3} = \frac{l_{nl}}{l_{dis3}}$, $l_{dis2} = \frac{2\tau_0^2}{|k_2|}$, $l_{dis3} = \frac{6\tau_0^3}{k_3}$, параметр μ переходит в $\frac{\mu \Psi_0}{\tau_0} l_{nl} \approx \frac{2}{N}$, b – в $\frac{b \Psi_0}{\tau_0} l_{nl} \approx \frac{1}{N}$, α – в $\frac{\alpha l_{nl}}{\tau_0^3} \approx \frac{1}{4N^2}$, β – в $\frac{\beta \Psi_0}{\tau_0} l_{nl} \approx \frac{1}{N}$, q – в $\frac{q \Psi_0}{\tau_0^2} l_{nl} \approx \frac{1}{N}$, $D_\sigma = \frac{\sigma \Psi_0 l_{nl}}{\tau_0}$, $\gamma = \frac{\varepsilon \Psi_0^2 l_{nl}}{\tau_0}$, τ_0 – длительность оптиче-

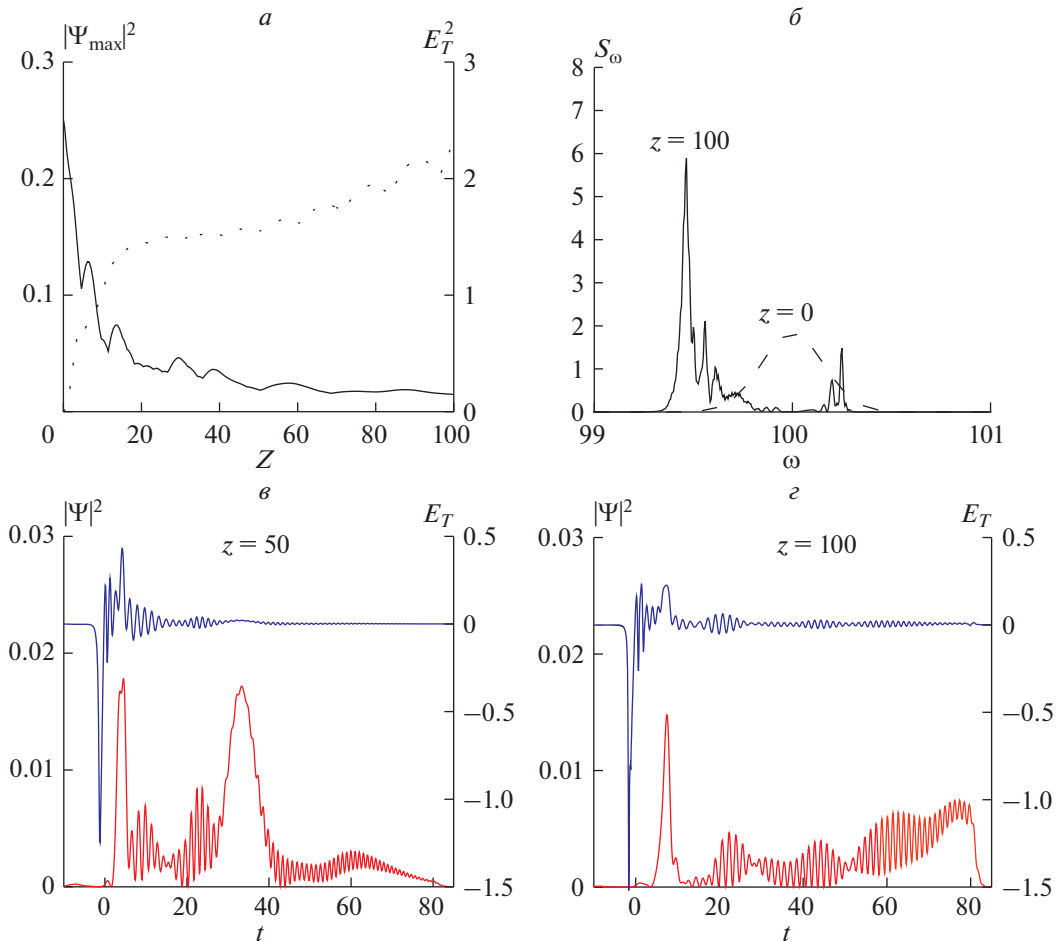


Рис. 1. Пиковые интенсивности (а) оптической (сплошная линия) и терагерцовой (пунктирная линия) компоненты оптической компоненты (б) на разных расстояниях, профили оптической (красные линии) и терагерцовой (синие линии) компонент на разных расстояниях (в, г). Начальная амплитуда $\psi_0 = 0.5$, коэффициенты дисперсии второго и третьего порядков $D_{k2} = 0.3$, $D_{k3} = 0.3$, квадратичная и кубическая нелинейности $D_{\sigma} = 1$, $\gamma = 0$, число колебаний $N = 100$.

ского импульса на входе. В системе (2) использованы соотношения $\frac{a}{\sigma} = \frac{b}{\mu}$, $\mu = 2b$ между коэффициентами системы (1) [13].

Так как на вход среды подается только оптический импульс, то граничное условие запишем в виде:

$$\psi(z = 0, \tau) = \psi_0 \exp(-\tau^2), E_T(z = 0, \tau) = 0. \quad (3)$$

Система (2) обладает интегралами движения, которые мы отслеживаем в наших расчетах:

$$N_0 = \int_{-L_{\tau}}^{L_{\tau}} |\psi|^2 d\tau = \text{const}, \quad (4)$$

$$A_T = \int_{-L_z}^{L_z} E_T d\tau = \text{const}. \quad (5)$$

В (4), (5) L_{τ} – безразмерный интервал времени, в течение которого моделируется взаимодействие

лазерного импульса со средой. Параметр N_0 в (4) пропорционален числу фотонов в оптическом импульсе. Часть энергии каждого фотона уходит в терагерцовую область. При этом число терагерцовых фотонов $N_T = \int_{-L_{\tau}}^{L_{\tau}} E_T^2 d\tau$ увеличивается, в то время как частота оптических фотонов уменьшается. В (5) A_T – электрическая площадь широкополосного импульса.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В серии численных экспериментов на основе безразмерной системы (2), (3) использовался численный метод, сохраняющий разностные аналоги интегралов (4), (5) [15]. Мы ожидали, что укорачивание импульса (уменьшение числа колебаний N) приведет к формированию и устойчивому распространению связанного оптико-терагерцового солитона. Наиболее ярко выраженные ре-

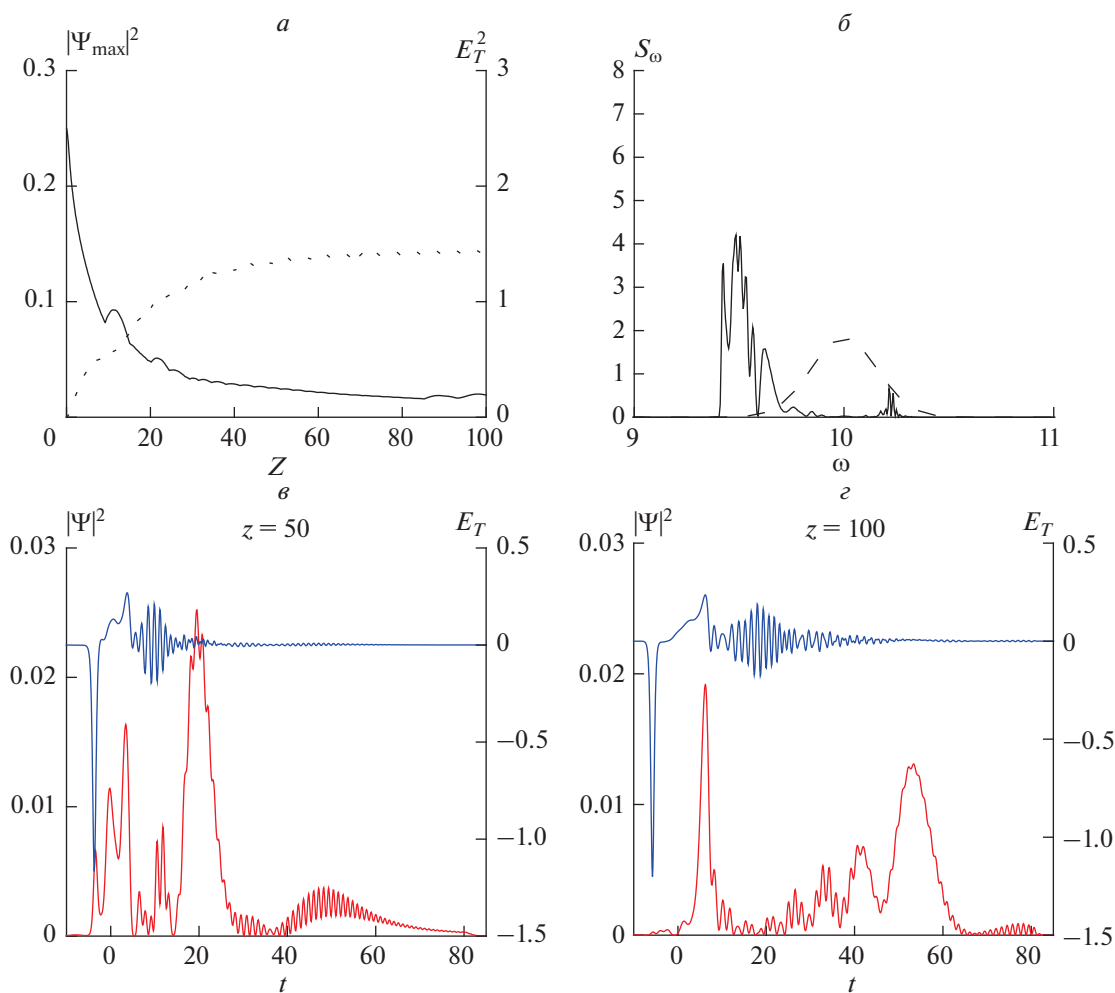


Рис. 2. Аналогично рис. 1, при тех же параметрах, кроме $N = 10$.

зультаты в случае нормальной дисперсии второго порядка представлены ниже. Сначала мы моделировали достаточно длинный оптический импульс ($N = 100$), запускаемый в кристалл (например, ZnTe), не учитывая нелинейность третьего порядка. Результаты, представленные на рис. 1, показывают, что, хотя сигнал терагерцового диапазона генерируется, солитон оптического терагерцового диапазона не формируется. При уменьшении начальной длительности импульса до $N = 3$, мы наблюдаем формирование и устойчивое распространение такого солитона (рис. 2, 3).

На рис. 2 показан переходный случай, когда число колебаний начального импульса $N = 10$. Несмотря на явные изменения профилей обеих компонент, сценарий процесса аналогичен случаю $N = 100$. Ситуация резко меняется для ультракоротких импульсов, когда $N = 3$. Мы наблюдаем формирование стабильного оптического солитона (рис. 3). При этом виден типичный красно-смещенный широкополосный спектр оп-

тического импульса (рис. 3б), а несолитонная часть терагерцовой составляющей имеет вид функции Эйри за счет дисперсии третьего порядка (рис. 3в и 3г). Аналогичная оптико-терагерцовая динамика отмечена в работе [16], где не учитывалась керровская нелинейность.

При учете керровской нелинейности (вплоть до $\gamma = 1$) мы по-прежнему наблюдаем устойчивый солитон оптико-терагерцового диапазона, обладающий теми же свойствами, что и в предыдущем случае (рис. 4). Увеличивая коэффициент керровской нелинейности до $\gamma = 3$, мы видим разрушение солитона. Известно, что при нормальной ДГС второго порядка и фокусирующей керровской нелинейности устойчивый оптический солитон не образуется. В этом случае необходим учет квадратичной нелинейности и ДГС третьего порядка. С уменьшением количества осцилляций N , содержащихся в оптическом импульсе, возрастает удельный вес дисперсии квадратичной нелинейности (четвертое и пятое слагаемые в

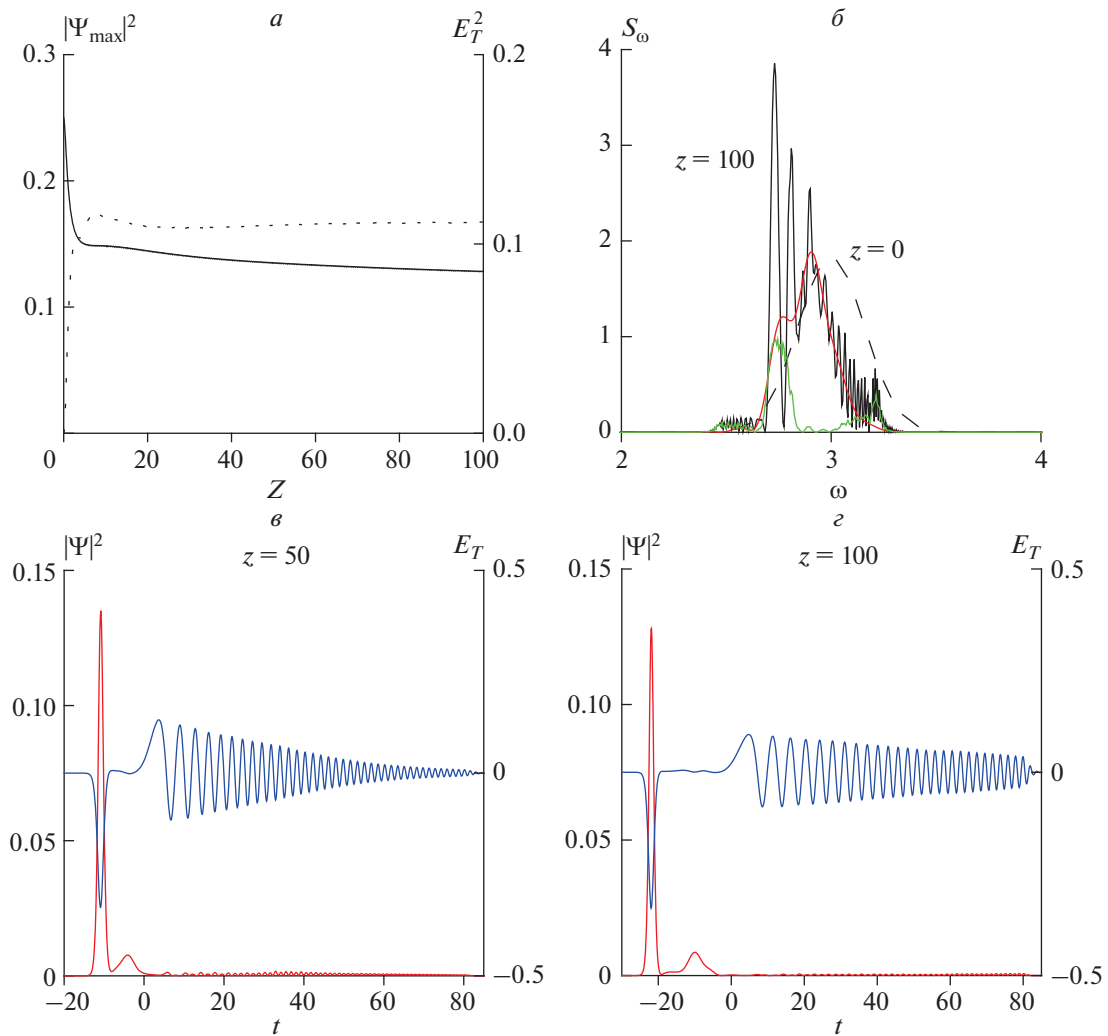


Рис. 3. Пиковые интенсивности (а) оптической (сплошная линия) и терагерцовой (пунктирная линия) компонент, спектры оптической компоненты (б) на разных расстояниях (красная и зеленая линии соответствуют правому и левому пикам профиля интенсивности), профили оптической (красные линии) и терагерцовой (синие линии) компонент на разных расстояниях (в, г). Начальная амплитуда $\psi_0 = 0.5$, коэффициенты дисперсии второго и третьего порядков $D_{k2} = 0.3$, $D_{k3} = 0.3$, квадратичная и кубическая нелинейности $D_{\sigma} = 1$, $\gamma = 0$, число колебаний $N = 3$.

правой части первого уравнения системы (2)), которая независимо от знака ДГС способствует формированию устойчивого одномерного солитона. При этом уменьшается деструктивная роль фокусирующей керровской нелинейности в купе с нормальной ДГС. При увеличении же количества осцилляций данная роль становится более значительной, что препятствует формированию солитона и в конце концов приводит к потере его устойчивости.

Мы также моделировали процесс оптического выпрямления с учетом аномальной дисперсии второго порядка $D_{k2} < 0$ и фокусирующей керровской нелинейности $\gamma < 0$. Сценарий генерации и распространения терагерцового импульса существенно отличается от описанного выше для нор-

мальной дисперсии групповой скорости и нелинейности фокусировки. Хотя мы укорачиваем запускаемый оптический импульс до $N = 3$, оптико-терагерцовый солитон не формируется. Видно распространение оптического солитона, сопровождаемого суперконтинуумом, в терагерцовом диапазоне. В этом случае на начальной стадии генерации превалирует сугубо оптическая керровская нелинейность фокусирующего характера, которая в купе с аномальной ДГС приводит к устойчивому формированию хорошо известного оптического солитона. Затем за счет квадратичной нелинейности, описываемой третьим и четвертым слагаемыми в правой части второго уравнения системы (2), генерируется терагерцовый суперконтинуум. Здесь важная роль принад-

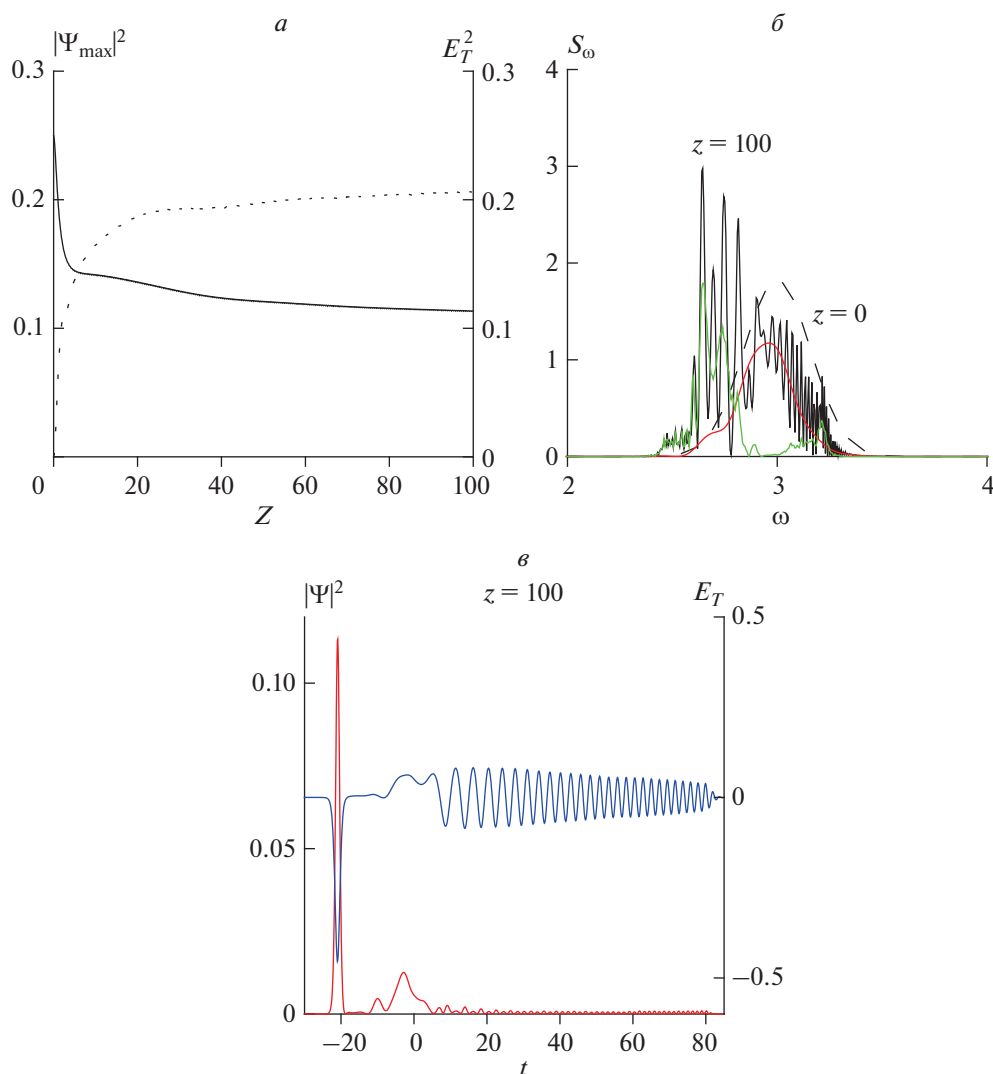


Рис. 4. Пиковые интенсивности (а) оптической (сплошная линия) и терагерцово́й (пунктирная линия) компонент, спектры оптической компоненты (б) на разных расстояниях (красная и зеленая линии соответствуют правому и левому пикам профилей интенсивности), профили оптической (красная линия) и терагерцово́й (синяя линия) компонент на расстоянии $z = 100$ (в). Начальная амплитуда $\psi_0 = 0.5$, коэффициенты дисперсии второго и третьего порядков $D_{k2} = 0.3$, $D_{k3} = 0.3$, квадратичная и кубическая нелинейности $D_\sigma = 1$, $\gamma = 1$, число колебаний $N = 3$.

лежит дисперсии и нелинейности терагерцового диапазона (см. первые два слагаемых в правой части того же уравнения). По сути, мы имеем дело с генерацией суперконтинуума, которая описывается неоднородным уравнением Кортевега-де Вриза (КдВ), где оптический солитон выполняет роль внешнего заданного поля. Хорошо известно соответствующее автомодельное решение КдВ, выражающееся через функцию Эйри [17].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено численное исследование генерации импульсов терагерцового диапазона в про-

цессе оптического выпрямления. Для моделирования мы используем обобщенную систему ЯО с учетом бездисперсионной кубической нелинейности. Эта система позволяет рассматривать оптические импульсы длительностью в несколько колебаний.

В случае нормальной ДГС второго порядка при отсутствии керровской нелинейности мы демонстрируем образование солитона оптико-терагерцового диапазона при уменьшении длительности входного оптического импульса. Наиболее яркое распространение устойчивого связанного солитона показано для числа осцилляций $N = 3$. Данный режим распространения сопровождается

характерным красным смещением широкополосного спектра оптического импульса. При этом генерируется также несолитонная часть терагерцовой составляющей, связанная с терагерцовой дисперсией третьего порядка.

Учет керровской нелинейности приводит к изменению динамики обеих компонент. В случае нормальной дисперсии второго порядка групповой скорости и фокусирующей кубической нелинейности при укорочении начального оптического импульса до $N = 3$ происходит захват оптико-терагерцового импульса, устойчиво распространяющегося на расстояние до 100 нелинейных длин.

Исследование выполнено при поддержке Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Peiponen K.-E., Zeitler A., Kuwata-Gonokami A. Terahertz spectroscopy and imaging. Berlin, Heidelberg: Springer, 2013.
2. Smirnov S.V., Grachev Ya.V., Tsytkin A.N. et al. // J. Opt. Technol. 2014. V. 81. No. 8. P. 464.
3. Abdullin U.A., Lyakhov G.A., Rudenko O.V. et al. // Sov. Phys. JETP. 1974. V. 39. P. 633.
4. Bagdasaryan B.A., Makaryan A.O., Pogosyan P.S. // JETP Lett. 1983. V. 37. P. 594.
5. Auston D.H., Cheung K.P., Valdmanis J.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 1555.
6. Захаров В.Е. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 5. С. 1745.
7. Benney D.J. // Stud. Appl. Math. 1977. V. 56. No. 1. P. 81.
8. Eilbeck J.C., Gibbon J.D., Caudrey P.J. et al. // J. Phys. A. 1973. V. 6. P. 1337.
9. Sazonov S.V., Sobolevskii A.F. // JETP Lett. 2002. V. 75. P. 621.
10. Sazonov S.V., Sobolevskii A.F. // JETP. 2003. V. 96. P. 1019.
11. Yajima N., Oikawa M. // Prog. Theor. Phys. 1976. V. 56. No. 6. P. 1719.
12. Stepanov A.G., Mel'nikov A.A., Kompanets V.O. et al. // JETP Lett. 2007. V. 85. No. 5. P. 227.
13. Sazonov S.V., Sukhorukov A.P., Ustinov N.V. // JETP Lett. 2014. V. 100. No. 10. P. 620.
14. Sazonov S.V., Sukhorukov A.P. // JETP Lett. 2013. V. 98. No. 12. P. 773.
15. Kalinovich A.A., Zakharova I.G., Komissarova M.V. et al. // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 2090. Art. No. 012040.
16. Bugai A.N., Sazonov S.V. // JETP Lett. 2008. V. 87. No. 8. P. 403.
17. Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Путаевский Л.П. Теория солитонов: Метод обратной задачи. М.: Наука, 1980.

Effect of Kerr nonlinearity on the formation of few-cycle optical-terahertz solitons

A. A. Kalinovich^{a, *}, I. G. Zakharova^a, S. V. Sazonov^{a, b, c}

^a Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

^b National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

^c Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russia

*e-mail: kalinovich@gmail.com

The process of generation of broadband terahertz radiation by a high-intensity optical pulse with a duration of several oscillation periods has been studied. Based on numerical simulation of the generalized Yajima–Oikawa system, it is shown that, under certain conditions, the generation process is accompanied by the formation of stable optical-terahertz solitons.

УДК 535.21:53.06

СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ОПТОТЕРМИЧЕСКИЕ ЛОВУШКИ

© 2022 г. С. П. Котова¹, *, Н. Н. Лосевский¹, А. М. Майорова¹,
Е. В. Разуева¹, С. А. Самагин¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Самарский филиал, Самара, Россия

*E-mail: kotova@fian.smr.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Представлены результаты исследований по формированию различных конфигураций микроскопических объектов с помощью структурированных оптотермических ловушек. Продемонстрированы динамическая перестройка конфигураций и фиксация микрочастиц на подложке за счет использования альбумина и кратковременного увеличения мощности лазерного излучения.

DOI: 10.31857/S0367676522120201

ВВЕДЕНИЕ

В оптотермических ловушках световое поле используется не только для формирования оптической силы, но и для создания в среде градиента температуры, формирующего в свою очередь конвекционные потоки [1–6]. Микро- и нано-объекты в таких комбинированных ловушках переносятся (захватываются) возникающими потоками жидкости, поэтому можно использовать заведомо меньшие мощности (от десятых долей до нескольких десятков милливольт) по сравнению с традиционными оптическими ловушками. Конвекционные оптические ловушки характеризуются возможностью довольно быстрого перемещения объектов (в том числе поглощающих) с относительно больших расстояний, и как следствие, простотой организации областей свободных от микрочастиц и областей с их локальной повышенной концентрацией. В настоящей статье мы предлагаем формировать заданные конфигурации микрочастиц за счет структурированных световых пучков. Такой подход широко используется в оптических ловушках (без конвекционной составляющей) [7–10], где применяются вихревые пучки весьма различных форм. В 2015 г. авторы [5] впервые реализовали структурированную оптотермическую ловушку в виде светового кольца, и отметили, что использование структурированных пучков (колец, параллельных линий и т.д.) открывает очень широкие возможности для манипуляции микрообъектами. Однако дальнейшего широкого развития структурированные оптотермические ловушки до сих пор не получили. Реализованные нами оптотермические ловушки — точечные, в виде вихревых

колец и спиралей Архимеда, описаны в [6, 11]. Цель данной статьи продемонстрировать возможности оптотермических ловушек для формирования разнообразных конфигураций микроскопических объектов, их динамической перестройки, а также фиксации на подложке.

ФОРМИРОВАНИЕ СВЕТОВЫХ ПОЛЕЙ С ЗАДАННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ИНТЕНСИВНОСТИ

В экспериментах по манипулированию микрообъектами использовались световые поля с разнообразными распределениями интенсивности в рабочей зоне микроскопа: в виде колец, границ треугольника, квадрата, двойных контуров, решеток нулей. Дифракционные оптические элементы (ДОЭ) для преобразования лазерного излучения в заданные распределения рассчитывались с использованием оптики спиральных пучков [12]. В расчетах применялся модифицированный итерационный алгоритм Герчберга-Сэкстона, при этом в качестве исходного фазового распределения использовалась фаза спирального пучка, а в качестве распределения интенсивности в выходной плоскости — распределение интенсивности его преобразования Фурье [13, 14].

При построении ДОЭ для формирования полей в виде пространственной решетки нулей интенсивности базисный спиральный пучок задавался в виде суммы спиральных пучков, интенсивность которых локализована вблизи параллельных отрезков. На небольших расстояниях между отрезками спиральные пучки начинают интерферировать. В результате такой интерференции формируется

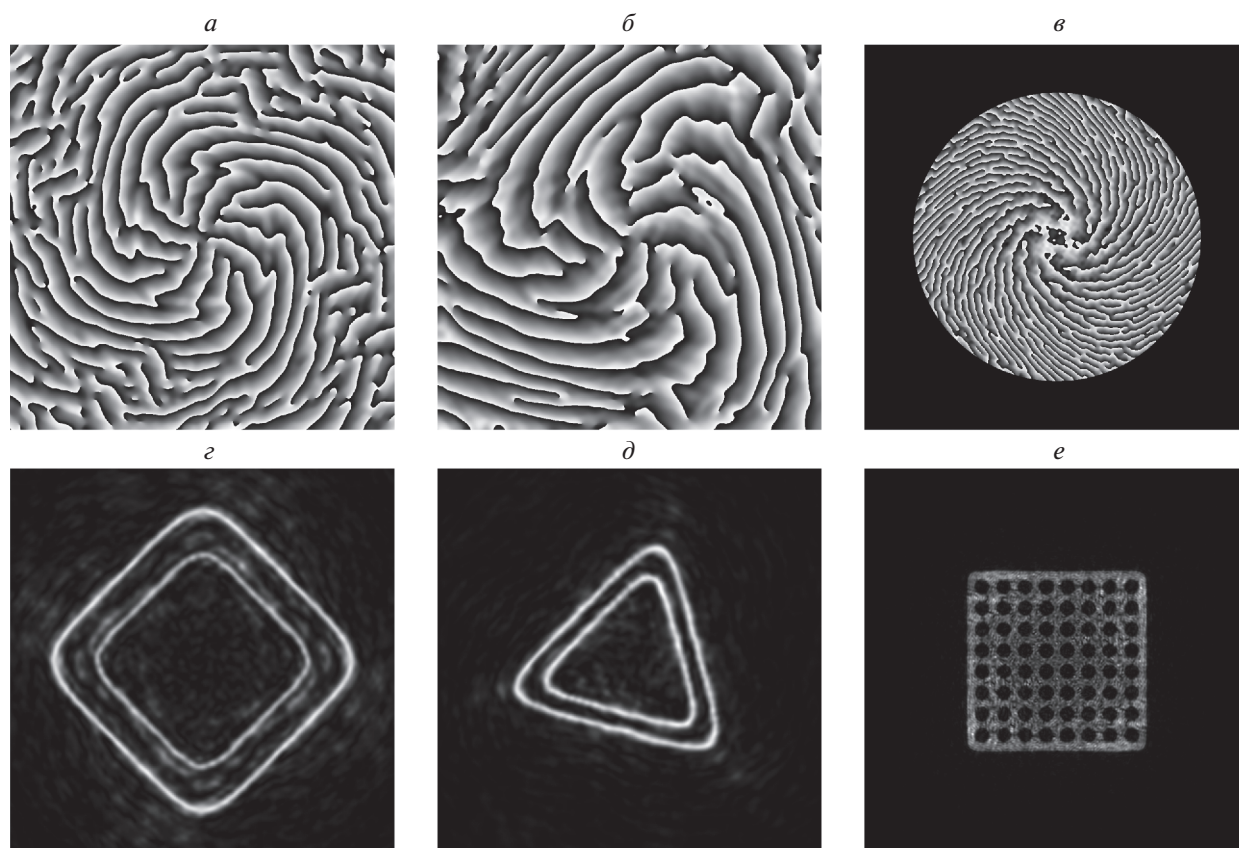


Рис. 1. Примеры рассчитанных фазовых элементов и формируемых ими распределений интенсивности.

решетка из одиночных оптических вихрей, которая является решеткой нулей интенсивности.

Для создания фазовых элементов в виде двойных контуров исходный спиральный пучок выбирался в виде суммы двух спиральных пучков с различными номерами квантования либо использовался производный спиральный пучок [15], поскольку его интенсивность имеет вид двух коаксиальных кривых. В обоих случаях эффективность рассчитанных дифракционных элементов составляет около 80%. При использовании производного спирального пучка расстояние между контурами фиксировано. В случае, когда используется сумма спиральных пучков, расстояние между контурами можно менять, выбирая разные номера квантования базовых кривых. Это расстояние ограничено интерференцией между интенсивностями пучков.

На рис. 1 приведены примеры рассчитанных фазовых элементов и формируемых ими распределений интенсивности в виде двойных контуров треугольника, квадрата и решетки нулей.

Экспериментальная реализация проводилась с помощью фазовых масок, формируемых многопиксельным жидкокристаллическим пространственным модулятором света (ЖК ПМС) HOLOEYE

PLUTO-2-NIR-011. Примеры сформированных полей приведены на рис. 2. Использование ЖК ПМС позволяет динамически (в реальном времени) менять конфигурацию сформированных распределений интенсивности в заданной плоскости за счет быстрой замены одной подаваемой на модулятор фазовой маски на другую. Управление качеством формируемого модулятором светового поля, размером распределения интенсивности, его положением осуществлялось с помощью специально созданного программного модуля. Программа позволяет изменять начальную фазовую маску (менять ее размер, поворачивать, растягивать либо сжимать в горизонтальном и вертикальном направлениях) и добавлять к загруженной и трансформированной фазовой маске дополнительные элементы: сферическую линзу, аксикон, оптический клин (наклон). Также возможны перемещение фазового распределения по поверхности модулятора в поперечных направлениях, задание формы и характеристик апертуры фазового распределения на поверхности модулятора без изменения геометрических и элементных параметров реальной оптической схемы. Например, внесение дополнительной линзы может улучшить качество изображения, изменение фор-

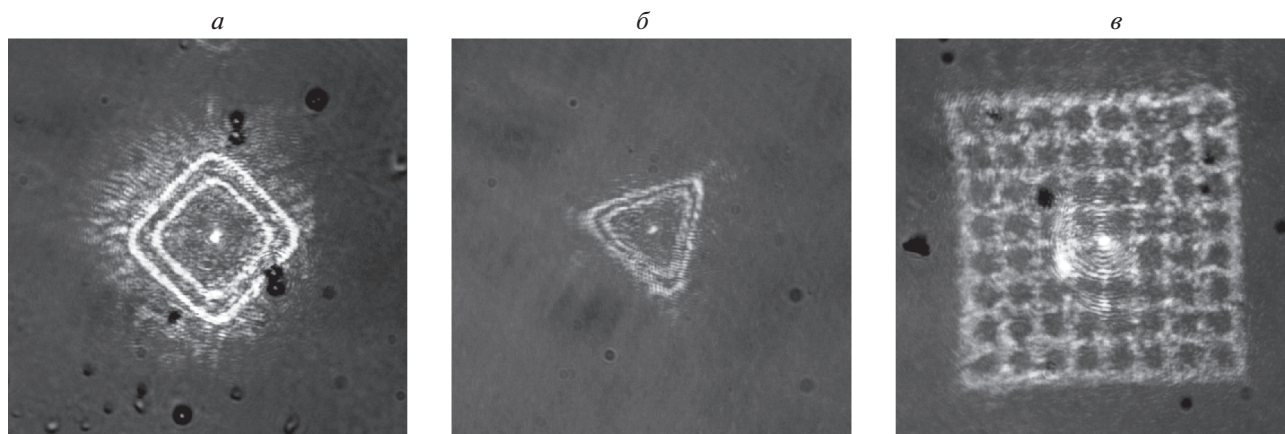


Рис. 2. Примеры экспериментальной реализации световых полей в виде двойных контуров и решетки нулей в рабочей зоне пинцета.

мы и характера внешней области апертуры помогает в случае необходимости избавиться от центрального максимума интенсивности и т.д., при этом менять экспериментальную схему не требуется. Кроме того, в программе реализована возможность сформировать фазовую маску дифракционного оптического элемента, представляющего собой сумму стандартных оптических элементов, таких как сферическая и цилиндрическая линза, призма, аксикон, спиральная фазовая пластинка, и изменять параметры этих элементов.

ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО МАНИПУЛИРОВАНИЮ МИКРООБЪЕКТАМИ

Схема экспериментальной установки оптотермической структурированной ловушки подробно описана нами в [6]. Источником излучения служил DPSS лазер с длиной волны излучения 0.53 мкм. Расширенный коллимированный пучок лазера освещал пространственный модулятор света HOLOEYE PLUTO-2-NIR-011, работающий в режиме отражения. С помощью ПМС формируется структурированный световой пучок (световое поле с заданным распределением интенсивности). Этот пучок фокусировался микрообъективом (40×) в заданную плоскость, формируя структурированную (вихревую) оптическую ловушку. Суммарная мощность излучения в рабочей зоне варьировалась от 10 до 100 мВт. Конвекционная составляющая ловушки формируется за счет использования поглощающего на длине волны 0.53 мкм светофильтра ОС 13 в качестве дна кюветы с образцами. Манипулирование проводилось микрочастицами латекса, взвешенными в дистиллированной воде. Диаметр частиц варьировался от 1 до 4 мкм.

Поскольку в оптотермических ловушках перенос микрочастиц осуществляется конвекционными потоками, то во всех экспериментах наблюдалось довольно быстрое движение микрочастиц с относительно больших расстояний к световому пятну, независимо от вида распределения интенсивности. Аналогичный характер движения наблюдался нами и в случае точечной тепловой ловушки, описанной в [6]. При работе с оптотермической ловушкой необходимо подобрать уровень мощности лазерного излучения так, чтобы скорость перемещения конвекционных потоков жидкости была достаточной для переноса микрочастиц к ловушке и формирования конфигурации вдоль ее границы. Увеличение мощности приводит к увеличению вертикальной составляющей конвекционных потоков, что может привести к тому, что частицы будут уноситься восходящими потоками вверх, не достигая области ловушки (светового распределения). В наших экспериментах захват и выстраивание в заданные конфигурации микрочастиц оптотермическими ловушками со сложным распределением интенсивности наблюдались при суммарной мощности излучения в рабочей зоне до 100 мВт.

Была исследована возможность фиксации захваченных микрочастиц латекса в сформированных конфигурациях. Для этого в кювету добавляли сывороточный альбумин (Альбумин, раствор для инфузий 10%). Кратковременное увеличение мощности лазерного излучения до определенного предела приводило к фиксации микрочастиц на подложке за счет коагуляции альбумина, обусловленной локальным повышением температуры раствора. На рис. 3 представлены примеры фиксации микрообъектов в заданных конфигурациях. На рис. 3а показан случай, когда микрочастицы, взвешенные в дистиллированной воде с раствором альбумина и добавлением ПАВ, захва-

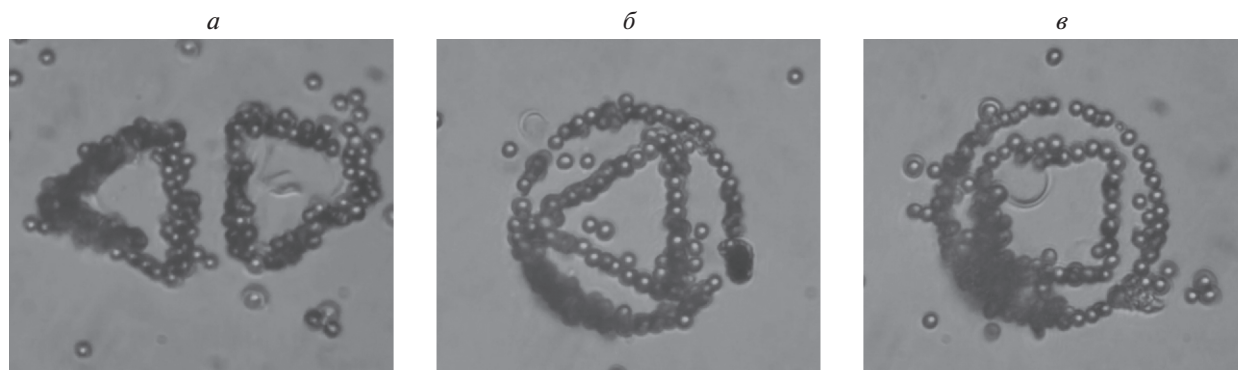


Рис. 3. Кадры из видео, иллюстрирующие возможности структурированной термооптической ловушки для формирования заданных конфигураций микрочастиц и их фиксации на подложке.

тывались ловушкой в виде треугольника. Увеличение мощности приводило к прилипанию частиц к подложке вдоль границы треугольника. Далее фазовая маска поворачивалась, кювета перемещалась относительно светового пучка, свободные частицы конвекционными потоками устремлялись к ловушке, выстраивались вдоль ее границы и вновь за счет увеличения мощности фиксировались на подложке. В результате мы видим, что частицы фиксированы вдоль двух треугольников, повернутых и смещенных друг относительно друга. Аналогичные эксперименты проводились при перестройке конфигурации одной формы в другую, например, треугольника в окружность (рис. 3б), окружности в квадрат (рис. 3в). Возможны и другие конфигурации.

Мощности лазерного излучения, необходимые для фиксации частиц, зависят от концентрации альбумина. Зависимость представлена в табл. 1. Видно, что чем выше концентрация альбумина, тем при меньшей мощности лазерного излучения происходит фиксация частиц на световой границе. Существуют как минимальное, так и максимальное пороговые значения мощности. Так, при концентрации альбумина 10% частицы медленно перемещаются к световой ловушке. Попытка увеличить скорость сбора микрочастиц

в ловушку за счет увеличения мощности приводит к тому, что альбумин коагулирует, до того, как частицы попадают в ловушку. При концентрации 0.5% и менее вместо коагуляции происходит образование газовых пузырей из-за нагрева жидкости. Таким образом, в наших экспериментах эффективная фиксация микрочастиц наблюдалась при концентрациях 2.5–10%. Частицы оставались фиксированными на подложке в течение продолжительного времени, не смывались проточной водой, не растворялись в водном растворе.

Представленная технология фиксации микрообъектов на подложке может найти свое применение в биофизических задачах. Манипулирование отдельными клетками — одно из самых ярких применений оптических пинцетов. Например, активно разрабатываются способы выстраивания клеток и биообъектов в разнообразные структуры с использованием как оптических, так и термооптических пинцетов [17–19]. В работе [17] описана процедура формирования паттернов клеток с последующим их культивированием за счет использования фотонно-кристаллического оптического пинцета. Клетки высаживали пинцетом на заранее заданные формы, потом добавляли внеклеточный матрикс и нагревали подложку, за счет чего и проходила фиксация. Преимуществом описанной нами технологии является возможность менять форму ловушки, а, следовательно, и формы паттерна в реальном времени. Однако возможность применения технологии к реальным биообъектам требует дальнейшего изучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе впервые реализованы оптотермические ловушки сложных конфигураций, включая двойные контуры, решетку нулей, перестраиваемые конфигурации различных форм. Продемонстрированы возможности и особенности

Таблица 1. Зависимость мощности лазерного излучения, при котором происходит фиксация микрочастиц на подложке в зависимости от мощности лазерного излучения

Концентрация альбумина, %	P , мВт
10	63
5	97
2.5	99
1	99–132
0.5	134 (коагуляция не наблюдается)

структурированных оптотермических ловушек для захвата и перемещения микрочастиц и их эффективной группировки в заданных конфигурациях. Предложен простой и эффективный способ фиксации на подложке захваченных микрообъектов вдоль границ световых ловушек за счет использования раствора альбумина и кратковременного повышения мощности лазерного излучения. Проведенные эксперименты и предложенные технологии показывают их перспективность для биофизических задач, но это требует дополнительных исследований.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00671).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Zemánek P., Volpe G., Jonáš A., Brzobohatý O.* // Adv. Opt. Photon. 2019. V. 11. P. 577.
2. *Zenteno-Hernandez J.A., Lozano J.V., Sarabia-Alonso J.A. et al.* // Opt. Lett. 2020. V. 45. P. 3961.
3. *Hosokawa Ch., Tsuji T., Kishimoto T. et al.* // J. Phys. Chem. C. 2020. V. 124. No. 15. P. 8323.
4. *Lin L., Hill E.H., Peng X., Zheng Y.* // Accounts Chem. Res. 2018. V. 51. P. 1465.
5. *Flores-Flores E., Torres-Hurtado S.A., Páez R. et al.* // Biomed. Opt. Express. 2015. V. 24. P. 4079.
6. *Kotova S.P., Korobtsov A.V., Losevsky N.N. et al.* // J. Quantitative. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2021. V. 268. Art. No. 107641.
7. *Rubinsztein-Dunlop H., Forbes A., Berry M. et al.* // J. Opt. 2017. V. 19. Art. No. 013001.
8. *Rodrigo J., Angulo M., Alieva T.* // Opt. Express. 2018. V. 26. No. 14. P. 18608.
9. *Li L., Chang Ch., Yuan X. et al.* // Opt. Express. 2018. V. 26. P.9798.
10. *Afanasiev K., Korobtsov A., Kotova S. et al.* // J. Phys. Conf. Ser. 2013. V. 414. Art. No. 012017.
11. *Mayorova A., Korobtsov A., Kotova S. et al.* // IEEE Int. Conf. on Inform. Technol. and Nanotechnol. (Samara, 2021). P. 1.
12. *Абрамочкин Е.Г., Волостников В.Г.* // УФН. 2004. Т. 174. № 12. С. 1273; *Abramochkin E.G., Volostnikov V.G.* // Phys. Usp. 2004. V. 47. No. 12. P. 1273.
13. *Abramochkin E.G., Razueva E.V., Volostnikov V.G.* // Proc. LFNМ. 2006. P. 275.
14. *Afanasiev K.N., Abramochkin E.G., Korobtsov A.V. et al.* // Proc. SPIE. 2007. V. 6644. Art. No. 664410.
15. *Абрамочкин Е.Г., Афанасьев К.Н., Волостников В.Г. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2008. Т. 72. № 1. С. 76; *Abramochkin E.G., Afanasiev K.N., Volostnikov V.G. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2008. V. 72. No. 1. P. 68.
16. *Волостников В.Г.* // Комп. оптика. 2014. Т. 38. № 3. С. 397.
17. *Jing P., Liu Y., Keeler E.G. et al.* // Biomed. Opt. Express. 2018. V. 9. P. 771.
18. *Li P., Yu H., Wang X. et al.* // Opt. Express. 2021. V. 29. P. 11144.
19. *Lu F., Gong L., Kuai Y. et al.* // Photon. Res. 2022. V. 10. P. 14.

Structured optothermal traps

S. P. Kotova^{a,*}, N. N. Losevsky^a, A. M. Mayorova^a, E. V. Razueva^a, S. A. Samagin^a

^a *Lebedev Physical Institute, Samara Branch, Samara, 443011 Russia*

^{*}*e-mail: kotova@fian.smr.ru*

The results of studies on the formation of various configurations of microscopic objects using structured optothermal traps are presented. The dynamic rearrangement of configurations and their fixation on a substrate with the use of albumin and by short time power increasing have been demonstrated.

УДК 535.36

ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА НА ЭМУЛЬСИИ ВОДЫ В МАСЛЕ С ЦЕЛЮ КОНТРОЛЯ СОДЕРЖАНИЯ ВОДЫ В НЕСМЕШИВАЮЩЕЙСЯ ЖИДКОСТИ

© 2022 г. А. И. Пономарев¹*, О. А. Заякин², С. П. Котова²,
Н. Н. Лосевский², Т. Н. Сапцина²

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева”, Самара, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Самарский филиал, Самара, Россия

*E-mail: andrey2000_10@mail.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследована зависимость рассеяния света на мелких каплях воды в несмешивающейся жидкости от угла наблюдения и количества воды для разработки датчика контроля количества воды в авиационном топливе. Работа направлена на поиск оптимального угла рассеяния для получения наибольшей чувствительности и монотонности сигнала в зависимости от количества воды.

DOI: 10.31857/S0367676522120249

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы обусловлена необходимостью тщательного контроля *in situ* количества воды в заправляемом в самолет авиационном топливе. Вода и авиационный керосин являются несмешивающимися жидкостями, однако некоторое количество воды растворяется в керосине, поступая из окружающей атмосферы. Например, при 21°C и атмосферном давлении насыщенное топливо на основе керосина содержит приблизительно от 40 до 80 (вода) частей на миллион массовых долей (ppm) [1]. При этом вода не считается загрязняющим веществом, пока она находится в растворенном состоянии. Но при изменении внешних условий может произойти конденсация воды в капли, а также прямое попадание воды в топливо, например, конденсата со стенок резервуара, с последующим возможным образованием льда во время полета, что является опасным.

При заправке топлива в аэропортах осуществляется постоянный контроль содержания воды в топливе разными способами, в том числе и оптическими. Оптические методы контроля отличаются быстродействием и точностью, что позволяет использовать их в непрерывном режиме. Сконденсированная вода в керосине образует капли разного размера, на которых может происходить рассеяние света. Хотя допустимое значение содержания сконденсированной воды в керосине

достаточно низкое, порядка 10^{-5} массовой доли, рассеяние на таких каплях можно зафиксировать. Существуют импортные датчики, основанные на этом принципе [2]. При этом у авторов нет информации относительно отечественных датчиков такого типа, что делает проблему более актуальной.

РАССЕЙЯНИЕ СВЕТА НА МЕЛКИХ КАПЛЯХ ВОДЫ В НЕСМЕШИВАЮЩЕЙСЯ ЖИДКОСТИ

Рассеяние света на различных объектах хорошо исследовано теоретически. В зависимости от размеров рассеивающего объекта применяются разные теории, в том числе теории Густава Ми и Джона Релея, дифракционный подход. Для частиц размером на порядок больше длины волны рассеивающегося света используется и геометро-оптический метод [3]. Экспериментальных работ для интересующего нас случая гораздо меньше, поэтому практическое исследование рассеяния на модельной среде, близкой по оптическим свойствам к авиационному топливу представляет определенный интерес. Из таких работ можно назвать количественный анализ концентрации жира и белка в молоке на основе опволоконной оценки интенсивности обратного рассеяния [4]. Однако в отличие от нашей задачи, здесь речь идет о мутной среде. У нас же среда является практически прозрачной, что, помимо каче-

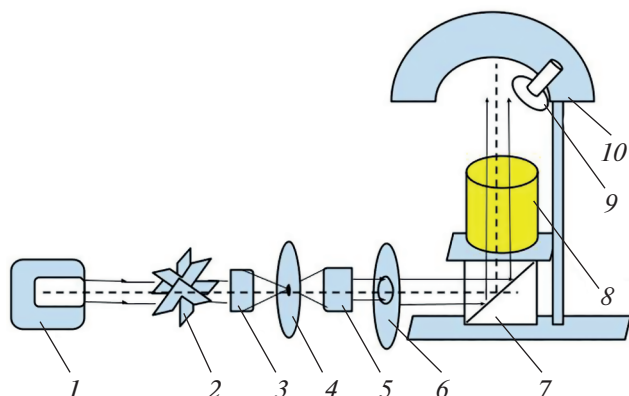


Рис. 1. Схема установки: 1 – гелий-неоновый лазер (ГН-5П); 2 – прерыватель; 3 – фокусирующий объектив (фокусное расстояние $F = 16$ мм, числовая апертура $NA = 0.3$); 4 – пинхол (диаметр 0.05 мм); 5 – коллимирующий объектив (фокусное расстояние $F = 33$ мм, числовая апертура $NA = 0.11$); 6 – диафрагма (диаметр 2 мм); 7 – светоделительный кубик; 8 – кювета с исследуемой средой; 9 – фотодиодный датчик (ФД-24); 10 – поворотная подвижка.

ственных различий с упомянутыми работами, дает на несколько порядков меньший оптический сигнал.

В качестве модельной среды для разработки датчика контроля количества воды в авиационном топливе было выбрано рафинированное подсолнечное масло с водой. Масло прозрачно и его показатель преломления близок к показателю преломления керосина (масло – 1.46, керосин – 1.39). Также на практике не трудно создать смеси с необходимым, очень низким содержанием воды. В работе исследовалась зависимость интенсивности рассеянного света от количества воды и

угла рассеяния. Целью работы было установление оптимального угла рассеяния и монотонности сигнала рассеяния в зависимости от количества воды.

ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Массовая доля воды в масле варьировалась от $10 \cdot 10^{-6}$ до $40 \cdot 10^{-6}$. Дробление капель производилось взбиванием бытовым миксером в течение пяти минут, с последующим отстаиванием в течение часа для освобождения смеси от пузырьков воздуха. Масло и вода для смеси отмерялись при помощи медицинских шприцов путем двух последовательных разведений. Определение размеров капель воды проводилось с использованием микроскопа ПоламЛ-213М и цифровой камеры ScorDEC DCM 300 с компьютерным интерфейсом USB 2.0.

Приготовленная среда помещалась в небольшой цилиндрический сосуд без дна, укрепленный на стеклянной подложке оптического качества. Схема экспериментальной установки показана на рис. 1. Излучение заводилось через делительный кубик снизу. Источником света являлся гелий-неоновый лазер ГН-5П, мощностью 5 мВт. Мощность излучения, прошедшего через рассеивающую среду, вычислялась по сигналу с фотоприемного устройства на основе фотодиода ФД 24К [5] с чувствительностью 3.33 мкВт/В и равнялась 0.27 мВт. Излучение непрерывного лазера модулировалось частотой 170 Гц механическим прерывателем. Рассеянный свет регистрировался тем же измерителем на основе фотодиода ФД 24К, с временем срабатывания (постоянной времени) 10^{-5} с и отклонением линейности, не превосходящим 2%, укрепленным на поворотной

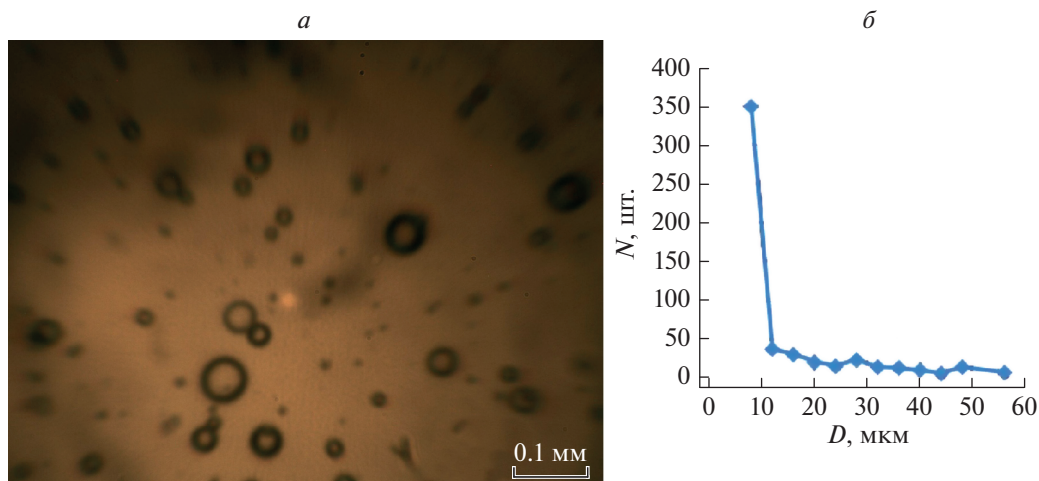


Рис. 2. Статистика капель: вид капель под микроскопом (а); статистика распределения капель по размерам (б), где D – размер капли; N – количество частиц.

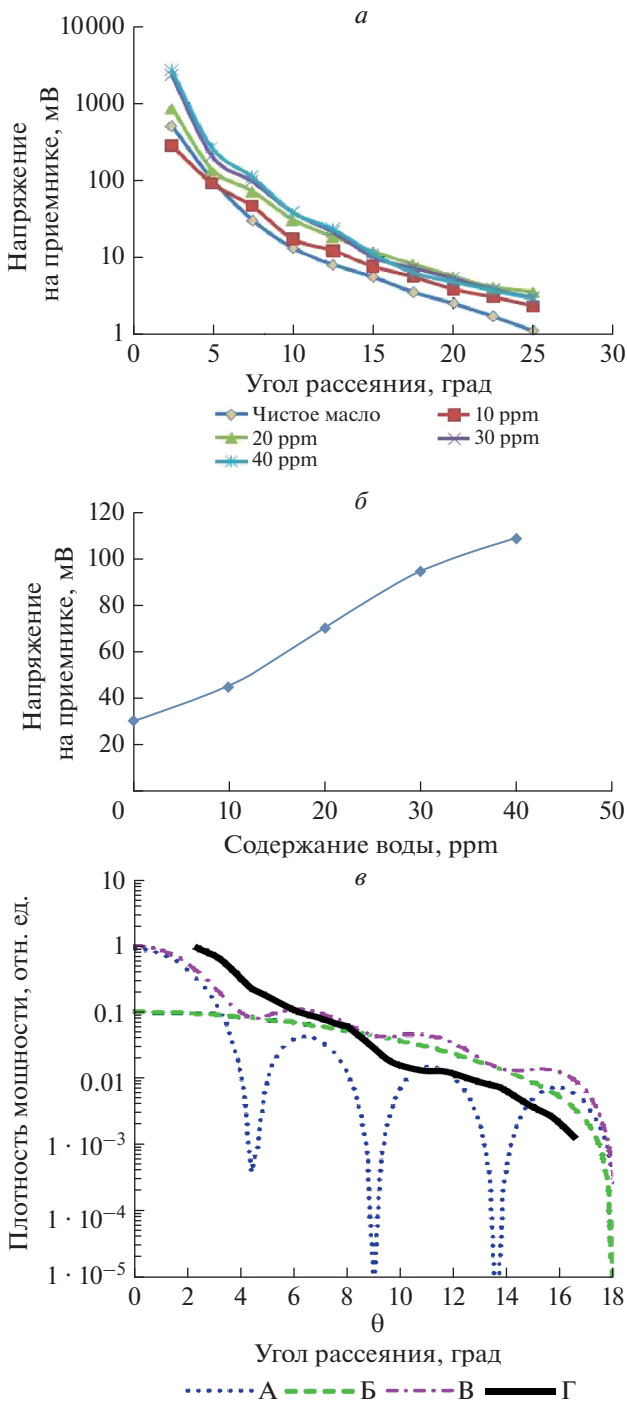


Рис. 3. Экспериментальные результаты: распределение интенсивности рассеянного света по углу для разной концентрации воды (*a*); зависимость интенсивности рассеянного света от концентрации воды при угле рассеяния 7.5° (*б*); сравнение расчетной зависимости интенсивности рассеянного света от угла с экспериментальными данными (*в*): А – дифракционная составляющая, Б – геометрическая составляющая, В – суммарная кривая, Г – экспериментальные результаты с массовой долей воды $40 \cdot 10^{-6}$.

оправе. Сигнал с фотоприемника подавался на селективный вольтметр В-6.9, в результате чего чувствительность увеличивалась еще в восемь раз, а быстродействие уменьшалось на два порядка.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Размеры капель определялись микроскопом и варьировались в интервале от 8 до 50 мкм. Вид капель в микроскопе и распределение капель по размерам, полученное в результате статистической обработки более 30 фотографий с камеры микроскопа со 160 кратным увеличением, приведены на рис. 2. Как и ожидалось, мелких капель (8 мкм) оказалось гораздо больше, чем крупных (больше 15 мкм). Далее в расчетах использовался размер капель, равный 8 мкм.

Экспериментальные результаты зависимости сигнала датчика, регистрирующего интенсивность рассеянного излучения в зависимости от содержания воды в масле, показаны на рис. 3. Видно, что при угле рассеяния 7.5° наблюдается монотонная зависимость сигнала приемника от концентрации воды в масле, что может позволить определять содержание воды по сигналу рассеяния. Следует отметить, что для углов рассеяния, меньших 5° , наблюдается немонотонная зависимость сигнала рассеяния от массовой доли воды в масле, что требует дальнейшего исследования.

Можно предположить, что вклад в рассеяние дает как дифракция, так и преломление [6]. Сравнение результатов расчетов, полученных на основе формул, приведенных в [6], с нашими экспериментальными результатами показало удовлетворительное качественное согласие (см. рис. 3в).

Полученные данные показывают, что сигнал приемника резко падает с характерными неоднородностями на несколько порядков при изменении угла рассеяния до 20° , что только и можно считать совпадением с расчетами. Так как условия эксперимента существенно отличаются от теоретических (близкое расположение фотоприемника по сравнению с протяженностью рассеивающей области), происходит усреднение по разным углам рассеяния и эти особенности гораздо слабее выражены. В доступных нам источниках конфигурация, соответствующая нашему эксперименту, не рассматривалась. Не анализировалась теоретически и схожая с нашей схема фирмы FAUDI [2], причем как самой фирмой, так и другими исследователями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных экспериментальных результатов установлено, что при угле рассеяния 7.5° наблюдается монотонная зависимость сигнала приемника от количества воды, что подтвер-

ждает возможность разработки отечественного датчика контроля содержания свободной воды в несмешивающейся жидкости для достаточно низкой концентрации 10–40 ppm.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Baena S., Repetto S.L., Lawson C.P. et al. // Prog. Aero-sp. Sci.* 2013. V. 60. P. 35.
2. https://www.faudi-aviation.com/fileadmin/user_upload/BA_AFGUARD_Ex_rev2.3_Englisch.pdf.
3. *Луговцов А.В., Никитин С.Ю., Приезжев А.В. // Квант. электрон.* 2008. Т. 38. № 6. С. 606.
4. *Katsumata T., Aizawa H., Komuro S. et al. // Int. Dairy J.* 2020. V. 109. Art. No. 104743.
5. *Калашиников С.П., Мацвейко А.А. // Приб. и техн. эксп.* 1981. № 2. С. 169.
6. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02975280/document>.

Investigation of light scattering on water-in-oil emulsions to control the water content in an immiscible liquid

A. I. Ponomarev^{a, *}, O. A. Zayakin^b, S. P. Kotova^b, N. N. Losevsky^b, T. N. Sapsina^b

^a *Samara National Research University, Samara, Russia*

^b *Lebedev Physical Institute, Samara Branch, Samara, Russia*

**e-mail: andrey2000_10@mail.ru*

The dependence of light scattering on small water droplets in an immiscible liquid on the observation angle and the amount of water has been studied to develop a sensor for monitoring the amount of water in aviation fuel. The work is aimed at finding the optimal scattering angle to obtain the highest sensitivity and monotonicity of the signal depending on the amount of water.

УДК 535.5:538.9

ДИНАМИКА ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ В ОПТИЧЕСКИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С ПРИМЕСНЫМИ ДВУХУРОВНЕВЫМИ СИСТЕМАМИ В РАМКАХ ПОДХОДА ГЛАУБЕРА

© 2022 г. М. Б. Белоненко¹, *, Н. Н. Конобеева¹¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучены особенности распространения предельно коротких оптических импульсов в примесной двухуровневой системе с углеродными нанотрубками, обладающей анизотропными оптическими свойствами. На основании уравнений Максвелла, а также кинетических уравнений для средних значений операторов псевдоспина, полученных с помощью метода Глаубера, выведена система эффективных уравнений для расчета векторного потенциала электромагнитного поля и псевдоспина. Проанализировано влияние параметров системы (температуры и угла наклона вектора поляризации к оси УНТ) на пространственные характеристики предельно короткого импульса.

DOI: 10.31857/S0367676522120079

ВВЕДЕНИЕ

В данной работе мы продолжаем исследование распространения предельно коротких импульсов [1, 2] в оптически анизотропных средах, когда учитывается не только вторая поляризация поля, но и разные величины компонент скорости [3, 4]. В качестве анизотропной среды выступает примесный сегнетоэлектрический кристалл (т.е. его сегнетоэлектрические свойства определяются примесями) со спонтанной поляризацией в определенном интервале температур. Сегнетоэлектрики представляют собой один из наиболее удобных инструментов при изучении конфигурационных фазовых переходов. Как известно, такие кристаллы испытывают фазовый переход второго рода типа “порядок–беспорядок” [5]. Это дает возможность изменять их свойства с помощью температуры, что важно с практической точки зрения [6].

При этом мы учитываем, что сегнетоэлектрическая среда содержит двухуровневую примесь. Эти примеси мы будем описывать в дальнейшем в рамках псевдоспинового формализма [7]. В этом формализме z компонента псевдоспина задает различные (противоположные) направления поляризации примеси. Так собственное значение $+1/2$ соответствует поляризации вдоль полярной оси, а $-1/2$ – в противоположном направлении. Ненулевое среднее значение псевдоспина в равновесном состоянии будет соответствовать фазовому переходу. Отметим, что в оптике двухуров-

невая система играет важную роль, подобную роли гармонического осциллятора в классической физике. А именно, данная модель используется при описании взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Введение в сегнетоэлектрический кристалл углеродных нанотрубок (УНТ) [8] обусловлено тем, что они способствуют стабильному распространению импульса.

МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим примесный сегнетоэлектрик с оптически анизотропными свойствами, в который помещены углеродные нанотрубки, оси которых сонаправлены и находятся под углом θ к оси OX . Полярная ось сегнетоэлектрика направлена под углом ψ к оси OX (рис. 1). Оси OX , OY и OZ показаны на рис. 1 [9]. Считаем, что в начальный момент времени электрическое поле направлено вдоль оси OX . Под действием этого поля в УНТ начинает течь ток и возникает поле вдоль оси OY .

Ранее при изучении фазовых переходов мы использовали феноменологический подход для записи уравнения движения [10]. В данной работе динамические свойства рассматриваемой системы будем изучать в рамках метода Глаубера [11].

Поскольку поляризация пропорциональна псевдоспину, то кинетическое уравнение для описания динамики псевдоспина можно записать в виде [12]:

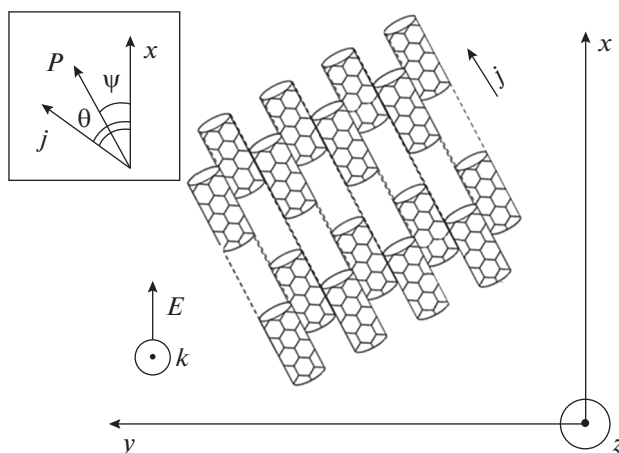


Рис. 1. Геометрия задачи.

$$\begin{aligned} \langle \dot{S}_x \rangle &= -\frac{\langle S_x \rangle - 0.5 \text{th}(\beta(J \langle S_x \rangle + \Delta_{\perp} \langle S_x \rangle \alpha + \gamma \langle S_x \rangle_{zz} + \delta E_x))}{T_{imp}}, \\ \langle \dot{S}_y \rangle &= -\frac{\langle S_y \rangle - 0.5 \text{th}(\beta(J \langle S_y \rangle + \Delta_{\perp} \langle S_y \rangle \alpha + \gamma \langle S_y \rangle_{zz} + \delta E_y))}{T_{imp}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где T_{imp} – время релаксации примеси, α, γ – константы, определяемые величиной обменного взаимодействия (J), $\langle S_i \rangle, i = (x, y)$ – среднее значение x и y компонент псевдоспина, точкой здесь обозначается производная по времени, Δ_{\perp} – Лапласиан в направлении перпендикулярном оси УНТ, $\beta = 1/(k_B T), k_B$ – постоянная Больцмана, T – температура, δ – дипольный момент, (E_x, E_y) – компоненты электрического поля вдоль осей OX и OY соответственно.

Уравнения Максвелла можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{E} = -\mu \cdot \langle \ddot{\vec{S}} \rangle + \frac{4\pi}{c} \frac{\partial \vec{j}}{\partial t}, \quad (2)$$

где c – скорость света, μ – константа, связанная с поляризацией примесной системы.

С учетом калибровки: $\vec{E} = -c^{-1} \partial \vec{A} / \partial t$, и вида векторного потенциала $\vec{A} = (A_x(x, y, z, t), A_y(x, y, z, t), 0)$, а также плотности электрического тока $\vec{j} = (j_x(x, y, z, t), j_y(x, y, z, t), 0)$, уравнение (2) примет вид:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{A} = -\mu \cdot \langle \dot{\vec{S}} \rangle + \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{A}). \quad (3)$$

Далее перейдем в цилиндрическую систему координат и перепишем уравнение (3) на две компоненты векторного потенциала:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V_e^2} \frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial A_x}{\partial r} \right) - \frac{\partial^2 A_x}{\partial z^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 A_x}{\partial \phi^2} &= \\ &= -\mu \cos \psi \frac{\partial \langle S_x \rangle}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} j_x(A_x, A_y), \\ \frac{1}{V_o^2} \frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial A_y}{\partial r} \right) - \frac{\partial^2 A_y}{\partial z^2} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 A_y}{\partial \phi^2} &= \\ &= -\mu \sin \psi \frac{\partial \langle S_y \rangle}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} j_y(A_x, A_y), \\ V_o &= c/n_o, \quad V_e = c/n_e \end{aligned} \quad (4)$$

r, z, ϕ – координаты в цилиндрической системе, n_e, n_o – показатели преломления в направлении x и y соответственно.

Запишем стандартное выражение для плотности тока вдоль оси УНТ [8]:

$$j = 2e \sum_{s=1}^m \int v_s(p) f(p, s) dp, \quad (5)$$

где e – заряд электрона, интегрирование ведется по первой зоне Бриллюэна, p – компонента квазиимпульса электрона, $v_s(p) = \partial \epsilon_s(p) / \partial p$ – скорость электронов, $f(p, s)$ – функция распределения Ферми, $\epsilon_s(p)$ – закон дисперсии электронов УНТ [13]:

$$\epsilon_s(p) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos(ap) \cos\left(\frac{\pi s}{m}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi s}{m}\right)}, \quad (6)$$

где $s = 1, 2, \dots, m$, нанотрубка имеет тип $(m, 0)$, $\gamma_0 \approx 2.7$ эВ, $a = 3b/2\hbar, b$ – расстояние между соседними атомами углерода

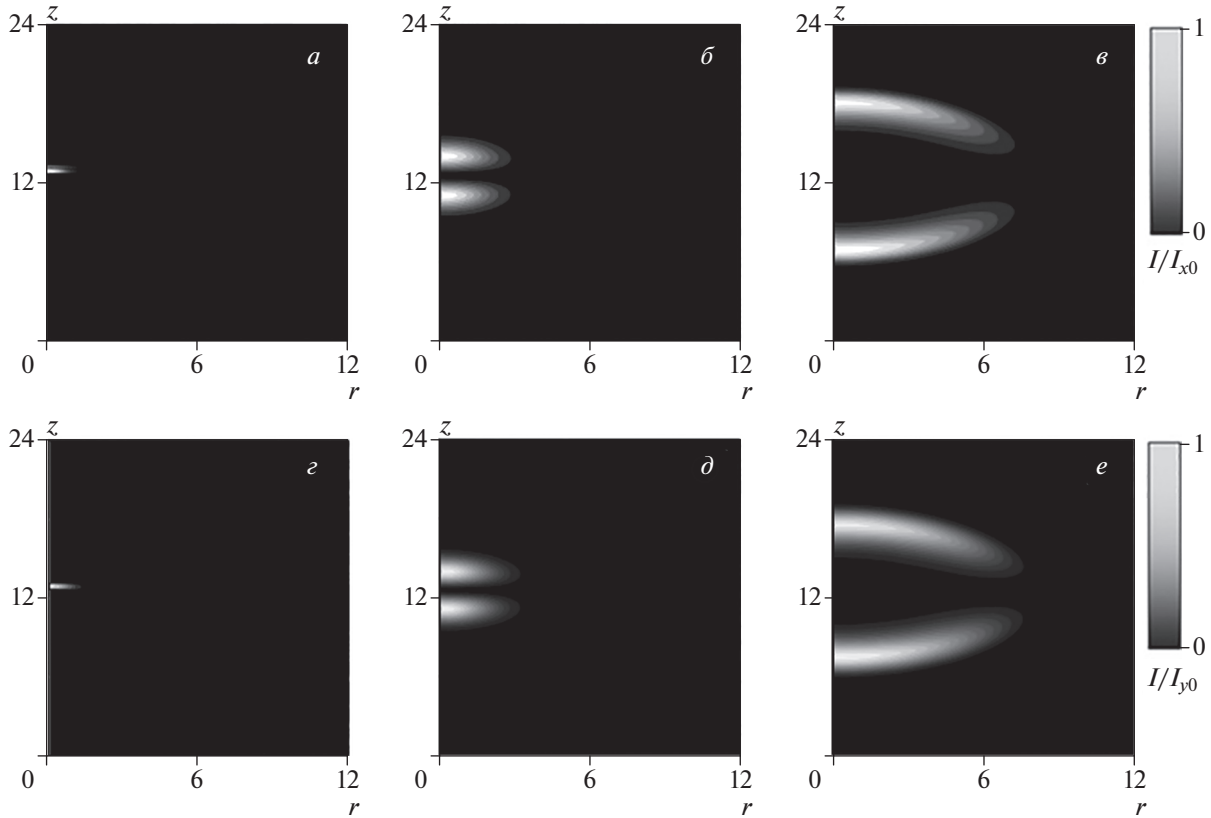


Рис. 2. Зависимость интенсивности для компонент электрического поля E_x (а-в) и E_y (з-е) от координат в различные моменты времени: (а, з) $t = 1$; (б, д) $t = 5$; (в, е) $t = 9$. Единица по времени соответствует 10^{-13} с, по координатам (z и r) – $2 \cdot 10^{-5}$ м. I_{x0}, I_{y0} – максимальная интенсивность для x и y компонент.

Согласно выполненным в работе [14] расчетам можно утверждать, что эффект накопления заряда, возникающий из-за неоднородности поля, для импульсов рассматриваемой нами длительности можно не учитывать. Это позволяет положить производную по углу равной нулю. В этом случае систему уравнений (4) можно переписать в виде:

$$\begin{cases}
 \Delta A_x + \frac{4e\sigma\gamma_0 a \cos\theta}{c} \times \\
 \times \sum_{q=1}^{\infty} b_q \sin\left(\frac{aeq(A_x \cos\theta + A_y \sin\theta)}{c}\right) - \\
 - \mu \cos\psi \frac{\partial \langle S_x \rangle}{\partial t} = \frac{1}{V_e^2} \frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2}, \\
 \Delta A_y + \frac{4e\sigma\gamma_0 a \sin\theta}{c} \times \\
 \times \sum_{q=1}^{\infty} b_q \sin\left(\frac{aeq(A_x \cos\theta + A_y \sin\theta)}{c}\right) - \\
 - \mu \sin\psi \frac{\partial \langle S_y \rangle}{\partial t} = \frac{1}{V_0^2} \frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2}, \\
 \Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}
 \end{cases} \quad (7)$$

σ – концентрация электронов,

$$b_q = \sum_s \frac{q}{\gamma_0} a_{sq} \int_{ZB} dp' \cos(p'q) \frac{\exp(-\epsilon_s(p')/k_B T)}{1 + \exp(-\epsilon_s(p')/k_B T)}, \quad (8)$$

a_{sq} – коэффициенты в разложении закона дисперсии электронов (6) в ряд Фурье.

Отметим, что вследствие убывания коэффициентов b_q с ростом q в сумме можно ограничиться первыми 10 слагаемыми.

Система уравнений (1) и (7) после обезразмеривания решалась численно с начальными условиями следующего вида:

$$\begin{aligned}
 A_x &= Q \exp\left(-\left(\frac{z}{l_z}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{l_r^2}\right), \\
 \frac{d}{dt} A_x &= \frac{2uQ}{l_z^2} \exp\left(-\left(\frac{z}{l_z}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{l_r^2}\right), \\
 A_y &= 0, \quad \frac{d}{dt} A_y = 0, \quad S_x = S_0, \\
 S_y &= 0, \quad \beta = \frac{atg(2S_0)}{JS_0},
 \end{aligned} \quad (9)$$

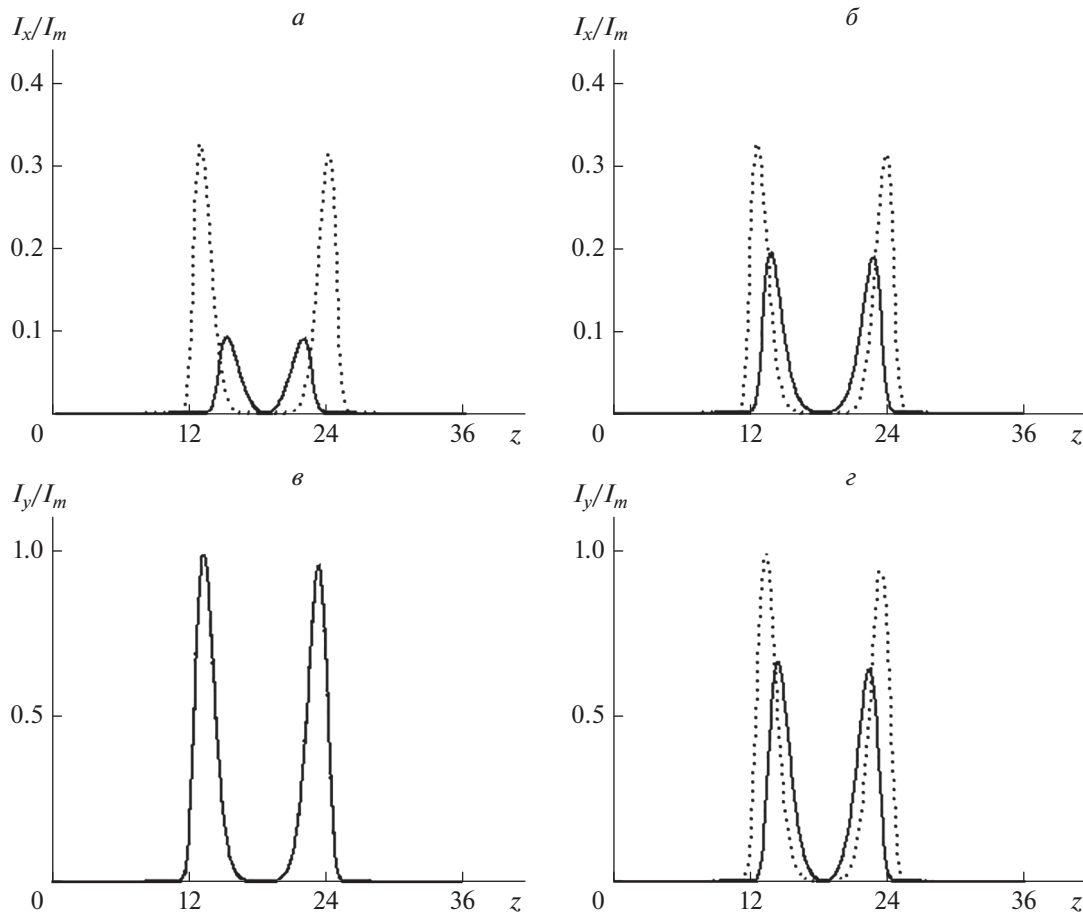


Рис. 3. Зависимость интенсивности для компонент электрического поля E_x (верхний ряд рисунков) и E_y (нижний ряд рисунков) от координат ($t = 9$): (а, в) $S_0 = 0$; (б, г) $S_0 = 0.25$. Точечная кривая – $\theta \neq \psi$; сплошная кривая – $\theta = \psi$. Единица по координатам (z и r) – $2 \cdot 10^{-5}$ м. I_m – максимальная интенсивность для всех случаев.

где Q – амплитуда электромагнитного импульса на входе в среду с УНТ, I_z, I_r – определяют ширину импульса вдоль направлений z и r соответственно, u – начальная скорость импульса вдоль оси z , S_0 – величина псевдоспина в начальный момент времени, которая позволяет определить обратную температуру β при $t = 0$.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Как показали результаты вычислений, пространственные производные от псевдоспина в уравнении (1) не оказывают влияния на динамику импульса. Это позволяет пренебречь ими в последующих расчетах.

Возникающая эволюция x и y компоненты электрического поля импульса представлена на рис. 2. При этом мы рассматриваем фазу, которой соответствует значение $S_0 = 0$. Отметим, что $I_x \propto E_x^2$, $I_y \propto E_y^2$.

Рисунок 2 иллюстрирует сильное расплывание импульса, причем также наблюдается существенное возрастание интенсивности для обеих компонент поля. Это можно объяснить дополнительной поляризацией примесей под действием импульса переменного электрического поля

Далее проанализируем влияние углов θ и ψ на форму предельно короткого импульса (рис. 3). Мы будем сравнивать два случая: когда поляризация сонаправлена с осью УНТ и нет, т.е. когда $\theta \neq \psi$.

Согласно рис. 3 можно заключить, что угол, который составляет вектор поляризации с осью УНТ, не играет никакой роли для второй компоненты поля при $S_0 = 0$, что соответствует температуре в наших расчетах $T = 123$ К. Для второго фазового состояния ($T = 56$ К) величины углов оказывают влияние как на амплитуду поля импульса, так и на его пространственную локализацию.

Влияние температуры на характеристики предельно короткого импульса в сегнетоэлектрической среде с углеродными нанотрубками в случае, когда $\theta \neq \psi$ представлено на рис. 4.

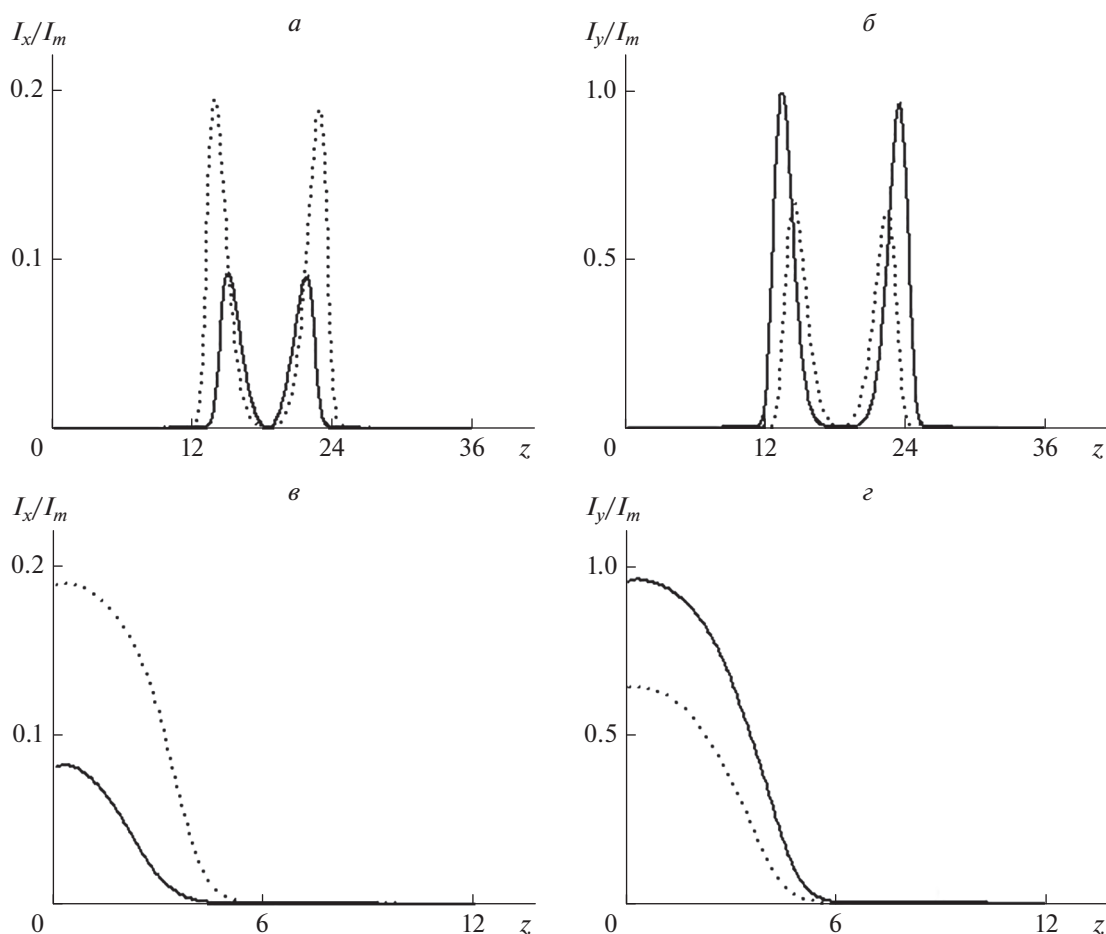


Рис. 4. Зависимость интенсивности для компонент электрического поля E_x (а, в) и E_y (б, з) от координат ($t = 9$, $\theta \neq \psi$): верхний ряд рисунков – продольные срезы (при $r = 0$), нижний ряд рисунков – поперечные срезы интенсивности по максимуму интенсивности. Сплошная линия соответствует $T = 123$ К, точечная – $T = 56$ К. Единица по координатам (z и r) – $2 \cdot 10^{-5}$ м. I_{x0} , I_{y0} – максимальная интенсивность для x и y компонент.

Построенные зависимости позволяют сделать вывод, что температура оказывает существенное влияние не только на амплитуду предельно короткого оптического импульса, но и на величину его продольного и поперечного расплывания. Таким образом, по ширине и амплитуде импульса можно определить фазовое состояние, в котором находится система.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, построена модель, описывающая динамику предельно короткого импульса в сегнетоэлектрической среде с оптически анизотропными свойствами в присутствии углеродных нанотрубок, в рамках подхода Глаубера. Установлено, что угол, который составляет вектор поляризации с осью УНТ, влияет на амплитуду электромагнитного импульса. Показано, что температура позволяет управлять пространственными

характеристиками импульса (амплитудой и шириной).

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки РФ и Совета по грантам Президента РФ (проект № МД-3173.2021.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kärtner F.X.* Few-cycle laser pulse generation and its applications. Berlin: Springer, 2004. 448 p.
2. *Krausz F., Ivanov M.* // *Rev. Mod. Phys.* 2009. V. 81. No. 1. P. 163.
3. *Konobeeva N.N., Belonenko M.B.* // *Int. J. Mod. Phys. B.* 2021. V. 35. No. 19. Art. No. 2150197.
4. *Konobeeva N.N., Belonenko M.B.* // *Nanosyst. Phys. Chem. Math.* 2021. V. 12. No. 4. P. 430.
5. *Blinc R.* // *Ferroelectrics.* 2010. V. 2004. No. 1. P. 3.
6. *Zhang C.X., Yang K.L., Ji P. et al.* // *J. Appl. Phys.* 2018. V. 123. Art. No. 094102.

7. Блиц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и анти-сегнетоэлектрики. Динамика решетки. М.: Мир, 1975. 402 с.
8. Елецкий А.В. // УФН. 1997. Т. 167. С. 945; *Eletsii A.V.* // Phys. Usp. 1997. V. 40. No. 9. P. 899.
9. Матвеев А.Н. Оптика. М.: Высшая школа, 1985. 351 с.
10. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 381 с.
11. *Glauber R.J.* // J. Math. Phys. 1963. V. 4. P. 294.
12. *Белоненко М.Б., Сасов А.С.* // ЖТФ. 2007. Т. 77. № 4. С. 131; *Belonenko M.B., Sasov A.S.* // Tech. Phys. 2007. V. 52. No. 4. P. 524.
13. *Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C.* Science of fullerenes and carbon nanotubes. Oxford: Academic Press, 1996. 965 p.
14. *Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B.* // J. Appl. Phys. 2013. V. 114. Art. No. 143106.

Dynamics of extremely short pulses in an anisotropic optical medium with two-level impurity systems in the framework of Glauber approach

М. В. Белоненко^{a,*}, N. N. Konobeeva^a

^a *Volgograd State University, Volgograd, 400062 Russia*

^{*}*e-mail: yana_nn@volsu.ru*

We studied the propagation of extremely short optical pulses in an impurity two-level system with carbon nanotubes. This system has anisotropic optical properties. Based on the Maxwell equations, as well as the kinetic equations for the average values of the pseudospin operators obtained using the Glauber method, a system of effective equations for the vector potential of the electromagnetic field and the pseudospin is derived.

УДК 538.9

РАССЕЯНИЕ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКОГО ИМПУЛЬСА НА УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ

© 2022 г. Н. Н. Конобеева¹, *, М. Б. Белоненко¹¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: yana_nn@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучены особенности взаимодействия электромагнитного поля со средой с нелинейностью 3–5–7 порядков без приближения медленно меняющихся амплитуд и фаз. Проанализирована эволюция предельно коротких оптических импульсов при их рассеянии на углеродной нанотрубке, помещенной в диэлектрическую среду. Показано, что наличие в среде одной углеродной нанотрубки приводит к сжатию импульса, что важно с практической точки зрения, например, для обнаружения нанотрубок и их типов, а также примесей на них.

DOI: 10.31857/S0367676522120195

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой квазиодномерные макромолекулы углерода [1] и вызывают повышенный интерес исследователей в связи с их уникальными свойствами, открывающими широкие перспективы для создания элементной базы новых устройств в различных прикладных областях. Непараболичность закона дисперсии электронов нанотрубок определяет ярко выраженную нелинейность отклика нанотрубок на воздействие электромагнитных полей умеренной интенсивности [2]. Это обстоятельство позволяет наблюдать ряд уникальных физических явлений в средах с УНТ в потенциально легко достижимых экспериментальных условиях, включая солитоны.

С другой стороны, важной задачей современных исследователей солитонов [3, 4] является обобщение существующих моделей с целью их приближения к реальным физическим задачам. Это можно сделать с учетом нелинейности разных видов, причем не только третьего, но и более высоких порядков [5, 6]. Нелинейность этого типа можно обнаружить в совершенно разных средах, например, в воздухе, оптическом стекле и т.д.

Распространение и самолокализация многомерных нелинейно-оптических структур [7] представляют большой интерес как для фундаментальной, так и для прикладной науки. Наиболее распространенным является случай учета кубической нелинейности [8, 9]. В работе [10] авторы анализируют устойчивость трехмерных диссипативных со-

литонов с собственной завихренностью S в среде 3–5 степени в комплексном уравнении Гинзбурга–Ландау. Показано, что необходимым условием устойчивости всех вихревых солитонов (кроме $S = 0$) является наличие ненулевой диффузии в поперечной плоскости. Получены условия устойчивости одномерных вихревых решений в среде с нелинейностью 3–5–7 порядков [11]. Существование и устойчивость солитонов брэгговской решетки в среде с нелинейностью 3–5 порядков показано в работе [12]. Введение нелинейности позволяет предотвратить пространственно-временной коллапс предельно коротких импульсов с аномальной дисперсией в плоском волноводе с чисто керровской нелинейностью [13].

В данной работе исследуется распространение двумерного предельно короткого оптического импульса (ПКОИ) в нелинейной среде 3–5–7 порядков с учетом рассеяния на УНТ. Отметим, что порядок нелинейности относится именно к диэлектрической матрице, в которую помещена УНТ. Важным вопросом в данной работе является изучение влияния концентрации углеродных нанотрубок в среде. А именно, есть ли эффекты при учете только одной нанотрубки.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Волновой вектор электромагнитного поля импульса направлен перпендикулярно оси УНТ

(вдоль оси OY), само поле вдоль оси нанотрубки (ось OZ).

Запишем уравнение Максвелла для электромагнитного поля в следующем виде:

$$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (1)$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость среды, c – скорость света.

Поляризация \vec{P} состоит из двух компонент (линейной и нелинейной):

$$\vec{P} = \vec{P}_L + \vec{P}_{NL}. \quad (2)$$

При этом линейная часть учтена в диэлектрической проницаемости.

Для нелинейной части выбрана модель в виде конкурирующих нелинейностей 3, 5 и 7 порядков:

$$\vec{P}_{NL} = \alpha |\vec{E}|^2 \vec{E} - \beta |\vec{E}|^4 \vec{E} + \gamma |\vec{E}|^6 \vec{E} \quad (3)$$

здесь α, β, γ – соответствующие коэффициенты при нелинейных слагаемых. В декартовой системе координат векторы \vec{E} и \vec{P} имеют вид: $\vec{E} = (0, 0, E(x, y, t))$ и $\vec{P} = (0, 0, P(x, y, t))$.

Авторами неоднократно исследовалось распространение предельно короткого импульса в среде, содержащей массив углеродных нанотрубок [14, 15]. Уравнение (1) для компоненты электрического поля, направленной вдоль оси УНТ (с учетом $\vec{E} = c^{-1} \partial \vec{A} / \partial t$) имеет вид:

$$\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \right) + \alpha \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^3 - \beta \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^5 + \gamma \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^7 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{4\pi e n_0 f_k}{c} \sin \left(\frac{k a e A}{c} \right), \quad (4)$$

$$f_k = \sum_s a_{sk} \int_{BZ} dp \cos(pk) \frac{\exp(-\epsilon_s(p)/k_B T)}{\exp(-\epsilon_s(p)/k_B T) + 1},$$

$$a_{sk} = \int_{BZ} dp \cos(pk) \epsilon_s(p),$$

где e – заряд электрона, $\epsilon_s(p)$ – закон дисперсии УНТ, p – компонента квазиимпульса электрона проводимости вдоль оси нанотрубки, s – число атомов по периметру УНТ, a_{sk} – коэффициенты в разложении закона дисперсии электронов в ряд Фурье. Интегрирование ведется по первой зоне Бриллюэна. В этом случае выражение для плотности электрического тока имеет вид правой части уравнения (4). Отметим, что в сумме по k мы учитываем первые 10 слагаемых в виду убывания коэффициентов f_k [16].

Отметим, что приведенная модель учитывает, что в среде находится массив УНТ. В случае же

одной трубки, необходимо умножить правую часть уравнения (4) на:

$$\frac{1}{\pi g_x g_y} \exp \left(- \left(\frac{x - x_{cnt}}{g_x} \right)^2 \right) \exp \left(- \left(\frac{y - y_{cnt}}{g_y} \right)^2 \right), \quad (5)$$

где $(x_{cnt}, y_{cnt}) = (15 \text{ отн. ед.}, 27 \text{ отн. ед.})$ – координаты нанотрубки в среде, g_x, g_y – дисперсия нормального распределения вдоль обоих направлений. Данная формула описывает падение нелинейности в присутствии УНТ. В сглаженной форме заменена на функцию Гаусса. Отметим, что при дисперсии, стремящейся к нулю, выражение (5) переходит в дельта-функцию.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Уравнение (5) решалось численно [17]. Начальное условие выбиралось в гауссовом виде:

$$A(x, y, 0) = Q \exp \left(- \left(\frac{x - x_0}{\gamma_x} \right)^2 \right) \exp \left(- \left(\frac{y - y_0}{\gamma_y} \right)^2 \right),$$

$$\frac{dA(x, y, 0)}{dt} = 2Qu \frac{y - y_0}{\gamma_y^2} \times \exp \left(- \left(\frac{x - x_0}{\gamma_x} \right)^2 \right) \exp \left(- \left(\frac{y - y_0}{\gamma_y} \right)^2 \right) \quad (6)$$

здесь Q – начальная амплитуда импульса, γ_x, γ_y определяют ширину импульса, (x_0, y_0) – начальное смещение центра импульса.

Ниже приводятся рисунки с эволюцией импульса в среде, содержащей массив УНТ (рис. 1), и одну УНТ (рис. 2).

Из рисунков видно, что при рассеянии на одной углеродной нанотрубке наблюдается увеличение скорости импульса. Также можно отметить, что при распространении предельно короткого импульса в среде с массивом УНТ, он распадается на несколько, отличающихся по амплитуде, причем большая часть энергии сосредоточена в основном импульсе. В случае одной УНТ этот распад происходит медленнее. “Хвост”, образующийся за основным импульсом, как в случае с массивом УНТ, не появляется. Это способствует локализации энергии импульса в продольном направлении.

На рис. 3 показано изменение ширины импульса со временем. Рисунок 3а иллюстрирует, что при распространении импульса в нелинейной среде с неоднородностью в виде одной углеродной нанотрубки, дисперсия в направлении распространения импульса меньше, чем в среде, содержащий массив УНТ. В тоже время за счет рассеяния на нанотрубке поперечная ширина импульса больше (рис. 3б).

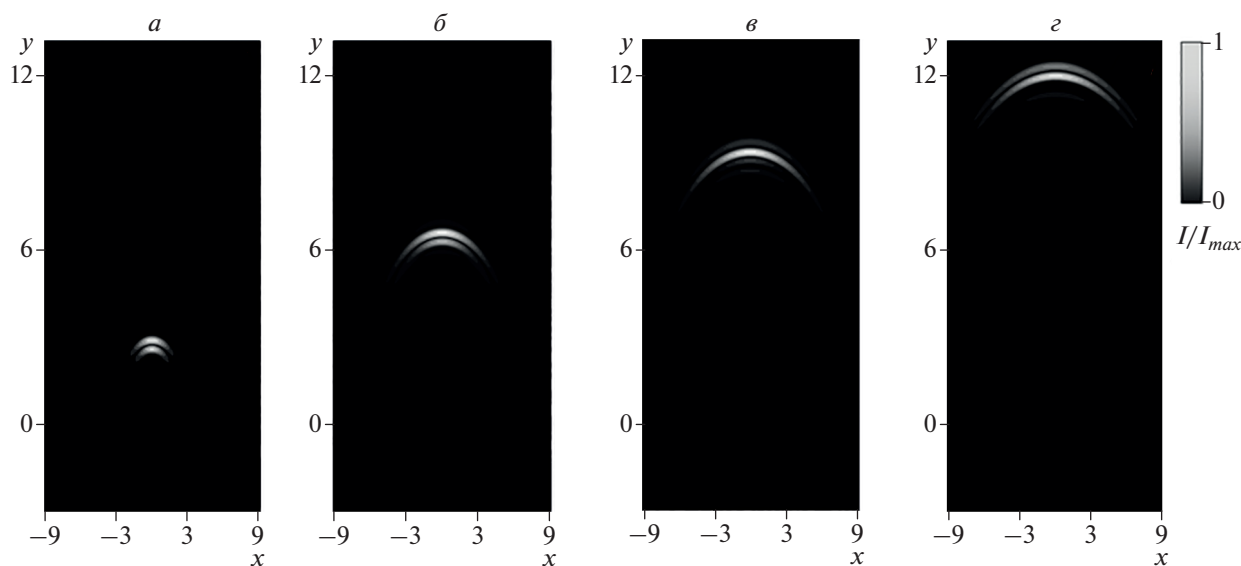


Рис. 1. Эволюция импульса в случае массива УНТ: $t = 3$ (а), 7 (б), 10 (в), 13 (г). Единица по времени соответствует $2 \cdot 10^{-14}$ с, единица по координате $-2 \cdot 10^{-5}$ м. I_{max} – максимальное значение интенсивности в начальный момент времени.

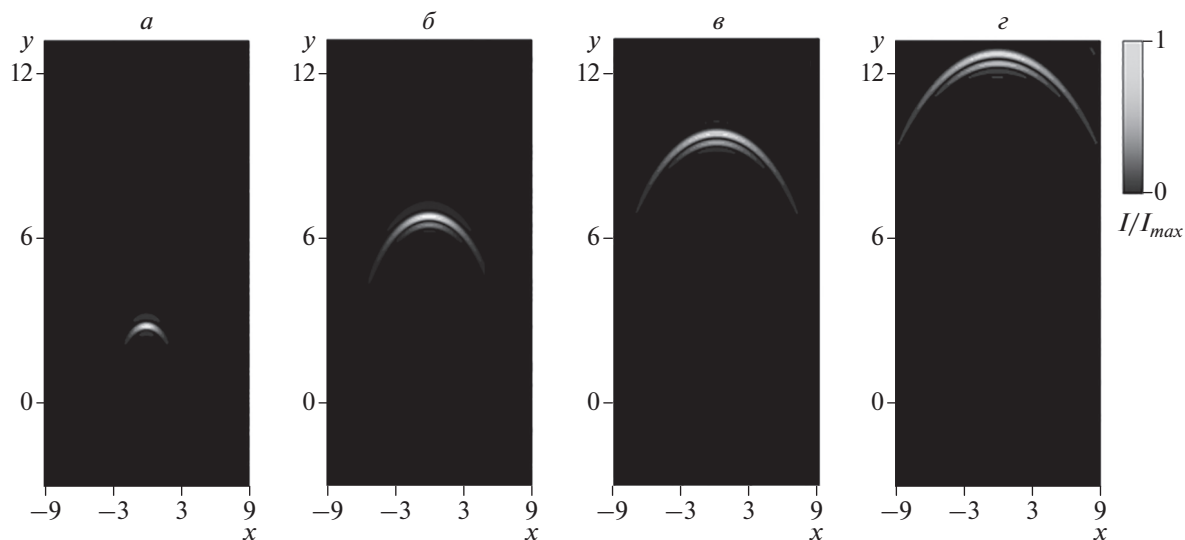


Рис. 2. Эволюция импульса в случае одной УНТ: $t = 3$ (а), 7 (б), 10 (в), 13 (г). Единица по времени соответствует $2 \cdot 10^{-14}$ с, единица по координате $-2 \cdot 10^{-5}$ м. I_{max} – максимальное значение интенсивности в начальный момент времени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, разработана модель распространения ПКОИ в нелинейной среде 3–5–7 порядков, содержащей углеродные нанотрубки. Установлено, что при рассеянии на одной нанотрубке “хвост” за импульсом не образуется, в от-

личие от случая с массивом УНТ. Можно управлять скоростью и шириной импульса за счет концентрации углеродных нанотрубок в среде.

Авторы выражают благодарность Министерству науки и высшего образования Российской Федерации за поддержку численного моделирования и

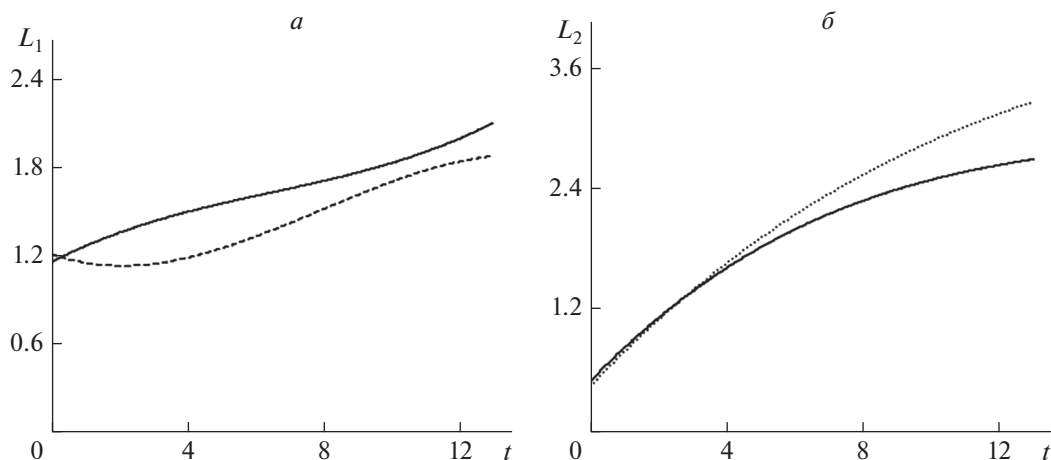


Рис. 3. Зависимость продольной (L_1) (а) и поперечной (L_2) (б) ширины импульса от времени. Сплошная линия соответствует массиву УНТ, пунктирная – одной нанотрубке. Единица по времени соответствует $2 \cdot 10^{-14}$ с, единица по ширине – $2 \cdot 10^{-5}$ м.

параллельных вычислений в рамках темы государственного задания (проект № 0633-2020-0003).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Iijima S.* // Nature. 1991. V. 354. P. 56.
2. *Yamashita S.* // APL Photonics. 2019. V. 4. Art. No. 034301.
3. *Silberberg Y.* // Opt. Lett. 1990. V. 15. P. 1282.
4. *Kanashov A.A., Rubenchik A.M.* // Physics D. 1981. V. 4. P. 122.
5. *Bagnato V.S., Frantzeskakis D.J., Kevrekidis P.G. et al.* // Rom. Rep. Phys. 2015. V. 67. P. 5.
6. *Farina A., Saut K.-C.* Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations. Providence: American Mathematical Society, 2008. 180 p.
7. *Mihalache D.* // Rom. Rep. Phys. 2017. V. 69. P. 403.
8. *Cao X.D., Agrawal G.P., McKinstrie C.J.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 49. P. 4085.
9. *Brтка M., Gammal A., Malomed B.A.* // Phys. Rev. A. 2010. V. 82. Art. No. 053610.
10. *Mihalache D., Mazilu D., Lederer F. et al.* // Phys. Rev. A. 2007. V. 76. Art. No. 045803.
11. *Reyna A.S., Malomed B.A., de Araújo C.B.* // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. Art. No. 033810.
12. *Atai J., Malomed B.A.* // Phys. Lett. A. 2001. V. 284. P. 247.
13. *Fibich G., Ilan B.* // Opt. Lett. 2004. V. 29. No. 8. P. 887.
14. *Конобеева Н.Н., Белоненко М.Б.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 12. С. 1706; *Konobeeva N.N., Belonenko M.B.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 12. P. 1359.
15. *Konobeeva N.N., Fedorov E.G., Rosanov N.N. et al.* // J. Appl. Phys. 2019. V. 126. Art. No. 203103.
16. *Belonenko M.B., Demushkina E.V., Lebedev N.G.* // J. Russ. Laser Res. 2006. V. 27. P. 457.
17. *LeVeque R.J.* Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007. 356 p.

Scattering of an extremely short pulse on a carbon nanotube

N. N. Konobeeva^{a, *}, M. B. Belonenko^a

^a Volgograd State University, Volgograd, 400062 Russia

*e-mail: yana_nn@volsu.ru

We studied the interaction of an electromagnetic field with a medium with a nonlinearity of 3–5–7 orders, without the approximation of slowly changing amplitudes and phases. The evolution of extremely short optical pulses during their scattering by a carbon nanotube placed in a dielectric medium is analyzed. It is shown that the presence of one carbon nanotube in the medium leads to pulse compression, which is important from a practical point of view, for example, for detecting nanotubes and their types, as well as impurities on them.

УДК 538.9

ГРАФЕНОВЫЕ НАНОЛЕНТЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПРИМЕСНЫМИ АТОМАМИ БОРА, КАК ОСНОВА ДЛЯ ДВУМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

© 2022 г. И. В. Запороцкова¹, С. В. Борознин¹, *, М. Б. Белоненко¹,
Е. С. Дрючков¹, Ю. В. Бутенко¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: boroznin@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучена зонная структура графеновых нанолент, легированных борными примесями, и проанализирована возможность их использования для формирования двумерных фотонных кристаллов. Установлено, что изменение ширины запрещенной зоны графеновых нанолент в широких пределах обуславливает изменение проводимости и, следовательно, показателя преломления.

DOI: 10.31857/S0367676522120316

ВВЕДЕНИЕ

Развитие многих отраслей современной физики, включая оптику, невозможно без использования новых материалов. Среди них наибольшее внимание привлекают фотонные кристаллы, чьи уникальные свойства обеспечили им широкие сферы применения в оптических исследованиях и практических приложениях [1, 2]. Одним из преимуществ данных объектов является наличие фотонных запрещенных зон (по аналогии с запрещенными зонами в твердых телах), возникающих благодаря периодически (квазипериодически) изменяющемуся показателю преломления. Таким образом, при попадании частоты фотона в значения границ запрещенной зоны частица не сможет пройти сквозь кристалл [3, 4]. Еще одной существенной характеристикой фотонных кристаллов является наличие зависимости между углом падения излучения и временем задержки светового сигнала при прохождении через кристалл. При этом становится возможным менять время задержки светового сигнала при прохождении через кристалл. Поэтому изучение электронно-энергетических характеристик наноматериалов, выступающих в качестве фотонных кристаллов, крайне важно и актуально.

Помимо изучения свойств фотонных кристаллов весьма остро стоит вопрос и о материалах для их изготовления. Желательно изготавливать фотонные кристаллы на основе одной матрицы, дублируя разные области тем или иным способом.

Мы предлагаем в качестве матрицы использовать графеновые наноленты, содержащие примесные атомы бора. Хорошо известно, что донорно-акцепторные реакции приводят к существенному сдвигу энергии Ферми даже при ничтожно малых концентрациях замещающих гетероатомов. Если электронные свойства нанолент сильно зависят от замещения гетероатомами, то контролируемый синтез материала *p*- или *n*-типа должен быть осуществим с помощью аналогичных методов [5–7].

Одним из вариантов управления физико-химическими свойствами нанолент является легирование графена бором [8]. Это обусловлено несколькими предпосылками. Во-первых, из-за незначительной разницы в размерах атомов введение примесей не вызывает существенных изменений в топологии наноленты. Во-вторых, различие в электроотрицательности является предпосылкой формирования новых свойств нанолент, полезных при их использовании в качестве фотонных кристаллов. В-третьих, способ легирования углеродных наноструктур бором был неоднократно описан в практических работах, что позволяет говорить о практической реализуемости синтеза и промышленного использования данного материала [8, 9].

ТЕОРИЯ МЕТОДА

Отметим, что наиболее простой способ изменения показателя преломления для данной зада-

чи связан с изменением ширины запрещенной зоны. Так

$$n^2 = \text{Re}\epsilon + k^2, \quad (1)$$

где n – показатель преломления, ϵ – диэлектрическая проницаемость, k – мнимая часть комплексного показателя преломления, ответственная за поглощение. В свою очередь поглощение α определяется проводимостью образца σ согласно общепринятой формуле:

$$\alpha = \sigma / cn\epsilon_0, \quad (2)$$

где c – скорость света, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. Связь проводимости с шириной запрещенной зоны хорошо известна:

$$\sigma \sim \exp(-E_g / 2k_b T), \quad (3)$$

где ΔE_g – ширина запрещенной зоны, k_b – постоянная Больцмана, T – температура [10]. Все вышеописанное обуславливает возможность управления показателем преломления при модифицировании нанолент.

Для создания фотонных кристаллов на основе подобных наноматериалов необходимо на фундаментальном уровне понимать механизмы влияния концентрации примесных атомов на ширину запрещенной щели. Для достижения поставленной задачи в данной статье описывается модельный эксперимент по созданию углеродных нанолент, содержащих примесные замещающие атомы бора, используемые в различных концентрациях и в различных вариантах расположения, для анализа зависимости ширины запрещенной щели нанолент от наличия и количества атомов В. Расчеты были выполнены с применением метода DFT [11, 12].

ОПИСАНИЕ МОДЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследования проводимости согласно приведенным выше формулам был выполнен модельный эксперимент. Ширину кластера наноленты для более удобного сопоставления с результатами модельных экспериментов с нанотрубками мы обозначали как “хиральность”.

Поскольку использование графеновых нанолент, содержащих примесные атомы бора, связано с изучением периодически распределенных в них примесей в рамках модельного эксперимента, нами были выбраны определенные концентрации борных примесей по аналогии с бороуглеродными нанотрубками: 50, 25 и 15% [5, 13, 14]. Взаимное расположение атомов бора и углерода в наноленте представлено на рис. 1, где изображены кластеры исследуемых наноструктур с различным расположением атомов В и С.

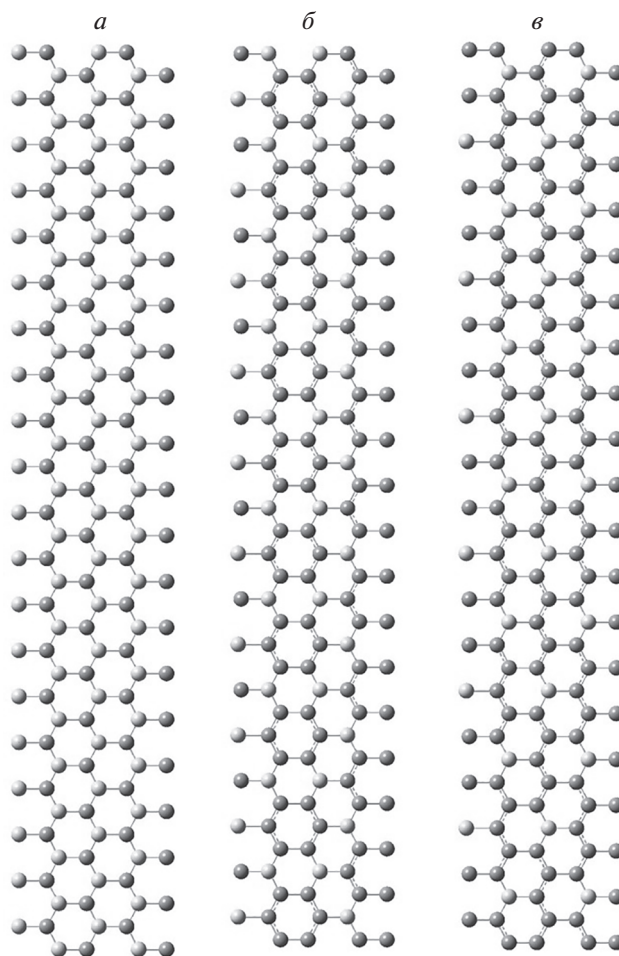


Рис. 1. Кластеры графеновых нанолент с различной концентрацией атомов бора: 50 (а), 25 (б) и 15% (в).

Для выполнения модельного эксперимента и установления основных свойств, характеристик и выяснения электронного строения нанолент был построен кластер графенового нанослоя с замещенными атомами бора, состоящий из четырех элементарных ячеек, как это показано на рис. 1. Теория функционала плотности была выбрана в качестве основного расчетного метода. Погрешность данного метода при выбранном базисном наборе (6-31G с функционалом B3LYP) дает отклонение до 1 ккал/моль, что следует из результатов проверки на 300 соединениях путем сравнения с экспериментальными данными [15, 16]. Во всех графеновых нанолентах, независимо от их диаметров, длина связи между атомами В и С выбиралась равной 1.4 Å. В результате теоретических исследований был определен основной параметр, влияющий на проводящие и оптические свойства наноструктур, а именно ширина запрещенной зоны. Значения ее в зависимости от диаметра приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения ширины запрещенной зоны для углеродных нанослоев с различным содержанием атомов бора. Для сравнения приведены значения для чистого нанослоя графена, обладающего нулевой шириной запрещенной зоны

$(n, 0)$	$\Delta E_g, \text{эВ}$				
	C	BC ₅	BC ₃ тип А	BC ₃ тип Б	BC
(4, 0)	0	0.02	0.17	0.27	0.32
(6, 0)	0	0.02	0.10	0.14	0.34
(8, 0)	0	0.01	0	0.11	0.35
(10, 0)	0	0.01	0.41	0.17	0.33
(12, 0)	0	0.01	0.12	0.29	0.31

Путем квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности были построены одноэлектронные спектры (рис. 2). В твердом теле энергетические уровни группируются в валентную зону и зону проводимости. Приведенные в табл. 1 значения величины энергетической щели, которая вычислялась как разность между энергиями верхней занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбитали (НВМО), позволяют отнести графеновые наноленты с содержанием примесных атомов бора 50% к полупроводникам, поскольку значения ΔE_g составляют приблизительно 0.3 эВ для всех рассматриваемых нанослоев. Полученные с помощью теории функционала плотности данные об энергетической структуре нанолент позволили установить, что валентная зона образова-

на s -орбиталями бора и углерода, а также p -орбиталями атомов В. Зону проводимости же формируют p -орбитали атомов бора и углерода. Анализ зарядового распределения, полученного в результате квантово-химических расчетов с применением теории функционала плотности, показал, что при легировании графеновых нанолент бором происходит смещение электронной плотности к атомам углерода (заряд на них $Q_C = -0.7$), что приводит к появлению на боре положительного заряда $Q_B = 0.8$. Таким образом, можно сделать вывод о том, что допирование атомами бора приводит к возникновению зарядового распределения в графеновых нанолентах.

Далее было изучено изменение проводящих свойств боросодержащих нанолент при уменьшении содержания примесных атомов бора. Объектом исследования стали графеновые нанослои BC₃ с содержанием бора 25%. Из-за уменьшения концентрации атомов В были рассмотрены различные варианты их пространственной ориентации на поверхности наноленты — они обозначены как слой типа А и типа Б по аналогии с нанотрубками, содержащими то же количество примесных атомов бора [5, 17].

Полученные значения ширины энергетической щели ΔE_g для двумерных BC₃ наноматериалов соответствуют узкощелевым полупроводникам. Анализ параметров валентной зоны и зоны проводимости показал следующее: в формировании валентной зоны участвуют s - и p -уровни орбиталей атомов С, а также p -орбиталей атомов В, зона проводимости состоит из s - и p -орбиталей атомов В и С. Как и в случае квазиодномерных нанотрубок [5] в двумерных наноструктурах присутствует перераспределение зарядовой плотности, а именно — смещение электронного облака от атомов бора с появлением у них положительного заряда $Q_B = 0.13$ к атомам углерода с соответствующим появлением у них отрицательного заряда $Q_C = -0.07$.

Завершающим этапом исследования влияния примесных атомов бора на электронную структуру графеновых нанолент стало исследование случая с минимальной концентрацией атомов В, а именно варианта, когда происходит замещение лишь одного атома С в гексагоне. Такая нанолента может быть обозначена BC₅. Вариант атомного упорядочения в BC₅ наноленте представлен на рис. 1в.

Исходя из рассчитанных значений ширины щели можно сделать вывод, что графеновые нанослои BC₅ по типу проводимости соответствуют узкощелевым полупроводникам, близким по свойствам к полуметаллам. Полученные в рамках проведенных модельных экспериментов значе-

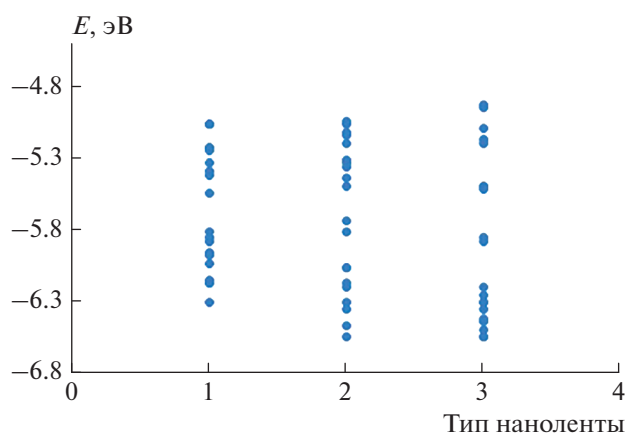


Рис. 2. Примеры одноэлектронных энергетических спектров графеновых нанолент, модифицированных примесными атомами бора: 1 — для структуры BC; 2 — для структуры BC₃; 3 — для структуры BC₅.

Таблица 2. Значения проводимости графеновых нанолент с различным содержанием атомов бора

$(n, 0)$	Σ			
	BC_5	BC_3 тип А	BC_3 тип Б	BC
(4, 0)	0.67	0.027	0.003	0.001
(6, 0)	0.67	0.122	0.055	$7.46 \cdot 10^{-4}$
(8, 0)	0.82	—	0.1	$6.11 \cdot 10^{-4}$
(10, 0)	0.82	$1.66 \cdot 10^{-4}$	0.027	$9.11 \cdot 10^{-4}$
(12, 0)	0.82	0.082	0.002	0.001

ния ширины энергетической щели нанолент приведены в табл. 1.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование с помощью теории функционала плотности электронно-энергетического строения легированных бором графеновых нанолент позволило сделать выводы об их проводящих свойствах и оценить возможность их использования в качестве фотонных кристаллов. С ростом концентрации примесных атомов бора происходит увеличение запрещенной зоны в графеновом нанослое. Однако, несмотря на возможность контролируемого изменения данной величины, все изучаемые наноленты по типу проводимости относятся к узкощелевым полупроводникам. При этом изучаемые наноленты представляют периодические (квазипериодические) гетероструктуры, образуемые путем создания равномерного распределения электронной плотности в наноструктурах: концентрации положительного заряда на атомах бора и отрицательного — на углероде. При этом при достижении равновесной концентрации атомов бора и углерода происходит максимальное увеличение значений ширины энергетической щели, что указывает на прямой характер зависимости между концентрацией и ΔE_g . В итоге установлено, что введение легирующих добавок в виде примесных атомов бора различной концентрации позволяет управлять проводимостью графеновых нанолент. Таким образом, становится возможным управление показателем преломления среды, состоящей из изучаемых нано-

структур. Выполненные исследования электронно-энергетических свойств графеновых нанолент, допированных бором, позволяет предположить возможность их использования в качестве двумерных фотонных кристаллов для построения устройств задержки и управления полем излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pilus G., Ivchenko E.* // Springer Series in Solid State Sciences. 1997. V. 110. P. 372.
2. *de Sterke C.M., Salinas D.G., Sipe J.E.* // Phys. Rev. E. 1996. V. 64. P. 1969.
3. *Mitin V.V., Kochelap V.A., Stroschio M.A.* Quantum heterostructures: microelectronics and optoelectronics. Cambridge: University Press, 1999. 642 p.
4. *Kivshar Y.S., Agrawal G.P.* // Optical solitons. From light guides to photonic crystals. M.: Fizmatlit, 2005. P. 648.
5. *Запорожкова И.В., Борознина Н.П., Борознин С.В. и др.* // Известия РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 6. С. 801. *Zaporotzkova I.V., Boroznina N.P., Boroznin S.V. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Physics. 2022. V. 86. No. 6. P. 673.
6. *Harris P.* Carbon nanotubes and related structures. New materials of the 21st century. M.: Technosphere, 2003. 336 p.
7. *Дьячков П.Н.* Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006. 296 с.
8. *Sawant S.V., Patwardhan A.W., Joshi J.B., Dasgupta K.* // Chem. Engin. J. 2022. V. 427. Art. No. 131616.
9. *Thirumal V., Pandurangan A., Jayavel R., Ilangovan R.* // Synth. Met. 2016. V. 220. P. 524.
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика твердых сред. М.: Физматлит, 1988. 621 с.
11. *Boroznin S.V., Zaporotzkova I.V., Boroznina N.P.* // J. Nano. Electron. Phys. 2017. V. 9. No. 2. P. 02034.
12. *Boroznina E.V., Zhiganova T.A., Boroznin S.V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2015. V. 586. Art. No. 012010.
13. *Zaporotzkova I., Boroznin S., Boroznina N.* // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1967. Art. No. 012045.
14. *Boroznina N., Zaporotzkova I., Boroznin S., Dryuchkov E.* // Chemosensors. 2019. V. 7. No. 1. P. 11.
15. *Koch W., Holthausen M.* A chemist's guide to density functional theory. Weinheim: Wiley-VCH, 2002. 306 p.
16. *Кон В., Попл Дж.А.* // УФН. 2002. Т. 172. № 3. С. 335.
17. *Sawant S.V., Banerjee S., Patwardhan A.W. et al.* // Int. J. Hydrogen Energy. 2019. V. 44. No. 33. P. 18193.

Graphene nanofilms modified with impurity boron atoms as a basis for two-dimensional photonic crystals

I. V. Zaporotzkova^{a,*}, S. V. Boroznin^a, M. B. Belonenko^a, E. S. Dryuchkov^a, Y. V. Butenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, 400062 Russia

*e-mail: boroznin@volsu.ru

The band structure of graphene nanoribbons doped with boron has been studied and the possibility of using them to form two-dimensional photonic crystals has been analyzed. It has been obtained that a change in the band gap of graphene nanoribbons in a wide range causes a change in conductivity and refractive index.

УДК 535.3

ВРАЩЕНИЕ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ ТРЕХМЕРНОГО ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКОГО ИМПУЛЬСА В АНИЗОТРОПНОМ ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

© 2022 г. Ю. В. Двужилова¹, И. С. Двужиллов¹*, Т. Б. Шилов¹,
И. А. Челнынцев¹, М. Б. Белоненко¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

На основании уравнений Максвелла получены эффективные уравнения на компоненты вектор-потенциала трехмерного предельно короткого лазерного импульса, распространяющегося в среде оптически анизотропного фотонного кристалла на основе полупроводниковых углеродных нанотрубок. Проведено численное моделирование эволюции двух компонент напряженности импульса в такой среде на временах, превышающих несколько дисперсионных длин. Показаны зависимости формы и времени задержки импульса от угла анизотропии. Показана зависимость угла поворота плоскости поляризации импульса от пройденного им расстояния.

DOI: 10.31857/S0367676522120092

ВВЕДЕНИЕ

Тематика работы лежит в области нелинейной оптики и фотоники, а именно, исследований взаимодействия оптического излучения с веществом. В качестве среды распространения излучения выбран фотонный кристалл (ФК), структура которого периодична, и как следствие, показатель преломления которого имеет пространственную неоднородность. Так, на основе ФК возможно создание пространственных модуляторов, переключателей, разветвителей, циркуляторов и т.д. [1, 2].

В качестве оптического излучения рассматриваются трехмерные предельно короткие импульсы (ПКИ), содержащие малое число периодов поля, частота которых лежит в ближнем ИК-диапазоне, а их длительность — фемтосекунды. Энергия таких импульсов остается локализованной в ограниченной области пространства, а также они обладают высокой направленностью их излучения, стабильностью формы и устойчивостью к возмущениям [3–5]. Отметим, что периодичность структуры ФК обеспечивает нелинейную среду, в которой ПКИ могут распространяться устойчиво, с минимальным дисперсионным и дифракционным расплыванием [6]. Дополнительную нелинейность, необходимую для стабилизации ПКИ, вносят полупроводниковые углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие нели-

нейными свойствами в оптическом диапазоне [7, 8].

Особый интерес представляет учет анизотропии ФК, поскольку в такой среде возможно возникновение двулучепреломления. Учет анизотропии среды может приводить к различным эффектам, например, резонансу Захарова–Бенни [9].

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для исследования эволюции трехмерных ПКИ в оптически анизотропном ФК и построения вращения плоскости поляризации импульса была выбрана следующая геометрия: ось нанотрубок наклонена под углом α к электрическому полю импульса и возникающему в системе току, направление распространения импульса совпадает с направлением модуляции показателя преломления ФК.

Отметим, что в задаче использованы некоторые приближения:

1. Электрическое поле подложки не учитывается.
2. Используется приближение сплошной среды, считается, что ток равномерно распределен по объему фотонного кристалла. Это приближение справедливо, поскольку геометрические размеры нанотрубок и расстояния между ними, на

1–2 порядка меньше, чем размер области локализации электрического поля импульса.

3. Не учтены межзонные переходы.

Для описания эволюции трехмерного импульса в среде фотонного кристалла воспользуемся уравнениями Максвелла, с использованием Кулоновской калибровки ($E = -\partial A/c\partial t$) [10, 11]:

$$\Delta \bar{A}_\beta - \frac{n^2(z)}{c_\beta^2} \frac{\partial^2 \bar{A}_\beta}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \bar{j}_\beta(\bar{A}_\beta) = 0; \quad (1)$$

здесь $\bar{A}_\beta = (A_x(x, y, z, t), A_y(x, y, z, t), 0)$ – вектор-потенциал электрического поля ПКИ; $n(z) = 1 + \mu \cos(2\pi z/\chi)$ – показатель преломления анизотропного ФК (μ – глубина модуляции показателя преломления, χ – период модуляции показателя преломления); c_β – скорость электромагнитной волны с поляризацией β ; $\bar{j}_\beta = (j_x(x, y, z, t), j_y(x, y, z, t), 0)$ – плотность электрического тока, связанного с углеродными нанотрубками.

Компонента плотности тока, который образуется благодаря взаимодействию поля импульса с электронами в зоне проводимости нанотрубок, имеет вид:

$$j_{CNT} = e \sum_{ps} v_s(p) \left(p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle c_{ps}^+ C_{ps} \rangle, \quad (2)$$

$$v_s(p) = \frac{\partial \epsilon_s(p)}{\partial p},$$

$\epsilon(p) = \pm \gamma_0 \left(1 + 4 \cos(ap) \cos(\pi s/m) + \cos^2(\pi s/m) \right)^{1/2}$, где $v_s(p)$ – групповая скорость электронов; e – заряд электрона; $\epsilon_s(p)$ – закон дисперсии π -электронов в полупроводниковых нанотрубках [8]; γ_0 – интеграл перекрытия (≈ 2.7 эВ); a – постоянная решетки углеродной нанотрубки; p – квазиимпульс электрона; m – количество гексагонов по периметру нанотрубки; C_{ps}^+, C_{ps} – операторы рождения и уничтожения электронов с квазиимпульсом (p, s) ; $\langle \rangle$ – усреднение с неравновесной матрицей плотности $\rho(t)$: $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$.

Следует заметить, что:

$$\langle B \rangle_0 = Sp(B(0)\rho(0)),$$

$$\rho(0) = \frac{\exp\left\{-\frac{H}{k_B T}\right\}}{Sp\left(\exp\left\{-\frac{H}{k_B T}\right\}\right)},$$

где k_B – постоянная Больцмана; T – температура.

Далее, закон дисперсии электронов в углеродных нанотрубках $\epsilon_s(p)$, разложим в ряд Фурье, и подставим выражения для плотности тока нанотрубок (2) в уравнения Максвелла (1), и получим эффективное уравнение на компоненты вектор-

потенциала электрического поля ПКИ в оптически анизотропном ФК:

$$\Delta A_x - \frac{n^2(z)}{c_x^2} \frac{\partial^2 A_x}{\partial t^2} + \frac{4en_0\gamma_0 a \cdot \sin \alpha}{c} \times$$

$$\times \sum_{q=1} b_q \cos\left(\frac{aeq(A_x \cos \alpha + A_y \sin \alpha)}{c}\right) \frac{aeq}{c} = 0,$$

$$\Delta A_y - \frac{n^2(z)}{c_y^2} \frac{\partial^2 A_y}{\partial t^2} + \frac{4en_0\gamma_0 a \cdot \sin \alpha}{c} \times$$

$$\times \sum_{q=1} b_q \sin\left(\frac{aeq(A_x \cos \alpha + A_y \sin \alpha)}{c}\right) \frac{aeq}{c} = 0, \quad (3)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2},$$

$$b_q = \sum_{s=1} a_{sq} \int_{ZB} \cos(pq) \frac{\exp\left\{-\frac{\epsilon_s(p)}{k_B T}\right\}}{1 + \exp\left\{-\frac{\epsilon_s(p)}{k_B T}\right\}} dp,$$

здесь n_0 – концентрация электронов в нанотрубках; Δ – лапласиан в цилиндрической системе координат. Однако, поле ПКИ, при распространении в ФК, неоднородно, следовательно, может возникнуть неоднородность тока, из-за чего возможно накопление заряда в какой-то области. Однако, расчеты в [12] показали, что эффектом накопления заряда для фемтосекундных импульсов можно пренебречь. Вследствие этого можно считать, что сохраняется цилиндрическая симметрия в распределении поля, и, следовательно, производной по углу можно пренебречь.

Начальные условия на вектор-потенциал электрического поля трехмерного ПКИ (6) выглядят следующим образом:

$$A_x|_{t=0} = A_{0x} \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{\gamma_r^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{\gamma_z^2}\right);$$

$$\frac{dA_x}{dt}\Big|_{t=0} = A_{0x} \cdot \frac{2uz}{\gamma_z^2} \exp\left(-\frac{r^2}{\gamma_r^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{\gamma_z^2}\right); \quad (4)$$

$$A_y|_{t=0} = 0; \quad \frac{dA_y}{dt}\Big|_{t=0} = 0;$$

где γ_z, γ_r – параметры, определяющие ширину импульса вдоль цилиндрических осей, A_{0x} – начальная амплитуда импульса, u – начальная скорость импульса при входе в среду.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эффективное уравнение на вектор-потенциал электрического поля ПКИ (3) решалось численно, при помощи явной конечно-разностной схемы типа “крест”, на равномерной сетке по времени и координате, со вторым порядком погрешности [13]. Шаги по времени и координате выбирались исходя из условия устойчивости Куранта, и уменьша-

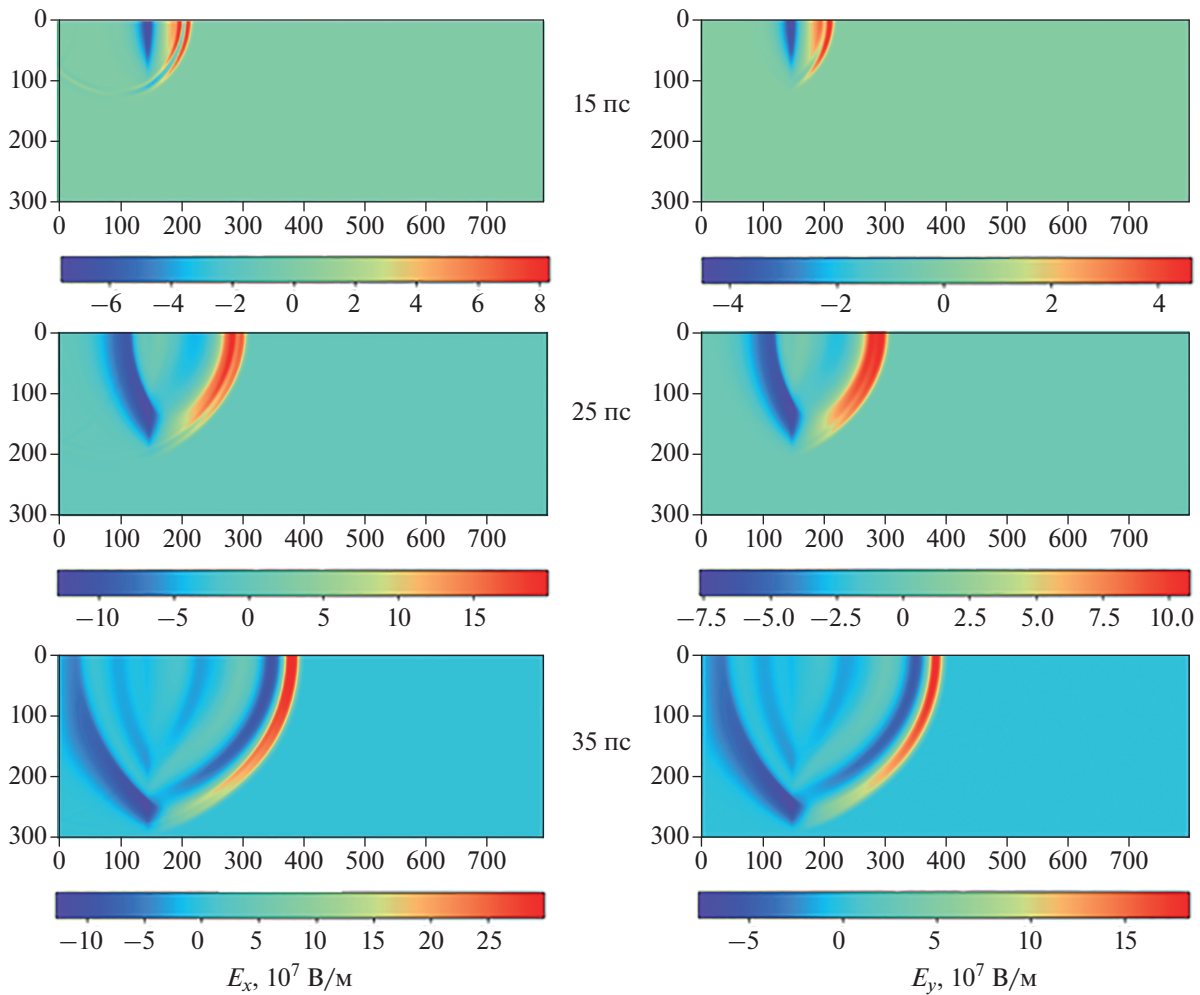


Рис. 1. Зависимости напряженностей x и y -компонент электрического поля ПКИ от цилиндрических координат в фиксированные моменты времени (15, 25, 35 пс) при его распространении в анизотропном ФК на основе УНТ. По оси абсцисс отложена координата z в мкм, по оси ординат — координата r в мкм.

лись до тех пор, пока решение не оставалось неизменным в восьмом значащем знаке.

При численном моделировании исследуемой системы ее параметры выбирались следующим образом: $m = 13$, $T = 293$ К, время релаксации в нанотрубках $\approx 10^{-11}$ с; длительность импульса $\approx 10^{-14}$ с.

Эволюция напряженности компонент электрического поля трехмерного ПКИ при его распространении в оптически анизотропного ФК на основе нанотрубок представлена на рис. 1. Параметры модуляции показателя преломления ФК задавались следующим образом: период — 2.5 мкм, глубина — 0.25. Значения параметров анизотропии: угол между осью УНТ и вектором электрического поля импульса $\alpha = \pi/3$; скорости импульса вдоль кристаллографических осей были выбраны, как: $v_x/c = 0.9$, $v_y/c = 0.5$.

Из представленной на рис. 1 временной эволюции импульса можно сказать, что присутствие

ФК, приводит к изменению формы импульса. Импульс сохраняет свою энергию локализованной в ограниченной пространственной области. После прохождения импульса в среде возникают электрические колебания. Также отмечается увеличение амплитуды импульса с течением времени, вследствие дисперсии электрического поля в среде УНТ. Этот факт позволяет использовать данную среду в устройствах усиления подобных импульсов.

На рис. 2 показаны срезы напряженности трехмерного ПКИ в зависимости от угла между осью нанотрубок и электрическим полем ПКИ. Видно, что угол между вектор-потенциалом электрического поля импульса и осью УНТ оказывает значительное влияние на форму ПКИ. Его энергия перекачивается на передний фронт, импульс сужается. Также отметим, что с уменьшением угла α время задержки импульса уменьшается, т.е. растет групповая скорость волнового пакета. Та-

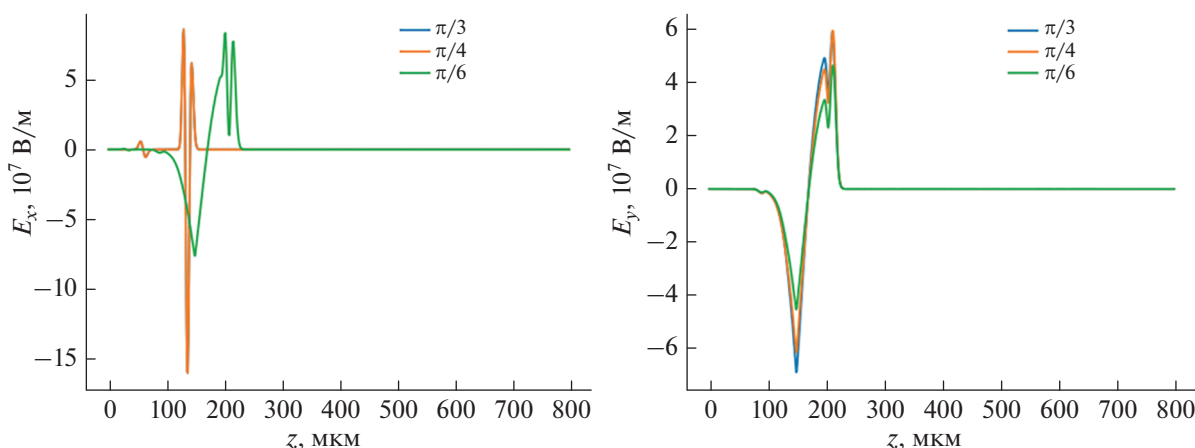


Рис. 2. Зависимости продольных срезов напряженностей x и y -компонент электрического поля ПКИ от угла между осью нанотрубок и вектор-потенциалом электрического поля импульса в фиксированный момент времени 20 пс.

ким образом, появляется возможность контролировать форму импульса и его скорость, меняя направление анизотропии ФК, что является особенно важным результатом для практического применения.

Изменение параметров модуляции показателя преломления оптически анизотропного ФК приводят к изменению формы огибающей и времени задержки ПКИ. Данный результат был неоднократно подтвержден, например, в работах [14, 15].

Следующий полученный результат показывает вращение плоскости поляризации трехмерного ПКИ при его распространении в оптически анизотропном ФК на основе нанотрубок.

На основании результата, представленного на рис. 3, можно сделать вывод, что существует оптимальная длина кристалла с УНТ, при которой

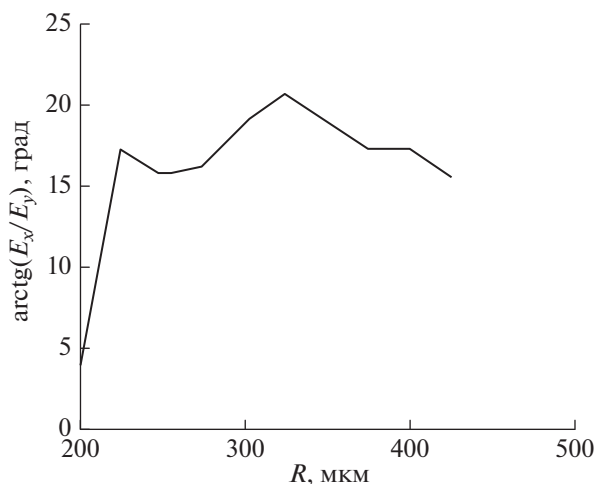


Рис. 3. Зависимость угла поворота плоскости поляризации ПКИ, при его распространении в ФК на основе УНТ, от пройденного им расстояния.

происходит максимальное вращение плоскости поляризации. При дальнейшем увеличении длины кристалла угол поворота плоскости поляризации уменьшается, что связано с сильной нелинейностью системы и обратной перекачкой энергии из моды с одной поляризацией в другую.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из результатов, полученных в данной работе, можно сформулировать следующие выводы. Распространение трехмерного ПКИ в оптически анизотропном ФК на основе полупроводниковых УНТ является устойчивым на временах нескольких дисперсионных длин. Угол между осью нанотрубок и вектор-потенциалом электрического поля ПКИ оказывает существенное влияние на форму и время задержки импульса. Установлена длина ФК, при которой происходит максимальная поляризация импульса.

Двужилова Ю.В., Двужилов И.С. выражают благодарность Министерству науки и высшего образования РФ и Совету по грантам Президента РФ (проект № МК-2089.2021.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mito S., Takagi H., Lim P.B. et al. // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. Art. No. 07E313.
2. Wang Z., Fan S. // Opt. Lett. 2005. V. 30. P. 1989.
3. Fibich G., Ilan B. // Opt. Lett. 2004. V. 29. P. 887.
4. Goorjian P.M., Mihalache D. // Rom. J. Phys. 2017. V. 69. P. 403.
5. Mihalache D. // Rom. Rep. Phys. 2021. V. 73. P. 403.
6. Sazonov S.V., Ustinov N.V. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. Art. No. 063803.
7. Елецкий А.В. // УФН. 1997. Т. 167. № 9. С. 945; Eletsii A.V. // Phys. Usp. 1997. V. 40. No. 9. P. 899.

8. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of fullerenes and carbon nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996. 965 p.
9. Сазонов С.В., Соболевский А.Ф. // Квант. электрон. 2005. Т. 35. № 11. С. 1019.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1973. 509 с.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624 с.
12. Zhukov A.V., Bouffanais R., Fedorov E.G., Belonenko M.B. // J. Appl. Phys. 2013. V. 114. Art. No. 143106.
13. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.
14. Dvuzhilova Y.V., Dvuzhilov I.S., Zaporotskova I.V. et al. // Rom. Rep. Phys. 2022. V. 74. No. 1. P. 401.
15. Белоненко А.М., Двужилова Ю.В., Двужилов И.С., Белоненко М.Б. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 2. С. 194; Belonenko A.M., Dvuzhilova Y.V., Dvuzhilov I.S., Belonenko M.B. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2022. V. 86. No. 2. P. 140.

Rotation of the polarization plane of a three-dimensional few cycle pulse in an anisotropic photonic crystal from carbon nanotubes

Yu. V. Dvuzhilova^a, I. S. Dvuzhilov^{a, *}, T. B. Shilov^a, I. A. Chelnintsev^a, M. B. Belonenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, 400062 Russia

*e-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru

Based on Maxwell's equations, effective equations are obtained for the components of the vector potential of a three-dimensional few cycle laser pulse propagating in the medium of an optically anisotropic photonic crystal based on semiconductor carbon nanotubes. Numerical modeling of the evolution of two components of the pulse strength in such a medium at times exceeding several dispersion lengths has been carried out. The pulse shape and delay time are shown as functions of the anisotropy angle. The dependence of the angle of rotation of the pulse polarization plane on the distance traveled by it is shown.

УДК 535.016:538.958

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯМИ ПРЕЛОМЛЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ С ДЕФЕКТАМИ

© 2022 г. К. Ю. Веревкина¹, *, И. Ю. Веревкин¹, В. В. Яцьшен¹, М. Б. Белоненко¹¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: verevkina@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследованы возможности управления показателями пропускания и отражения периодической структуры, в которую встроены диэлектрические слои и приложена разность потенциалов. Данная структура была исследована при различных условиях с помощью разработанной ранее компьютерной программы для расчета соответствующих коэффициентов. Изучены характеристики слоистой структуры кристалла типа сфалерита с приложенной разностью потенциалов. Также исследованы особенности отражения периодической структуры LiF/Si/Ag₂O/C с внедренным диэлектрическим слоем с фоновым резонансом.

DOI: 10.31857/S0367676522120298

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время уделяется большое внимание изучению кристаллов типа сфалерита. Сфалерит является одним из наиболее распространенных сульфидных материалов. В чистом виде он представляет собой широкозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны около 3.54 эВ, что делает чистый материал прозрачным в видимом спектре. В зависимости от примесей он будет флуоресцировать под УФ светом.

Кристалл типа ZnS представляет собой хороший диэлектрик. Отметим, что под действием напряжения данный кристалл обладает во всех направлениях естественным двулучепреломлением. Оптические свойства сфалеритов выделяются особенно явно его включить в периодическую структуру. Структура и физические свойства природных сфалеритов и галенита исследованы в работе [1]. Параметры элементарной ячейки сфалерита были установлены методом рентгеновской дифракции. Так же была изучена микроструктура образцов, состав которых отличается содержанием железа. Повышенное содержание железа в твердом растворе сфалерита приводит к росту параметров элементарной ячейки. Установлено, что сфалериты являются изоляторами и в температурном интервале от 4 до 300 К имеют абсолютные значения удельного электрического сопротивления более 1 МОм · м. Алмазоподобные же структуры кристаллов сфалерита изучены в рабо-

те [2]. Авторы в ходе эксперимента установили связь между определенными параметрами ячейки и табличными значениями размеров атомов (ионов) цинка и серы. Полный обзор, посвященный свойствам всех известных к настоящему времени электрооптических кристаллов изложен в работе [3]. Там же описывается и феноменологическая теория электрооптического эффекта в кристаллах. Кроме того, рассмотрены экспериментальные методы измерения двулучепреломления, индуцированного внешним электрическим полем и механическим напряжением. В работе [4] рассматривается влияние примесей на рост и морфологию кристаллов с внутренними напряжениями и аномальным двулучепреломлением, появляющимися при захвате примесей растущим кристаллом. В ходе эксперимента были изучены модельная система NH₄Cl–MnCl₂·H₂O–CONH₂ и образующиеся в ней гетероструктурные кристаллы NH₄Cl:Mn²⁺. Основы теории оптики слоистых структур изложены в фундаментальном труде [5]. Характеристики частиц α-SiO₂ в искусственных опалах были исследованы в работе [6]. В работе [7] были изучены структура и оптические свойства слоистых нанокompозитов ZnSe/SiO₂, полученных с помощью ВЧ-магнетронного напыления. В работе [8] изучены особенности новых материалов, которые формируются в результате заполнения синтетических опалов разными сегнетоэлектриками типа: нитритом натрия, титанатом

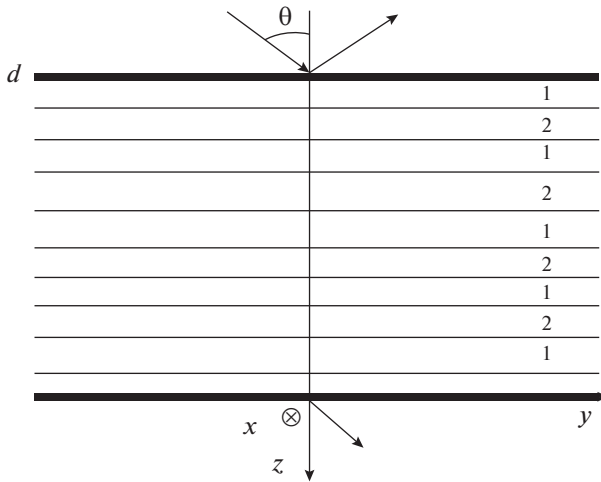


Рис. 1. Геометрия отражения волны от слоистой периодической среды.

бария, ниобатом лития и др. Все это делает структуры на основе данных веществ весьма перспективными для практических приложений. Отметим, что, несмотря на изучение разных параметров данных веществ, свойства многослойных тонких пленок на их основе не изучены.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

На среду, имеющую повторяющийся показатель преломления, и занимающую область от $z = 0$ до $z = d$, из вакуума падает плоская гармоническая световая волна (рис. 1). Область $z < 0$ – это подложка, заполненная однородным диэлектриком. Рассматриваемая среда состоит из периодически повторяющихся слоев с заданными диэлектрическими проницаемостями. В данную структуру введен диэлектрический слой, к которому приложена разность потенциалов, или внедрен слой с фоновым резонансом. Необходимо рассчитать угловые спектры отражения и пропускания для такой структуры, дополнив разработанный ранее [10] программный комплекс для расчета амплитудных и энергетических коэффициентов отражения и прохождения для такого класса веществ. Разработанный ранее программный продукт используется для анализа спектров отражения и пропускания вышеупомянутых пленочных многослойных покрытий. В частности, как уже было описано во введении, были изучены характеристики практически важного кристалла типа сфалерита.

ПРОХОЖДЕНИЕ И ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Приведем для полноты изложения формулы, необходимые для расчета нашей структуры со

слоями типа сфалерита. Изложение будет вестись согласно [9].

Пусть T , A и R амплитуды электрических векторов преломленной, падающей и отраженной волн, соответственно, ϵ_1, ϵ_2 и μ_1, μ_2 – диэлектрические и магнитные проницаемости граничных сред, θ_1 и θ_2 – углы между нормальными к падающей и прошедшей волнами и направлениями оси z . Амплитудные коэффициенты пропускания (t) и отражения (r) будут определяться как:

$$t = \frac{T}{A} = \frac{2p_1}{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 + (m_{21} + m_{22}p_l)}, \tag{1}$$

$$r = \frac{R}{A} = \frac{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 - (m_{21} + m_{22}p_l)}{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 + (m_{21} + m_{22}p_l)}, \tag{2}$$

где величины p_1 и p_l определены ниже формулой (6б), а величины m_{ij} определены как матричные элементы матрицы M в формуле (5).

Пропускательная (T) и отражательная (R) способности, выраженные через t и r , имеют вид:

$$T = \frac{p_l}{p_1} |t|^2, \quad R = |r|^2. \tag{3}$$

Соответствующие формулы для волны p -поляризации получаются из (1) и (2) путем замены p_1 и p_l на $q_i = \sqrt{\mu_i/\epsilon_i} \cos \theta_i$. В этом случае t и r являются отношением амплитуд не электрических, а магнитных векторов.

Рассмотрим случай диэлектрической однородной пленки, расположенной между двумя однородными средами. Все среды будем считать немагнитными ($\mu = 1$).

Характеристическая матрица диэлектрической однородной пленки имеет вид

$$M(z) = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n z \cos \theta) - \frac{i}{p} \sin(k_0 n z \cos \theta) \\ -i p \sin(k_0 n z \cos \theta) \cos(k_0 n z \cos \theta) \end{bmatrix}, \tag{4}$$

$$M = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\frac{i}{p_1} \sin \beta \\ -i p_2 \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}, \tag{5}$$

где

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2 h \cos \theta_2, \tag{6a}$$

$$p_j = n_j \cos \theta_j, \quad j = 1, 2, 3. \tag{6b}$$

В случае, если вместо однородной пленки взять слоистую структуру с характеристическими матрицами слоев M_1, M_2, \dots, M_n , результирующая матрица будет иметь вид:

$$M(z_N) = M_1(z_1) M_2(z_2 - z_1) * \dots * M_N(z_N - z_{N-1}). \tag{7}$$

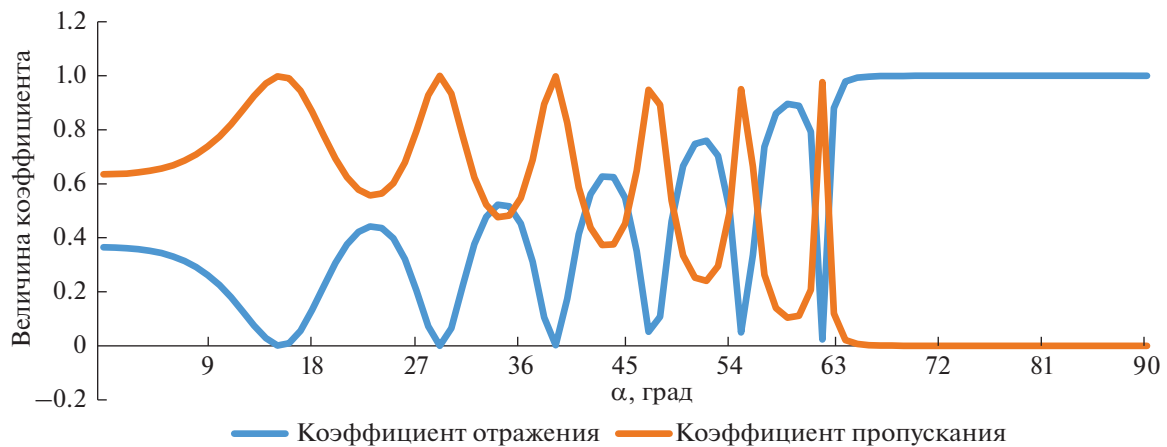


Рис. 2. Зависимость коэффициентов отражения и пропускания от угла падения α при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 с приложенным напряжением 20 кВ для ТЕ волны.

РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТОВ НА ЯЗЫКЕ C++

Для реализации расчетов было создано консольное приложение на языке C++. Входными данными программы является: количество слоев N ; толщины слоев $h[N-1]$; показатель преломления $n[N]$, длина волны падающего света L_0 .

Угол между нормальными к падающей и прошедшей волнам $te[N]$, а так же коэффициент β ($be[N-1]$) рассчитывается согласно формуле (6а), а коэффициенты p ($p[N]$), рассчитываются в соответствии с формулой (6б). Далее $M[N-1][2][2]$ — элемент характеристической матрицы для каждого слоя вычисляется согласно формуле (4). Элемент результирующей матрицы $M[2][2]$ есть результат произведения характеристических матриц согласно формуле (7). Так же согласно формулам (1)–(3) проводится расчет коэффициентов пропускания T и отражения R .

В выходных файлах сохраняются следующие расчетные характеристики: действительная и мнимая части изменения фазы при отражении и пропускании, а также коэффициенты отражения и пропускания.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 2 показан угловой спектр коэффициентов отражения и пропускания при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 при разных углах падения α для ТЕ волны. Толщина слоя: 100 и 160 нм. Длина волны падающего излучения составляет 400 нм. Количество повторов структуры равно 15. Дефектом является напряжение во втором слое в пятом повторении структуры, равное 20 кВ. Электрооптический коэффициент $r_{41} = 3.3 \cdot 10^{-8}$ эл. ст. ед.

На рис. 3 показана такая же структура как на рис. 2. Длина волны падающего излучения составляет 500 нм. В качестве неоднородности в данном случае было выбран способ, в котором прикладывалось напряжение во втором слое в пятом повторении структуры, равное 15 кВ. Электрооптический коэффициент был взят для данной длины волны как $r_{41} = 5.5 \cdot 10^{-8}$ эл. ст. ед.

На рис. 2 и 3 наблюдается периодическая зависимость коэффициентов отражения и прохождения от угла падения (углы меняются от 0° до 90°). Благодаря этому, изменяя угол падения, можно подбирать оптимальные коэффициенты. На рис. 2 так же наблюдается полное отражение при угле падения от 66° до 90° . Отметим, что характер отражения и пропускания на рисунках существенно разный, поскольку соответствующий электрооптический коэффициент увеличился более чем в 1.5 раза, при изменении длины волны в 100 нм [3]. Так же из сравнения рис. 2 и 3 видно, что с увеличением электрооптического коэффициента можно обойтись меньшим напряжением и получить коэффициенты пропускания равные 1. Однако, как видно из сравнения вышеупомянутых рисунков, на длине волны 400 нм, наблюдается лучшая избирательная способность по углу (т.е. кривые коэффициента пропускания падают более резко при отклонении угла от угла соответствующего максимуму). Полученные результаты можно распространить на диапазон приложенных напряжений от 0 до величин, когда будут видны эффекты высших порядков (или до напряжения пробоя вследствие дефектной структуры), т.е. по нашим оценкам до 50 кВ, при характерных размерах предложенной в работе структур. Это может быть полезно в различных приложениях. Физически данное поведение связано с многократными отражениями от границы раздела сред и дальнейшей интерференцией всех волн. Если оптическая

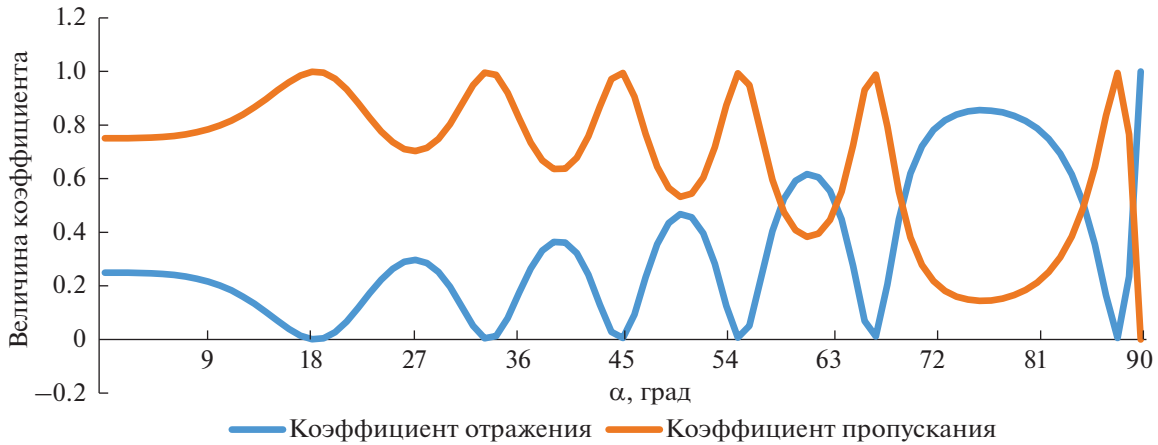


Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения и пропускания от угла падения α при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 с приложенным напряжением 15 кВ для ТЕ волны.

длина пути при отражении от границ раздела при увеличении числа слоев структуры становится несоизмеримой (например, от АВАВАВ и АВАВАВАВ), то вместо сложения волн при интерференции может произойти их вычитание и появится соответствующий провал. Еще более изменяет характер взаимодействия волн внедрения слоя с иным показателем преломления (как в случае с прилагаемым напряжением выше или с фотонным резонансом ниже). В этом случае происходит резкое изменение фаз волн уже для относительно небольшого количества слоев.

К сожалению, получить аналитические зависимости от величины приложенного электрического поля, не представляется возможным. Изменение показателя преломления в зависимости от приложенного напряжения учитывалось в рамках линейного электрооптического эффекта, т.е. $\delta n \sim E$, причем коэффициент пропорциональности сложным нелинейным образом зависит от длины волны. В силу многослойности структуры, даже небольшие изменения показателя преломления, могут привести к существенному изменению коэффициента пропускания. Вследствие этого указанные зависимости могут быть получены только численно.

СРЕДА С ФОНОННЫМ РЕЗОНАНСОМ

Диэлектрическая проницаемость кристалла $\epsilon(\omega)$ вблизи фонованного резонанса вычисляется по формуле

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi N e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_{T0}^2 - \omega^2} = \epsilon_0 + \frac{\Omega_p^2}{\omega_{T0}^2 - \omega^2}. \quad (8)$$

Здесь введено обозначение Ω_p для плазменной частоты:

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{\mu}.$$

Мы видим, что выражение для диэлектрической проницаемости описывает резонанс в области частот вблизи частоты поперечных оптических фононов ω_{T0} . Наличие резонанса значительно влияет на характер распространения электромагнитной волны в среде.

При расчете коэффициентов отражения и прохождения света от слоистой структуры с резонансным слоем, в качестве последнего использовался слой, диэлектрическая проницаемость которого задавалась формулой (8). Наличие резонанса при варьировании частоты в области $\omega \sim \omega_{T0}$ приводит к резкому изменению энергетических коэффициентов отражения и прохождения, что особенно сильно проявляется в том случае, когда этот слой находится в периодической структуре и образует своего рода дефект такой периодичности.

На рис. 4 показан частотный спектр коэффициентов отражения и прохождения при прохождении через слоистую периодическую структуру ($\text{LiF}/\text{Si}/\text{Ag}_2\text{O}/\text{C}$) при разных углах падения α . Толщина слоя: 100, 160, 80 и 120 нм. Длина волны падающего излучения составляет 640 нм. Количество повторений структуры: 10. В качестве дефекта выбирался второй слой в пятом повторении структуры с резонансным законом для диэлектрической проницаемости, и его толщина была увеличена в пять раз.

В зависимости показателей отражения и прохождения данной структуры, в отличие от обсуждавшихся выше, имеются не отдельные области

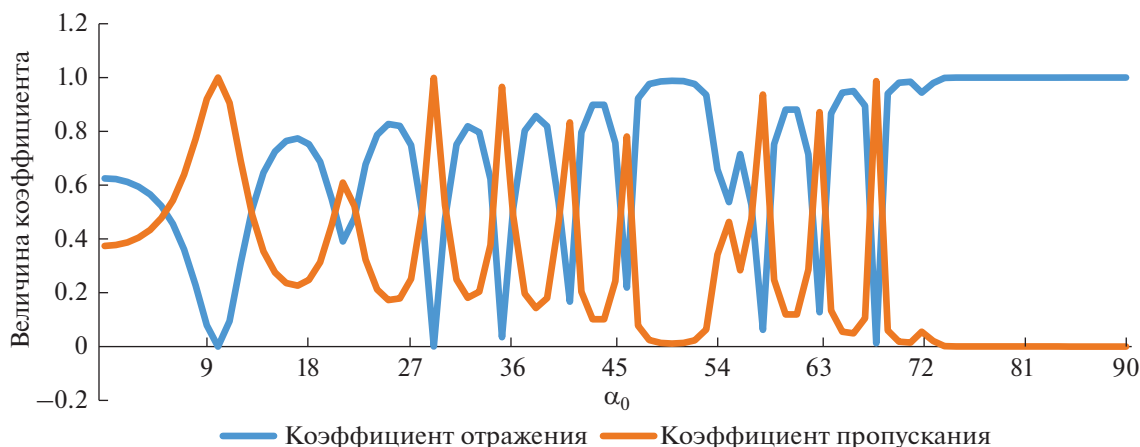


Рис. 4. Энергетические коэффициенты отражения (синий) и пропускания (красный) при различных углах падения α при прохождении через слоистый LiF/Si/Ag₂O/C с внедренным слоем с фоновым резонансом.

(при больших углах падения), а несколько участков, где происходит полное отражение. Это связано с наличием фотонного резонанса во внедренном слое. Для выбранной длины волны коэффициент пропускания равен и близок к 1 только при углах падения примерно в 54° (при другой длине волны угол, как показали расчеты, соответственно изменится). Это позволяет использовать данную структуру как фильтр длин волн. Также, в отличие от случая, обсужденного выше, данные спектры имеют более резкий характер. Наличие изломов не связано с расчетным шагом (что было проверено при моделировании), а связано по нашему мнению с резким характером резонансной зависимости во внедренном слое (8). Кроме того, верификация расчетов проводилась не только изменением шага, но и изменением толщин пленок и их количества. Везде наблюдалась подобное поведение. Как уже отмечалось выше, такая зависимость связана с резким изменением оптической длины пути пройденной волной даже в одном слое отличном от других. Заметим, что выбор слоев связан с практическим характером их получения и широкого распространения данных веществ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, развита методика, позволяющая изучать оптические свойства периодической структуры, содержащей слои с электрооптическим эффектом. В качестве исследуемого объекта был выбран кристалл типа сфалерита. Полученные результаты соответствуют поставленным задачам. Показана возможность управления отражательными способностями слоистой структуры при помощи приложенной разности потенциалов, что дает возможность использовать полученные результаты для расчета спектральных филь-

тров и покрытий для видимого и ближнего ИК диапазона. Методику также можно использовать для конструирования сверхчувствительных нанорезонаторов и нановолноводов для использования в плазмонике и нанофотонике электрооптических структур для избирательного рассеяния световых волн, усиления и управляемой передачи в заданном направлении оптических сигналов. Отметим, что все вышесказанное относится и к структурам с внедренным слоем с фоновым резонансом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуляева Р.И., Селиванов Е.Н., Дорогина Г.А. и др. // Геология и геофиз. 2017. Т. 58. № 8. С. 1242.
2. Лиопо В.А., Лявшук И.А., Овчинников Е.В., Секержицкий С.С. // Веснік Брэсцкага ўніверсітэта. Сер. 4. Фізіка. Матэматыка. 2020. № 1. С. 36.
3. Сонин А.С., Василевская А.С. Электрооптические кристаллы. М.: Атомиздат, 1971. 328 с.
4. Пьянкова Л.А., Пунин Ю.О., Франке В.Д. и др. // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 4. С. 697.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики: М.: Наука, 1973. С. 66.
6. Самусев К.Б., Юшин Г.Н., Рыбин М.В., Лимонов М.Ф. // ФТТ. 2008. Т. 50. № 7. С. 1230.
7. Крылов П.Н., Закирова Р.М., Кобзиев В.Ф. и др. // ЖТФ. 2016. Т. 86. № 7. С. 69.
8. Горелик В.С. // ФТТ. 2009. Т. 51. № 7. С. 1252.
9. Verevkin K.Yu., Yatsyschen V.V. // AIP Conf. Proc. 2020. V. 2313. Art. No. 060026.
10. Веревкина К.Ю. Программа для расчета коэффициентов пропускания и отражения слоистых и периодических сред. Свид. о гос. рег. прогр. для ЭВМ № 2019614152. 2019.

Study of the possibility of control of the refractive and reflection indices in layered structures with defects

K. Yu. Verevkina^{a, *}, I. Yu. Verevkin^a, V. V. Yatsyshen^a, M. B. Belonenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, Russia

**e-mail: verevkina@volsu.ru*

The possibilities of controlling the transmission and reflection indices of a periodic structure in which dielectric layers are embedded and a potential difference is applied are investigated. This structure was investigated under various conditions using a previously developed computer program to calculate the corresponding coefficients. The characteristics of the layered structure of a sphalerite-type crystal with an applied potential difference are studied. The reflection features of the periodic LiF/Si/Ag₂O/C structure with an embedded dielectric layer with phonon resonance are also studied.

УДК 620.3:[577.35+538.958+53.05+53.096]

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ АПКОНВЕРСИОННЫХ НАНОЧАСТИЦ $YVO_4:Yb, Er$ В ДИАПАЗОНЕ 285–325 К

© 2022 г. А. Г. Шмелев^{1, *}, Д. К. Жарков¹, А. В. Леонтьев¹, В. Г. Никифоров¹, Д. Н. Петров²,
М. А. Крылов², Х. Э. Клавихо², В. С. Лобков¹

¹Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки

“Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр Российской академии наук”, Казань, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Казанский (Приволжский) федеральный университет”, Казань, Россия

*E-mail: sgartjom@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Синтезированные методом термического разложения в атмосфере аргона в присутствии октадецена и олеиновой кислоты апконверсионные наночастицы $YVO_4:Yb, Er$ продемонстрировали яркую люминесценцию в видимом диапазоне при облучении лазером с длиной волны 980 нм. Показано, что линия люминесценции на 530 нм слабо зависит от температуры. Между тем, сильная температурная зависимость интенсивности линии на 541 нм открывает возможность создания наноразмерного сенсора температуры в области 285–325 К.

DOI: 10.31857/S0367676522120262

ВВЕДЕНИЕ

За последние несколько десятков лет с помощью техники люминесцентной биовизуализации стало возможно не только получать микроизображения [1], но также изучать локальную температуру различных структур на микромасштабе [2, 3]. Традиционно в качестве нанозондов выступают молекулы органических красителей, квантовые точки, флуоресцентные протеины и люминесцентные комплексы переходных металлов [4–9]. Все эти наномаркеры обладают теми или иными недостатками. Например, одной из фундаментальных проблем, которая сильно ограничивает области применения нанозондов, является УФ накачка. Она приводит к фотодеструкции и автофлуоресценции, что негативно сказывается на точности измерения. Токсичность и мерцание квантовых точек, широкие линии люминесценции биомолекул и красителей также являются существенным недостатком для их применения в качестве наномаркеров [10–15].

Апконверсионные наночастицы лишены указанных недостатков. Они состоят из матрицы-нанокристалла, куда внедрены сенсibilизатор и активатор. Это позволяет осуществлять эффективную конверсию ИК-излучения в люминесценцию видимого диапазона длин волн. К пре-

имуществам апконверсионных наночастиц относятся: большая глубина проникновения ближнего ИК излучения в биоткани [16], отсутствие автофлуоресценции [17–19], фотостабильность [17, 20, 21], низкая фотодеструкция биологических молекул [22], а также низкая токсичность [16, 20, 23, 24].

В настоящее время активно исследуются наночастицы, допированные ионами Yb^{3+} и Er^{3+} . Они выступают в роли сенсibilизатора и активатора, соответственно. Ионы Yb^{3+} с большим сечением поглощения на длине волны 980 нм эффективно передают энергию на резонансные уровни ионов Er^{3+} . В результате нескольких последовательных процессов поглощения и переноса энергии обеспечивается апконверсионная люминесценция. Перенос энергии через метастабильные состояния ионов повышает вероятность двухквантовых процессов [25, 26]. Чтобы добиться высокого квантового выхода, для апконверсионных наночастиц необходимы матрицы с фононами низкой энергии. Одной из наиболее широко используемых матриц является кристалл $\beta-NaYF_4$, энергия фонона которого составляет 350 см^{-1} [27, 28]. Однако у данных нанокристаллов есть недостаток – токсичность и высокая чувствительность к тушителям люминесценции в водных растворах.

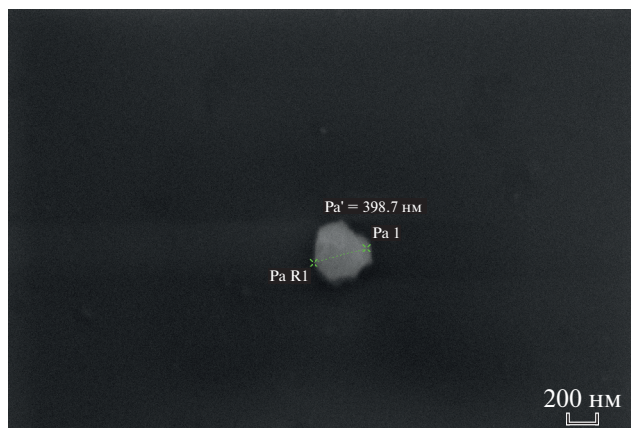


Рис. 1. Изображение наночастиц $\text{YVO}_4:\text{Yb, Er}$, полученное на сканирующем электронном микроскопе.

В данной работе мы используем в качестве матрицы нанокристаллы YVO_4 . Несмотря на сравнительно большую энергию фононов 880 см^{-1} , наночастицы $\text{YVO}_4:\text{Yb, Er}$ размером от нескольких десятков нанометров и более оказываются слабо чувствительными к воздействию поверхностных тушителей в водных средах [29–32]. Помимо этого, они считаются малотоксичными [33], что делает их перспективными для применения как нанобиозондов [32].

Для оценки возможности создания термонаносенсора на основе апконверсионных наночастиц в данной работе исследовались температурные зависимости спектра люминесценции синтезированных наночастиц $\text{YVO}_4:\text{Yb, Er}$ в диапазоне 285–325 К.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Апконверсионные наночастицы (АКНЧ) были синтезированы в соответствии со следующей процедурой [34], за исключением того, что мы проводили синтез с помощью линии Шленка, в то время как в литературе синтез проводился в автоклаве. Все исходные компоненты использовались чистоты не менее 99% за исключением олеиновой кислоты. Исходные растворы лантаноидов и ванадата приготавливались следующим образом: 1 мМоль нитратов лантаноидов $\text{Ln}(\text{NO}_3)_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln} = \text{Y, Yb, Er}$) в молярном соотношении 78 : 20 : 2 растворялся в 3 мл дистиллированной воды. Ортованадат натрия ($\text{Na}_3\text{VO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$) в том же количестве, что и лантаноиды, растворялся в 10 мл дистиллированной воды. В трехгорлой колбе смешивались 25 мл 1-октадецена и 2 мл олеиновой кислоты (90%), затем обезвоживались при температуре 150°C и дегазировались в вакууме в течение 15 мин при постоянном помешивании магнитной мешалкой. Далее в колбу добавлялись ис-

ходные растворы лантаноидов, смесь снова дегазировалась и обезвоживалась. На следующей стадии добавлялся 1 мл олеиламина и раствор ортованадата натрия. Также добавлялся гидроксид натрия до достижения смеси кислотности pH 9. После этого смесь опять дегазировалась и обезвоживалась при температуре 90°C в течении 20 мин. В потоке аргона смесь нагревалась до 280°C в течение 1 ч. После охлаждения смесь центрифугировалась и промывалась этанолом и гексаном в пропорции 1 : 1 четыре раза. Промытые наночастицы хранились в гексане.

Изображение типичной АКНЧ, полученное на сканирующем электронном микроскопе EVO 50 XVP (Carl Zeiss) с системой зондового микроанализа “INCA Energy-350”, показано на рис. 1. Характерные размеры полученных АКНЧ лежат в диапазоне 100–500 нм.

Для изучения спектроскопических особенностей изготавливались образцы АКНЧ следующим методом. На стандартное покровное стекло (толщина 0.17 мм) наносилось 50 мкл раствора АКНЧ, после чего нанесенная капля высушивалась. Образцы помещались на холодный палец криостата ST-100 (Janise). Криостат вакуумировался и охлаждался жидким азотом. Температура поддерживалась с помощью термостата LakeShore 325 с точностью 0.1 К. Криостат помещался в камеру образцов спектрофлуориметра Fluorolog-QM-75-22-C (Horiba). На поверхности образца фокусировалось излучение полупроводникового непрерывного лазера с длиной волны 980 нм, мощностью 100 мВт (CNI Laser), прошедшее через интерференционный фильтр для выделения лазерного излучения (ширина линии 3.5 нм). Люминесценция анализировалась с помощью двойного монохроматора с фокусным расстоянием 380 мм, оснащенного дифракционными решетками 1200 шт./мм с блеском 500 нм и ФЭУ R13456-11 (Hamamatsu) с термоэлектрическим охлаждением до 70°C . На рис. 2 показан обзорный спектр люминесценции образца при температуре 77 К с указанием всех зарегистрированных характерных линий ионов Er^{3+} .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Как правило, для удаленного измерения температуры люминесцентными наносенсорами используются такие параметры, как интенсивность и форма линий люминесценции, время затухания кинетики люминесценции, сдвиг спектрального максимума и др. В данной работе мы решили использовать самый надежный из них — ратиометрический способ измерения. Его суть состоит в регистрации относительной интенсивности линий люминесценции, соответствующих различным переходам иона Er^{3+} . Это позволяет нивели-

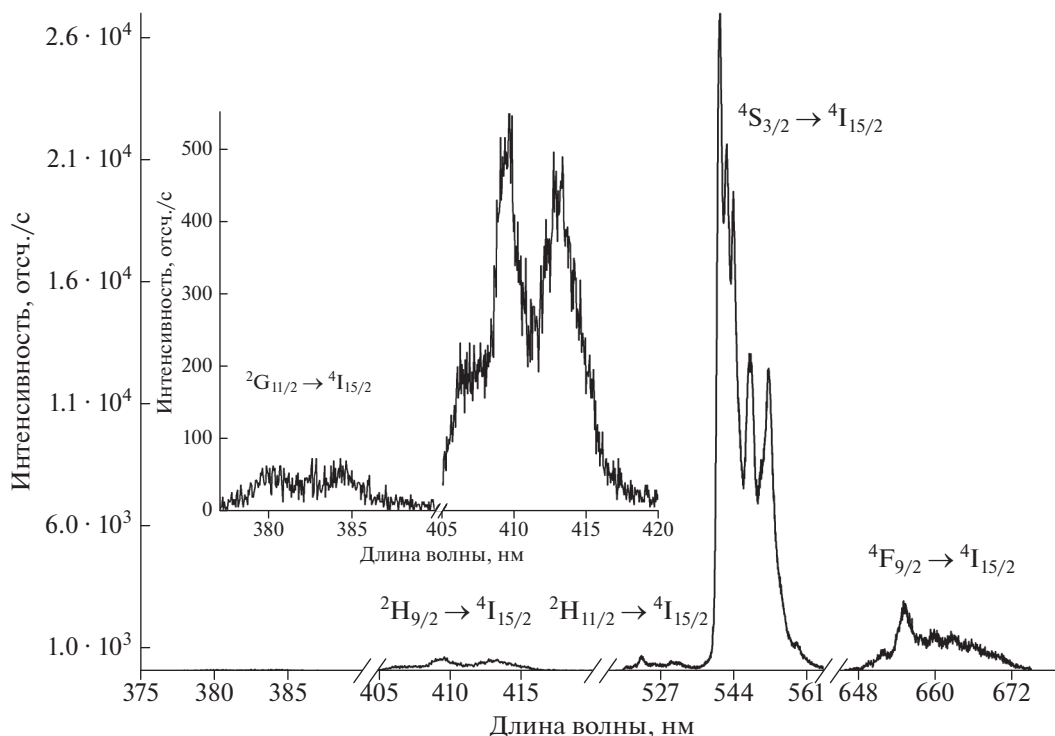


Рис. 2. Обзорный спектр АКНЧ при температуре 77 К. На врезке показан УФ диапазон излучения.

ровать многие систематические и случайные ошибки измерения.

В эксперименте регистрировались переходы на основной уровень $4I_{15/2}$ иона Er^{3+} с уровней $4F_{7/2}$ (470 нм), $2H_{11/2}$ (530 нм), $4S_{3/2}$ (550 нм), $4F_{9/2}$ (660 нм) и $4I_{9/2}$ (800 нм). Для возбуждения ионов на эти уровни требуется две порции энергии поглощенные сенсibilизатором (ионом Yb^{3+}). Однако, линии люминесценции в районе 800 нм тяжело наблюдать из-за спектральной близости накачки — лазерного излучения 980 нм. Линию люминесценции в районе 470 нм тяжело наблюдать с помощью установки, использованной в статье, потому что прошедшее через двойной монохроматор излучение накачки препятствует измерению на кратных длинах волн из-за особенностей дифракционных решеток. Таким образом, мы обратили внимание на три спектральных диапазона в районе 530, 550 и 660 нм.

При варьировании температуры образца с неизменными остальными параметрами экспериментальной установки наиболее яркими оказались линии люминесценции в области 520–560 нм, которые соответствуют излучательным переходам с уровней $2H_{11/2}$ и $4S_{3/2}$ на основной уровень $4I_{15/2}$ иона Er^{3+} . На рис. 3 видно, что линии переходов с уровня $2H_{11/2}$ практически не меняют интенсивность при изменении температуры. При этом ин-

тенсивность эмиссии с уровня $4S_{3/2}$ уменьшается с ростом температуры.

На рис. 4 продемонстрирована температурная зависимость отношения интенсивности люминесценции на длине волны 541 нм к интенсивности на длине волны 530 нм. Также на рисунке приведена линейная аппроксимация с наклоном -0.034 .

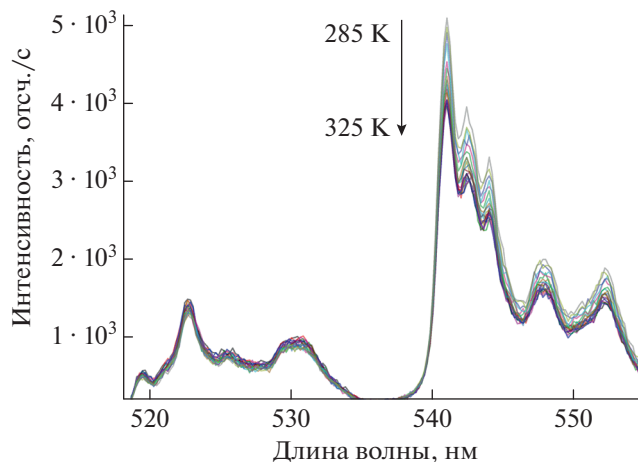


Рис. 3. Спектр эмиссионных переходов с уровней $2H_{11/2}$ и $4S_{3/2}$ на основной уровень $4I_{15/2}$ иона Er^{3+} в зависимости от температуры в диапазоне 285–325 К.

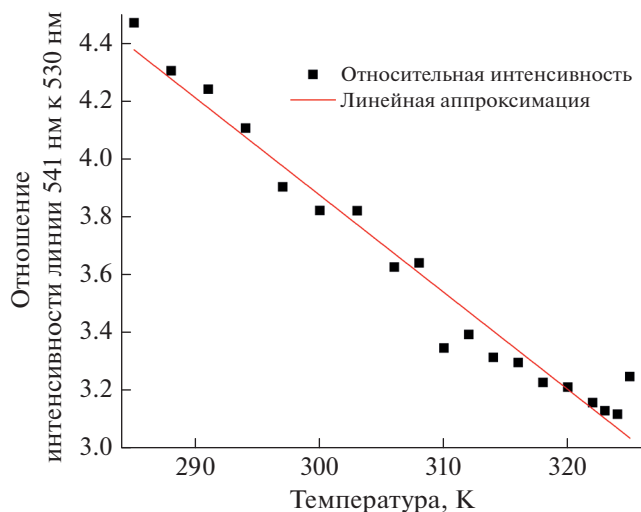


Рис. 4. Температурная зависимость относительной интенсивности спектральных линий АКНЧ. Точки — отношение интенсивности люминесценции на длине волны 541 нм к интенсивности на длине волны 530 нм. Сплошная линия — линейная аппроксимация с наклоном -0.034 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами были синтезированы наночастицы $\text{YVO}_4:\text{Yb}$, Er , которые обладают эффективной апконверсией с наиболее яркой люминесценцией в области 520–560 нм, вызванной излучательными переходами с уровней ${}^2\text{H}_{11/2}$ и ${}^4\text{S}_{3/2}$ на основной уровень ${}^4\text{I}_{15/2}$ иона Er^{3+} при облучении непрерывным диодным лазером на длине волны 980 нм. Обнаружено линейное падение интенсивности пика люминесценции на длине волны 541 нм по отношению к пику на 530 нм с ростом температуры. Это позволяет заключить, что синтезированные нами АКНЧ $\text{YVO}_4:\text{Yb}$, Er являются перспективными термонаносенсорами, пригодными для использования в широкой области приложений. Ориентировочная чувствительность таких наносенсоров составляет 0.034 K^{-1} в диапазоне 285–325 К.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00545), а также РФФИ и БРФИ (проект № 20-52-04018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Berezin M.Y., Achilefu S. // Chem. Rev. 2010. V. 110. P. 2641.
2. Okabe K., Inada N., Gota C. et al. // Nature Commun. 2012. V. 3. Art. No. 705.
3. Hayashi T., Fukuda N., Uchiyama S., Inada N. // PLoS One. 2015. V. 10. No. 2. Art. No. e0117677.
4. Lau J.S.Y., Lee P.K., Tsang K.H.K. et al. // Inorg. Chem. 2009. No. 48. P. 708.
5. Malkani N., Schmid J.A. // PLoS One. 2011. V. 6. Art. No. e18586.
6. Medintz L., Uyeda H.T., Goldman E.R., Mattoussi H. // Nature Mater. 2005. V. 4. P. 435.
7. Wang C., Ma Q., Dou W.C., Kanwal S. et al. // Talanta. 2009. V. 77. P. 1358.
8. Yu M.X., Zhao Q., Shi L.X. et al. // Chem. Commun. 2008. No. 18. P. 2115.
9. Zhao Q., Yu M.X., Shi L.X. et al. // Organometallics. 2010. V. 29. P. 1085.
10. Hilderbrand S.A., Shao F.W., Salthouse C. et al. // Chem. Commun. 2009. No. 28. P. 4188.
11. Karimullin K.R., Arzhanov A.I., Eremchev I.Yu. et al. // Laser Phys. 2019. V. 29. No. 12. Art. No. 124009.
12. Larson D.R., Zipfel W.R., Williams R.M. et al. // Science. 2003. V. 300. P. 1434.
13. van de Rijke F., Zijlmans H., Li S. et al. // Nature Biotechnol. 2001. V. 19. P. 273.
14. Nikiforov V.G., Leontyev A.V., Shmelev A.G. et al. // Laser Phys. Lett. 2019. V. 16. No. 6. Art. No. 065901.
15. Leontyev A.V., Shmelev A.G., Zharkov D.K. et al. // Laser Phys. Lett. 2019. V. 16. No. 1. Art. No. 015901.
16. Chatterjee D.K., Rufaihah A.J., Zhang Y. // Biomaterials. 2008. V. 29. P. 937.
17. Idris N.M., Li Z.Q., Ye L. et al. // Biomaterials. 2009. V. 30. P. 5104.
18. Johnson N.J.J., Sangeetha N.M., Boye J.C., van Veggel F.C.J.M. // Nanoscale. 2010. V. 2. P. 771.
19. Wu X.J., Zhang Q.B., Wang X. et al. // Eur. J. Inorg. Chem. 2011. No. 13. P. 2158.
20. Park Y.I., Kim J.H., Lee K.T. et al. // Adv. Mater. 2009. V. 21. P. 4467.
21. Sudhagar S., Sathya S., Pandian K., Lakshmi B. // Biotech. Lett. 2011. V. 33. P. 1891.
22. Jiang S., Zhang Y. // Langmuir. 2010. V. 26. P. 6689.
23. Jalil A.R., Zhang Y. // Biomaterials. 2008. V. 29. P. 4122.
24. Xiong L.Q., Yang T.S., Yang Y. et al. // Biomaterials. 2010. V. 31. P. 7078.
25. Gamelin D.R., del Gu H.U. // Topics Curr. Chem. 2001. V. 214. P. 1.
26. Auzel F. // Chem. Rev. 2004. V. 104. P. 139.
27. Joubert M.F. // Opt. Mater. 1999. V. 11. P. 181.
28. Goldner P., Pellé F. // J. Luminescence. 1993. V. 55. P. 197.
29. Alkahtani M., Hemmer P.R., Zharkov D.K. et al. // Nanomaterials. 2022. V. 12. No. 4. Art. No. 601.
30. Никифоров В.Г. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 12. С. 1734; Nikiforov V.G. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 12. P. 1383.
31. Жарков Д.К., Шмелев А.Г., Леонтьев А.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 3. С. 317; Zharkov D.K., Shmelev A.G., Leontyev A.V. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 3. P. 241.
32. Жарков Д.К., Шмелев А.Г., Леонтьев А.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 12. С. 1746; Zharkov D.K., Shmelev A.G., Leontyev A.V. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 12. P. 1486.

33. Petrochenko P.E., Zhang Q., Wildt B. et al. // J. Appl. Ceramic. Technol. 2012. V. 9. No. 5. P. 881. 34. Deng H., Yang S., Xiao S., Gong H.-M., Wang Q.-Q. // J. Amer. Chem. Soc. 2008. V. 130. No. 6. P. 2032.

YVO₄:Yb, Er upconversion nanoparticles relative spectral line temperature dependency in the range of 285–305 K

**A. G. Shmelev^{a,*}, D. K. Zharkov^a, A. V. Leontyev^a, V. G. Nikiforov^a, D. N. Petrov^b,
M. F. Krylov^b, J. E. Clavijo^b, V. S. Lobkov^a**

^a *Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Kazan, 420029 Russia*

^b *Kazan Federal University, Institute of Physics, Kazan, 420008 Russia*

*e-mail: sgartjom@gmail.com

YVO₄-based nanoparticles doped with Yb and Er have been synthesized by the thermal decomposition in Ar-athmosphere method. The UCNPs are demonstrating a strong luminescence upconversion in 510–560 nm range. The dependence of the luminescence intensity at 541 nm on temperature is much stronger than 530 nm. Linear fit of the relative intensity (541 nm to 530 nm) on temperature dependency show –0.034 slope.

УДК 620.3:[577.35+538.958+53.05+53.096]

ОСОБЕННОСТИ ОПТИЧЕСКОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В НАНОАЛМАЗАХ

© 2022 г. А. В. Леонтьев¹, *, Д. К. Жарков¹, А. Г. Шмелев¹, В. Г. Никифоров¹,
В. С. Лобков¹, Е. О. Митюшкин², М. Х. Алькатани³

¹Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Федеральный исследовательский центр
“Казанский научный центр Российской академии наук”, Казань, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Казанский (Приволжский) федеральный университет”, Казань, Россия

³Национальный центр лазерных технологий и оптоэлектроники,
Город науки и техники Короля Абдулазиза, Эр-Рияд, Саудовская Аравия

*E-mail: AVLeontyev@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Представлены результаты исследования возможности создания оптически активных нанодиазидов, чувствительных к магнитным полям. Эксперименты по оптическому детектированию магнитного резонанса в синтезированных нанодиазидах ясно показали наличие отрицательно заряженных азотно-вакансионных центров окраски, чувствительных к внешнему магнитному полю. Полученные результаты демонстрируют возможность применения таких нанодиазидов в роли наносенсоров слабых магнитных полей.

DOI: 10.31857/S0367676522120225

ВВЕДЕНИЕ

Квантовые оптические магнитометры, использующие сигналы оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) на азотно-вакансионных (NV) центрах в алмазе [1, 2], в настоящее время занимают значительную нишу в задачах измерения локальных магнитных полей. Поскольку NV-центры представляют собой точечные дефекты атомарного размера и могут быть локализованы в непосредственной близости от поверхности алмаза, их можно расположить в пределах нескольких нанометров от образцов, что обеспечивает нанометровое пространственное разрешение [3]. В то же время возможно достижение высокой чувствительности с использованием ансамбля таких центров [4]. Практически абсолютная инертность алмаза позволяет использовать такие магнитометры в биологических образцах, включая отдельные нейроны [1, 5, 6].

Нами исследована возможность изготовления люминесцентного нанодиазидометра на основе образцов, полученных с использованием сравнительно простой техники выращивания нанодиазидов вокруг алмазоподобной молекулы затравки.

ЭКСПЕРИМЕНТ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Нанодиазиды были синтезированы в соответствии с процедурой [7], краткое описание которой состоит в следующем. Молекулы затравки (1-адамантиламин) были распределены в смеси гептаметилнонана и тетракозана. Далее реакционная смесь была помещена в отверстие в металлической гаскете из жаропрочной стали Inconel 718. Гаскета с заполненной реакционной камерой (диаметр и толщина последней составляли ~100 мкм) была помещена в винтовую ячейку с алмазными наковальнями (изготовлена из Inconel 718, наковальни Almax easyLab). Рост нанодиазидов производился в условиях давления в ячейке 10 ГПа, температуре 650°C в аргонной атмосфере для защиты наковален в течение 4 ч, после чего продукты реакции были извлечены из ячейки высокого давления. С целью создания углеродных вакансий они были облучены ионами гелия (50 кэВ, $2 \cdot 10^{13}$ ионов/см²). Далее при температуре 750°C в течение 2 ч происходило окончательное формирование азотно-вакансионных центров [8, 9].

Оптические свойства полученных центров в нанодиазидах исследовались с использованием лазерного сканирующего конфокального микро-

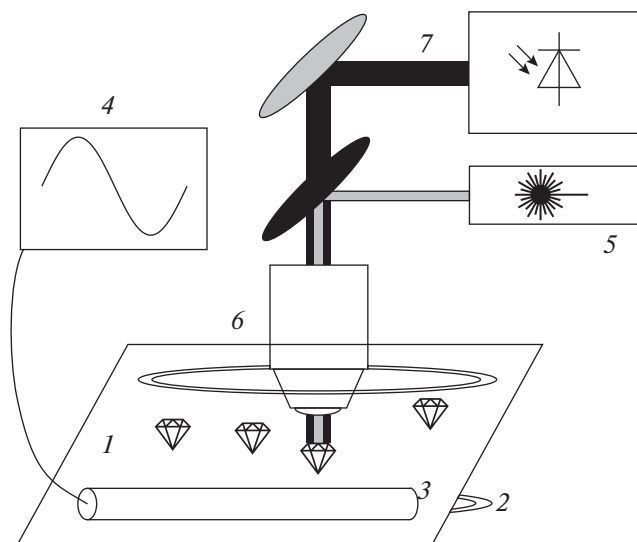


Рис. 1. Схема установки по регистрации сигналов ОДМР с субмикронным пространственным разрешением: 1 – кремниевая подложка с диспергированными на ней наноалмазами, 2 – катушки Гельмгольца, 3 – РЧ-антенна, 4 – генератор РЧ-поля, 5 – лазер, 6 – микрообъектив, 7 – фотодетектор.

скопа (рис. 1). Возбуждение осуществлялось второй гармоникой непрерывного YAG-Nd лазера (532 нм, 5 мВ). Лазерный луч фокусировался 40× микрообъективом на поверхность кремниевой пластинки с диспергированными на ней наноалмазами. Пространственное положение сфокусированного пучка управлялось парой гальванометрических зеркал (Thorlabs GVS 212) и пьезоэлектрическим микроактуатором (Newport NPO140SG). Излучение облучаемой лазером области, пропущенное через блокирующий длину волны лазера фильтр, направлялось на фотодетектор, счетчик фотонов или оптический спектрометр, представляющий собой комбинацию дифракционной решетки (Thorlabs GT25-03) и ПЗС-камеры (Starlight Xpress Trius SX-694).

Для наблюдения сигналов ОДМР был использован высокочастотный генератор (Windfreak SynthHD). Подача радиочастотного (РЧ) поля в исследуемую область на поверхности кремниевой подложки осуществлялась с помощью прямого медного провода диаметром 100 мкм, размещенного на поверхности подложки вблизи исследуемых частиц и подсоединенного к цепи генератора. Величина внешнего постоянного магнитного поля регулировалась при помощи катушек Гельмгольца в диапазоне 0.7–7 мТл.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Пример спектра люминесцирующей области приведен на рис. 2. Положения максимумов в

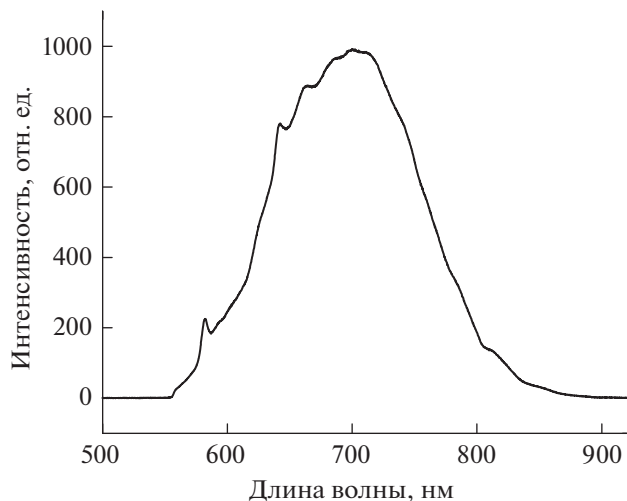


Рис. 2. Спектр люминесценции NV-центров в наноалмазах при возбуждении излучением с длиной волны 532 нм.

спектре вблизи 575 нм и 638 нм соответствуют бесфонным линиям центров NV^0 и NV^- .

Сигнал ОДМР, представленный на рис. 3, получен путем варьирования частоты РЧ поля в диапазоне 2.75–3 ГГц с одновременной регистрацией в режиме счета фотонов интегральной интенсивности люминесценции. Полученные характерные зависимости спектров от величины постоянного магнитного поля полностью соответствуют таковым для отрицательно заряженных центров (NV^-) [9]. Как правило, низкая концентрация P1-центров в наноалмазах проявляется в виде высококонтрастного узкого сигнала ОДМР, шириной около

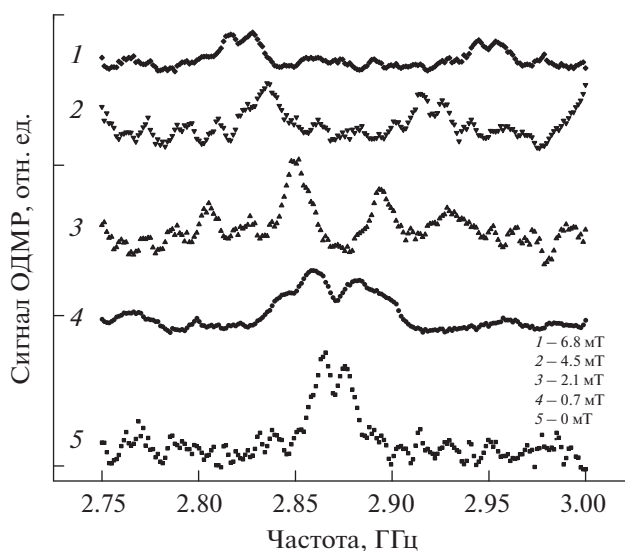


Рис. 3. Сигналы ОДМР NV-центров в наноалмазах в постоянном магнитном поле 0–7 мТ.

15 МГц, линия которого не имеет расщепления в нулевом магнитном поле [9, 10]. На рис. 3 видно, что в нашем случае низкоконтрастный сигнал ОДМР имеет ярко выраженное расщепление в нулевом магнитном поле. Согласно [7], расщепление вызвано наличием локальных электрических полей из-за высокой концентрации доноров электронов. Таким образом, основываясь на приведенных выше соображениях, разумно предположить, что полученные нами нанодиамазы имеют большую концентрацию P1-центров, которая образовалась во время быстрого роста нанокристаллов при температуре 650°C, путем включения атомов азота в кристаллическую решетку. Отметим, что высокая концентрация доноров электронов препятствует переходам между состояниями NV⁰ и NV⁻ и, таким образом, стабилизируют отрицательно заряженный центр окраски. Стабильность NV⁻ центров под действием красного лазерного излучения крайне желательна при детектировании магнитных полей в биологических задачах. Рисунок 3 как раз показывает чувствительность ОДМР сигнала к приложенному внешнему магнитному полю. Видно, что поле величиной 6.8 мТ приводит к сдвигу пиков ОДМР на 130 МГц. Этот факт дает основания полагать, что после калибровки синтезированные нами нанодиамазы можно использовать в качестве наносенсоров локальных магнитных полей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Синтезированы образцы нанодиамазов, содержащие азотно-вакансионные центры окраски, на

которых зарегистрированы спектры ОДМР во внешнем постоянном магнитном поле. Контраст и чувствительность к величине поля сигналов ОДМР достаточны для использования таких частиц в качестве наносенсоров локальных магнитных полей индукцией порядка 1 мТ.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00545), а также РФФИ и БРФФИ (проект № 20-52-04018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hall L., Beart G., Thomas E. et al. // Sci. Rep. 2012. V. 2. P. 401.*
2. *Balasubramanian G., Chan I.Y., Kolesov R. et al. // Nature. 2008. V. 455. P. 648.*
3. *Taylor J.M., Cappellaro P., Childress L. et al. // Nature Phys. 2008. V. 4. P. 810.*
4. *Hong S., Grinolds M.S., Pham L.M. et al. // MRS Bulletin. 2013. V. 38. P. 155.*
5. *Chen S., Li W., Zheng X. et al. // Proc. National Acad. Sci. 2022. V. 119. No. 5. Art. No. e2118876119.*
6. *Barry J.F., Turner M.J., Schloss J.M. et al. // Proc. National Acad. Sci. 2016. V. 113. No. 49. P. 14133.*
7. *Alkahtani M., Lang J., Naydenov B. et al. // ACS Photonics. 2019. V. 6. No. 5. P. 1266.*
8. *Alkahtani M., Hemmer P. // Opt. Mater. Express. 2020. V. 10. P. 1224.*
9. *Matsuzaki Y., Morishita H., Shimooka T. et al. // J. Phys. Cond. Matter. 2016. V. 28. Art. No. 275302.*
10. *Mittiga T., Hsieh S., Zu C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. No. 24. Art. No. 246402.*

Optically detected magnetic resonance signal features in nanodiamond samples

A. V. Leontyev^{a,*}, D. K. Zharkov^a, A. G. Shmelev^a, V. G. Nikiforov^a, V. S. Lobkov^a,
E. O. Mityushkin^b, M. H. Alkahtani^c

^a *Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Kazan, 420029 Russia*

^b *Kazan Federal University, Institute of Fundamental Medicine and Biology, Kazan, 420008 Russia*

^c *National Center for Laser and Optoelectronics, Riyadh, Saudi Arabia*

*e-mail: AVLeontyev@gmail.com

The results on the creation of optically active nanodiamonds sensitive to magnetic fields are reported. Experiments on the optical detection of magnetic resonance in synthesized nanodiamonds clearly show the presence of negatively charged nitrogen-vacancy color centers sensitive to an external magnetic field. The results demonstrate the possibility of applications as nanosensors of weak magnetic fields.

УДК 620.3:[577.35+538.958+53.05+53.096]

ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ АПКОНВЕРСИОННЫХ ЕДИНИЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$

© 2022 г. Д. К. Жарков^{1,*}, В. Г. Никифоров¹, А. Г. Шмелев¹, А. В. Леонтьев¹, Е. О. Митюшкин¹,
Н. М. Лядов¹, Н. И. Нургазизов¹, А. П. Чукланов¹, А. В. Пашкевич², В. С. Лобков¹

¹Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Федеральный исследовательский центр
“Казанский научный центр Российской академии наук”, Казань, Россия

²Научно-исследовательское учреждение “Институт ядерных проблем”
Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь

*E-mail: dzharkov@list.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Используя сольвотермальный метод, мы синтезировали наночастицы $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$. Под действием лазерного излучения на длине волны 980 нм они демонстрируют яркую апконверсионную люминесценцию, которая соответствует эмиссии ионов Tm^{3+} в результате переноса энергии с ионов Yb^{3+} . Регистрация излучения единичных наночастиц показала, что спектральные линии на длинах волн 480 и 495 нм обладают разной поляризацией.

DOI: 10.31857/S0367676522120328

ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие нанотехнологии обуславливает растущую потребность в стабильных зондах для контроля локальных физических параметров [1]. В зависимости от задачи возникает необходимость мониторинга температуры, давления, электрических и магнитных полей, а также ряда других величин. Например, внутриклеточная температура и электрические потенциалы представляют актуальную информацию о состоянии биологических тканей [2]. Локальная температура различных элементов микросхем может сигнализировать о предельных режимах эксплуатации в радиоэлектронных устройствах. Определение локальных напряжений в различных узлах и агрегатах космической, авиационной, автомобильной техники также важно для ранней диагностики нагруженных элементов [3].

Апконверсионные наночастицы (АНЧ) представляют собой удобный инструмент для реализации на их основе различных нанозондов [4]. В АНЧ возбуждение осуществляется инфракрасным лазерным излучением в области поглощения ионов Yb^{3+} , которые выступают в роли антенны. Люминесценция возникает в видимом диапазоне, благодаря эмиссии с уровней ионов Tm^{3+} [5, 6]. В отличие от даунконверсионных люминофоров, АНЧ обладают высокой фотостабильностью. Использование инфракрасного возбужде-

ния не вызывает паразитную автофлюоресценцию органических молекул (грязи), что положительно сказывается на соотношении сигнал/шум. Как правило, в практических задачах инфракрасное излучение позволяет добиться большей глубины проникновения в исследуемый образец.

Нами выполнен синтез наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$, которые обладают ярко выраженными апконверсионными свойствами. Однако, в отличие от большинства подобных работ, где изучаются свойства большого ансамбля АНЧ (в порошке, в растворах, в полимерах и др.), мы сосредоточились на исследовании люминесцентного сигнала одиночных АНЧ. Это имеет особое значение с практической стороны, поскольку путем использования единичных АНЧ предполагается получать наиболее точную информацию о локальных параметрах среды.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Синтез апконверсионных наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$ проводили сольвотермальным методом в инертной атмосфере. Соли редкоземельных элементов 0.78 ммоль YCl_3 (99.9%), 0.2 ммоль YbCl_3 (99.9%) и 0.02 ммоль TmCl_3 (99.9%) растворяли в 10 мл раствора олеиновой кислоты (90%) и 15 мл октадецена (90%) путем интенсивного пе-

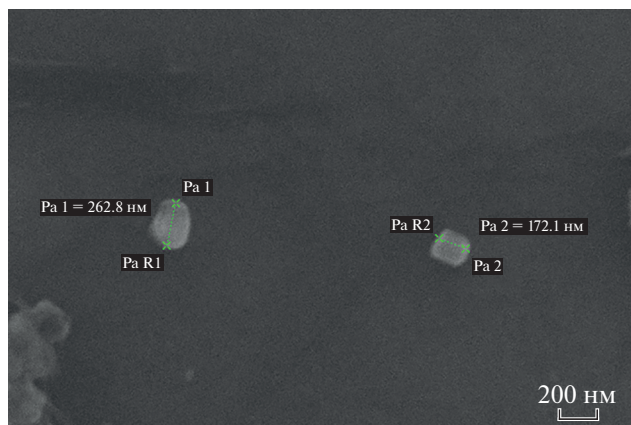


Рис. 1. Микрофотография наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb},\text{Tm}$, полученная на сканирующем электронном микроскопе.

ремешивания. Затем в реакционную смесь вводили 4 ммоль NaOH (98%) и 4 ммоль NH_4F (99.99%). Интенсивное перемешивание осуществляли при комнатной температуре. На следующем этапе температуру повышали до 120°C . После чего в течение 30 мин происходило формирование АНЧ.

Для осуществления перехода кристаллической решетки из кубической симметрии в гексагональную температура была доведена до 300°C . Следует отметить, что данная процедура повышает интенсивность люминесценции на несколько порядков. Спустя 1 ч раствор охлаждали до комнатной температуры. Наночастицы центрифугировали, промывали поочередно этанолом и циклогексаном для удаления остатков олеиновой кислоты. В результате проведенного синтеза получили коллоидный раствор АНЧ в толуоле. Размеры синтезированных АНЧ находятся в пределах 100–200 нм (рис. 1).

Для дальнейшего изучения люминесцентных свойств АНЧ высаживали на стеклянную подложку. Один и тот же образец исследовали с помощью конфокального люминесцентного и электронного сканирующего микроскопов. Манипуляции с АНЧ осуществляли методами атомно-силовой микроскопии.

Исследования одиночной АНЧ проводили на конфокальном микроскопе с регистрацией спектров люминесценции в области от 350 до 1100 нм при лазерном возбуждении на длине волны 980 нм. Стократный объектив и соответствующий пинхол позволяют получать разрешение вплоть до 1 мкм. Для регистрации слабого сигнала люминесценции применяли однофотонные детекторы. Это позволило проводить уверенное детектирование люминесценции одиночных наночастиц. Для регистрации поляризационной зависимости в

конфокальную систему был добавлен поляризатор, расположенный перед пинхолом.

Размер и форма полученных в результате синтеза образцов изучали на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) “Zeiss EVO50 XVP”, оснащенный энергодисперсионным рентгеновским спектрометром “OxfordInca Energy-350”. Ускоряющее напряжение – 10 кВ.

Для подготовки образца к получению спектров от отдельной АНЧ использовали методы зондовой литографии. Зондовую литографию проводили на сканирующем зондовом микроскопе SolverHV (NTMDT), который работал в режиме атомно-силового микроскопа (АСМ). Сначала на образце механическим способом создавали метку, которая позволяла синхронизировать область сканирования для атомно-силового и конфокального микроскопов. Затем с помощью АСМ, работающего в полуконтактном режиме, прописывали область размерами приблизительно 50×50 мкм² и на этом поле выбирали отдельно лежащую АНЧ. Затем АСМ переводили в контактный режим работы и увеличивали на несколько порядков давление со стороны зонда на поверхность образца. Это позволило за счет выбора необходимой траектории движения зонда вытеснить остальные АНЧ и возможные загрязнения за пределы области сканирования. После этого АСМ снова переводили в полуконтактный режим работы, и проверяли степень очистки поля сканирования. При необходимости вышеописанную процедуру повторяли несколько раз, до тех пор, пока в поле сканирования не оставалась одиночная АНЧ.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При регистрации спектров люминесценции ансамблей АНЧ в разных областях подложки была обнаружена зависимость формы линий от координаты подложки. В частности, относительные амплитуды линий на 480 и 496 нм, соответствующие переходам $^1D_2 \rightarrow ^3F_4$ и $^1G_4 \rightarrow ^3H_6$, варьировались в широких пределах.

Для выяснения причины наблюдаемых спектральных различий было решено исследовать поляризационные зависимости эмиссионных переходов $^1D_2 \rightarrow ^3F_4$ и $^1G_4 \rightarrow ^3H_6$ отдельной АНЧ. С этой целью методами зондовой литографии на подложке была расчищена от возможных загрязнений и ненужных частиц область размерами около 0.003 мм², на которой была оставлена единственная АНЧ, что позволило регистрировать сигнал от этой конкретной частицы.

Для определения поляризованного излучения в систему регистрации был добавлен поляризатор. Спектры люминесценции снимались с различными ориентациями поляризатора с шагом

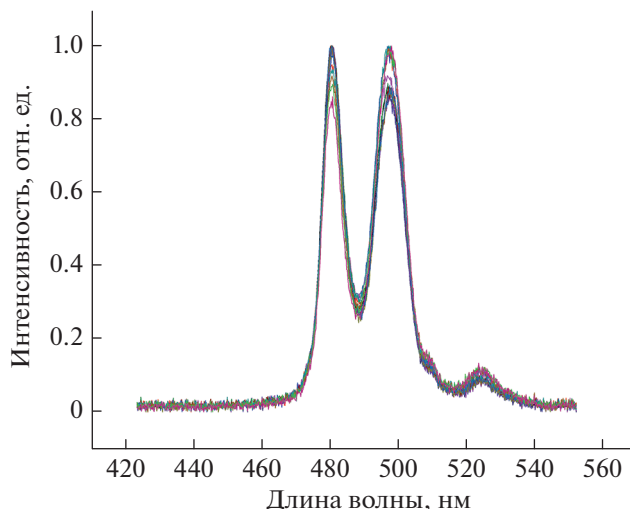


Рис. 2. Спектры люминесценции апконверсионных наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$ при различных ориентациях поляризатора, расположенного перед пинхолом.

15 град. Результаты экспериментов представлены на рис. 2, где отчетливо видно, что соотношение интенсивностей линий люминесценции на 480 и 495 нм зависит от угла поляризатора.

На рис. 3 показана диаграмма соотношений интенсивностей двух линий люминесценции в зависимости от угла поворота поляризатора. Видны плавные изменения в пределах от 0.8 до 1.2. В выбранной нами геометрии эксперимента направление угла 360–15 град соответствует минимуму интенсивности линии ${}^1D_2 \rightarrow {}^3F_4$ на 480 нм. Максимальное значение эта линия имеет в области 90–270 град. Изменение относительных интенсивностей составляет примерно 40%. Соответственно, факт того, что не обнаружено направлений с близкой к нулю интенсивностью линий переходов ${}^1D_2 \rightarrow {}^3F_4$ и ${}^1G_4 \rightarrow {}^3H_6$, указывает на то, что их поляризации далеки от линейных. Чтобы определить степени поляризации, нужны дополнительные эксперименты с измерением абсолютных величин, что требует существенно большей точности контроля позиционирования (менее 1 мкм). Однако уже тестовые измерения (рис. 3) свидетельствуют о разной степени и углах поляризации излучательных переходов ${}^1D_2 \rightarrow {}^3F_4$ и ${}^1G_4 \rightarrow {}^3H_6$ в единичной АНЧ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования апконверсионной люминесценции синтезированных наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$ показали, что линии эмиссионных переходов ${}^1D_2 \rightarrow {}^3F_4$ и ${}^1G_4 \rightarrow {}^3H_6$ единичной наночастицы поляризованы. Этот факт следует учитывать как при разработке наносенсоров на основе

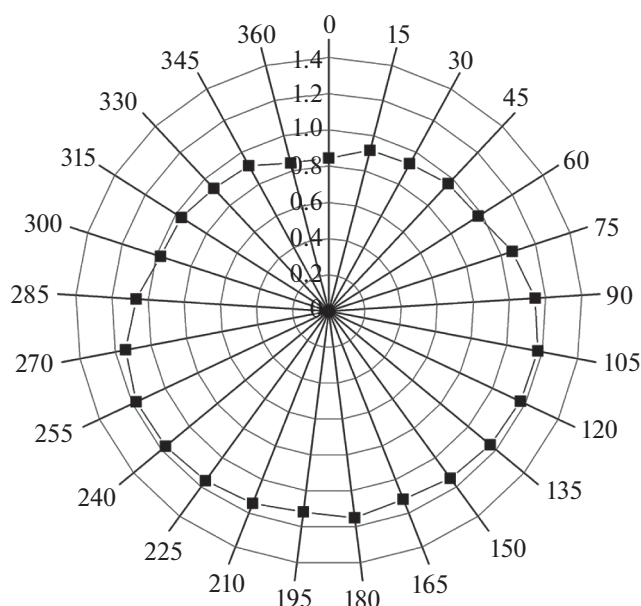


Рис. 3. Диаграмма соотношений интенсивностей двух линий люминесценции апконверсионных наночастиц $\text{YNaF}_4:\text{Yb}, \text{Tm}$ в зависимости от угла поворота поляризатора, расположенного перед пинхолом.

АНЧ, так и при проведении процедуры калибровки. Данный фактор может сыграть существенную роль, если в процессе измерения предполагается использовать счетный ансамбль наночастиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00545), а также РФФИ совместно с БРФФИ (проект № 20-52-04018). Исследования методами электронной микроскопии поддержаны грантом Минобрнауки РФ в рамках соглашения № 075-15-2021-623 с ФИЦ КазНЦ РАН. АСМ манипуляции с частицами проводились в рамках выполнения темы государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Javaid M., Haleem A., Singh R.P. et al.* // *Sensors Int.* 2021. V. 2. Art. No. 100130.
2. *Sharma P., Pandey V., Sharma M. et al.* // *Nanoscale Res. Lett.* 2021. V. 16. No. 1. P. 1.
3. *Lioi D.B., Varshney V., Izor S. et al.* // *J. Mater. Chem. C.* 2019. V. 7. No. 46. P. 14471.
4. *Zaldo C.* // *Adv. Nanomat.* 2018. P. 335.
5. *Gamelin D.R., Gudel H.U.* // In: *Transition metal and rare earth compounds: excited states, transitions, interactions.* Springer, 2000.
6. *Auzel F.* // *Chem. Rev.* 2004. V. 104. No. 1. P. 139.

Polarization of the luminescence of upconversion single $\text{YNaF}_4:\text{Yb},\text{Tm}$ nanoparticles**D. K. Zharkov^{a,*}, V. G. Nikiforov^a, A. G. Shmelev^a, A. V. Leontiev^a, E. O. Mityushkin^a, N. M. Lyadov^a,
N. I. Nurgazizov^a, A. P. Chuklanov^a, A. V. Pashkevich^b, V. S. Lobkov^a***^aZavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center
of the Russian Academy of Sciences, Kazan, 420029 Russia**^bInstitute for Nuclear Problems, Belarusian State University, Minsk, 220006 Belarus***e-mail: dzharkov@list.ru*

Using the solvothermal method, we synthesized $\text{YNaF}_4:\text{Yb},\text{Tm}$ nanoparticles. Under the action of laser irradiation at a wavelength of 980 nm, they demonstrate bright upconversion luminescence, which corresponds to the emission of Tm^{3+} ions as a result of energy transfer from Yb^{3+} ions. Registration of the emission of single nanoparticles showed that the spectral lines at wavelengths of 480 and 495 nm have different polarizations.

УДК 535.34

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СТРУКТУРНО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ПОЛОС В ИК-СПЕКТРАХ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

© 2022 г. Д. И. Камалова¹, *, О. А. Кочурова¹, М. Э. Сибгатуллин^{1, 2}¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Казанский (Приволжский) федеральный университет”, Казань, Россия²Государственное научное бюджетное учреждение “Академия наук Республики Татарстан”, Казань, Россия

*E-mail: dina.kamalova@kpfu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучено температурное поведение ИК полос поглощения полукристаллического поливинилхлорида. Получены температурные зависимости спектральных характеристик структурно-чувствительных полос поглощения ПВХ в широком диапазоне температур от 100 до 500 К. Для интерпретации колебательных полос, относящихся к аморфной и кристаллической областям ПВХ, а также для оценки степени кристалличности использовано разложение сложного спектрального контура на составляющие.

DOI: 10.31857/S0367676522120146

ВВЕДЕНИЕ

Благодаря своей невысокой стоимости, механической прочности, химической стабильности и другим физико-химическим свойствам поливинилхлорид (ПВХ) находит широкое применение в производстве ультрафильтрационных мембран, в частности композитных мембран [1–5]. Следует отметить, что гидрофобная природа ПВХ всегда приводит к сильному загрязнению мембраны и ограничивает ее применение. Производство полимерных мембран может быть улучшено путем смешивания разных полимеров, имеющих подходящие свойства. Добавление к гидрофобному ПВХ гидрофильного полимера позволяет наделить его гидрофильными свойствами, которые уменьшают скорость загрязнения мембраны [6, 7].

На разделительные свойства мембранных материалов влияет структура полимеров с точки зрения их кристалличности. В самом простом случае полимер состоит из упорядоченной (кристаллической) и неупорядоченной (аморфной) областей. ПВХ относится к полукристаллическим полимерам со степенью кристалличности, которая зависит от регулярности строения и условий кристаллизации. Кристаллическая и аморфная области в образце ПВХ характеризуются наличием специфических полос поглощения в ИК-спектре, которые претерпевают изменения при вариации температуры. При этом увеличение и уменьшение интенсивностей полос спектра про-

исходит по-разному. Для корректной интерпретации экспериментальных спектроскопических данных необходим анализ связи колебательного спектра с исследуемой структурой частично кристаллического полимера. Имеется большое количество работ по изучению физической структуры ПВХ методом ИК-спектроскопии, в частности монография [8]. Однако авторы работ по изучению связи температурных изменений структуры полимера и его спектра либо не выполняют разложение сложных контуров на составляющие в области структурно-чувствительных полос поглощения ПВХ (например, [9]), либо проводят разложение на составляющие, но не анализируют температурное поведение составляющих [10].

В настоящей работе проанализировано влияние температуры на спектральные характеристики структурно-чувствительных ИК-полос поглощения полимерных пленок из ПВХ в широком интервале температур с использованием разложения сложного контура на составляющие. Это позволяет характеризовать степень упорядоченности и разупорядоченности образца пленки ПВХ.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исследовали порошкообразный ПВХ фирмы SigmaAldrich с молекулярной массой $M_w = 80000$ и $M_n = 47000$. Структурная формула ПВХ приведена на рис. 1.

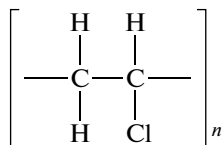


Рис. 1. Структурная формула поливинилхлорида (ПВХ).

Образцы полимерных пленок получали путем растворения полимера в тетрагидрофуране. Затем отливали пленки на подложке из КВг и выдерживали при температуре 100°C в течение 4 ч в сушильном шкафу. Отсутствие растворителя в пленках проверяли по ИК-спектрам, а именно, по отсутствию полосы поглощения при 1066 см⁻¹, относящейся к растворителю. Толщина пленок составляла 0.04 мм.

Спектры регистрировали с помощью ИК-фурье-спектрометра Frontier фирмы Perkin Elmer в интервале температур от 100 до 500 К. Для температурных экспериментов использовали криостат фирмы Sreac, температуру варьировали с шагом 10 К.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Наиболее подходящей для анализа влияния температуры на структуру ПВХ является спектральная область 500–800 см⁻¹. В качестве примера на рис. 2 представлены фрагменты ИК-фурье-спектра при пяти значениях температуры: 113, 203, 303, 403 и 503 К. Наблюдается значительное перераспределение интенсивностей полос поглощения, относящихся к С–С1 колебаниям, при изменении температуры. Поскольку в этой спектральной области полосы поглощения сильно перекрываются, то потребовалось разложение сложных спектральных контуров на составляющие. Задача разложения сложного спектрального контура на составляющие относится к классу обратных некорректных задач. Математическое решение подобной задачи возможно при применении априорной информации, которая уменьшает некорректность. В данной работе в качестве априорной информации было использовано количество спектральных контуров и положения их максимумов. Учет данной информации позволил провести разложение экспериментального контура на элементарные составляющие наиболее оптимальным образом с применением метода наименьших квадратов, что позволяет говорить об однозначности разложения с учетом полноты примененной априорной информации. Положения максимумов и количество полос определили с применением второй производной и выявили девять полос поглощения: 758, 694, 676, 649, 636, 624, 613, 604 и 540 см⁻¹.

При разложения контура на элементарные составляющие принималось во внимание качество восстановления контура при различных комбинациях гауссовых и лоренцевых компонентов. Это было необходимо ввиду того, что исследуемый спектральный контур является сложным по форме и состоит из большого числа элементарных контуров. Была подобрана наиболее оптимальная комбинация гауссовых и лоренцевых элементарных контуров. Свидетельством достижения наилучшей комбинации гауссовых и лоренцевых составляющих является практически точное совпадение исходного экспериментального и восстановленного контуров, которое было устойчивым как для спектров в низкотемпературной, так и высокотемпературной областях (рис. 2). В результате наилучшее совпадение экспериментального и рассчитанного сложных контуров достигнуто при аппроксимации лоренцевыми контурами спектральных компонент с максимумами 604, 613, 624, 636 и 649 см⁻¹, а компоненты 694 и 676 см⁻¹ описаны контурами Гаусса. Такая математическая обработка была выполнена для всех спектров, полученных при разных температурах. Результат обработки для спектров при пяти температурах представлен на рис. 2. Составляющие 758 и 540 см⁻¹ учитывали при разложении, хотя их вклад в крылья рассматриваемого контура весьма мал.

Были исследованы температурные зависимости спектральных характеристик компонентов контура в области 600–700 см⁻¹. На рис. 3а и 3б представлены температурные зависимости оптической плотности в максимуме $D_{\text{макс}}$ и интегральные значения оптической плотности $D_{\text{инт}}$ полос поглощения при 636 и 604 см⁻¹, которые согласно [8] являются полосами упорядоченности ПВХ. Сравнивая зависимости, представленные на рис. 3а и 3б, видим, что характер зависимостей оптических плотностей в максимуме и интегральной оптической плотности от температуры одинаков. Кроме того, обнаруживается сходное поведение оптических плотностей обеих полос поглощения между собой при изменении температуры. Как видно из рис. 3, для обеих зависимостей наблюдается слабое изменение оптической плотности при повышении температуры пленок ПВХ вплоть до 360 К, где имеет место излом, после чего резко падает при температуре выше 450 К. Ранее в [11] было показано, что вид температурных зависимостей интегральных интенсивностей полос упорядоченности полукристаллического полимера поливинилиденфториде позволил зарегистрировать термические превращения, в частности, процесс стеклования. Сравнивая температуру, соответствующую излому на зависимостях (рис. 3), с температурой стеклования ПВХ, рав-

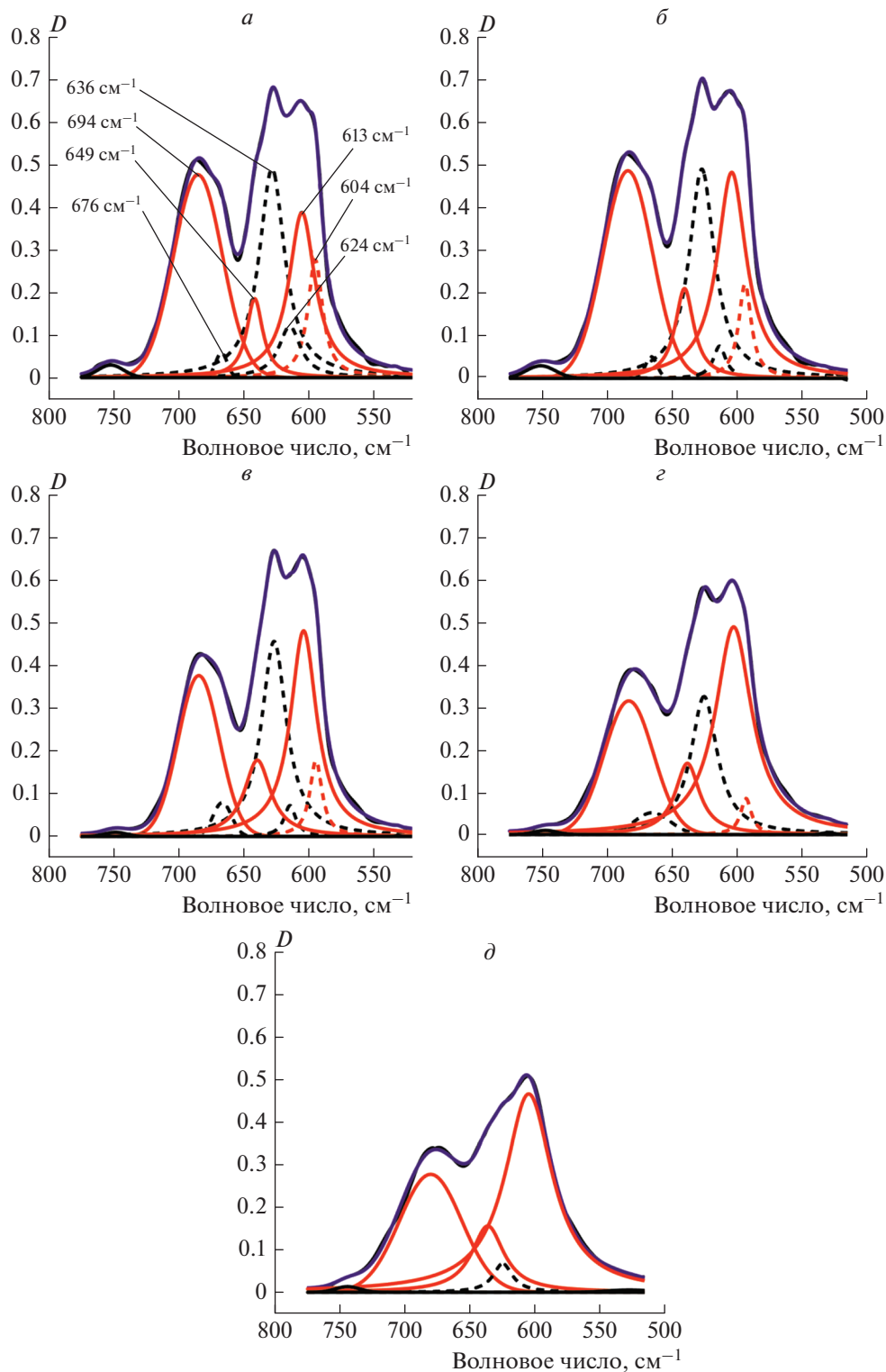


Рис. 2. Фрагменты ИК-фурье-спектров ПВХ в области 500–800 см⁻¹ при 503 (а), 403 (б), 303 (в), 203 (г) и 113 К (д) и результаты разложения на составляющие.

ной 360 К [12], можно полагать, что этот температурный переход соответствует стеклованию ПВХ.

На рис. 4а и 4б показаны зависимости от температуры оптической плотности полос поглоще-

ния 694, 676, 649 и 613 см⁻¹. Спектральная компонента 624 см⁻¹ мала по интенсивности и практически не меняется с температурой. Из рисунка также видно, что при температуре выше 500 К ин-

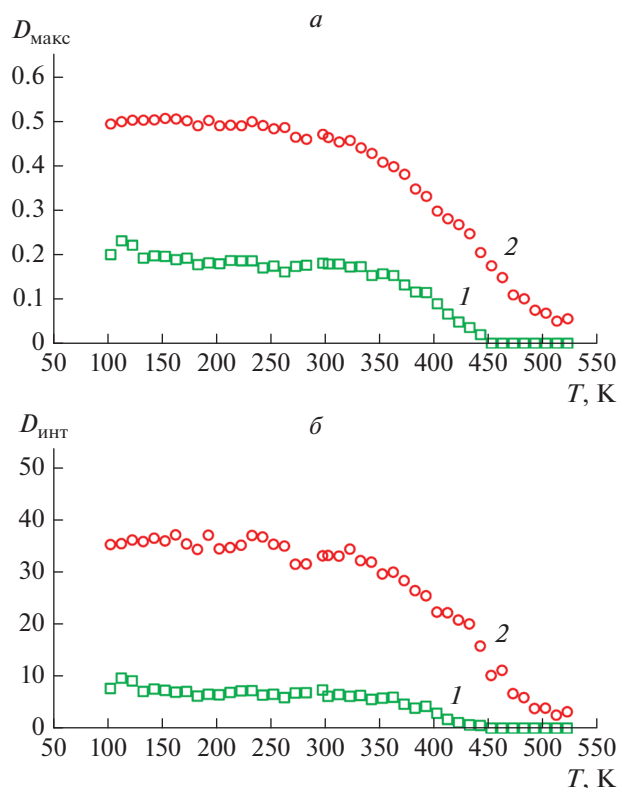


Рис. 3. Температурные зависимости оптической плотности в максимуме (а) и интегральной (б) оптической плотности полос поглощения 604 (1) и 636 (2) см^{-1} для ПВХ в диапазоне температур 100–500 К.

тенсивности полос поглощения ПВХ резко уменьшаются, что связано с процессом разрушения, изученным детально в [13].

Анализируя температурные зависимости оптической плотности в максимуме и интегральной оптической плотности (рис. 4а и 4б), видим, что характер этих зависимостей одинаков для полос поглощения 649 и 676 см^{-1} и отличается для полос 694 и 613 см^{-1} . Оптическая плотность в максимуме полосы 613 см^{-1} слабо растет с температурой в интервале вплоть до 500 К, в то время как интегральная оптическая плотность заметно увеличивается. Оптическая плотность в максимуме полосы 694 см^{-1} падает с температурой, а интегральная оптическая плотность растет, что сопровождается увеличением полуширины этой спектральной составляющей. Что касается слабой по интенсивности полосы поглощения 676 см^{-1} , то она по интенсивности падает с повышением температуры и не может быть отнесена к аморфной области. Интенсивность компоненты 649 см^{-1} увеличивается при увеличении температуры. Увеличение интегральной оптической плотности полос поглощения 694, 649 и 613 см^{-1} с повышением

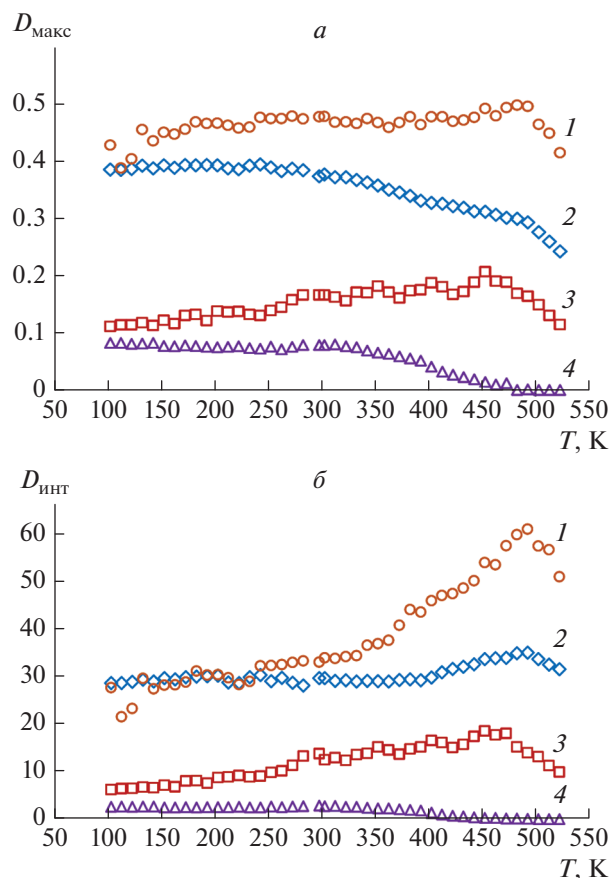


Рис. 4. Температурные зависимости оптической плотности в максимуме (а) и интегральной (б) оптической плотности полос поглощения 613 (1), 694 (2), 649 (3) и 676 (4) см^{-1} для ПВХ в диапазоне температур 100–500 К.

температуры подтверждает их отнесение к полосам неупорядоченности, то есть к аморфной фазе.

Корректное отнесение полос поглощения полукристаллического полимера к аморфной фазе позволяет оценить концентрацию аморфной и кристаллической частей полукристаллического полимера. Если предположить, что в расплаве полимера концентрация аморфной части полимера равна единице, то при температуре ниже температуры плавления доля аморфной части полимера ($c_{\text{ам}}$) равна отношению оптических плотностей полосы неупорядоченности при измеряемой температуре и при температуре плавления, тогда доля кристаллической части при данной температуре составляет $(1 - c_{\text{ам}})$ [14]. Из рис. 4а и 4б видно, что характер температурного поведения интегральных интенсивностей полос поглощения 613 и 649 см^{-1} практически одинаков, что позволяет эти две полосы использовать для оценки степени кристалличности исследуемых ПВХ пленок. Необходимые значения интегральных оптических

плотностей этих полос неупорядоченности были взяты при 303 К и для расплава при температуре 453 К, которая, как видно из рис. 3, соответствует расплавленному образцу. Доля аморфной части полимера, определенная по полосам 613 и 649 см⁻¹, составляет 0.68 и 0.67 соответственно. Следовательно, степень кристалличности исследуемого образца пленки ПВХ оценивается как 32.5%. Таким образом, метод ИК-фурье-спектроскопии с использованием математической обработки сложных спектральных контуров, состоящих из девяти составляющих, позволил провести корректный анализ влияния температуры на надмолекулярную структуру полукристаллического полимерного материала.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено влияние температуры на структурно-чувствительные полосы поглощения ИК-фурье-спектра, характеризующие упорядоченное и разупорядоченное состояния образца пленки ПВХ. Выполнено разложение сложных спектральных контуров в области 500–800 см⁻¹ для различных температур в интервале от 100 до 500 К с шагом 10 К. Получены температурные зависимости спектральных характеристик полос поглощения, относящихся к аморфной и кристаллической фазам ПВХ, и проанализированы термические превращения в структуре ПВХ в диапазоне от 100 до 500 К. Использование полос разупорядоченности позволило оценить степень аморфности и кристалличности исследуемого полимерного образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yong M., Zhang Y., Sun S., Liu W.* // J. Membr. Sci. 2019. V. 575. P. 50.
2. *Peng G., Yaoqin W., Changmei S. et al.* // J. Membr. Sci. 2022. V. 642. Art. No. 119993.
3. *Zhang C., Mu Y., Zhang W. et al.* // J. Membr. Sci. 2020. V. 596. Art. No. 117724.
4. *El-Gamal S., Elsayed M.* // Polymer. 2020. V. 206. Art. No. 122911.
5. *Gomaa E., Ali E.H.* // Mod. Chem. Appl. 2019. V. 7. No. 2. Art. No. 269.
6. *Chi L., Wang J., Chu T. et al.* // RSC Adv. 2016. V. 6. Art. No. 28038.
7. *Pardeshi P.M., Mungray A.K., Mungray A.A.* // Desalination. 2017. V. 421. P. 149.
8. *Dechant J., Danz R., Kimmer W., Schmolke R.* Ultraspektroskopische untersuchungen an polymeren (Infrared spectroscopy of polymers). Berlin: Akademie, 1972.
9. *Глазковский Ю.В., Згаевский В.Э., Ручинский С.П., Бакарджиев Н.М.* // Высокомол. соед. 1966. Т. 8. № 8. С. 1472.
10. *Третинников О.Н., Жбанков П.Г.* // Высокомол. соед. Б. 1990. Т. 32. № 11. С. 805.
11. *Камалова Д.И., Абдразакова Л.Р.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 12. С. 1711; *Kamalova D.I., Abdrazakova L.R.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 12. P. 1363.
12. *Мулдер М.* Введение в мембранную технологию. М.: Мир, 1999.
13. *Beltran M., Marcilla A.* // Eur. Polym. J. 1997. V. 33. No. 7. P. 1135.
14. *Макаревич Н.И.* // ЖПС. 1965. Т. 2. № 4. С. 341.

Temperature dependences of structure-sensitive bands in the IR spectra of polyvinyl chloride

D. I. Kamalova^{a, *}, O. A. Kochurova^a, M. E. Sibgatullin^{a, b}

^a Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, 420008 Russia

^b Tatarstan Academy of Sciences, Kazan, 420111 Russia

*e-mail: dina.kamalova@kpfu.ru

The temperature behavior of the IR absorption band of semi-crystalline polyvinyl chloride (PVC) is studied. The temperature dependencies of the spectral characteristics of structure-sensitive absorption bands of PVC in the temperature range from 100 to 500 K are obtained. To interpret the vibrational bands which are associated with the amorphous and crystalline regions of PVC, as well as to estimate the degree of crystallinity, deconvolution of the complex spectral contour is used.

УДК 535.016:539.233

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ, ИММОБИЛИЗОВАННОГО НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ СЕРЕБРЯНЫХ НАНОПРОВОЛОК

© 2022 г. Е. В. Китушина^{1, 2, *}, Е. П. Кожина^{1, 3}, А. А. Пирязев^{4, 5},
С. А. Бедин^{1, 3}, А. В. Лобанов^{1, 2}

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский педагогический государственный университет”, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук”, Москва, Россия

⁴Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования
“Научно-технологический университет “Сириус”, Научный центр генетики и наук о жизни,
федеральная территория “Сириус”, Сочи, Россия

⁵Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт проблем химической физики Российской академии наук”, Черноголовка, Россия

*E-mail: ekat_kit@mail.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Фталоцианин алюминия, иммобилизованный на поверхности серебряных нанопроволок, исследован методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. При воздействии лазерным излучением малой и большой мощности, происходит перераспределение интенсивностей, свидетельствующем о возбуждении разных колебательных мод. Показана перспективность изучения спектральных свойств гибридных структур на основе фталоцианинов.

DOI: 10.31857/S036767652212016X

ВВЕДЕНИЕ

Фталоцианины и их металлокомплексы, а также их различные замещенные соединения исследуются с начала XX в. в основном в качестве красителей и пигментов, но интерес к ним до сих пор только возрастает. Это связано с широкими перспективами применения их в полупроводниковых приборах, солнечных элементах, газовых сенсорах и биосенсорах, в качестве лекарственных средств [1]. В настоящее время предложено использовать фталоцианины в устройствах для хранения и отображения информации, в жидкокристаллических композициях, нелинейной оптике.

Фталоцианины представляют собой класс макроциклических соединений, состоящий из четырех изоиндольных фрагментов. Уникальные свойства фталоцианинов обусловлены особенностями электронного строения ароматической системы их молекул. Ароматический макрогетероцикл имеет плоскую форму и средний размер ~ 1 нм [2].

Доступность, высокая стабильность и способность преобразовывать свет видимого диапазона по механизмам переноса энергии или электрона делают фталоцианины подходящими на роль фотосенсибилизаторов. Фталоцианины широко применяются при фотосенсибилизированном окислении органических веществ активными формами кислорода, образующимися в присутствии молекул фотосенсибилизаторов при облучении реакционной смеси видимым светом [3]. Процессы, происходящие с участием реакционноспособных радикальных частиц, играют колоссальную роль в катализе [4] и биомиметике [5], а также в синтезах, основанных на “зеленой химии” [6].

Фотосенсибилизирующие свойства фталоцианинов находят применение в современной медицине при фотодинамической терапии онкологических новообразований [7–10]. Фотодинамическое воздействие — неинвазивный метод элиминации клеток, в основе которого лежит взаимодействие фотосенсибилизатора и света с длиной волны, со-

ответствующей максимуму поглощения. При данном взаимодействии происходит образование высокотоксичных активных форм кислорода, что приводит к гибели клеток, накопивших краситель. Селективность фотосенсибилизаторов в раковых клетках-мишенях достигается за счет их значительно более высокой метаболической активности и рецепторной специфичности по сравнению со стандартными клетками. Важно отметить, что фталоцианины используются не только для проведения фотодинамического воздействия на опухолевые клетки, но и для диагностики онкологических патологий [11–13].

Физико-химические свойства макроциклических соединений существенно зависят от их агрегационной формы и межмолекулярных взаимодействий [14–17]. Наиболее значимыми свойствами обладают соединения, макроциклы которых упаковываются в стопки или структуры типа “кирпичной кладки”. В этом отношении большие перспективы открывает разработка супрамолекулярных ансамблей фталоцианинов, а также гибридных структур на основе фталоцианинов и различных наноразмерных поверхностей, например, на основе серебра [18].

Наличие дополнительных атомов азота в молекулах фталоцианинов усиливает взаимодействие между ближайшими макроциклами в надмолекулярных стопках, следствием чего является большая жесткость последних [19]. Кроме того, фталоцианины – перспективные материалы для современной техники и технологии, соединения проявляют жидкокристаллические свойства, которые были открыты недавно. При переходе к замещенным фталоцианинам проявляется возможность расширения делокализованной π -электронной системы макроцикла, что, в свою очередь, дает возможность получать еще более структурированные супрамолекулярные ансамбли. В итоге образуются мезогены на основе фталоцианина, которые обладают достаточной термостойкостью. Переход из мезофазы в изотропную фазу в них происходит при высоких температурах приблизительно 300–400°C, что является преимуществом данного класса перед другими жидкокристаллическими материалами [20].

Возможность получать из фталоцианинов материалы с управляемой структурой открывает перспективы использования фталоцианинов при создании солнечных батарей. Заместить традиционные источники на дешевую, экологически чистую и практически неисчерпаемую солнечную энергию является одной из важных задач в области энергетики. Фотовольтаика – сектор технологий, направленный на преобразование солнечной энергии в электрическую, бурно развивается на протяжении последних лет. Производные фталоцианина становятся перспективными для при-

менения в фотовольтаике, так как для них возможна тонкая настройка физических и физико-химических свойств при различных вариантах природы металла-комплексобразователя и заместителей. Ранее было обнаружено, что использование стеклюющих мезогенных производных фталоцианина A₃B-типа, где А – донорная группа, В – акцепторная группа, замещены в периферических позициях алкоксигруппами в качестве доноров электронов и атомами хлора, может создать условия для повышения эффективности органических фотовольтаических ячеек вследствие их одномерной проводимости в колончатой фазе наряду с наличием максимума поглощения в ближней ИК-области [21, 22].

В направлении модификации общей структуры фотовольтаических ячеек для солнечных батарей, одним из перспективных методов является применение каскадных донорно-акцепторных структур [23, 24]. При этом диффузия и транспорт зарядов повышаются при строгом взаимодействии комплементарных компонентов, сформировавшихся в виде многослойной системы. Органические фотовольтаические устройства приобретают также все большее распространение и в качестве химических сенсоров.

Таким образом, разработка различных гибридных материалов на основе фталоцианинов и исследование их характеристик является весьма актуальным научным направлением. В наибольшей мере к изменению структурных особенностей такого рода материалов чувствительны их спектральные свойства. В данной работе представлены результаты исследования спектров комбинационного рассеяния света (КР) и усиленного поверхностью комбинационного рассеяния света (SERS) нового гибридного материала, формирующегося при иммобилизации сульфированного фталоцианина алюминия на поверхности нанопроволок из серебра.

ОСОБЕННОСТИ КР- И SERS-СПЕКТРОВ ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ СЕРЕБРЯНЫХ НАНОПРОВОЛОК

В результате иммобилизации молекул фталоцианина на наноструктурированную поверхность и последующей молекулярной агрегации возможно создание новых гибридных материалов с новыми и необычными спектральными свойствами. Спектральные характеристики отдельных молекул хромофоров и их цепочек, образованных в результате агрегации, различны [3, 15]. Особенности формирования агрегатов можно проследить с помощью спектральных методов, в частности, спектроскопии комбинационного рассеяния света и усиленного поверхностью комбинационного рассеяния света.

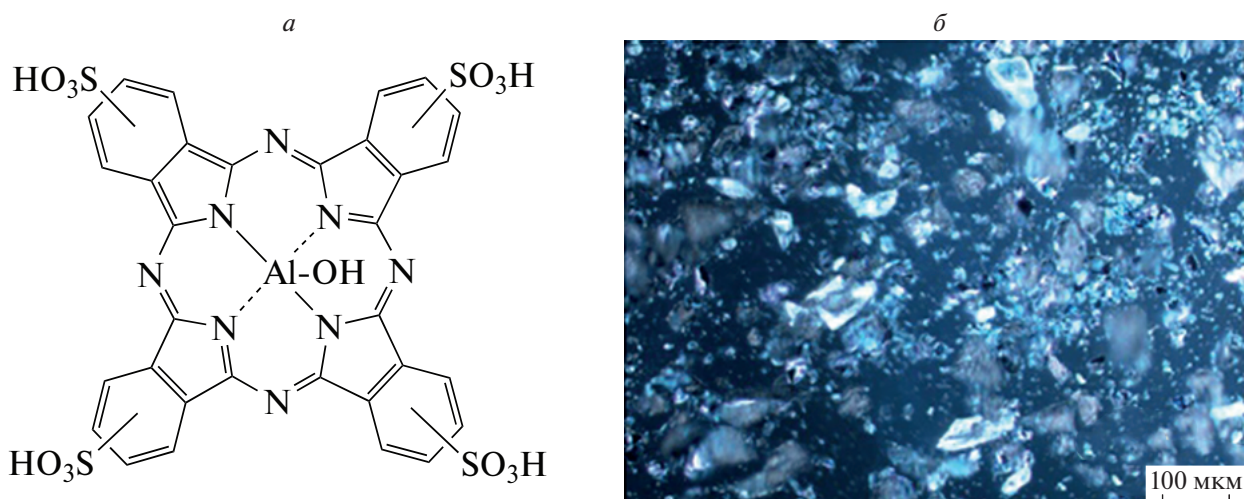


Рис. 1. Структурная формула алюминиевого комплекса фталоцианин-тетрасульфокислоты $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ (а) и микрофотография кристаллов $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ (б).

В настоящей работе получен и охарактеризован новый материал на основе алюминиевого комплекса сульфированного фталоцианина $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ и серебряных нанопроволок. Строение молекулы алюминиевого комплекса фталоцианина ($\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$) представлено на рис. 1а. Чистоту и индивидуальность $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ подтверждали методом MALDI-масс-спектрометрии на приборе Thermo DSQ II (США). Структуру кристаллов $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ исследовали методом оптической микроскопии с использованием оптического инспекционного микроскопа Nikon LV100 (Япония) (рис. 1б).

ИК-спектральный анализ $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ проводили на спектрофотометре Thermo Scientific Nicolet 380 FT-IR (США) с использованием ме-

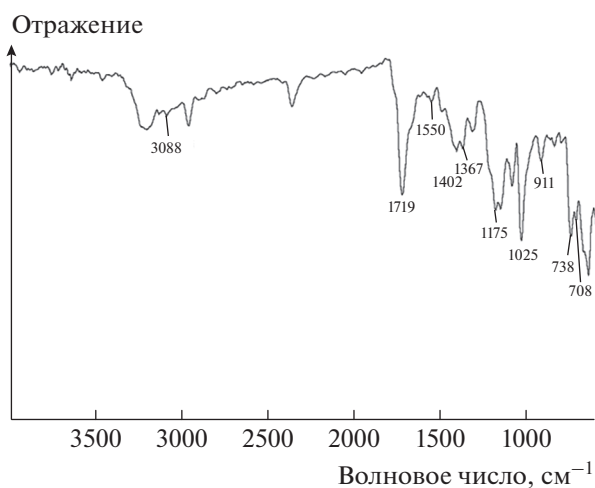


Рис. 2. ИК-спектры $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$.

тода отражения. В ИК-спектре $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ представлен набор характерных валентных и деформационных колебаний. Спектр исследуемого соединения предоставил большой набор валентных и деформационных колебаний. Валентные колебания С–Н-связей отражены в области 3088 см^{-1} . Внеплоскостные деформационные колебания С–Н-связей проявляются вблизи 738 см^{-1} . Плоскостные деформационные колебания связей $\text{C}_{\text{ар}}\text{–H}$ наблюдаются в диапазоне $1175\text{–}1025\text{ см}^{-1}$. Интенсивные колебания в области 911 см^{-1} относятся к полносимметричным валентным колебаниям С–С-связи ароматического кольца. Интенсивная полоса в области 1719 см^{-1} отвечает деформационным колебаниям С=C-группы в алициклической составляющей. Колебания группировки –C=C–N= (пиррольный фрагмент и мезоатомы азота) проявляются в полосе при 1402 см^{-1} . Также ИК-спектр $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ содержит характерную для всех фталоцианинов полосу в области 1367 см^{-1} . Колебания, проявляющиеся вблизи 1550 см^{-1} , относятся к деформационным колебаниям N–H-группе. Сульфогруппы молекулы $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ дают сигналы в двух областях, – при 1025 см^{-1} , что отвечает валентным колебаниям в SO_2 -группе, и вблизи 708 см^{-1} , что соответствует валентным колебаниям S–O-связи (рис. 2) [25].

Регистрацию спектров комбинационного рассеяния света и SERS-спектров молекул $\text{AlONPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$, иммобилизованных на подложке с массивом серебряных нанопроволок, осуществляли на рамановском спектрометре Horiba LabRam Evolution (Франция) (рис. 3). Длина серебряных нанопроволок составляла $\sim 1.6\text{ мкм}$,

диаметр — ~ 100 нм. Пленки были выращены в матрице полиэтилентерефталата с поверхностной пористостью $1.2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$ по методике [26]. Объем наносимой капли водного раствора фталоцианина (10^{-3} моль \cdot л $^{-1}$) составлял 10 мкл. Спектры КР возбуждали лазером с длиной волны 532 нм и мощности 17 мВт. SERS-спектры снимали при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм при мощностях 17, 1.7, 0.17 и 0.017 мВт. Размер лазерного пятна засветки для всех измерений составлял 1 мкм при использовании объектива с увеличением $50\times$. Время экспозиции составляло 120 с для регистрации спектров КР и 5 с при записи SERS-спектров.

Заметного влияния флуоресценции $\text{AlOHPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$ как на спектры КР, так и SERS-спектры не было обнаружено, несмотря на выбор лазера с длиной волны 532 нм в качестве источника возбуждающего излучения. Так как спектр КР слабоинтенсивный, он требует значительно большего времени интегрирования, по сравнению со спектрами SERS. Были соотнесены SERS-спектры молекул фталоцианина, снятые при разной мощности источника, и спектр КР. Стоит отметить, что спектры КР и SERS, снятые при малой мощности, равной 0.017 мВт, идентичны (рис. 3а). Обратная ситуация наблюдалась при снятии SERS-спектра при большей мощности лазера, равной 1.7 и 17 мВт (рис. 3б). Несмотря на то, что все характерные пики $\text{AlOHPc}(\text{SO}_3\text{H})_4$, присутствующие в спектрах КР, сохраняются и в спектрах SERS (рис. 3в), происходит незначительное перераспределение интенсивностей пиков, характерных для колебаний бензольного кольца в области 1600 см^{-1} (рис. 3б). Кроме того, наблюдаются интенсивные пики в районе 1340 см^{-1} , что соответствует колебаниям пиррольного кольца.

Таким образом, эффект перераспределения интенсивностей спектральных линий фталоцианина в зависимости от мощности лазерного излучения открывает перспективы не только для обнаружения молекул фталоцианина в сложных растворах и повышения предела детектирования, но также и для изучения структуры сложных молекул с большим количеством колебательных мод. Данный эффект требует дальнейшего изучения, в частности, на различных длинах волн возбуждающего излучения.

Результаты исследования показывают перспективность изучения спектральных свойств данного гибридного материала, что позволит в дальнейшем оптимизировать методику разработки композитов на основе фталоцианинов и дополнительных компонентов, таких как, например, массив серебряных нанопроволок на подложке. Чувствительность спектральных характеристик

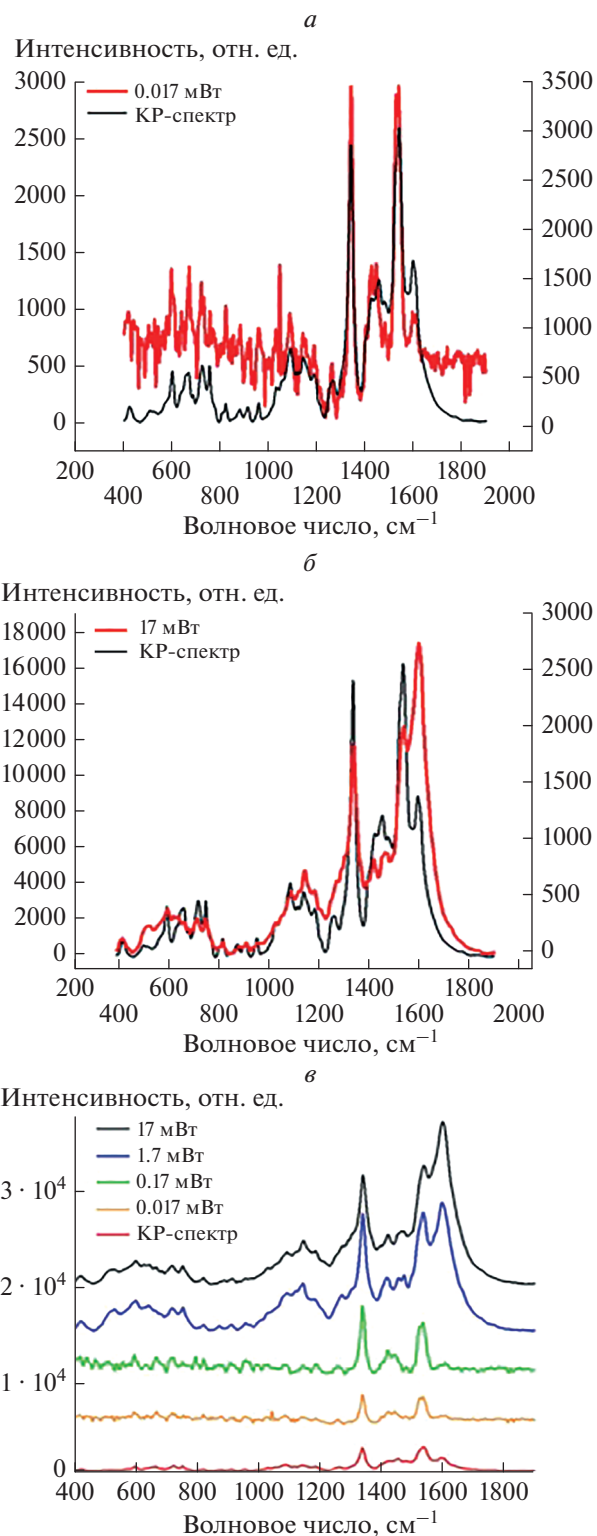


Рис. 3. Спектр КР и SERS-спектр, снятый при мощности лазера 0.017 мВт (а), спектр КР и SERS-спектр, снятый при мощности лазера 17 мВт (б), спектр КР и серия SERS-спектров, снятых при мощности лазера 0.017, 0.17, 1.7 и 17 мВт (в).

иммобилизованных молекул фталоцианина, относящихся к колебательным и вращательным переходам, к мощности возбуждающего света демонстрирует возможность разработки сенсорных элементов, реагирующих на различные физические и химические факторы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Молекулы фталоцианина в составе гибридно-наноматериала были изучены спектральными методами, включая анализ ИК-спектров и спектров комбинационного рассеяния света (в том числе и SERS). Показано, что при возбуждении SERS-спектров лазерным излучением малой и большой мощности по-разному происходит перераспределение интенсивностей, что свидетельствует о возбуждении разных колебательных мод. В дальнейшем планируется изучение спектров люминесценции данной системы, что позволит оптимизировать методику разработки спектрально-чувствительных гибридных структур на основе фталоцианинов и наноразмерных подложек.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания Московского педагогического государственного университета “Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике” при поддержке Министерства Просвещения Российской Федерации (АААА-А20-120061890084-9). Авторы являются членами ведущей научной школы Российской Федерации “Оптико-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов” (проект НШ-776.2022.1.2). Авторы благодарят Университет Сириус за финансовую поддержку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Fourati N., Seydou M., Zerrouki C. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2014. V. 6. No. 24. Art. № 22378.*
2. *Drain C.M., Bazzan G., Milicic C.T. et al. // Israel J. Chem. 2005. V. 45. P. 255.*
3. *Сультимова Н.Б., Левин П.П., Лобанов А.В., Музафаров А.М. // Хим. выс. энерг. 2013. Т. 47. № 3. С. 186; Sul'timova N.B., Levin P.P., Lobanov A.V., Muzafarov A.M. // High Energy Chem. 2013. V. 47. No. 3. P. 98.*
4. *Lobanov A.V., Golubeva E.N., Mel'nikov M.Ya. // Mendeleev Commun. 2010. V. 20. No. 6. P. 343.*
5. *Лозина Т.А., Лобанов А.В., Ландер А.В. // Журн. физ. хим. 2015. Т. 89. № 8. С. 1329; Lozinova T.A., Lobanov A.V., Lander A.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2015. V. 89. No. 8. P. 1492.*
6. *Лобанов А.В., Холуйская С.Н., Комиссаров Г.Г. // Хим. физика. 2004. Т. 23. № 5. С. 44.*
7. *Huang Z., Chen Y., Zhang J. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2021. V. 13. No. 33. Art. No. 39934.*
8. *Abid S., Hassine S.B., Sun Z. et al. // Macromolecules. 2021. V. 54. No. 14. P. 6726.*
9. *Güzel E., Atmaca G.Y., Kuznetsov A.E. et al. // ACS Appl. Bio Mater. 2022. V. 5. No. 3. P. 1139.*
10. *Wang R., Kim K.-H., Yoo J. et al. // ACS Nano 2022. V. 16. No. 2. P. 3045.*
11. *Taratula O., Schumann C., Naleway M.A. et al. // Mol. Pharm. 2013. V. 10. No. 10. P. 3946.*
12. *Madamsetty V.S., Paul M.K., Mukherjee A. et al. // ACS Biomater. Sci. Engin. 2020. V. 6. No. 1. P. 167.*
13. *Ударцева О.О., Лобанов А.В., Андреева Е.Р. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 2016. № 1. С. 277.*
14. *Карпова С.Г., Ольхов А.А., Кривандин А.В. и др. // Высокомолекул. соед. Сер. А. 2019. Т. 61. № 1. С. 67; Karpova S.G., Ol'khov A.A., Krivandin A.V. et al. // Polymer Sci. Ser. A. 2019. V. 61. No. 1. P. 70.*
15. *Градова М.А., Жданова К.А., Брагина Н.А. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 2015. № 4. С. 806; Gradova M.A., Zhdanova K.A., Bragina N.A. et al. // Russ. Chem. Bull. 2015. V. 64. No. 4. P. 806.*
16. *Lobanov A.V., Nevrova O.V., Platovskii V.A. et al. // Macroheterocycles. 2011. V. 4. No. 2. P. 132.*
17. *Чудинов А.В., Румянцева В.Д., Лобанов А.В. и др. // Биоорг. хим. 2004. Т. 30. № 1. С. 99.*
18. *Caplins B.W., Suich D.E., Shearer A.J., Harris C.B. // J. Phys. Chem. Lett. 2014. V. 5. No. 10. P. 1679.*
19. *Ichihara M., Miida M., Mohr B., Ohta K. // J. Porphy. Phthalocyanines. 2006. V. 10. P. 1145.*
20. *Цивадзе А.Ю., Носикова Л.А., Кудряшова З.А. // Физикохим. поверх. и защита матер. 2012. Т. 48. № 2. С. 115; Tsivadze A.Yu., Nosikova L.A., Kudryashova Z.A. // Protect. Metals Phys. Chem. Surfaces. 2012. V. 48. No. 2. P. 135.*
21. *Смирнова А.И., Гиричева Н.И., Солдатова К.М., Усольцева Н.В. // Жид. крист. и их практ. использ. 2016. Т. 16. № 4. С. 42.*
22. *Усольцева Н.В., Смирнова А.И., Казак А.В. и др. // Жид. крист. и их практ. использ. 2015. Т. 15. № 4. С. 56.*
23. *Zhang X.-F., Wang J. // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. No. 31. P. 8597.*
24. *Lee M.H., Dunietz B.D., Geva E. // J. Phys. Chem. Lett. 2014. V. 5. No. 21. P. 3810.*
25. *Зиминов А.В., Рамиш С.М., Спиридонов И.Г. и др. // Вестн. СПбГУ. 2009. Т. 4. № 4. С. 95.*
26. *Kozhina E.P., Bedin S.A., Nechaeva N.L. et al. // Appl. Sci. 2021. V. 11. No. 4. P. 1375.*

Spectral properties of aluminum phthalocyanine immobilized on silver nanowire substrates

E. V. Kitushina^{a, b, *}, E. P. Kozhina^{a, c}, A. A. Piryazev^{d, e}, S. A. Bedin^{a, c}, A. V. Lobanov^{a, b}

^a*Moscow State Pedagogical University, Moscow, 119991 Russia*

^b*Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119334 Russia*

^c*Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia*

^d*Sirius University of Science and Technology, Scientific Center for Genetics and Life Sciences, Sirius Federal Territory, Sochi, 354340 Russia*

^e*Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, 142432 Russia*

**e-mail: ekat_kit@mail.ru*

Aluminum phthalocyanine immobilized on the surface with silver nanowires was studied by Raman spectroscopy. When exposed by laser radiation of low and high power, a redistribution of intensities occurs, indicating the excitation of different vibrational modes. The study of the spectral properties of hybrid structures based on phthalocyanines is shown to be promising.

ОСОБЕННОСТИ ЗАРЯДОВОГО ОТКЛИКА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ГРАФЕН-СОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕКТРОДОВ

© 2022 г. В. В. Кочервинский¹, М. А. Шапетина², *, С. А. Бедин²,
С. А. Баскаков³, Ю. М. Шульга³

¹Открытое акционерное общество

“Ведущий научно-исследовательский институт химической технологии”, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский педагогический государственный университет”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия

*E-mail: mshapetina@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучены электрофизические высоковольтные характеристики сегнетоэлектрического сополимера винилиденфторида с тетрафторэтиленом с использованием проводящих графен-содержащих электродов. Показано, что обработка графен-содержащих чернил ультразвуком перед нанесением, приводит к изменению кривых зарядового и токового отклика в процессе поляризации пленок с помощью биполярного прямоугольного импульса электрического поля. Обнаруживается тенденция, при которой предварительное воздействие ультразвука на чернила, приводит к снижению как квазистационарного тока, так и значения поляризации вблизи насыщения.

DOI: 10.31857/S0367676522120183

ВВЕДЕНИЕ

Винилиденфторид и тетрафторэтилен относятся к классу сегнетоэлектриков, которые находят широкое применение в технике благодаря наличию целого ряда специфических свойств [1–5]. Данные полимеры после обработки в поле высокой напряженности обнаруживают достаточно высокие значения пьезо-, пиро-отклика [2, 4, 5]. Одновременно в них, за счет, как минимум двухфазной структуры, обнаружены высокие значения электрокалорического эффекта [6]. Эти свойства могут быть использованы для создания принципиально новых твердотельных рефрижераторов [7]. За счет высоких значения напряженности пробойных полей (до 800 МВ/м) такие полимеры могут быть использованы в качестве материала для емкостных накопителей энергии с объемными плотностями энергии до 25 Дж/см³ [8–11].

Известно, что поливинилиденфторид (ПВДФ) имеет свойство неограниченно смешиваться с полиметилметакрилатом [12]. Такие смеси обладают высокой прозрачностью и могут быть использованы в электрооптических преобразователях энергии [13, 14].

Указанные полимеры относятся к классу биосовместимых. Известны их возможности для регенерации костной ткани, имплантологии, устройствах УЗ диагностики и в других областях медицины [15, 16]. Ценность таких материалов применительно к человеческому организму сводится к тому, что их акустические импедансы близки к акустическому импедансу биологической ткани [16, 17]. Поэтому на границе раздела материала и человеческой ткани не возникают паразитные сигналы, связанные с отражением, в отличие от неорганических материалов.

Для расширения возможностей применения таких материалов в биомедицине требуются новые проводящие материалы для электродов органической природы, которые не меняют акустический импеданс системы полимер–электрод. Одними из перспективных материалов могут служить графен-содержащие структуры.

Ранее было показано [18], что использование таких материалов в качестве сенсоров для регистрации внешних воздействий характеризуется ограниченным динамическим диапазоном со стороны высоких частот, это связывалось с низкой проводимостью графен-содержащих электродов.

тродов [18]. Было высказано предположение о том, что расширить динамический диапазон преобразователя энергии можно повышением проводимости рассматриваемых электродов. Их формирование в диэлектрической матрице сопровождается процессами агрегации частиц графена. Снижение такой агрегации может предположительно обеспечить УЗ обработка исходной суспензии.

В данной работе было исследовано влияние способа приготовления проводящих графен-содержащих электродов на диэлектрические характеристики сополимера винилиденфторида с тетрафторэтиленом П(ВДФ-ТФЭ), для возможного повышения проводимости электрода, что должно обеспечить увеличение динамического диапазона преобразователей энергии на основе сегнетоэлектрического полимера.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для исследования методом экструзии из расплава с последующей ориентацией и кристаллизацией преимущественно в полярной бета-фазе была изготовлена пленка П(ВДФ-ТФЭ) толщиной 60 мкм. Методом ЯМР высокого разрешения ранее была исследована микроструктура данного сополимера. Было показано, что молярная доля тетрафторэтилена ~6 мол. % при наличии ~3 мол. % внутрицепных дефектов присоединения “head-to-head (tail-to-tail)” соседних мономерных звеньев.

На пленку с двух сторон методом окунания в графеновые чернила наносились графен-содержащие электроды. Электроды различались способом приготовления исходных чернил (суспензии): в одном случае компоненты обрабатывались УЗ полем (Gr 1), а в другом случае исходная суспензия гомогенизировалась с помощью шаровой мельницы (Gr 2) [18].

Ультразвуковой метод получения графеновых чернил (Gr 1) состоял в следующем. В 300 мл 1-метил-2-пирролидона добавляли 30 г графита ГК-1. Смесь обрабатывали в стеклянном стакане ультразвуковым диспергатором МЭЛФИЗ-92.1 (600 Вт, 22 кГц), который был помещен в термостат при $T = 20\text{--}30^\circ\text{C}$ для предотвращения перегрева смеси. Время диспергирования составляла 8–10 ч. После УЗ-обработки дисперсию центрифугировали в течение 15 мин при 3000 g. Затем надосадочную часть, содержащую графеновые нанопластины отбирали. Для выделения графеновой составляющей в суспензию добавляли 2-кратный избыток воды, при этом графеновые пластинки выпадали в осадок и отделялись центрифугированием. Содержание твердой фазы в суспензии после центрифугирования составило 0.05 мг/мл. Полученную графеновую фазу смешивали с этиловым спиртом до концентрации 13.5 мг/мл и добавляли связующее вещество – этилцеллюлозу в

количестве 10% от массы графена. Итоговые чернила имели концентрацию 15 мг/мл.

Механический способ получения чернил (Gr 2) состоял в следующем. 50 г графита марки ГК-1 помещали в размольный стакан емкостью 500 мл и добавляли 200 мл N-метилпирролидона (NMP) и добавляли 70 стальных размольных шаров диаметром 15 мм. Стакан помещали в шаровую мельницу планетарного типа RETSCH PM100 (Германия) и производили размол при 450 об/мин. Время размолки варьировалось от 1 до 6 ч. После окончания размолки и остывания стакана до комнатной температуры, полученную графитовую суспензию центрифугировали при 3000 g в течение 15 мин. Полученная после центрифугирования суспензия имела черный цвет.

Для осаждения графеновых частиц из суспензии в NMP в суспензию добавляли дистиллированную воду в объеме 50%, чтобы вызвать их коагуляцию. После этого осадок отделяли с помощью центрифуги и многократно промывали ацетоном и сушили.

Для обоих способов приготовления чернил, сухую графеновую основу 1.35 г засыпали в стакан объемом 250 мл, добавляли 100 мл этанола и обрабатывали ультразвуковым диспергатором в течение 15 мин, при необходимости охлаждая стакан в бане со льдом. По истечении 15 мин, добавляли 150 мг этилцеллюлозы в качестве стабилизатора графена и повторно озвучивали еще 5 мин. Полученные чернила в итоге имели концентрацию нелетучих компонентов, равную 15 мг/мл.

Электрические свойства при высоких напряжениях после нанесения графен-содержащих электродов изучали на установке с модифицированной схемой по типу Соьера–Тауэра [19]. Подаваемые на образец биполярные импульсы электрического поля E задавали при помощи специальной программы. В процессе измерений варьировали амплитуду и длительность импульсов и записывали зарядовый и токовый отклик полимера.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Данные рис. 1 показывают, что кинетическая (временная) кривая зарядового отклика может быть описана общим соотношением диэлектрического смещения D (dielectric displacement field) для неидеальных сегнетоэлектриков, которые имеют конечную проводимость σ [20, 21], следующим образом:

$$D = \varepsilon_0 E + \sigma t^m E + 2P_r \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{t}{\tau_s} \right)^n \right) \right], \quad (1)$$

где второе слагаемое отвечает за вклад от проводимости σ , а третий – за переключение связанных зарядов с характерным временем τ_s . Анализ кривых, приведенных на рис. 1а, показывает, что при полях, ниже коэрцитивных, способ приго-

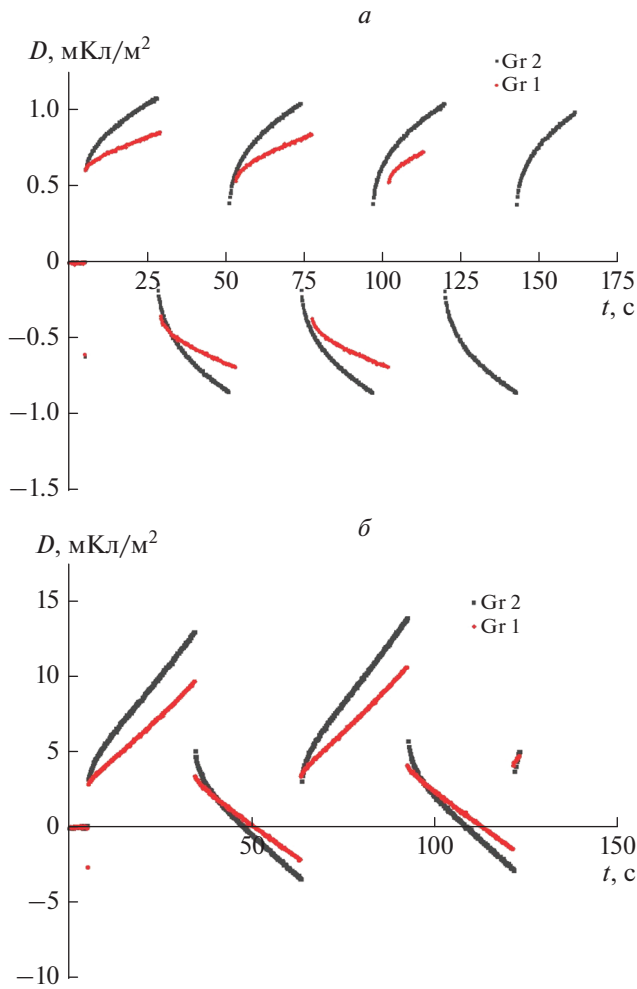


Рис. 1. Кривые зарядового отклика для различных внешних полей: $E = 6.45$ (а), 27 МВ/м (б). Красным на рисунке указан образец с предварительной длительной УЗ обработкой (Gr 1), черным – с использованием шаровой мельницы (Gr 2).

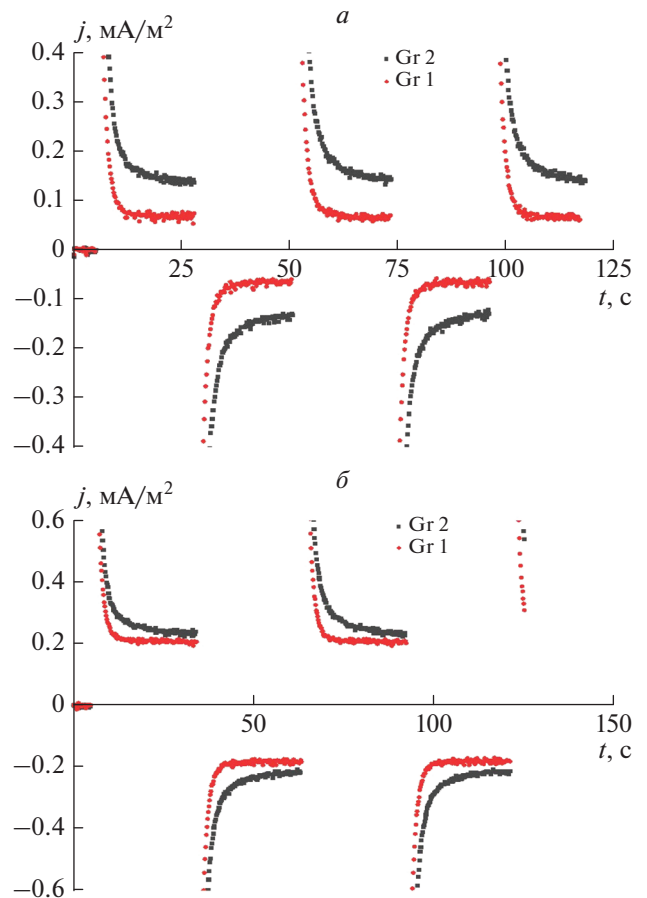


Рис. 2. Кривые квазистационарного тока для различных внешних полей: $E = 17$ (а), 27 МВ/м (б). Красным на рисунке указан образец с предварительной длительной УЗ обработкой (Gr 1), черным – с использованием шаровой мельницы (Gr 2).

товления сказывается как на величине σ , так и на эмпирическом параметре m .

Оценки, полученные с помощью соотношения (1), показывают, что в случае предварительной ультразвуковой обработки проводимость σ оказывается меньше, чем в случае, когда такой обработки не проводилось. Проверку такого вывода проверяли путем измерения токовых характеристик исследуемых пленок. Результаты измерений приведены на рис. 2.

Из рис. 2а видно, что при выбранном поле предварительная обработка суспензии ультразвуком, приводит к снижению квазистационарного тока, который получается при подаче на эту пленку электрического биполярного прямоугольного импульса. Известно, что для одномерного случая, измеряемая плотность тока j , меняется по закону:

$$j = \sigma E. \tag{2}$$

Из соотношения (2) следует, что в случае предварительной обработки суспензии УЗ, значение σ окажется меньше, чем таковая для суспензии с обработкой в шаровой мельнице. Данный результат, который согласуется с данными, полученными из рис. 1, где проиллюстрированы измерения зарядового отклика.

Известно, что на границе сегнетоэлектрик-металл из-за различий энергий Ферми материалов образуется барьер Шоттки. Сходный барьер будет возникать и при контакте сегнетоэлектрик-графенодержательный электрод. Величина потенциального барьера при этом будет контролировать процессы инжекции (injection) носителей из такого электрода.

Отмеченные носители будут причиной появления нового поля E_{inj} . Поэтому локальное действующее на сегнетоэлектрик поле E_l для одномерного случая с учетом знака E_{inj} будет:

$$\vec{E}_l = \vec{E}_{ext} + \vec{E}_{inj}. \tag{3}$$

Согласно соотношению (2), более высокий ток через полимерный конденсатор в случае электро-

дов, полученных после длительной УЗ-обработки (Gr 1), при постоянстве поля внешнего источника E_{ext} означает, что в этом случае будет более высокая эффективность инъекции носителей из электрода в полимер. Очевидно, что для электрода, полученного без длительной обработки УЗ (Gr 2) за счет предполагаемой агрегации проводящих частиц, величина потенциального барьера на границе с сополимером оказывается более высокой, что приводит в соответствии с (2) и (3) к экспериментально наблюдаемому повышению плотности тока.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обнаружено, что длительная ультразвуковая обработка графен-содержащих чернил с последующим нанесением электродов на винилиденфторид с тетрафторэтиленом меняет характеристики как зарядового, так и токового отклика полимерной пленки на электрическое поле. Обнаруженные эффекты требуют проведения детальных исследований изменений молекулярной структуры графен-содержащих электродов после ультразвуковых воздействий.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания Московского педагогического государственного университета “Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике” при поддержке Министерства Просвещения Российской Федерации (АААА-А20-120061890084-9), а так же при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания (номер государственной регистрации АААА-А19-119032690060-9). М.А.Ш. и С.А.Б. являются членами ведущей научной школы Российской Федерации “Опτικο-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов” (проект НШ-776.2022.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Луццейкин Г.А.* Полимерные пьезоэлектрики. М.: Химия, 1990. 176 с.
2. *Кочервинский В.В.* // Усп. химии. 1999. Т. 68. № 10. С. 904; *Kochervinsky V.V.* // Russ. Chem. Rev. 1999. V. 68. No. 10. P. 821.
3. *Wang T.T., Herbert J.M., Glass A.M.* The application of ferroelectric polymers. Glasgow: Chapman and Hall, 1988. 387 p.
4. *Kochervinskii V.V.* // Crystallogr. Reports. 2003. V. 48. No. 4. P. 649.
5. *Kawai H.J.* // Japan. J. Appl. Phys. 1969. V. 8. P. 975.
6. *Heng Cui, Wen He, Qibing Pei et al.* // In: Organic ferroelectric materials and application. Elsevier Ltd, 2021. P. 535.
7. *Zhang G., Li Q., Gu H. et al.* // Adv. Mater. 2015. V. 27. P. 1450.
8. *Zhu L., Wang Q.* // Macromolecules. 2012. V. 45. No. 7. P. 2937.
9. *Zhubing H., Qing W.* // In: Organic ferroelectric materials and application. Elsevier Ltd, 2021. P. 503.
10. *Sukumaran S., Chatboursi S., Rouxel D. et al.* // J. Intel. Mater. Syst. Structures. 2020. V. 32. No. 7. P. 746.
11. *Lund A., Rundqvist K., Nilsson E. et al.* // npj Flex. Electron. 2018. V. 2. Art. No. 9.
12. *Aid S., Eddhahak A., Khelladi S. et al.* // Polymer Testing. 2019. V. 73. P. 222.
13. *Bae I., Park C.* // In: Organic ferroelectric materials and application. Elsevier Ltd, 2021. P. 113.
14. *Tanaka A., Sawada H., Kojima Y.* // Polymer J. 1990. V. 22. No. 6. P. 463.
15. *Sekine T., Sugano R., Tashiro et al.* // Sci. Reports. 2018. V. 8. No. 1. Art. No. 4442.
16. *Gradov O.V., Gradova M.A., Kochervinskii V.V.* // In: Organic ferroelectric materials and application. Elsevier Ltd, 2021. P. 503.
17. *Bloomfield P.E., Lo Wei-Jung, Lewin P.A.* // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control. 2000. No. 47. V. 6. P. 1397.
18. *Kochervinskii V.V., Baskakov S.A. et al.* // Ferroelectrics. 2022. V. 600. (in print).
19. *Kochervinskii V.V., Chubunova E.V., Lebedinskii Yu.Yu. et al.* // Polymer Sci. Ser. A. 2011. V. 53. No. 10. P. 929.
20. *Nalwa H.S.* Ferroelectric polymers. Chemistry: physics, and applications. CRC Press, 1995. 912 p.
21. *Kochervinskii V.V., Chubunova E.V., Lebedinskii Yu.Yu. et al.* // Adv. Mater. Res. 2015. V. 4. No. 2. P. 113.

Features of the charge response of ferroelectric polymers when using graphene-containing electrodes

V. V. Kochervinskii^a, M. A. Shapetina^b*, S. A. Bedin^b, S. A. Baskakov^c, Yu. M. Shulga^c

^aLeading Research Institute of Chemical Technology JSC, Moscow, 111524 Russia

^bMoscow State Pedagogical University, Moscow, 119435 Russia

^cInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, Chernogolovka, 142432 Russia

*e-mail: mshapetina@gmail.com

We studied the electro-physical high-voltage characteristics of a ferroelectric copolymer of vinylidene fluoride with tetrafluoroethylene using conductive graphene-containing electrodes. It is shown that ultrasonic treatment of graphene-containing ink before deposition, leads to a change in the charge and current response curves during film polarization using a bipolar rectangular electric field pulse. A tendency is found in which pre-sonication of the ink leads to a decrease in both the quasi-stationary current and the polarization value near saturation.

УДК 539.375.5

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ ВОКРУГ ПОР ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН ПРИ ИХ РАСТЯЖЕНИИ

© 2022 г. В. Н. Гумирова^{1, *}, И. В. Разумовская¹, А. В. Наумов^{1, 2, 3}¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский педагогический государственный университет”, Москва, Россия²Федеральное государственное бюджетное учреждение наукиФизический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Троицкое обособленное подразделение,
Москва, Россия³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт спектроскопии Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: gumirova_v@mail.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Взаимодействие полей механических напряжений вокруг близко расположенных пор трековых мембран промоделировано численными методами в программе COMSOL Multiphysics. Выполнены натурные испытания образцов полиимидной пленки с отверстиями, включая визуализацию напряжений при помощи оптического поляризационного микроскопа. Изучение пленки с двумя отверстиями показало существенное влияние их ориентации на прочность образца.

DOI: 10.31857/S0367676522120122

ВВЕДЕНИЕ

Трековые мембраны (ТМ) представляют собой полимерные пленки, пронизанные системой калиброванных отдельных или перекрывающихся микро- и нанопор. Поры создаются при облучении пленки в ускорителе и последующем ее травлении [1]. ТМ широко используют в качестве фильтров тонкой очистки газов и жидкостей, спектрально-селективных дифракционных фильтров, а также для получения различных вторичных структур, в том числе – SERS подложек [2–4].

При разработке различных практических приложений новых материалов важное значение имеет всестороннее изучение его механических свойств. С точки зрения прочности, поры ТМ являются дефектами не только для самих мембран, но и для многих вторичных структур на их основе. При этом существенную роль при разрушении таких структур играют поля механического напряжения вокруг пустых или заполненных пор и взаимодействие этих полей [5, 6]. Взаимодействие возникает, когда расстояние между порами становится менее пяти их диаметров [7]. Прочность ТМ, используемых в разнообразных устройствах фильтрации, представляет самостоятельный интерес.

Ввиду малости диаметров пор (порядка нанометров или микрометров) наблюдать процесс их взаимо-

действия в процессе растяжения сложно. Однако можно использовать компьютерный эксперимент, а также моделирование пор в ТМ малыми круглыми отверстиями в полимерной пленке. В данной работе моделировались поры, канал которых перпендикулярен поверхности ТМ, поэтому можно было рассматривать двумерную задачу.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Численное моделирование было выполнено с использованием метода конечных элементов в системе COMSOL Multiphysics для различного расположения двух отверстий (пор) относительно оси растяжения образца (под углами 0°, 45° и 90°, см. рис. 1). Расстояние между центрами пор во всех случаях составляло величину, равную пяти их диаметрам. При таком условии поля механических напряжений взаимодействовали.

НАТУРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Аналогично ориентированные пары круглых отверстий наносились на полиимидную пленку толщиной 0.04 мм с помощью сверлильной установки Groxxon, состоящей из бормашины FBS 240/E с частотой вращения вала от 5000 до 20000 об./мин, сверлильной станины Groxxon MB 140S с жесткой возвратной пружиной, координаты

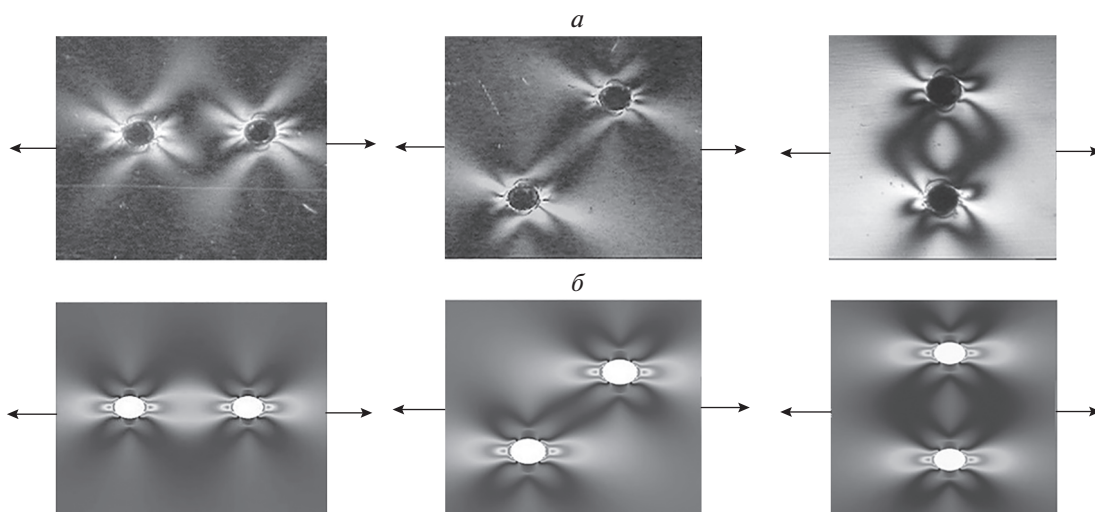


Рис. 1. Качественные результаты моделирования взаимодействия пор на отверстиях диаметром $d = 0.3$ мм под различными углами к направлению растяжения пленки: 90° (первый столбец), 45° (второй столбец) и 0° (третий столбец). Приложенное механическое напряжение составляет 15 МПа. Фотографии, полученные для пленок с отверстиями с помощью оптического микроскопа в монохромном поляризованном свете (а) и изображения, полученные численным моделированием методом конечных элементов в COMSOL Multiphysics (б). Направление растяжения указано стрелками.

натного стола Proxhon КТ 70 и пары ступенчатых зажимов. Диаметр отверстий составлял 0.3 мм, расстояние между центрами составляло пять диаметров (1.5 мм). В цифровом оптическом поляризационном микроскопе “Альтами Поляр-312” наблюдали сдвиговые напряжения, расположенные под углом 45° к направлению растяжения. Образец растягивали с помощью ручной растяжной машинки. Получена достаточно хорошая корреляция между результатами компьютерного моделирования и натурального эксперимента (рис. 1).

Заметим, что при моделировании в COMSOL Multiphysics коэффициент концентрации напряжения на порах при деформации образца 15–80% составил 2.2–2.5 для различных ориентаций пары пор, что хорошо согласуется с нашими предыдущими экспериментами на ТМ и на натуральных модельных системах [3]. Для круглого отверстия коэффициент концентрации напряжения $\beta = 3$, однако он уменьшается за счет искажения (удлинения) формы пор при растяжении пленки.

ИСПЫТАНИЯ МОДЕЛЬНЫХ ОБРАЗЦОВ НА РАЗРЫВНОЙ МАШИНЕ

Механические свойства (прочность σ_p и разрывная деформация ϵ_p) модельных образцов из полиимидной пленки определяли в режиме одноосного растяжения на универсальной испытательной машине Autograph AGS – 500 kN.

Обнаружена зависимость прочности образцов от ориентации отверстий относительно друг друга (рис. 2). Образцы с двумя отверстиями, расположенными под углом $\alpha = 45^\circ$ к направлению растяжения,

разрывались при напряжении $\sigma_p = 112 \pm 6$ МПа, деформации $\epsilon_p = 17 \pm 3\%$; образцы с отверстиями, расположенными под углом $\alpha = 90^\circ$ – при $\sigma_p = 118 \pm 5$ МПа, $\epsilon_p = 28 \pm 4\%$ и образцы с отверстиями, расположенными под углом $\alpha = 0^\circ$ – при $\sigma_p = 128 \pm 9$ МПа, $\epsilon_p = 36 \pm 4\%$.

Полученные результаты можно объяснить тем, что при разной ориентации пары пор (отверстий) существенное для образования микротрещин взаимодействие полей напряжений вблизи них возникает при разных номинальных напряжениях. Расположение пор под углом 45° соответствует наименьшему такому номинальному напряжению, а под углом 0° – наибольшему.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОР ТМ

В реальном пористом материале (в нашем случае – в трековой мембране) взаимодействие полей механических напряжений вокруг множества пор должно формировать сложную структуру микротрещин, приводящую в итоге к развитию магистральной трещины и разрушению образца.

На рис. 3 приведены фотографии ТМ на основе ПЭТФ толщиной 9 мкм, с плотностью пор $2.08 \cdot 10^6$ см⁻² и диаметрами пор, равными 2.625 мкм, полученные с помощью оптического микроскопа Nikon LV100 (Japan) в поляризованном свете. Направление растяжения горизонтальное. Светлое поле между порами соответст-

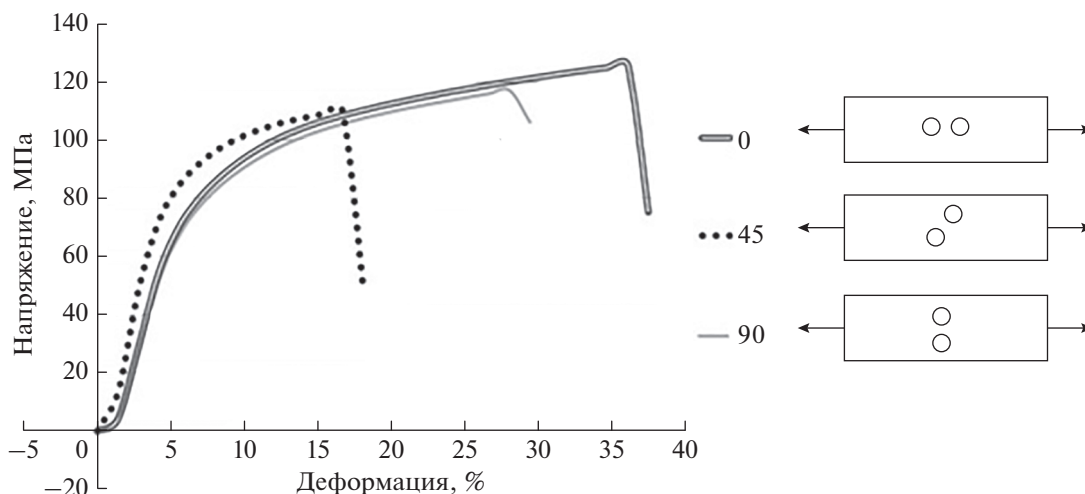


Рис. 2. Диаграммы растяжения образцов с различным расположением двух отверстий относительно оси растяжения (под углами 0° , 45° и 90°).

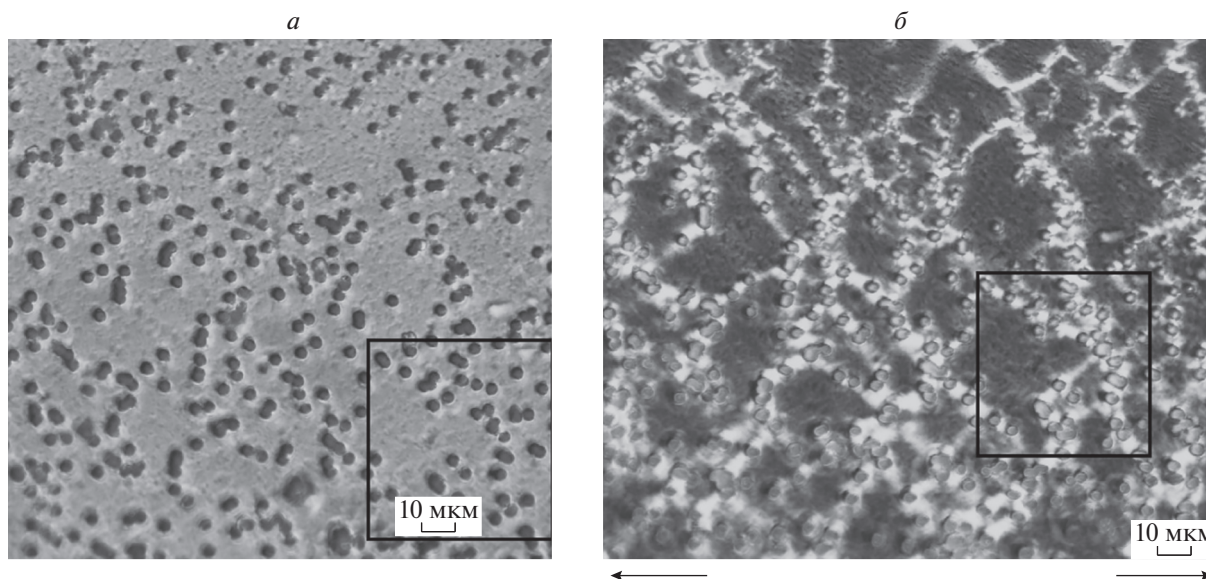


Рис. 3. Фотографии ТМ на основе ПЭТФ в оптическом микроскопе в поляризованном свете без деформации (а), при деформации в 8% (б). Направление растяжения указано стрелками.

ет наибольшим значениям полей напряжения, темное поле соответствует зонам разгрузки.

Прочность таких ТМ, с учетом уменьшения рабочего сечения за счет пор, равна $\sigma_p = 123.8 \pm \pm 3.5$ МПа, разрывная деформация $\epsilon_p = 12 \pm 2\%$, условный предел текучести $\sigma_T = 53 \pm 4$ МПа.

Прямоугольником на рис. 3а выделен участок, проанализированный в программе COMSOL Multiphysics методом сеток [8] и методом фазового поля [9]. При моделировании объекта на плоскую пластину перенесены координаты центров

пор, расстояние до края пластины выбрано достаточным, для избежания краевого эффекта.

На рис. 4а приведены полученные методом сеток пластично-упругие деформации в выделенном участке при деформации ТМ. Градиентная шкала показывает области концентрации напряжений. Сплошные контуры пор соответствуют начальному состоянию ТМ без растяжения, “белые” – ТМ при деформации. Видно, что одиночные (не взаимодействующие) поры вытянулись в овал, соответственно, коэффициент концентрации напряжений на них уменьшился. Форма

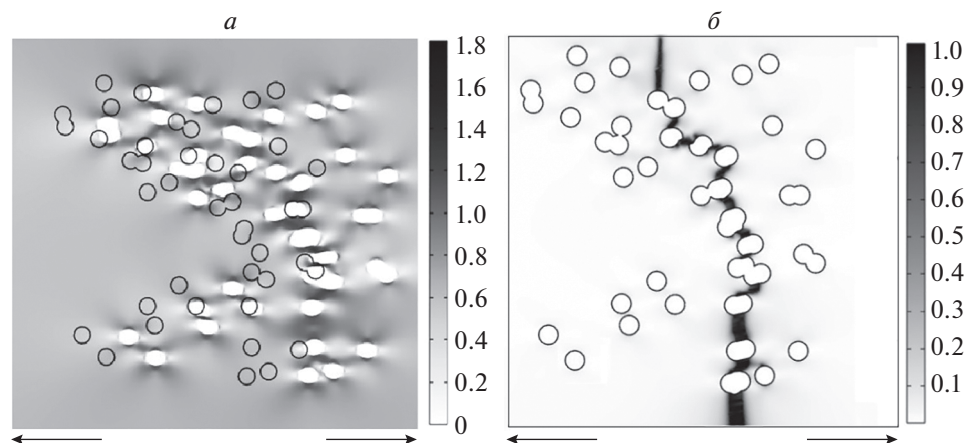


Рис. 4. Моделирование пластично-упругой деформации ТМ методом сеток (а), фазовое поле трещины при одноосном растяжении (б). Направление растяжения указано стрелками.

близко расположенных (взаимодействующих) пор искажена.

На рис. 4б приведены данные моделирования разрушения выделенного участка ТМ с помощью приближения фазового поля, причем в приближении хрупкого (фактически – быстрого) разрушения. Темная область соответствует наиболее вероятной траектории трещины.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показано, что результаты моделирования взаимодействия пор в ТМ численными методами в COMSOL Multiphysics коррелируют с результатами натурного модельного эксперимента. Результаты применения методов численного моделирования и прямого эксперимента с пористым материалом демонстрируют существенное влияние взаимодействия полей механических напряжений, возникающих вокруг пор растянутого материала, на его деформационно-прочностные свойства и позволяют получить дополнительную информацию о механизмах образования системы трещин, приводящих к его разрушению. Применительно к ТМ это означает, что необходимо учитывать среднее относительное расстояние между порами $r_{\text{отн}} = r_{\text{ср}}/D$, где среднее расстояние между порами $r_{\text{ср}} = (n)^{1/2}$, n – поверхностная плотность пор, D – их диаметр [6]. Среднее расстояние между порами для ТМ, изображенных на рис. 3, вычисленное по вышеприведенным формулам составляет примерно 2.4, что меньше 5.

При $r_{\text{отн}} < 5$ начинает сказываться взаимодействие полей механических напряжений вокруг пор. При этом, судя по рис. 4а, нарушается процесс вытягивания пор “в овал”, который уменьшает коэффициент концентрации напряжения около пор и увеличивает прочность ТМ [5]. Следует

отметить, что дополнительную информацию о параметрах пор трековых мембран можно получить методами атомно-силовой микроскопии [10].

Исследование выполнено в рамках темы государственного задания Московского педагогического государственного университета “Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике” при поддержке Министерства просвещения РФ (номер государственной регистрации: АААА-А20-120061890084-9). Авторы являются членами ведущей научной школы Российской Федерации “Опτικο-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов” (проект НШ-776.2022.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Apel P.* // *Radiat. Meas.* 2001. V. 34. No. 1–6. P. 559.
2. *Криставчук О.В., Никифоров И.В., Кукушкин В.И. и др.* // *Коллоид. журн.* 2017. № 5. С. 596.
3. *Kovalets N.P., Kozhina E.P., Razumovskaya I.V. et al.* // *J. Chem. Phys.* 2022. V. 156. No. 3. Art. No. 034902.
4. *Kozhina E.P., Bedin S.A., Nechaeva N.L. et al.* // *Appl. Sciences.* 2021. V. 11. No. 4. P. 1375.
5. *Разумовская И.В., Гумирова В.Н., Апель П.Ю., Баженов С.Л.* // *Преподаватель XXI в.* 2009. № 1. С. 206.
6. *Гумирова В.Н., Абдурашидова Г.С., Бедин С.А. и др.* // *Физика твердого тела.* 2015. Т. 57. № 2. С. 328.
7. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* *Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости.* 2001. 264 с.
8. *Zienkiewicz O.C., Taylor R.L.* // *The finite element method.* Butterworth-Heinemann, 2000.
9. *Ambati M., Gerasimov T., De Lorenzis L.* // *Comput. Mech.* 2015. V. 55. P. 383.
10. *Golovanova A.V., Domnina M.A., Arzhanov A.I. et al.* // *Appl. Sciences.* 2022. V. 12. No. 3. Art. No. 1334.

The distribution of mechanical stress around track etched membrane pores while sample elongation

V. N. Gumirova^{a,*}, I. V. Razumovskaya^a, A. V. Naumov^{a, b, c}

^a *Moscow Pedagogical State University, Moscow, 119991 Russia*

^b *Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Branch in Troitsk, Moscow, 108840 Russia*

^c *Institute of Spectroscopy Russian Academy of Sciences, Moscow, 108840 Russia*

*e-mail: gumirova_v@mail.ru

The interaction of mechanical stress fields around near positioned pores of track etched membrane was simulated by numerical methods in program COMSOL. Sample of polyimide film with holes was studied experimentally including the stress fields observation using optical polarizing microscope. The test of film with two holes indicated the significant influence of them orientation on sample strength.

УДК 621.315.592

ГИГАНТСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ ШИРИН ЛИНИЙ ЭПР ЦЕНТРОВ Mn^{2+} В УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ $Pb_{1-x}Mn_xS$ И $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$)

© 2022 г. В. А. Уланов^{1,2}, Р. Р. Зайнуллин¹, И. В. Яцык², Р. И. Калимуллин¹, А. М. Синицин¹, Т. А. Н. Хушея¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Казанский государственный энергетический университет”, Казань, Россия

²Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки

“Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр Российской академии наук”, Казань, Россия

*E-mail: ulvlad@inbox.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

В кристалле узкощелевого полупроводника $Pb_{1-x}Mn_xS$ в температурном диапазоне 5–150 К методом ЭПР в X -диапазоне обнаружена гигантская анизотропия ширин линий ЭПР на электронных переходах ($|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$) и ($|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$) центров Mn^{2+} (${}^6S, S = 5/2, I = 5/2$). Несколько меньшая анизотропия ширин линий ЭПР на переходах ($|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$) и ($|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$) обнаружена в полупроводниковом кристалле $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$) при тех же температурах. Описаны зависимости ширин и амплитуд наблюдаемых линий ЭПР от температуры. Обсуждаются причины анизотропии ширин линий.

DOI: 10.31857/S0367676522120274

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в физике полупроводников интенсивно изучаются спин-зависимые явления в узкощелевых полупроводниках [1, 2]. Это в первую очередь связано с тем, что эти материалы характеризуются рядом необычных физических свойств, которые могут позволить создать новые приборы оптоэлектроники, наноэлектроники и спинтроники. Эти свойства существенно модифицируются путем допирования узкощелевых полупроводников парамагнитными примесями. Благодаря этим примесям в таких полупроводниках при определенных условиях реализуются процессы, зависящие от поляризации спиновых моментов электронов проводимости внешним магнитным полем и от спиновых состояний примесных парамагнитных ионов [3, 4]. Изучению таких процессов посвящено большое число теоретических и экспериментальных работ (см., например, [5, 6]).

Прямозонный узкощелевой полупроводник PbS (галенит) привлек наше внимание как перспективный термоэлектрический материал и материал оптоэлектроники и спинтроники. Несмотря на свои привлекательные свойства, этот

материал до настоящего времени остается малоизученным. До настоящего времени особенно мало было опубликовано результатов экспериментальных работ, выполненных методом ЭПР, хотя именно этот метод позволяет изучать процессы в полупроводниках, обусловленные взаимодействиями свободных носителей заряда с парамагнитными ионами, находящимися в определенных спиновых состояниях [7]. В этом методе информация об исследуемом полупроводнике извлекается из параметров спинового гамма-кванта, формы линий ЭПР, а также магнитных и температурных зависимостей этих параметров.

В одной из первых работ, выполненной методом ЭПР в кристаллах группы халькогенидов свинца (PbS, PbTe, PbSe) с небольшим содержанием примесного марганца [8], сообщалось о наблюдении спектров ионов Mn^{2+} , локализованных в позициях катионов решетки Pb^{2+} и подверженных влиянию кристаллического поля кубической группы симметрии. Наблюдаемые спектры содержали только шесть линий ЭПР равной интенсивности, положения которых не зависели от направления вектора внешнего магнитного поля \vec{H}_0 . Авторы объяснили этот факт нулевым началь-

ным расщеплением спиновых уровней энергии ($a \approx 0$) и, как следствие, наложением друг на друга соответствующих сверхтонких линий ЭПР, возникающих в результате резонансных электронных переходов ($|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$), ($|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$) и ($|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$). Позже такую же картину наблюдали авторы работы [9] и объясняли факт отсутствия тонкой структуры в спектрах ЭПР нулевым начальным расщеплением. Однако в работе [10] было обнаружено наличие дополнительных линий ЭПР в ориентации $\langle 111 \rangle$ кристаллического образца $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ с $x = 0.002$. Эти дополнительные линии были приписаны электронным переходам ($|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$), ($|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$) и первоначально объяснялись псевдо-эффектом Яна-Теллера. Результаты последующего анализа полученных угловых зависимостей в спектрах ЭПР вызвали сомнения в справедливости ян-теллеровской модели центра Mn^{2+} в полупроводниковом кристалле PbS . Тем более, что такая модель не объясняла отсутствия дополнительных линий в спектрах ЭПР, исследовавшихся в работах [8, 9]. Более вероятным представляется предположение о наличии анизотропии процессов спиновой релаксации в спиновых состояниях $|\pm 5/2\rangle$ и $|\pm 3/2\rangle$, которая отсутствует в кристалле с низкой концентрацией марганца, но реализуется в этом же кристалле при повышенной концентрации этой примеси.

Целью данного экспериментального исследования было изучение методом ЭПР концентрационных, угловых и температурных зависимостей в спектрах ЭПР центров Mn^{2+} (${}^6S, S = 5/2, I = 5/2$) в монокристаллических образцах $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ ($x < 0.004$) и изменений в спектрах ЭПР кристалла $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Cu}_y\text{Mn}_x\text{S}$ ($x = 0.002; y = 0.002$), вызванных внедрением в кристалл $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ дополнительной примеси меди.

ЭКСПЕРИМЕНТ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Исследуемые кристаллы $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ и $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Cu}_y\text{Mn}_x\text{S}$ были выращены вертикальным методом Бриджмена в кварцевых ампулах с коническим дном. Были использованы химически чистые реактивы PbS , Mn , Cu и S . Марганец и медь брались в виде мелкой металлической пудры. Сера добавлялась в количествах, необходимых для обеспечения стехиометричности расплава.

Исследования методом ЭПР были выполнены в X-диапазоне при температурах 5–150 К на спектрометре ER200SRC (EMX/plus, Bruker), оснащенном контроллером температуры ITC503S (Oxford instruments).

Первоначально были исследованы спектры ЭПР двух кристаллических образцов $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ с $x_1 = 0.0002$ и $x_2 = 0.002$. Концентрация марганца в

первом образце ($x_1 = 0.0002$) была лишь немного выше, чем в образцах авторов работ [7, 8]. Спектры этого образца, зарегистрированные в трех главных ориентациях ($\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$, $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$) при температуре 5 К, на частоте 9414 МГц и мощности сверхвысокочастотной волны в резонаторе спектрометра $P_{\text{СВЧ}} = 2$ мВт, представлены на рис. 1а.

На рис. 1а видно, что зарегистрированный спектр в основном представлен шестью наиболее интенсивными линиями, которые обязаны своим появлением взаимодействию электронного магнитного момента каждого из ионов Mn^{2+} (${}^6S, S = 5/2, I = 5/2$) с его ядерным моментом. В промежутках между этими линиями сверхтонкой структуры спектра ЭПР видны пары линий, которые появляются в спектре из-за небольшой вероятности резонансных переходов с $\Delta m_l = 1$ (“запрещенные” линии). Однако в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ в спектре ЭПР присутствуют слабые дополнительные линии, часть из которых оказались наложенными на “запрещенные” линии, а две из них (отмечены цифрами 1 и 2) находятся вне интервала, занятого шестью сверхтонкими линиями. Как выяснилось, интенсивности этих дополнительных линий возрастают с повышением концентрации марганца в кристаллах $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$. Действительно, при концентрации $x = 0.002$ (см. рис. 1б) интенсивности этих дополнительных линий становятся значительно более высокими, хотя по-прежнему в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ никакие дополнительные линии не наблюдаются; наблюдаются лишь слабые “запрещенные” линии сверхтонкой структуры спектра.

При отклонениях вектора напряженности внешнего магнитного поля \vec{H}_0 от кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$ амплитуды линий типа 1 и 2 начинают быстро уменьшаться и эти линии практически исчезают уже при углах отклонения, превышающих 15° .

Были изучены температурные зависимости ширины линий ЭПР образца $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{S}$ ($x_2 = 0.002$). Для шести сверхтонких линий (рис. 1б), соответствующих электронному переходу ($|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$) и наблюдаемых при всех ориентациях образца, эти зависимости были практически одинаковыми. Поскольку большая часть дополнительных линий типа 1 и 2 сильно перекрываются друг с другом и наблюдаются только в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$, температурные зависимости были изучены именно в этой ориентации и только для линии 1 и соседствующей с ней слабополевой линии сверхтонкой структуры. Графики этих зависимостей приведены на рис. 2, где кривая (А) соответствует ширине линии 1, а кривая (В) – соседней с ней линии сверхтонкой структуры электронного перехода ($|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$).

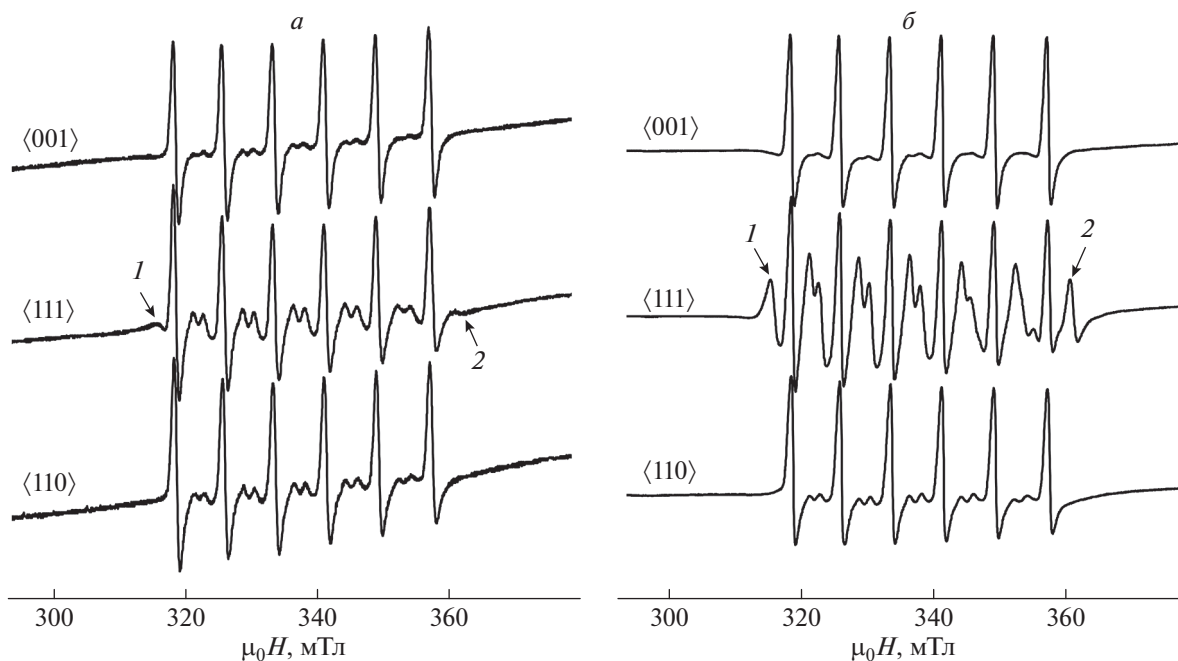


Рис. 1. Спектры ЭПР образцов $Pb_{1-x}Mn_xS$ с $x_1 = 0.0002$ (а) и $x_2 = 0.002$ (б), зарегистрированные при $T = 5$ К, $f = 9414$ МГц и $P_{СВЧ} = 2$ мВт в трех главных ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$, $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$.

Как видно из графиков рис. 2, ширины обеих исследуемых линий меняются мало в интервале температур 4.2–15 К. Такое поведение линий определяется, по-видимому, двумя конкурирующими эффектами. Первый из них (эффект “узкое горло” [11]) характеризуется сужением линии ЭПР с повышением температуры. Одновременно с этим при повышении температуры происходит примерно линейное уширение линий по корринговскому механизму спин-решеточной релаксации [12]. По этому механизму энергия локализованного спинового момента передается электронам зоны проводимости. При этом происходит одновременное “переворачивание” спинового момента парамагнитного центра и электрона проводимости (“флип-флоп”).

Начиная с $T \approx 15$ К ширины обеих линий начинают увеличиваться примерно по линейному закону (корринговская релаксация). Однако выше 30 К дополнительная линия начинает уширяться примерно по экспоненциальному закону. Такое же экспоненциальное уширение наблюдается и для сверхтонкой линии, но при $T > 47$ К. Очевидно, что при этих температурах в решетке начинаются процессы дипольной нестабильности кристаллической решетки, характеризующиеся появлением мягких мод в фоновом спектре исследуемого образца [13].

Температурная зависимость ширины линии 1 (рис. 1б) в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ не дает ответа на вопрос о том, почему в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ линии этого типа не наблюдаются. Од-

нако нет оснований считать, что марганец находится в каком-либо другом валентном состоянии. Изотропия электронного зеемановского и сверхтонкого взаимодействий говорят о том, что состояние марганца – Mn^{2+} . Поэтому следует ожидать присутствия в спектрах ЭПР этих ионов линий, связанных с электронными резонансными переходами ($|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle$) и ($|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle$). Если

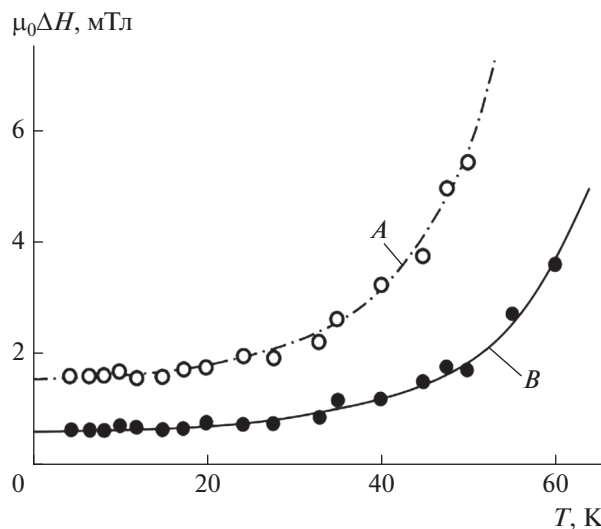


Рис. 2. Температурные зависимости ширин линий спектра ЭПР, представленного на рис. 1б для ориентации $\langle 111 \rangle$: А – график для линии 1; В – график соседней с ней сверхтонкой линии перехода ($|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle$).

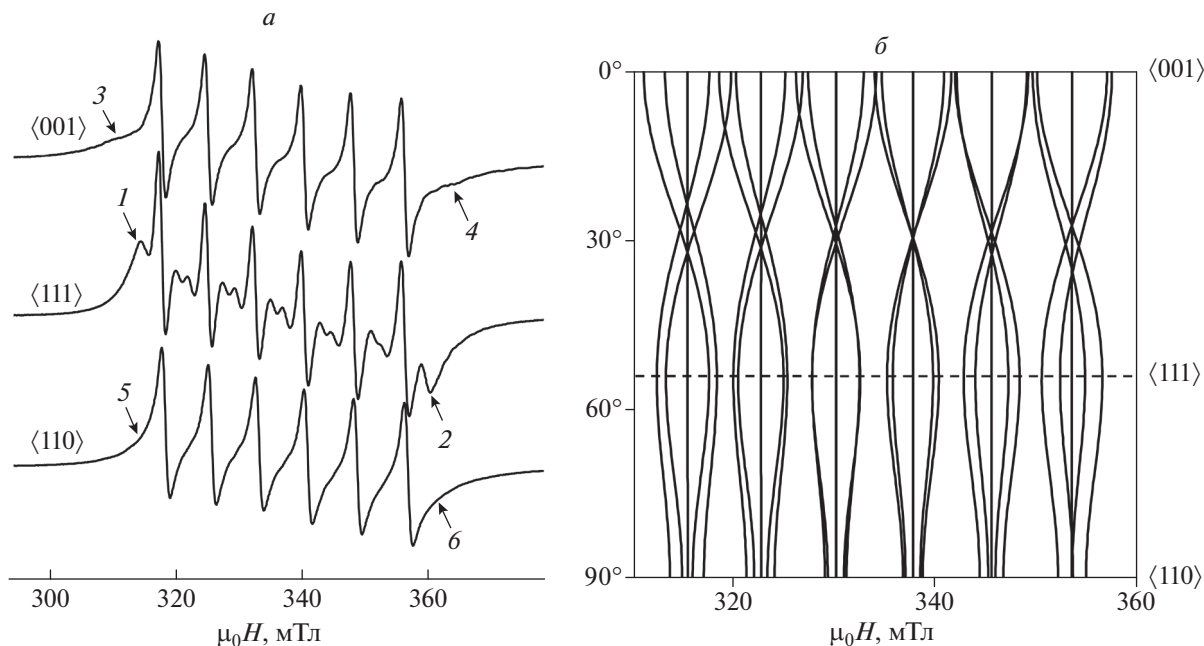


Рис. 3. Спектры ЭПР образца $\text{Pb}_{1-y}\text{Cu}_y\text{Mn}_x\text{S}$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$) в трех главных ориентациях (а) и теоретические угловые зависимости положений линий спектра ЭПР этого образца (б), определенные на базе СГ(1).

реализовалась кубическая симметрия кристаллического поля в позициях ионов Mn^{2+} , то следует ожидать появления дополнительных линий и в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$. Однако такие линии в этих ориентациях отсутствуют, что можно было бы объяснить псевдо-эффектом Яна-Теллера и тригональным искажением координационного октаэдра ионов марганца, но при этом в образце должны были бы появиться четыре ансамбля магнитно-неэквивалентных центров, что увеличило бы число наблюдаемых линий в спектрах ЭПР.

Отсутствие линий ЭПР от переходов $(|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle)$ и $(|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle)$ в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ можно объяснить, предположив, что сечения рассеяния электронов проводимости на примесных ионах Mn^{2+} зависят от спиновых состояний этих ионов в момент столкновения и от направления внешнего магнитного поля.

Для того чтобы проверить справедливость такого предположения, нами был выращен образец $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Cu}_y\text{Mn}_x\text{S}$, содержащий вторую примесь — медь. Как было показано в работе [14], медь в галените является псевдо-акцепторной примесью. Мы ожидали, что, оказавшись в решетке галенита в позиции катиона Pb^{2+} , ион Cu^+ не будет парамагнитным центром, но будет создавать в решетке локальные центросимметричные деформации, влияющие на процессы рассеяния электронов проводимости на примесных ионах Mn^{2+} . При этом, будучи примесью акцепторного типа, медь

способна уменьшить концентрацию электронов проводимости.

На рис. 3а приведены спектры ЭПР выращенного образца $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Cu}_y\text{Mn}_x\text{S}$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$), зарегистрированные при температуре 5 К в трех главных ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$, $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ на частоте 9414 МГц и при мощности сверхвысокочастотной волны в резонаторе спектрометра 2 мВт.

На рис. 3б приведены теоретические угловые зависимости положений всех 30 линий ЭПР, которые должны наблюдаться в исследуемом образце при условии, что присутствующие в его объеме центры Mn^{2+} характеризуются кубической симметрией магнитных свойств. В таком случае эти свойства должны быть описаны спиновым гамильтонианом (СГ):

$$H_S = \beta_e g [H_{0x} \cdot S_x + H_{0y} \cdot S_y + H_{0z} \cdot S_z] + A[S_x \cdot I_x + S_y \cdot I_y + S_z \cdot I_z] + B_4(O_4^0 + 5O_4^4) - \beta_N g_N [H_{0x}^{(i)} \cdot I_x + H_{0y}^{(i)} \cdot I_y + H_{0z}^{(i)} \cdot I_z] \quad (1)$$

где первый член суммы — оператор электронного зеемановского взаимодействия ($S_{\text{Mn}} = 5/2$), второй член — оператор сверхтонкого взаимодействия электронного момента иона Mn^{2+} с его ядерным моментом ($I_{\text{Mn}} = 5/2$), третий член — оператор, описывающий взаимодействие электронного спинового момента парамагнитного центра Mn^{2+} с кристаллическим полем кубиче-

ской симметрии, реализующееся через спин-орбитальное взаимодействие, последний член – оператор ядерного зеемановского взаимодействия. При расчете угловых зависимостей, представленных на рис. 3б, были использованы значения параметров СГ(1), определенные в результате моделирования спектра ЭПР образца $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$, $y = 0.002$) в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$ при температуре 5 К на частоте 9414 МГц: $g = 1.996$; $A = 211$ МГц; $B_4 = -0.13$ МГц.

Отличие спектров ЭПР на рис. 3а от тех, что представлены выше на рис. 1б, состоит в следующем. Во-первых, линии спектров $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$, $y = 0.002$) характеризуются заметно большей шириной (даже те, что связаны с электронным переходом $(|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle)$). При этом они неоднородно уширены. Во-вторых, в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ появились “плечи”, указывающие на присутствие в этих местах линий тонкой структуры, соответствующих электронными переходам $(|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle)$ и $(|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle)$. Эти “плечи” отмечены на рис. 3а цифрами 3, 4, 5 и 6. Именно в этих местах ожидаются линии тонкой структуры центра Mn^{2+} , если в действительности он имеет кубическую симметрию магнитных свойств с параметром начального расщепления $B_4 \sim -0.13$ МГц. Таким образом, мы получили свидетельство того, что центры Mn^{2+} в кристалле $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$, $y = 0.002$) практически обладают кубической симметрией магнитных свойств (с малыми отклонениями от кубичности) и при температуре 5 К характеризуются, с учетом точности моделирования, следующими значениями параметров СГ(1): $g_a = 1.996 \pm 0.001$; $A_a = 211 \pm 5$ МГц, $B_{4a} = -0.13 \pm 0.03$ МГц.

Следует отметить, что концентрация меди в $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ была недостаточной для образования каких-либо чужеродных фаз – рентгенографическое тестирование этого образца не обнаружила их. Поэтому можно сделать вывод, что если в менее совершенной кристаллической решетке галенита с дополнительной примесью меди мы имеем практически кубические центры Mn^{2+} , то в этой же решетке без примесей меди (т.е. в $Pb_{1-x}Mn_xS$) центры Mn^{2+} несомненно должны быть кубическими и характеризоваться примерно таким же значением константы B_4 . Поэтому линии типа 1 и 2 на рис. 1б также следует связать с электронными переходами $(|\pm 5/2\rangle \leftrightarrow |\pm 3/2\rangle)$ и $(|\pm 3/2\rangle \leftrightarrow |\pm 1/2\rangle)$. При этом мы получаем возможность путем моделирования спектра, представленного на рис. 1б для ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 111 \rangle$, определить параметры g , A и B_4 также и для образца $Pb_{1-x}Mn_xS$ ($x = 0.002$). Для температуры 5 К они оказались следующими: $g_b = 1.994 \pm 0.001$; $A_b = 212 \pm 3$ МГц, $B_{4b} = -0.14 \pm 0.01$ МГц.

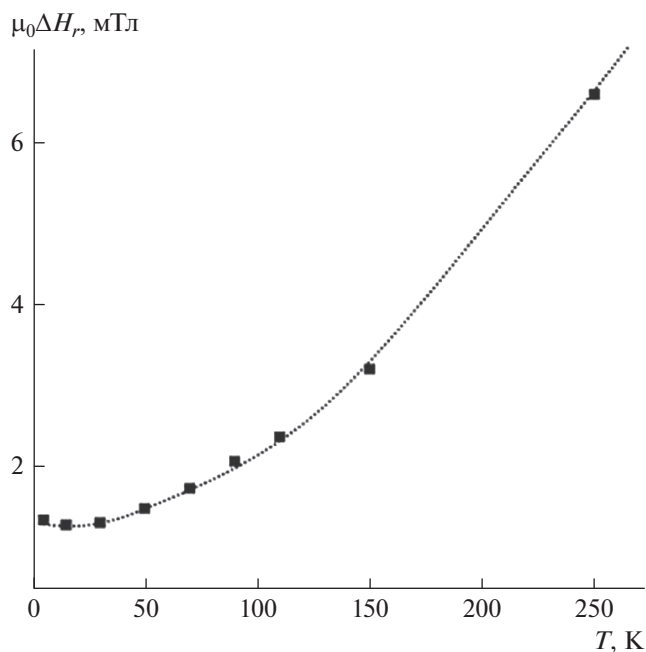


Рис. 4. Температурная зависимость ширины слабopолево́й сверхтонкой линии спектра ЭПР образца $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$), зарегистрированного в ориентации $\langle 111 \rangle$ на частоте $f = 9412$ МГц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обнаружено, что с повышением температуры параметры g для образцов $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$) и $Pb_{1-x}Mn_xS$ ($x = 0.002$) увеличиваются, но незначительно (при $T = 90$ К g_a оказывается примерно на 0.002 больше, а g_b – на 0.001). Параметры A_a и A_b при $T = 90$ К оказываются меньше указанных выше значений примерно на 4 МГц. Температурные изменения параметров B_{4b} и B_{4b} обнаружить не удалось.

Информативными оказались и температурные зависимости ширин линий образца $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$). Поскольку формы дополнительных линий 1 и 2 спектра ЭПР этого образца оказались сложными (рис. 3а), удалось получить экспериментальные точки температурной зависимости только для сверхтонких линий спектра ЭПР на переходе $(|+1/2\rangle \leftrightarrow |-1/2\rangle)$. Чтобы была возможность сравнивать результаты измерений с графиком B на рис. 2, рассматриваемая зависимость строилась для слабopолево́й сверхтонкой линии спектра ЭПР, регистрируемого в ориентации $\langle 111 \rangle$. График искомой зависимости представлен на рис. 4.

Представленный на этом рисунке график качественно похож на график B , показанный на рис. 2. Здесь также присутствует участок, демонстрирующий присутствие эффекта “узкое горло”. Есть также линейный участок, указывающий на

роль корринговского механизма спиновой релаксации. Но соответствующие этим участкам интервалы температур намного шире. Последнее говорит о том, что присутствие дополнительной примеси меди существенным образом влияет на темпы спиновой релаксации. Особенно сильно это влияние коснулось механизмов релаксации в спиновых состояниях $|\pm 5/2\rangle$ и $|\pm 3/2\rangle$ примесных ионов Mn^{2+} , где зависимость темпов релаксации от направления внешнего магнитного поля значительно уменьшилась, но осталась весьма заметной. Что касается образца $Pb_{1-x}Mn_xS$ ($x = 0.002$), не содержащего примеси меди, то здесь анизотропию процессов спиновой релаксации в состояниях $|\pm 5/2\rangle$ и $|\pm 3/2\rangle$ примесных ионов Mn^{2+} можно назвать гигантской.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Desai D.C., Zviashynski B., Zhou Jin-Jian, Marco B. // Phys. Rev. B. 2021. V. 103. Art. No. L060504.
2. Nakazawa Y., Uchida M., Nishihaya Sh. et al. // Phys. Rev. B. 2021. Art. No. 045109.
3. Engel H.-A., Halperin B.I., Rashba E.I. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. Art. No. 166605.
4. Teran F.J., Potemski M., Maude D.K. et al. // Physica E. 2003. V. 17. P. 335.
5. Carbrera-Baez M., Iwamoto W., Magnawita E.T. et al. // J. Phys. Cond. Matter. 2014. V. 26. Art. No. 175501.
6. Sala A., Danon J. // Phys. Rev. B. 2021. V. 104. Art. No. 085421(12).
7. Wilamowski Z., Solnica M., Michaluk E. et al. // Semicond. Sci. Technol. 2011. V. 26. Art. No. 064009.
8. Pifer J.H. // Phys. Rev. 1967. V. 157. P. 272.
9. Bartkowski M., Northcott D.J., Reddoch A.H. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 6506.
10. Ulanov V.A., Sinitsyn A.M., Zainullin R.R. // Book of Abstracts of XV Int. Feofilov Symp. on Spectroscopy of Crystals Doped with Rare Earth and Transition Metal ions. (Kazan, 2013). P. 158.
11. Абрагам А., Блинн Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Т. 1. М.: Мир. 1972. 652 с.
12. Barnes S.E. // Adv. Phys. 1981. V. 30. P. 801.
13. Zhang Yi, Xuezhong Ke, Kent P.R.C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. Art. No. 175503.
14. Голенищев-Кутузов В.А., Синицин А.М., Лабутина Ю.В., Уланов В.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 7. С. 852; Golenishchev-Kutuzov V.A., Sinicin A.M., Labutina Y.V., Ulanov V.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 7. P. 761.

Giant anisotropy of the width of the EPR lines of Mn^{2+} centers in narrow-gap semiconductors $Pb_{1-x}Mn_xS$ и $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ ($x = 0.002$; $y = 0.002$)

V. A. Ulanov^{a, b, *}, R. R. Zainullin^a, I. V. Yatsyk^b, R. I. Kalimullin^a,
A. M. Sinicin^a, T. A. Housheya^a

^a Kazan State Power Engineering University, Kazan, 420066 Russia

^b Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, 420029 Russia

*e-mail: ulvlad@inbox.ru

In a crystal of a narrow-gap $Pb_{1-x}Mn_xS$ semiconductor in the temperature range of 5–150 K, a giant anisotropy of the widths of EPR lines at electronic junctions was detected by the EPR method in the X-range ($|\pm 5/2\rangle|\pm 3/2\rangle$) and ($|\pm 3/2\rangle|\pm 1/2\rangle$) centers Mn^{2+} (6S, S = 5/2, I = 5/2). Slightly lower anisotropy of EPR line widths at junctions ($|\pm 5/2\rangle|\pm 3/2\rangle$) and ($|\pm 3/2\rangle|\pm 1/2\rangle$) was observed in a $Pb_{1-x-y}Cu_yMn_xS$ semiconductor crystal ($x = 0.002$; $y = 0.002$) in this very temperature range. The dependences of the widths and amplitude of the observed EPR lines on temperature are described. The reasons for the anisotropy of line widths are discussed.

УДК 538.9

СТРУКТУРА И ПАРАМЕТРЫ МАГНИТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРАХ Nb⁴⁺ В КРИСТАЛЛЕ BaF₂: ДАННЫЕ ЭПР

© 2022 г. В. А. Уланов^{1, 2}, Р. Б. Зарипов², Р. Р. Зайнуллин¹, Р. И. Калимуллин¹¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Казанский государственный энергетический университет”, Казань, Россия²Казанский физико-технический институт имени Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки

“Федеральный исследовательский центр “Казанский научный центр Российской академии наук”, Казань, Россия

*E-mail: ulvlad@inbox.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

В кристаллах BaF₂, допированных ниобием, методом ЭПР на частоте $f = 34196$ МГц при температурах 25 и 300 К изучены структуры и магнитные характеристики парамагнитных центров двух типов, образованных ионами Nb⁴⁺ ($4d^1$, $S = 1/2$) в позициях катионов Ba²⁺. В центрах Nb⁴⁺(I) наблюдается эффект Яна–Теллера на основном орбитальном дублете $E_g \otimes e_g$, вызывающий сильное тетрагональное искажение координационного куба, и дополнительное слабое орторомбическое искажение, обязанное эффекту Яна–Теллера на возбужденном дублете $E \otimes b_1$. Центры Nb⁴⁺(II) представляют собой осевые ассоциаты из иона Nb⁴⁺, замещающего катион Ba²⁺, и двух междоузельных ионов F_{int1}^- и F_{int2}^- . В образовавшихся ассоциатах ион Nb⁴⁺ смещается в сторону одного из междоузельных ионов фтора. Определены значения параметров зеемановского, сверхтонкого и суперсверхтонкого взаимодействий в обнаруженных центрах. Обсуждается их молекулярная структура.

DOI: 10.31857/S0367676522120286

ВВЕДЕНИЕ

Кристалл BaF₂ относится к структурной группе флюорита [1]. В его кристаллической структуре каждый катион Ba²⁺ окружен восемью анионами F⁻, образующими координационный куб катиона. При этом каждый анион располагается в центре координационного тетраэдра, образуемого четырьмя катионами Ba²⁺. Поскольку число анионов в кристаллах типа флюорита в два раза больше числа катионов, то в кубической анионной подрешетке такого кристалла только половина элементарных кубов содержит в своем центре катион. В литературе незаполненные кубы анионной подрешетки иногда называют октаэдрическими пустотами или междоузлиями.

При допировании кристаллов группы флюорита элементами переходных металлов последние в виде ионов обычно встраиваются в катионные позиции и оказываются в кубическом кристаллическом поле. В таком поле основные орбитальные состояния большинства ионов переходных металлов оказываются вырожденными, поэтому в образовавшемся примесном комплексе реали-

зуется эффект Яна–Теллера. Статическими проявлениями эффекта Яна–Теллера являются смещения ядер примесного комплекса в новые равновесные положения и понижение симметрии исходной равновесной ядерной конфигурации. Динамическими проявлениями эффекта Яна–Теллера являются взаимная зависимость электронного и ядерного движений в примесном комплексе и туннельные переходы комплекса между ямами основного листа его адиабатического потенциала.

Кристалл BaF₂ имеет широкую полосу оптической прозрачности и используется в качестве материала для изготовления приборов квантовой электроники. Кроме того, этот кристалл очень хорошо раскалывается в кристаллографических плоскостях (111), что позволяет изготавливать из него чистые поверхности для напыления нанослоев металлов и полупроводников с целью их использования в различных приборах наноэлектроники и спинтроники. Интересным с практической точки зрения является и то, что данный кристалл при высоких температурах обладает так называемой “суперионной” проводимостью [2].

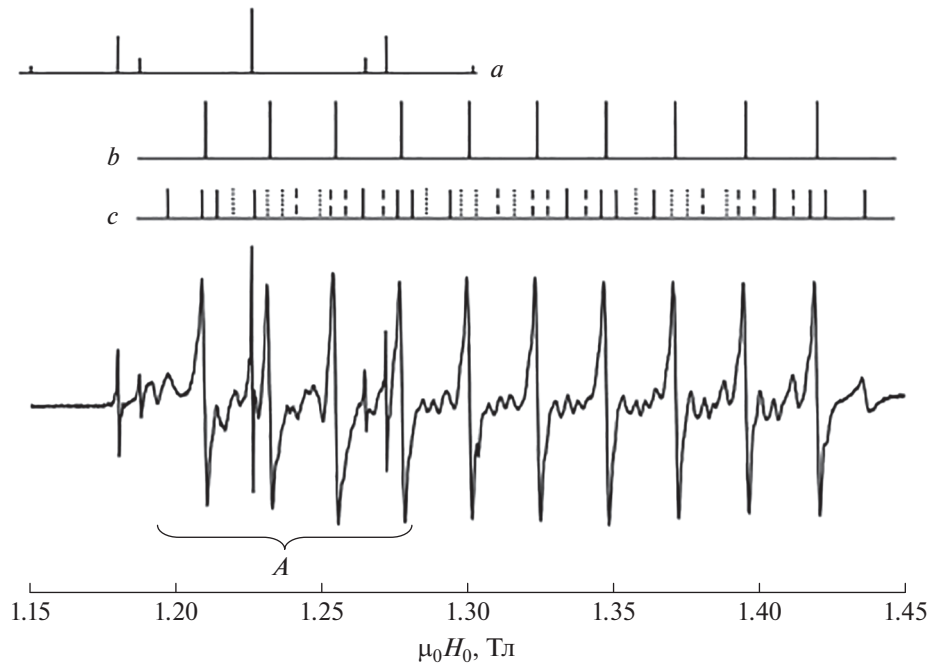


Рис. 1. Спектр ЭПР образца $\text{BaF}_2:\text{Nb}$ в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ и диаграммы, указывающие на положения резонансных линий ЭПР центров Gd^{3+} (a) и центров Nb^{4+} (I) (b) и Nb^{4+} (II) (c): $T = 300 \text{ K}$; $f = 34\,196 \text{ МГц}$.

Это свойство связано с высокими скоростями скореллированной диффузии ионов решетки с одновременным “залечиванием” возникающих при этом точечных дефектов решетки. Поскольку кроме собственных ионов решетки в диффузионном процессе могут участвовать также и примесные ионы, объем кристалла фтористого бария является удобной средой для синтеза примесных многоядерных кластеров. Если примесный ион в решетке BaF_2 является ян-теллеровским, то взаимодействие диффундирующих ионов через поле фононов может стимулировать образование сложных примесных кластеров с термически стабильной структурой [3].

Целью настоящей работы явилось изучение возможностей синтеза в кристалле BaF_2 ян-теллеровских кластеров ниобия и определение структуры и магнитных характеристик синтезированных кластеров. Ниобий был выбран в качестве базового элемента синтезируемого кластера, поскольку ранее методом ЭПР было установлено [4], что этот элемент внедряется в кристалл BaF_2 в катионную позицию. В результате он оказывается в этой позиции в состоянии $\text{Nb}^{4+}(4d^1, {}^2D, S = 1/2)$, т.е. оказывается ионом ян-теллеровского типа [5]. Однако в такой ситуации избыточный заряд ниобия требует зарядовой компенсации. Поэтому в решетке кристалла должны образоваться заряженные дефекты. В качестве таковых было решено использовать избыточные ионы F^- , для чего синтез кластеров проводился в атмосфере

гелия, содержащего некоторое количество фтора. Ниобий внедрялся в кристалл с поверхности беспримесной монокристаллической заготовки BaF_2 , нагретой до температуры $T \sim (T_{\text{пл}} - 15^\circ \text{C})$. В объем монокристаллической заготовки также внедрялось небольшое количество ионов Gd^{3+} для контроля ориентации исследуемого образца относительно вектора напряженности внешнего магнитного поля \vec{H}_0 .

ЭКСПЕРИМЕНТ

Исследования приготовленных образцов проводились методом ЭПР на спектрометре Elexus 580 (Bruker). Контроль температуры исследуемого образца в диапазоне 5–300 К осуществлялся криостатной системой CF 935 (Oxford). На рис. 1 и 2 представлены спектры ЭПР кристаллического образца BaF_2 , допированного ниобием ($\sim 0.1 \text{ ат. \%}$) и небольшим количеством гадолиния ($\sim 0.01 \text{ ат. \%}$). Эти спектры зарегистрированы при $T = 300 \text{ K}$, на частоте 34196 МГц в ориентациях $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$ (рис. 1) и $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ (рис. 2).

На рис. 1 и 2 выше экспериментальных спектров ЭПР приведены диаграммы, указывающие положения резонансных линий, соответствующих спектрам ЭПР зондовых центров Gd^{3+} и центров Nb^{4+} двух типов (Nb^{4+} (I) и Nb^{4+} (II)). Участки спектров, обозначенные на рис. 1 буквой A и на рис. 2 буквой B, содержит наложенные друг на

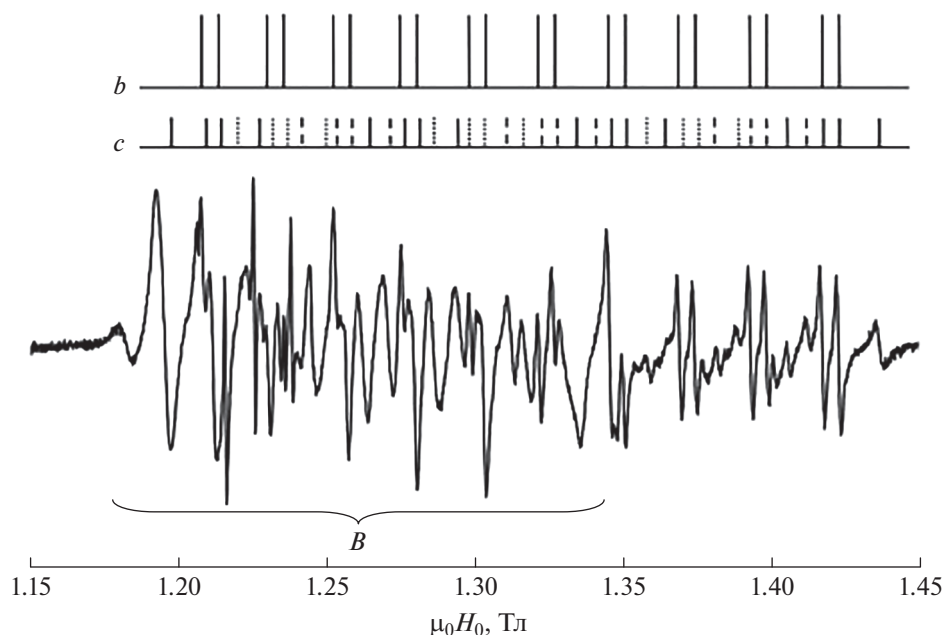


Рис. 2. Спектр ЭПР образца $\text{BaF}_2:\text{Nb}$ в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$ и диаграммы, указывающие на положения резонансных линий ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ (b) и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ (c): $T = 300 \text{ K}$; $f = 34\,196 \text{ МГц}$.

друга линии спектров ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$, ориентированных относительно постоянного внешнего магнитного \vec{H}_0 в соответствии с кубической симметрией кристалла-матрицы BaF_2 (магнитно-неэквивалентных центров). Правее этих участков все линии принадлежат только спектрам ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$, ориентированных так, что оси z их локальных систем координат оказались перпендикулярными вектору \vec{H}_0 . Диаграммы (b) и (c) соответствуют именно этим центрам.

На рис. 3 приведен вид спектров этого же образца $\text{BaF}_2:\text{Nb}$ при температуре 25 K . Верхний спектр зарегистрирован в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 110 \rangle$, а нижний – в ориентации $\vec{H}_0 \parallel \langle 001 \rangle$. На этом рисунке видно, что в тех местах, которые на рис. 1 и 2 были обозначены буквами *A* и *B*, наблюдаются группы очень узких линий шириной $\sim 1.5 \text{ Гс}$. Эти линии соответствуют суперсверхтонкой структуре (ССТС) спектров ЭПР тех центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$, у которых оси Z их локальных систем координат ориентированы параллельно внешнему магнитному полю \vec{H}_0 (нижний спектр) или под углом 45° (верхний спектр). К сожалению, угловые зависимости положений этих узких линий построить не удалось. Однако угловые зависимости положений линий, представленных на рис. 1 и 2 диаграммами (b) были построены. Также были построены угловые зависимости положений линий спектров

ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$, где каждая компонента сверхтонкой структуры (СТС) была расщеплена на 4 линии равной интенсивности, представляющие ССТС. Положения этих линий в главных ориентациях представлены на рис. 1 и 2 диаграммами (c).

Наблюдаемые угловые зависимости положений линий спектров ЭПР центров ($\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$) хорошо описываются спиновым гамма-тонием (СГ) следующего вида:

$$H_S = \beta_e H_0 \cdot g \cdot S + (S \cdot A^{\text{Nb}} \cdot I^{\text{Nb}} - g_n^{\text{Nb}} \beta_n H_0 \cdot I^{\text{Nb}}) + \sum_i [S \cdot A^{F(i)} \cdot I^{F(i)} - g_n^F \beta_n H_0 \cdot I^{F(i)}], \quad (1)$$

где первый член описывает электронное зеемановское взаимодействие спинового момента центра Nb^{4+} ($S^{\text{Nb}} = 1/2$) с постоянным внешним магнитным полем \vec{H}_0 , второй член – сверхтонкое взаимодействие электронного спинового момента центра с магнитным моментом ядра ниобия ($I^{\text{Nb}} = 9/2$) и взаимодействие магнитного момента ядра ниобия с внешним магнитным полем (ядерное зеемановское взаимодействие), третий член – суперсверхтонкое взаимодействие (ССТВ) электронного спинового момента центра ниобия с ядерными спиновыми моментами ближайших к ниобию ионов фтора (пронумерованных индексом i), а также зеемановские взаимодействия с ядрами этих ионов ($I^F = 1/2$). СГ (1) представлен в

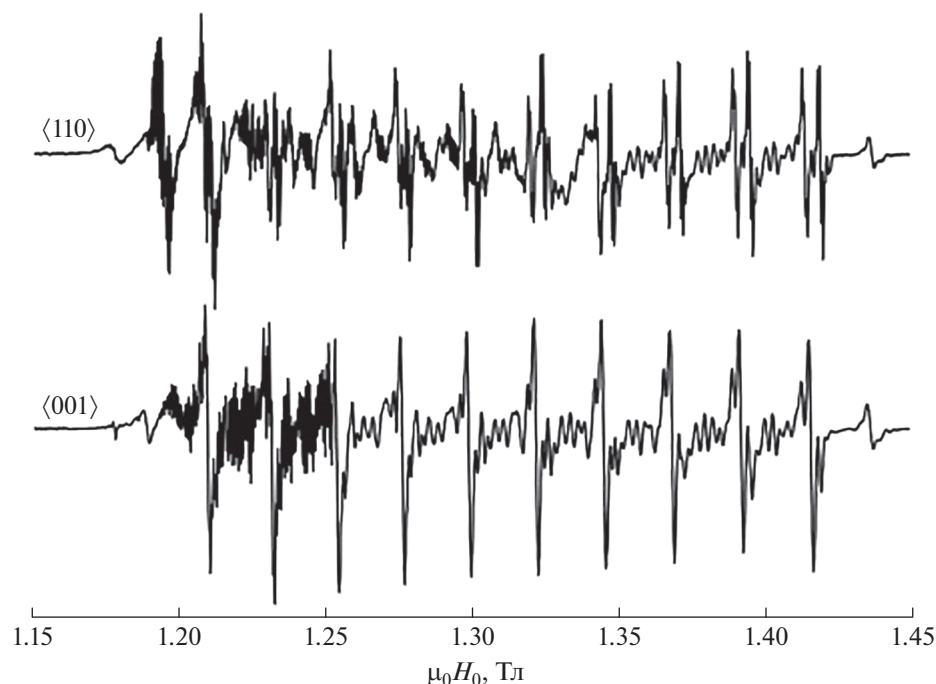


Рис. 3. Спектры ЭПР образца $\text{BaF}_2\text{:Nb}$, зарегистрированные при $T = 25 \text{ К}$ и $f = 34196 \text{ МГц}$.

локальных системах координат, связанных с магнитными осями каждого из магнитно-неэквивалентных центров. Оси z этих локальных систем направлены вдоль одной из кристаллографических осей $\langle 001 \rangle$, а оси x и y вдоль кристаллографических осей $\langle 110 \rangle$ и $\langle 1-10 \rangle$, соответственно.

Следует отметить, что линии ССТС центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ оказались спектрально неразрешимыми, поэтому определить параметры соответствующих им тензоров $A^{F(i)}$ не удалось. Однако в спектрах ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ присутствовали хорошо разрешенные линии ССТС с двумя междуузельными ионами фтора ($F_{\text{int}1}^-$ и $F_{\text{int}2}^-$), расположенными в октаэдрических пустотах вдоль оси тетрагональной симметрии этих центров (вдоль оси z их локальных систем координат). Параметры $A^{F(1)}$ и $A^{F(2)}$ оказались различными, что свидетельствует о смещении иона $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ из центра координационного куба по направлению оси z локальной системы координат.

В результате изучения угловых зависимостей положений резонансных линий спектров ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ были определены наиболее важные параметры их спиновых гамильтонианов. Они представлены в табл. 1.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

Экспериментальные данные, приведенные в табл. 1, указывают на то, что симметрия магнитных свойств центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ является орторомбической, хотя две компоненты тензора \mathbf{g} (g_x и g_y) мало отличаются друг от друга, а компоненты тензора \mathbf{A}^{Nb} (A_x^{Nb} и A_y^{Nb}) оказались практически одинаковыми (в пределах точности эксперимента). Поскольку сверхтонкие компоненты спектра ЭПР этих центров практически не расщеплены на суперсверхтонкие компоненты (есть только намеки на наличие таких компонент), то здесь можно говорить о нелокальной компенсации заряда. Поэтому объяснить орторомбичность магнитных свойств центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ присутствием в ближайшем окружении ниобия междуузельных ионов фторов не удастся. Учитывая то, что при почти одинаковых величинах x - и y -компонент тензоров \mathbf{g} и \mathbf{A} величины их z -компонент заметно больше первых, можно говорить о двухстадийном процессе понижения симметрии центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$. Будучи в центре координационного куба замещенного катиона Ba^{2+} , пятикратно вырожденный орбитальный терм 2D свободного иона Nb^{4+} расщепляется так, что нижним оказывается орбитальный дублет $E_g(d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2})$. В таких условиях обычно реализуется эффект Яна–Теллера $E \otimes e$. В случае электронной конфигурации $4d^1$ можно

Таблица 1. Параметры спиновых гамильтонианов центров Nb⁴⁺(I) и Nb⁴⁺(II)

Параметры СГ (I)		Центры Nb ⁴⁺ (I)		Центры Nb ⁴⁺ (II)	
		<i>T</i> = 25 К	<i>T</i> = 300 К	<i>T</i> = 25 К	<i>T</i> = 300 К
g	<i>g_z</i>	1.997 ± 0.001	1.998 ± 0.001	1.998 ± 0.001	1.999 ± 0.001
	<i>g_x</i>	1.865 ± 0.001	1.862 ± 0.001	1.862 ± 0.001	1.859 ± 0.001
	<i>g_y</i>	1.858 ± 0.001	1.854 ± 0.001	1.862 ± 0.001	1.859 ± 0.001
A^{Nb}, МГц	<i>A_z^{Nb}</i>	158 ± 10	147 ± 10	164 ± 10	166 ± 10
	<i>A_x^{Nb}</i>	595 ± 5	606 ± 5	604 ± 5	611 ± 5
	<i>A_y^{Nb}</i>	595 ± 5	606 ± 5	604 ± 5	611 ± 5
A^{F(1)}, МГц	<i>A_z^{F(1)}</i>	—	—	207 ± 10	172 ± 10
	<i>A_x^{F(1)}</i>	—	—	539 ± 5	447 ± 5
	<i>A_y^{F(1)}</i>	—	—	539 ± 5	447 ± 5
A^{F(2)}, МГц	<i>A_z^{F(2)}</i>	—	—	152 ± 10	126 ± 10
	<i>A_x^{F(2)}</i>	—	—	396 ± 5	327 ± 5
	<i>A_y^{F(2)}</i>	—	—	396 ± 5	327 ± 5

ожидать сильного эффекта $E \otimes e$, совмещенного с псевдоэффектом Яна–Теллера с участием возбужденных конфигураций. Это может привести к сильному тетрагональному искажению координационного куба и к смещению иона Nb⁴⁺ в нецентральное положение тетрагонального вида. В новых условиях основной дублет E_g расщепится на два синглета A_1 и B_1 , а возбужденный триплет T_{2g} расщепится на синглет B_2 и дублет E . Если последний окажется достаточно близко к основному синглету (A_1 или B_1), то его расщепление может оказаться энергетически выгодным. Однако наблюдать эффект такого расщепления методом ЭПР на основном орбитальном синглете можно только тогда, когда время жизни иона Nb⁴⁺ в состояниях расщепленного дублета E окажется намного больше периода электромагнитной волны в резонаторе спектрометра ($\tau \gg 10^{-11}$ с).

Что касается центров Nb⁴⁺(II), их тетрагональная симметрия объясняется присутствием в ближайшем окружении двух междоузельных ионов F_{int1}^- и F_{int2}^- , локализованных симметрично с двух сторон от иона Nb⁴⁺ в ближайших октаэдрических междоузлиях. Однако данные ЭПР свидетельствуют о том, что наборы параметров ССТВ с каждым из этих междоузельных ионов заметно

различаются. Следовательно ион Nb⁴⁺ в этих центрах оказался ближе к одному из F_{int1}^- или F_{int2}^- . Возможной причиной смещения иона Nb⁴⁺ в нецентральное положение является вибронное смешивание основной электронной конфигурации с возбужденными конфигурациями [5].

Рассмотрим вопрос об электронной структуре центров Nb⁴⁺(I) и Nb⁴⁺(II). Поскольку определенные нами значения компонент g -тензоров двух обнаруженных центров Nb⁴⁺($4d^1$) не сильно отличаются от величины g -фактора свободного электрона (2.0023), то есть основания утверждать, что основные орбитальные состояния этих центров являются орбитальными синглетами, расположенными на диаграмме уровней энергии далеко внизу от четырех возбужденных орбитальных уровней. Чтобы определить, какая орбитальная функция иона Nb⁴⁺ является основной в электронной структуре исследуемых центров Nb⁴⁺(I) и Nb⁴⁺(II), рассмотрим приближенные выражения для компонент g -тензоров [6] в трех наиболее вероятных случаях. При этом, из-за отсутствия подробной информации о лигандных взаимодействиях в исследуемых центрах, в этих выражениях рассмотрим лишь вклады функций иона Nb²⁺ в соответствующие молекулярные орбитали (МО). Весовые коэффициенты орбиталей $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} ,

$d_{3z^2-r^2}$, d_{yz} и d_{xz} в МО обозначим, соответственно, α , β , δ , γ_1 и γ_2 . Кроме того, будем рассматривать только константу спин-орбитального взаимодействия $4d^1$ -электрона без учета влияния кристаллического поля и орбитальной редукции (т.е. возьмем $\xi_d \approx 750 \text{ см}^{-1}$ [7]).

1. Основное орбитальное состояние $d_{x^2-y^2}$:

$$\begin{aligned} g_z &= 2.0023 - 8\alpha^2\beta^2\xi_d/\Delta_{xy}; \\ g_x &= 2.0023 - 2\alpha^2\gamma_2^2\xi_d/\Delta_{xz}; \\ g_y &= 2.0023 - 2\alpha^2\gamma_1^2\xi_d/\Delta_{yz}. \end{aligned} \quad (2)$$

2. Основное орбитальное состояние d_{xy} :

$$\begin{aligned} g_z &= 2.0023 - 8\alpha^2\beta^2\xi_d/\Delta_{x^2-y^2}; \\ g_x &= 2.0023 - 2\beta^2\gamma_2^2\xi_d/\Delta_{xz}; \\ g_y &= 2.0023 - 2\beta^2\gamma_1^2\xi_d/\Delta_{yz}. \end{aligned} \quad (3)$$

3. Основное орбитальное состояние $d_{3z^2-y^2}$:

$$\begin{aligned} g_z &= 2.0023; \quad g_x = 2.0023 - 6\delta^2\gamma_2^2\xi_d/\Delta_{xz}; \\ g_y &= 2.0023 - 2\delta^2\gamma_1^2\xi_d/\Delta_{yz}. \end{aligned} \quad (4)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Важными экспериментальными фактами данного исследования являются следующие: а) наличие суперсверхтонкой структуры (ССТС) в спектрах ЭПР центров $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$, в то время как в спектрах центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ ССТС не наблюдается; б) параллельные компоненты тензоров суперсверхтонкого взаимодействия (ССТВ) в центре $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ намного меньше перпендикулярных компонент; в) параллельные компоненты g -тензоров центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ больше величин перпендикулярных компонент.

Из факта (а) следует, что энергетические диаграммы центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ и $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ должны качественно отличаться друг от друга. Факт (б) указывает на то, что ион Nb^{4+} в центре $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ связан с двумя осевыми междоузельными ионами фтора $F_{\text{int}1}^-$ и $F_{\text{int}2}^-$ в основном π -связями, и, следовательно, орбитальное состояние $d_{3z^2-r^2}$ не является основным для этого центра. Неравенство соответствующих компонент тензоров ССТВ с $F_{\text{int}1}^-$ и $F_{\text{int}2}^-$ говорит об отсутствии центра симметрии в центре $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$.

Из факта (в) следует, что для обоих исследуемых центров наиболее предпочтительным явилось бы предположение о том, что их основному орбитальному состоянию удовлетворяет функция $d_{3z^2-r^2}$. Однако, как сказано выше, для центра $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ это предположение не подходит. Для

центра $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ функция $d_{3z^2-r^2}$ вполне может оказаться основной, тем более что по указанным выше причинам энергетическая диаграмма этого центра должна качественно отличаться от энергетической диаграммы центра $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$. Это отличие должно заключаться в принадлежности функций основных состояний этих центров к различным классам симметрии.

Считая в качестве основного орбитального уровня центров $\text{Nb}^{4+}(\text{I})$ уровень $d_{3z^2-r^2}$ и положив $\delta \approx \gamma_1 \approx \gamma_2 \approx 1$, находим оценочные величины энергетических интервалов до возбужденных уровней d_{xz} и d_{yz} при температуре 25 К: $\Delta_{xz} \approx 33000 \text{ см}^{-1}$ и $\Delta_{yz} \approx 31500 \text{ см}^{-1}$. Расположение уровней $d_{x^2-y^2}$ и d_{xy} по полученным данным определить невозможно.

Исходя из оценочных расчетов, выполненных на базе точечной модели кристаллического поля, наиболее вероятной функцией основного состояния центров $\text{Nb}^{4+}(\text{II})$ является $d_{x^2-y^2}$. В этом случае мы получаем, что уровень d_{xy} находится значительно выше орбитального дублета $E(d_{xz}, d_{yz})$, удаленного от основного уровня $d_{x^2-y^2}$ примерно на 10000 см^{-1} (напомним, что речь идет о порядках величин). Как следует из расчетов по точечной модели кристаллического поля, такая диаграмма может реализоваться только при смещении иона Nb^{4+} из центра координационного куба в одном из кристаллографических направлений $\langle 001 \rangle$. При этом он будет удаляться от междоузельного иона $F_{\text{int}1}^-$, но приближаться к $F_{\text{int}2}^-$. Измеренные параметры ССТВ именно это и демонстрируют.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hayes W. Crystals with the fluorite structure: electronic, vibrational and defect properties. Oxford: Clarendon Press, 1974. 414 p.
2. Dorenbos P. Mechanism of ionic transport in rare earth doped alkaline earth fluorides. Druk: Krips Repro Meppel. 1988. 169 p.
3. Уланов В.А., Зарипов М.М., Фазлижанов И.И. Аномалии в магнитных свойствах кластеров примесной меди в кристаллах фтористого бария // ФТТ. 2005. Т. 47. № 9. С. 1596.
4. Zhitetsev E.R., Zaripov R.B., Ulanov V.A. // Book of Abstracts of Intern. Conf. "Modern Development of Magnetic Resonance". (Kazan, 2016). P. 186.
5. Bersuker I.B. Electronic structure and properties of transition metal compounds/ Introduction to the theory. N.Y.: Wiley, 1996.
6. Mabbs F.E., Collison D. Electron paramagnetic resonance of d transition metal compounds. Elsevier Science Publishers, 1992. 1326 p.
7. Абрагам А., Блунд Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Т. 1. М.: Мир, 1972. 672 с.

Structure and parameters of magnetic interactions in Nb⁴⁺ impurity centers in the BaF₂ crystal: EPR data

V. A. Ulanov^{a, b, *}, R. B. Zaripov^b, R. R. Zainullin^a, R. I. Kalimullin^a

^aKazan State Power Engineering University, Kazan, 420066 Russia

^bZavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center of RAS, Kazan, 420029 Russia

*e-mail: ulvlad@inbox.ru

The structures and magnetic characteristics of two types of paramagnetic centers formed by Nb⁴⁺ ions ($4d^1$, $S = 1/2$) at the positions of Ba²⁺ cations were studied in BaF₂ crystals doped with niobium by EPR at a frequency 34196 MHz at temperatures of 25 and 300 K. In the Nb⁴⁺(I) centers, the Jan-Teller effect was realized on the main orbital doublet $E_g \otimes e_g$, which caused a strong tetragonal distortion of the coordination cube, and an additional weak orthorhombic distortion due to the Jan-Teller effect on the resulting excited doublet, $E \otimes b_1$. The Nb⁴⁺(II) centers are axial associates of the Nb⁴⁺ ion, which has replaced the Ba²⁺ cation, and two interstitial ions $F_{\text{int}1}^-$ and $F_{\text{int}2}^-$. In the resulting associates, the Nb⁴⁺ ion was displaced towards one of these interstitial fluorine ions. The values of the parameters of the Zeeman, hyperfine and superfine interactions in the detected centers are obtained. Their molecular structure is discussed.

УДК 535.32:535.14

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ СТРУКТУРЫ НАНОВОЛНОВОДА ИЗ LiNbO_3 С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ СВЕРХШИРОКОПОЛОСНЫХ БИФОТОНОВ В БЛИЖНЕМ ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ

© 2022 г. О. А. Ермишев¹, М. А. Смирнов¹, А. Ф. Хайруллин¹, Н. М. Арсланов¹, *¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Казанский квантовый центр”, Казанский национальный исследовательский технический университет имени А.Н. Туполева – КАИ, Казань, Россия

*E-mail: narkis@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Квантовые источники запутанных фотонных пар активно применяются в технологиях коммуникаций, процессинга и в биомикроскопии. Для квантовой биомикроскопии с целью реализации квантовых источников запутанных фотонных пар с высокими яркостью и скоростью двухфотонной генерации и надежным сигналом для флуоресценции образцов при низких уровнях интенсивности в ближней инфракрасной области, исследованы возможности использования нановолновода из ниобата лития (LiNbO_3) с управляемым профилем дисперсии и пространственным профилем поля. В результате моделирования и численных расчетов найдены оптимальные параметры нановолновода, обеспечивающие генерацию сверхширокополосных двухфотонных состояний в ближней инфракрасной области. Максимальная ширина спектра достигает ~ 180 ТГц для длины волны излучения вблизи 1.0 мкм.

DOI: 10.31857/S0367676522120109

ВВЕДЕНИЕ

Генераторы фотонных пар являются ключевыми элементами во многих современных активно разрабатываемых устройствах в области квантовых технологий, среди которых можно выделить квантовый повторитель [1], а также генераторы одиночных фотонов [2]. В настоящее время большой интерес представляют фотонные пары (бифотоны) с широкой частотной полосой спектра (десятки – сотни ТГц), которые часто называют широкополосными [3–5]. Широкая полоса спектра дает ряд преимуществ, так как позволяет увеличить количество оптических каналов связи на основе мультиплексирования с разделением по длине волны [6], использовать многоуровневое кодирование информации [7], улучшить чувствительность измерительных систем в метрологии [8]. Также широкополосные бифотоны находят широкое применение в литографии [9], квантовой томографии [11], микроскопии [10] и биомикроскопии [15].

В настоящее время существует достаточно большое количество способов генерации фотонных пар с широкой спектральной полосой. Наиболее распространенными являются способы, ос-

нованные на использовании волоконных микроструктурированных световодов [15], тонких нелинейных кристаллов, например ВВО (максимальная ширина спектра – до 144 ТГц) [3], кристаллов с периодическими (20 ТГц) [12] и апериодическими (до 40 ТГц) [4] поляризованными структурами.

Для биомикроскопии требуется создание двухфотонного источника, который совместит в себе не только большую яркость, широкий спектр и высокую скорость генерации фотонных пар, но и возможность контролировать параметры генерируемых фотонных пар в широком диапазоне длин волн в ближнем инфракрасном диапазоне [15], где уже могут быть активными маркеры и не поглощает вода. Перспективным подходом, позволяющим решать подобные задачи, являются генераторы фотонных пар на основе наноразмерных волноводов [13]. Возможность управлять их дисперсионными параметрами путем конструирования оптимальной структуры позволяет достичь высокой эффективности генерации фотонных пар при широком спектре двухфотонного излучения, что продемонстрировано, например, в работе [14], в которой путем моделирования

вблизи центральной длины волны 1550 нм была показана возможность генерации фотонных пар с шириной спектра 100 ТГц. Кроме того, такие генераторы могут быть интегрированы в нанофотонные чипы вместе с другими оптическими и электрооптическими устройствами, такими как модуляторы Маха-Цендера, детекторами, резонаторами, что позволяет значительно уменьшить размеры всей системы и открывает большие перспективы практического применения таких устройств [13]. Однако в работе [14] практически не был затронут вопрос оптимизации геометрии волновода и длины волны накачки для достижения максимальной ширины спектра бифотонов и минимальной длины волны фотонов в ближнем инфракрасном диапазоне частот, что очень актуально для двухфотонной микроскопии биологических объектов [15]. В нашей работе мы исследуем нанофотонные волноводные структуры из ниобата лития в ближнем инфракрасном диапазоне длин волн и находим оптимальные параметры геометрии волновода при которых возможно увеличение ширины спектра бифотонов до 177 ТГц.

ФАЗОВЫЙ СИНХРОНИЗМ В НАНОВОЛНОВОДЕ

Наиболее распространенным методом генерации фотонных пар является метод, основанный на явлении спонтанного параметрического рассеяния света: фотон накачки, распространяющийся в среде с квадратичной нелинейностью распадается на два фотона с меньшей энергией – сигнальный и холостой. Необходимым условием возникновения данного процесса является выполнение условий фазового синхронизма. Фазовый синхронизм фактически определяет спектральные и временные параметры генерируемых фотонных пар [2, 16, 17]. Существует множество способов достичь фазового синхронизма в нелинейных материалах. В данной работе нами был использован квазифазовый синхронизм (волновод с периодической поляризацией), ввиду его большой управляемости и высокой точности настройки [2].

Условие квазисинхронизма при генерации вырощенного двухфотонного состояния с центральной частотой ω_0 в общем случае принимает вид [14]:

$$\Delta k L = \left[k(2\omega_0) - k\left(\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2}\right) - k\left(\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2}\right) - \frac{2\pi}{\Lambda} \right] L, \quad (1)$$

где $k(2\omega_0)$ – волновой вектор поля накачки, $k\left(\omega_0 \pm \frac{\Delta\omega}{2}\right)$ – волновые векторы двухфотонного поля, Λ – период поляризации волновода, L –

общая длина структуры. Волновые векторы определяются выражением:

$$k(\omega) = \frac{n_{eff}(\omega)\omega}{c}, \quad (2)$$

где $n_{eff}(\omega)$ – эффективный показатель преломления. С учетом дисперсионных свойств волновода условие (1) запишется в виде [14]:

$$\Delta k L = \left[k(2\omega_0) - 2k(\omega_0) - \frac{2\pi}{\Lambda} \right] \times L - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L\beta_{2n}(\omega_0)}{(2n)!} \left(\frac{\Delta\omega}{2} \right)^{2n}, \quad (3)$$

где $\beta_{2n}(\omega_0) = \frac{d^{2n}}{d\omega^{2n}} k(\omega_0)$ – дисперсия четного порядка. Первое слагаемое выражения (3) можно уменьшить практически до 0 при правильном подборе периода домена Λ . Второе слагаемое определяется дисперсионными свойствами волновода, поэтому при проектировании волновода необходимо минимизировать дисперсию β_{2n} на центральной частоте генерируемых бифотонов ω_0 большего числа порядков ряда разложения. Это приведет к уширению возможного спектра, который будет ограничиваться только вкладом дисперсий высших порядков.

Для расчета дисперсии β_{2n} выполнено моделирование зависимости волновых чисел мод от частоты в различных структурах поперечного сечения волновода в программном пакете Comsol Multiphysics. На рис. 1а изображена конфигурация поперечного сечения волновода, которая исследовалась в данной работе с указанием всех размеров и материалов слоев. Мы варьировали следующие параметры: w – ширина верхней части выступа, h – ширина верхней части выступа, p – толщина слоя ниобата лития на подложке. Параметры подложки не менялись. Значение длины нановолновода $L = 5$ мм было выбрано как в работе [5] для уменьшения влияния граничных условий и поиск его минимального значения представляет отдельную задачу. Для решения уравнения Максвелла методом конечных элементов в частотной области и анализа мод поперечного электрического поля в волноводе был использован модуль волновой оптики Comsol Multiphysics, что позволило получить картину поперечного распределения моды электромагнитного поля любого порядка, а также определить для него параметры волнового вектора и эффективного показателя преломления. Для увеличения точности моделирования мы использовали автоматическое построение треугольной сетки конечных элементов с изменяемыми максимальными и минимальными значениями в различных областях и которые мы подстраивали до получе-

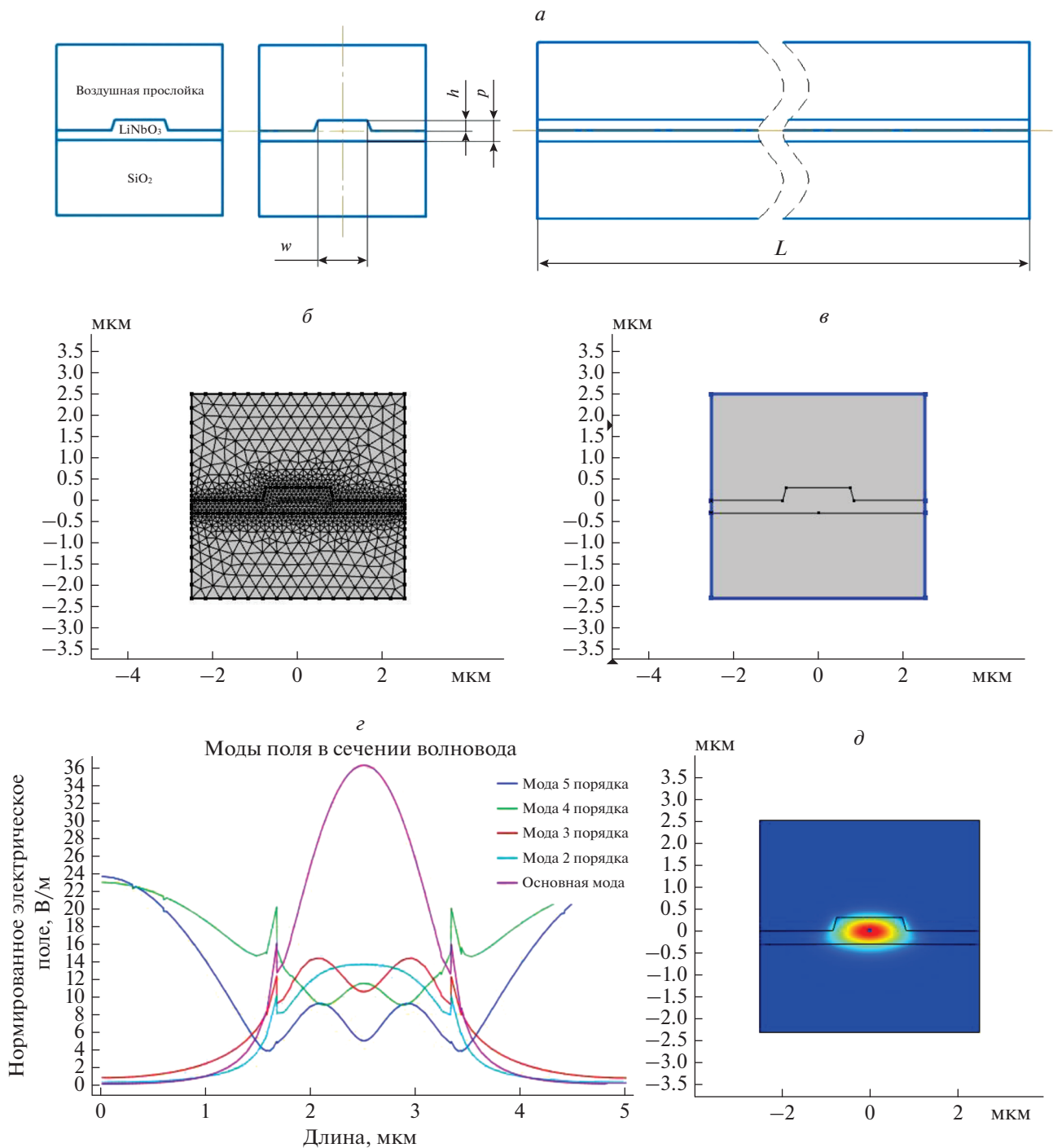


Рис. 1. Модовый анализ структуры в программе Comsol Multiphysics. Общий вид модели с указанием размеров (а). Значение длины $L = 5$ мм было выбрано аналогично указанному в работе [5], параметры w, h, p варьировались при построении поля. Пример сетки, построенной для модели в программе (б). Обозначение граничных условий модели (в). Решение уравнений для мод первых 5 порядков на длине волны 1550 нм (г). Пример распределения поля основной моды (д).

ния стабильных значений. Пример сетки, использованной в моделировании показан на рис. 1б. Для ограничения расчетов на больших расстояниях от поперечного сечения мы исполь-

зовали приближение так называемого идеально согласованного слоя, который не отражает электромагнитных волн (граничный слой модели показан на рис. 1в). Модовый анализ электромагнитного

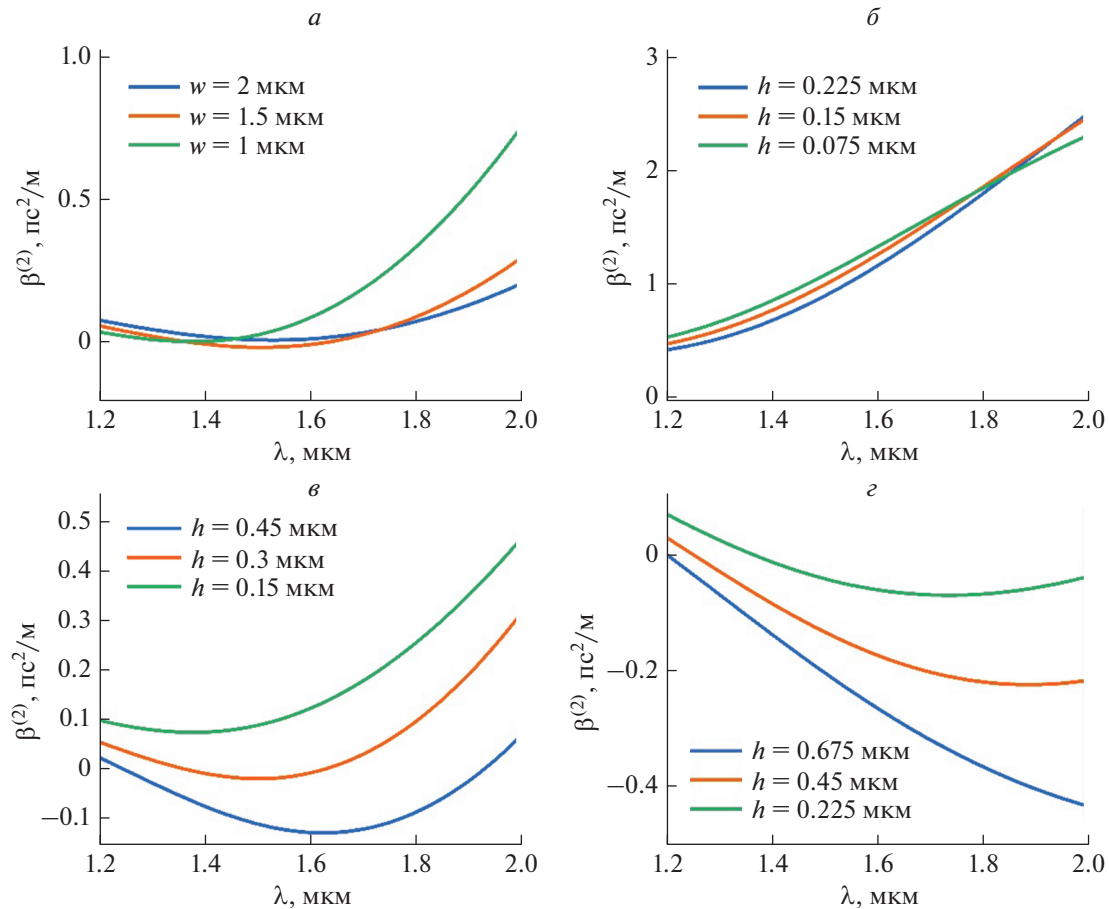


Рис. 2. Дисперсионные кривые для различных геометрических параметров волновода: для трех значений ширины w (а), для трех значений высоты h при фиксированном значении $p = 0.3$ мкм (б), для трех значений высоты h при фиксированном значении $p = 0.6$ мкм (в), для трех значений высоты h при фиксированном значении $p = 0.9$ мкм (г).

поля проводился в диапазоне длин волн 400–3000 нм. Пример результата автоматического решения уравнения для мод первых 5 порядков на длине волны 1550 нм показан на рис. 1г и 1д, где первая, вторая и третья моды оказываются локализованными в сердцевине волновода, а для четвертой и пятой моды параметры волновода уже не удовлетворяют условиям локализации и распространения этих мод. На основе построенной модели и численного расчета дисперсионной зависимости эффективного показателя преломления $n_{eff}(\omega)$

далее была рассчитана дисперсия мод $\beta^{(2)}$ для анализа спектральных параметров генерируемых фотонных пар с использованием выражений (1)–(3).

ДИСПЕРСИЯ ОСНОВНОЙ МОДЫ НАНОВОЛНОВОДА

На рис. 2а показаны кривые дисперсии групповых скоростей основной моды нановолновода $\beta^{(2)}$ для трех различных значений ширины волно-

вода $w = 1, 1.5$ и 2 мкм. Увеличение ширины волновода смещает минимум кривой $\beta^{(2)}$ в область больших длин волн. При длине волны 1400 нм дисперсия близка к нулю у нановолновода с шириной $w = 1$ мкм, при увеличении ширины волновода до 1.5 мкм минимум дисперсии смещается в область 1500 нм в соответствии с [14]. Дальнейшее увеличение значения w приводит к сдвигу кривой в правую часть и исчезновению нулей дисперсии.

Для учета влияния высоты нановолновода были проведены расчеты дисперсионных и спектральных свойств мод при различных значениях высоты h для трех значений толщины слоя ниобата лития p . Для $p = 0.3$ мкм дисперсионные кривые изображены на рис. 2б в диапазоне длин волн 1200–2000 нм. Для таких параметров нановолновода нули дисперсии отсутствуют при любых значениях h . При $p = 0.6$ мкм (рис. 2в) и увеличении h дисперсионная кривая смещается вниз и при этом при $h = 0.15$ мкм нули дисперсии вообще отсутствуют, при $h = 0.3$ мкм появляется один нуль

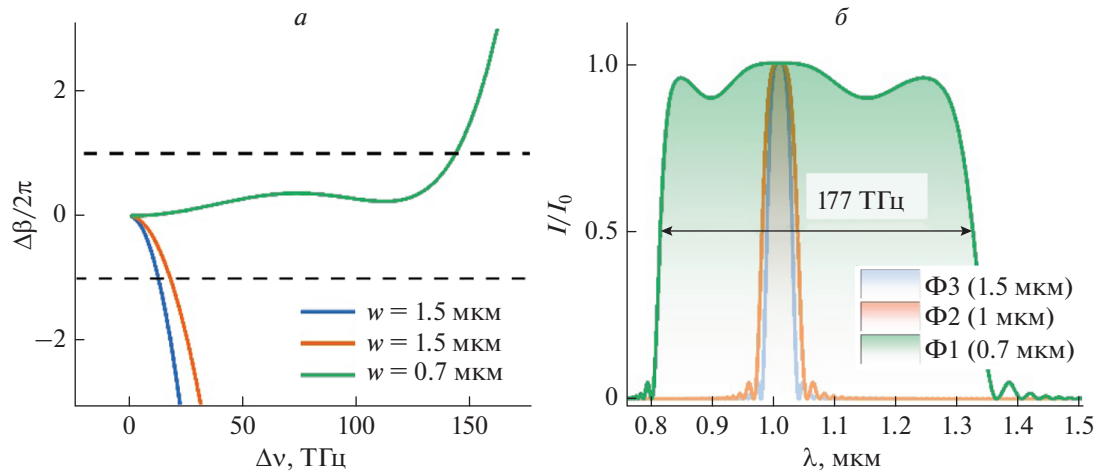


Рис. 3. Фазовая расстройка (а) и форма спектра бифотонов (б) на длине волны вблизи 1010 нм.

дисперсии, который приходится на длину волны примерно 1550 нм, а при $h = 0.45$ мкм имеется уже два нуля дисперсии на длинах волн примерно 1250 и 1900 нм.

При дальнейшем увеличении p кривая дисперсии начинает переходить в отрицательную область. В случае $p = 0.9$ мкм (рис. 2г) увеличение h аналогично предыдущим случаям приводит к смещению дисперсионной кривой вниз по вертикали, что в свою очередь приводит к смещению нуля дисперсии в область меньших длин волн и остается только один нуль дисперсии в исследуемом диапазоне длин волн.

Таким образом, чтобы сместить нуль дисперсии в сторону меньших длин волн, необходимо: уменьшить ширину выступа w , увеличить высоту выступа h . Если при этом значение h становится слишком близко к p , необходимо увеличить p и выполнить пересчет параметров w и h . Для того, чтобы сместить нуль дисперсии в область больших длин волн, необходимо выполнить обратные действия.

Методом, описанным выше, мы выполнили расчет дисперсионных и спектральных свойств для структуры с различными параметрами w в диапазоне 0.4–2 мкм для поиска максимальной ширины спектра бифотонов. Для демонстрации результатов мы приводим расчеты для нановолновода со следующими параметрами: $w = 0.7, 1, 1.5$ мкм, $h = 0.8$ мкм, $p = 1$ мкм, центральная длина волны генерируемых фотонов – 1010 нм. На рис. 3а изображены кривые фазовой расстройки, на рис. 3б – форма спектра бифотонов для трех различных значений w . При параметрах структуры $w = 0.7$ мкм, $h = 0.8$ мкм, $p = 1$ мкм, центральная длина волны генерируемых фотонов – 1010 нм получена максимальная ширина спектра бифотонов – 177 ТГц (см рис. 3б). Полученная макси-

мальная ширина спектра бифотонов превышает величину 100 ТГц, указанную в работе [14]. При этом отклонение ширины верхней части выступа от $w = 0.7$ мкм может приводить к значительному уменьшению ширины спектра бифотонов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было проведено моделирование и численный анализ волноводной наноструктуры на основе ниобата лития, предназначенной для генерации на фотонных пар на различных длинах волн. Было проанализировано поведение дисперсионных свойств оптической моды при изменении геометрических параметров нановолновода. Найдены оптимальные параметры, которые могут позволить получить фотонные пары с очень протяженной частотной полосой спектра шириной на центральной длине волны в ближней инфракрасной зоне (на длине волны 1.0 мкм ширина спектра достигает ширины ~ 180 ТГц). Полученные результаты могут быть полезны в нелинейной микроскопии биологических объектов, использующих двухфотонное поглощение.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки России (рег. номер НИОКТР 121020400113-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liu X., Hu J., Li Z.-F. et al. // Nature. 2021. V. 594. No. 7861. P. 41.
2. Migdall A., Polyakov S., Fan J., Bienfang J.C. // Exp. Meth. Phys. Sci. 2013. V. 45. P. 1.
3. Katamadze K.G., Borshchevskaya N.A., Dyakonov I.V. et al. // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. No. 2. Art. No. 023812.
4. Chekhova M.V., Germanskiy S., Horoshko D.B. et al. // arXiv: 1710.08330v2 [quant-ph]. 2017.

5. *Javid U.A., Ling J., Staffa J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2021. V. 127. No. 18. Art. No. 183601.
6. *Lim H.C., Akio Y., Hidemi T., Kazuro K.* // Opt. Express. 2008. V. 16. No. 26. Art. No. 22099.
7. *Bessire B., Bernhard C., Feurer T., Stefanov A.* // New J. Phys. 2014. V. 16. Art. No. 033017.
8. *Giovannetti V., Lloyd S., MacCone L.* // Nature Photon. 2011. V. 5. No. 4. P. 222.
9. *Boto A.N., Kok P., Abrams D.S. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. No. 13. P. 2733.
10. *Dayan B., Péér A., Friesem A.A., Silberberg Y. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. No. 2. Art. No. 023005.
11. *Abouraddy A.F. Nasr M.B., Saleh B.E.A. et al.* // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. No. 5. P. 6.
12. *Bisht N.S., Shimizu R.* // J. Opt. Soc. Amer. B. 2015. V. 32. No. 4. P. 550.
13. *Zhu D., Shao L., Yu M. et al.* // Adv. Opt. Photonics. 2021. V. 12. No. 2. P. 242.
14. *Javid U.A., Ling J., Staffa J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2021. V. 127. No. 18. Art. No. 183601.
15. *Желтиков А.М., Скалли М.О.* // УФН. 2020. Т. 190. № 7. P. 749; *Zheltikov A.M., Scully M.O.* // Phys. Usp. 2020. V. 63. No. 7. P. 698.
16. *Калачев А.А.* Спонтанное параметрическое рассеяние и задачи квантовой информатики: учеб.-метод. пособ. Казань: Казан. университет, 2012.
17. *Клышко Д.Н.* Фотоны и нелинейная оптика. М.: Наука, 1980. 254 с.

Optimization of the parameters of the structure of a LiNbO₃ nanowaveguide with periodic polarization for the generation of ultrabroadband biphotons in the near infrared range

O. A. Ermishev^a, M. A. Smirnov^a, A. F. Khairullin^a, N. M. Arslanov^{a, *}

^a *Kazan National Research Technical University, Kazan, 420111 Russia*

^{*}*e-mail: narkis@yandex.ru*

To generate entangled photon pairs with a high brightness and two-photon generation rate, providing a reliable signal for fluorescence of samples at low intensity levels in the near-infrared region we have investigated the possibilities of a lithium niobate (LiNbO₃) nanowaveguide with a controlled dispersion profile and a spatial field profile. As a result of modeling and numerical calculations, optimal parameters of the nanowaveguide were found that ensure the generation of ultra-wide-band two-photon states in the near infrared region. The maximum width of the spectrum reaches ~180 THz for a wavelength of radiation near 1.0 microns.

УДК 535.32:535.14

НЕАДИАБАТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ БЫСТРОЙ КВАНТОВОЙ ПАМЯТИ НА АТОМНО-РЕЗОНАТОРНОЙ СИСТЕМЕ, РЕАЛИЗУЕМЫЙ ОПТИМАЛЬНЫМ ВКЛЮЧЕНИЕМ КОНТРОЛИРУЮЩЕГО ПОЛЯ

© 2022 г. Ю. А. Харламова¹, Н. М. Арсланов¹, С. А. Моисеев¹, *

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Казанский квантовый центр”, “Казанский национальный исследовательский технический университет имени А.Н. Туполева – КАИ”, Казань, Россия

*E-mail: samoi@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Найден оптимальный плавный режим включения контролирующего поля, обеспечивающий высокую эффективность неадиабатической квантовой памяти в рамановской схеме взаимодействия фотона с трехуровневым атомом в высокодобротном резонаторе. Рассматриваются предложения по улучшению базовых параметров рассматриваемой квантовой памяти при использовании реалистичных экспериментальных параметров.

DOI: 10.31857/S0367676522120158

ВВЕДЕНИЕ

Для квантовых сетей, позволяющих выполнять распределенные квантовые вычисления, необходима передача кодируемых квантовых состояний между сетевыми узлами, что успешно реализуется, используя потоки фотонных кубитов [1–4]. Выполнение разнообразных быстрых операций с фотонными кубитами является актуальной задачей квантовых сетей, решение которой возможно при использовании интегральных волноводных систем. Использование квантовой памяти в таких интегральных системах существенно расширяет возможности квантового процессинга с фотонными кубитами. В качестве квантовой памяти могут использоваться высокодобротные резонаторы с одиночными резонансными атомами, что открывает возможность выполнения дополнительных квантовых операций, используя долгоживущие квантовые состояния атома [5, 6].

Представляет интерес атомно-резонаторная квантовая память, в которой сопоставимы по величине постоянные взаимодействия атома с фотоном в резонаторе и резонатора с внешним волноводом, при которых реализуется максимальная скорость выполнения операций с однофотонными полями. Кроме того, в быстрой квантовой памяти сильнее подавляются эффекты релаксации и необратимые потери в резонаторе, что облегчает точность реализации квантовых операций. К настоящему времени получены обнадеживающие результаты по реализации квантовой памяти на атоме в резонаторе в условиях быстрого неадиабатического взаимодействия с сигнальным фо-

тоном [7–9]. Однако эффективность продемонстрированных протоколов быстрой квантовой памяти пока не превосходит 9% с учетом релаксации и потерь резонатора, и 63% в условиях слабой релаксации и минимальных потерь резонатора [8]. Достижение более высокой практически значимой эффективности такой квантовой памяти остается актуальной проблемой, решению которой посвящается настоящая работа.

Мы разрабатываем протокол высокоэффективной быстрой квантовой памяти на трехуровневом атоме в высокодобротном резонаторе. Ранее нами было показано [10], что использование оптимальной временной формы управляющего лазерного импульса может увеличить эффективность переноса фотонного волнового пакета на долгоживущие состояния атома в разрабатываемом протоколе квантовой памяти практически до 100%. Однако найденное аналитическое решение для временной формы контролирующего поля является сложным для практической реализации и требует дальнейшего совершенствования разрабатываемого протокола квантовой памяти, с поиском более плавного включения контролирующего поля.

ПРИНЦИПИАЛЬНАЯ СХЕМА И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Возможная интегрально-волноводная схема рассматриваемой квантовой памяти изображена на рис. 1. Оптический волновод переходит в на-нофотонный резонатор, настроенный на частоту

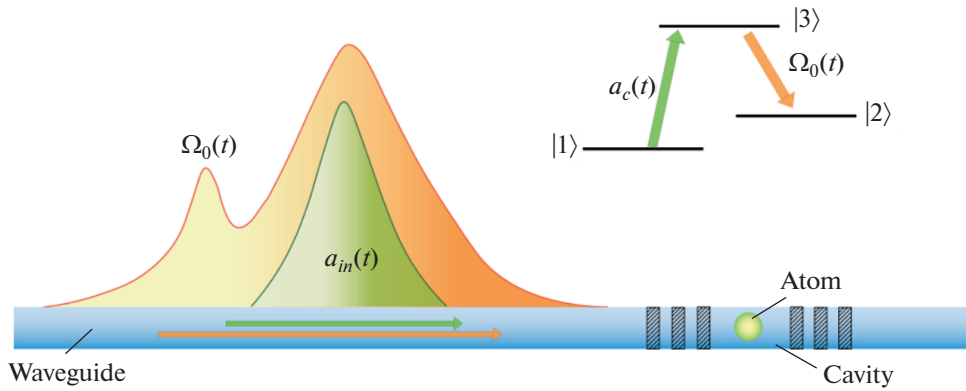


Рис. 1. Принципиальная схема протокола быстрой квантовой памяти: управляющее поле Ω_0 и фотонный волновой пакет $a_{in}(t)$ распространяются по волноводу и взаимодействуют с атомом через моду резонатора a_c . Управляющее поле Ω_0 обеспечивает перевод оптического возбуждения атома на его долгоживущее состояние $|2\rangle$. На вставке показаны атомные состояния и квантовые переходы.

ω_{31} оптического перехода $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ атома, которая совпадает с несущей частотой фотонного волнового пакета. Частота контролирующего поля совпадает с частотой ω_{32} резонансного атомного перехода 2–3 и отстроена от частоты нанофотонного резонатора. В этом случае контролирующее поле будет проходить из волновода через нанофотонный резонатор, не испытывая отражения [11]. Учитывая геометрию нанофотонного резонатора, контролирующее поле может подаваться на атом не по волноводу, под некоторым углом к оси нанорезонатора. В качестве трехуровневого атома может быть использован редкоземельный ион, обладающий большим временем жизни оптической и спиновой когерентности [12]. Неадиабатическое взаимодействие фотона с атомом в высокодобротном резонаторе описывается Гамильтонианом:

$$H = H_a + H_c + H_f + V_{a\Omega} + V_{ac} + V_{fc}, \quad (1)$$

где $H_a = \sum_{m=2}^3 \hbar\omega_{a1}\hat{P}_{mm}$ – гамильтониан трехуровневого атома (ω_{a1} – частота атомного перехода

$|1\rangle \leftrightarrow |m\rangle$), $H_c = \hbar\omega_c\hat{a}_c^+\hat{a}_c$ – гамильтониан моды резонатора (ω_c – частота резонатора), $H_f = \int_0^\infty d\omega\hbar\omega\hat{a}_\omega^+\hat{a}_\omega$ – Гамильтониан волноводной моды, $V_{a\Omega} = \hbar\{\Omega_0(t)\hat{P}_{32}e^{i[\omega_{32}t+\varphi(t)]} + h.c.\}$ – Гамильтониан взаимодействия атома с контролирующим лазерным полем, характеризующимся частотой Раби $\Omega_0(t)$ и фазой $\varphi(t)$ поля, связывающего атомные состояния $|2\rangle$ и $|3\rangle$, $V_{ac} = \hbar g(\hat{a}_c\hat{P}_{31} + \hat{a}_c^+\hat{P}_{13})$ – Гамильтониан взаимодействия атома и резонатора (g – константа связи взаимодействий атом-мода резонатора) и $V_{fc} = \hbar\int_0^\infty d\omega(g_{c\omega}\hat{a}_\omega^+\hat{a}_c + h.c.)$ – Гамильтониан связи между модой резонатора и волноводными модами, где $g_{c\omega}$ – константа взаимодействия моды резонатора и волноводной моды. Поведение исследуемой квантовой системы описывается волновой функцией

$$|\Psi(t)\rangle = \{a_c(t)\hat{a}_c^+ + b(t)\hat{P}_{21} + S(t)\hat{P}_{31} + \int d\omega f_\omega(t)\hat{a}_\omega^+\}|1\rangle \otimes |\emptyset\rangle. \quad (2)$$

Предполагается, что однофотонный волновой пакет передается через волновод в высокодобротный резонатор, содержащий трехуровневый атом, находящийся в основном состоянии $|1\rangle$ (рис. 1) так, что $|\int d\omega|f_\omega(t \rightarrow -\infty)|^2 = 1$ с начальными амплитудами $a_c(t \rightarrow -\infty) = S(t \rightarrow -\infty) = b(t \rightarrow -\infty) = 0$. Используя (2) в уравнении Шрёдингера с Гамильтонианом (1), получаем уравнения для медленно меняющихся амплитуд:

$$\frac{d}{dt}S = -(i\Delta_s + \gamma_s)S - i\Omega_0(t)e^{-i\varphi(t)}b - ig_a a_c, \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt}b = -(i\Delta_b + \gamma_b)b - i\Omega_0(t)e^{i\varphi(t)}S, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt}a_c = -\left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2} + \kappa_{loss}\right)a_c - igS + \sqrt{\kappa}a_{in}, \quad (5)$$

где $a_c = a_c(t)e^{i\omega t}$, $S = S(t)e^{i\omega t}$, $b = b(t)e^{i(\omega_2 - \omega)t}$, $a_{in} = a_{in}(t)e^{i\omega t} = -i\frac{g_{c\omega}}{\sqrt{\kappa}}e^{i\omega t}\int d\omega f_\omega(t_0)e^{i\omega(t-t_0)}$, $\int dt a_{in}(t)a_{in}^*(t) = 1$, $\kappa = 2\pi|g_{c\omega}|^2$, $\Delta_s = \omega_{31} - \omega$, $\Delta_b = (\omega_{21} + \omega_\Omega - \omega)$, $\Delta_c = \omega_c - \omega$, для более общего анализа также вводятся феноменологические

константы атомного затухания γ_s, γ_b и затухание в резонаторе κ_{loss} .

Входной импульс представляет собой импульс

гауссовой формы: $a_{in}(t) = \sqrt{\frac{\Delta_f}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(\Delta_f t)^2}{2}}$, где Δ_f – спектральная ширина волнового пакета сигнального фотона. При решении дифференциального уравнения первого порядка для частоты Раби $\Omega_0(t)$, полученного из системы уравнений (3)–(5) для случая пренебрежимо слабой релаксации $\gamma_{s,b}t \ll 1$, отсутствия потерь в резонаторе $\kappa_{loss} = 0$ и точных резонансов $\Delta_{s,b,c} = 0$ находим решения для частоты Раби и населенности долгоживущего уровня в условиях отсутствия отражения фотона от резонатора:

$$\Omega_0(t) = \frac{2g^2 + \Delta_f^2(-2 + \kappa t + 2\Delta_f^2 t^2)}{\sqrt{c(1 + \text{Erf}(\Delta_f t))e^{\Delta_f^2 t^2} - 4g^2 - (\kappa + 2\Delta_f^2 t)^2}}, \quad (6)$$

$$|b(t)|^2 = \frac{(2g^2 a_c(t) + \kappa a_c'(t) - 2\sqrt{\kappa} a_{in}'(t) + 2a_c''(t))^2}{4g^2 \Omega_0^2(t)}, \quad (7)$$

где $c = 2\sqrt{\pi}g^2\kappa/\Delta_f$ определяется из начального условия $|b(-\infty)|^2 = 0$.

Отметим, что решение (7) с учетом $|S(t \rightarrow \infty)|^2 \rightarrow 0$, $|a_c(t \rightarrow \infty)|^2 \rightarrow 0$ дает следующее поведение для вероятности сохранения фотонного пакета в резонаторе с атомом:

$$P_{a+c}(\Delta_f, t) = |b(t)|^2 + |S(t)|^2 + |a_c(t)|^2 = \frac{1}{2}(1 + \text{Erf}(\Delta_f t)) \quad (8)$$

для полной вероятности получить возбуждение в моде атом + резонатор. Таким образом, мы получаем $|b(t \rightarrow \infty)|^2 \rightarrow 1$, что показывает эффективное сохранение фотона в долгоживущем атомном состоянии $|2\rangle$ к концу взаимодействия.

ПАРАМЕТРЫ ОПТИМИЗАЦИИ КОНТРОЛИРУЮЩЕГО ПОЛЯ

Условия согласования (отсутствия отражения фотона) рассматриваемого протокола памяти справедливы только при определенных параметрах взаимодействия. Временная динамика контролирующего лазерного поля $\Omega_0(t)$ для некоторых параметров взаимодействия может иметь сложное поведение – принимать большие значения и затем резко спадать за короткое время. Такие контролирующие импульсы сложно генериро-

вать в реальных экспериментах. В реальных условиях управляющее лазерное поле можно представить в виде $\Omega(t) = F(t)\Omega_0(t)$, где $F(t)$ – функция плавно включающая взаимодействие, которую мы приемем в виде $F^2(t) = P_{a+c}(\Delta_{f2}, t - t_2)$, где Δ_{f2}, t_2 – ширина и время включения передаточной функции соответственно – подлежащие определению. Данный выбор функции включения мотивируется выбором схожей временной асимптотики. Важно найти значения параметров Δ_{f2}, t_2 , при которых возможно эффективное сохранение фотона на долгоживущий уровень атома.

Путем численного моделирования было найдено, что $\Delta_{f2} = 3g$ является близким к оптимальному выбору скорости включения контролирующего поля. Также было показано, что оптимальным является следующее соотношение для параметров постоянной связи κ , которая должна в несколько раз превосходить постоянную связи g и ширину спектра Δ_f фотонного волнового пакета [10]. Ниже мы изучаем реализацию оптимального включения для подобных параметров системы ($\kappa \approx 3g$, $\Delta_f \approx 0.5g$). При этом приемлемая плавность функции включения реализуется для $\Delta_{f2} \approx \kappa$.

На рис. 2а приведены результаты расчетов эффективности переноса фотонного волнового пакета на долгоживущий уровень атома в зависимости от времени включения t_2 функции $P_{a+c}(\Delta_{f2}, t - t_2)$ при $\Delta_f = 0.529$, $\kappa = 3.35$, $g = 1$, $\Delta_{f2} = \kappa$. В общем случае контролирующее поле $\Omega(t)$ имеет двугорбый характер, что реализуется при раннем времени включения $t_2 < -3$. С увеличением t_2 первый максимум $\Omega(t)$ исчезает при $t_2 \cong -3$. На рис. 2б представлено поведение переноса состояния фотона на атомные состояния, вероятности возбуждения атома на различные состояния и моды резонатора для момента включения $t_2 \cong -3$. При этом эффективность памяти остается довольно высокой ($|b|^2 = 0.9995$), что достаточно для выполнения квантовых алгоритмов и проведения процедуры коррекции ошибок. Асимптотический режим поведения контролирующего поля адаптирован к временной форме фотонного волнового пакета, что обеспечивает однонаправленный перенос фотона на атомные состояния без отражения в волновод.

Дальнейшее увеличение времени включения t_2 приводит к существенному укорочению переднего фронта контролирующего поля, что сопровождается уменьшением эффективности квантовой памяти. Резкий спад эффективности имеет место при времени включения $t_2 > -1$ ($|b|^2 = 0.9795$ при $t_2 = -1$). Таким образом, мы показываем, что

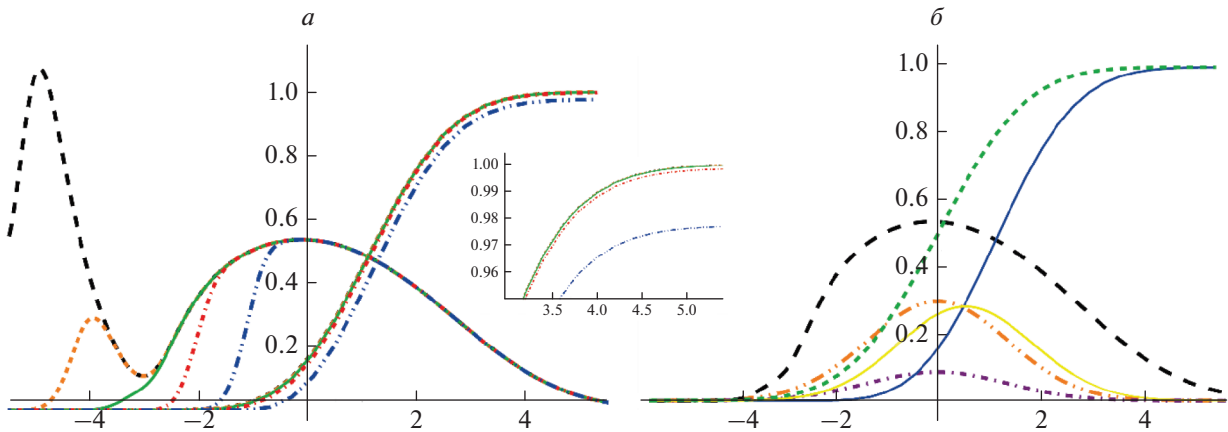


Рис. 2. Поведение внешнего управляющего поля $\Omega(t)$ и $|b(t)|^2$ в зависимости от времени $t \in (t_0, t_1)$ при $\Delta_f = 0.529$, $\kappa = 3.35$, $g = 1$, $\Delta_{f2} = 3$ и разным времени включения t_2 : 1) $t_2 = -5$, $\Omega^{(1)}$ (черная штриховая линия), $|b^{(1)}(t_1)|^2 = 0.9997$, 2) $t_2 = -4$, $\Omega^{(2)}$ (оранжевая пунктирная линия), $|b^{(2)}(t_1)|^2 = 0.9996$, 3) $t_2 = -3$, $\Omega^{(3)}$ (зеленая сплошная линия), $|b^{(3)}(t_1)|^2 = 0.9995$, 4) $t_2 = -2$, $\Omega^{(4)}$ (красная штрих-пунктирная линия), $|b^{(4)}(t_1)|^2 = 0.9981$, 5) $t_2 = -1$, $\Omega^{(5)}$ (синяя двойная штрих-пунктирная линия), $|b^{(5)}(t_1)|^2 = 0.9768$ (а). Поведение системы: входящего поля $a_{in}^2(t)$ (оранжевая двойная штрих-пунктирная линия), поля в резонаторе $|a_c(t)|^2$ (фиолетовая штрих-пунктирная линия), управляющее поле $\Omega(t)$ (черная пунктирная линия), возбужденная мода $|S(t)|^2$ состояния $|3\rangle$ атома (желтая сплошная линия), возбужденная мода $|b(t)|^2$ долгоживущего уровня атома (синяя сплошная линия) и вероятность возбуждения системы атом + резонатор $|b(t)|^2 + |S(t)|^2 + |a_c(t)|^2$ (зеленая пунктирная линия). Параметры: $\Delta_f = 0.529$, $\kappa = 3.35$, $g = 1$, $\Delta_{f2} = 3$, $t_2 = -3$ (б).

можно в значительной степени изменять включение взаимодействия контролирующего лазерного излучения, делая его достаточно плавным, не ослабляя существенно эффективность сохранения состояния фотона на долгоживущее состояние атома.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя аналитическое решение [10], предложен оптимальный режим включения контролирующего лазерного поля для быстрого и эффективного сохранения фотонного волнового пакета на долгоживущем уровне трехуровневого атома в высокочастотном резонаторе. Для предложенного режима показана возможность выбора оптимального времени и скорости включения контролирующего поля, при котором контролирующее поле приобретает вид импульса с плавным передним и задним фронтом, обеспечивающего высокую эффективность для быстрой квантовой памяти волнового пакета фотона с гауссовым временным профилем. Рассмотренная схема быстрой квантовой памяти может быть реализована в интегральной волноводной системе с нанопотонным резонатором.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kimble H.* // Nature. 2008. V. 453. P. 1023.
2. *Xu F., Ma X., Zhang Q. et al.* // Rev. Mod. Phys. 2020. V. 92. Art. No. 025002.
3. *Gleim A.V., Egorov V.I., Nazarov Yu.V. et al.* // Opt. Express. 2016. V. 24. P. 2619.
4. *Bannik O.I., Moiseev E.S.* // Opt. Express. 2021. V. 29. P. 38858.
5. *Wehner S., Elkouss D., Hanson R.* // Science. 2018. V. 362. P. 1.
6. *Reiserer A., Rempe G.* // Rev. Mod. Phys. 2015. V. 87. Art. No. 1379.
7. *Dilley J., Nisbet-Jones P., Shore B.W. et al.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. Art. No. 023834.
8. *Giannelli L., Schmit T., Calarco T. et al.* // New J. Phys. 2018. V. 20. Art. No. 105009.
9. *Macha T., Urunuela E., Alt W. et al.* // Phys. Rev. A. 2020. V. 101. Art. No. 053406.
10. *Arslanov N.M., Moiseev S.A.* // J. Russ. Laser Res. 2021. V. 42. P. 378.
11. *Li M., Liang H., Luo R. et al.* // Optica. 2019. V. 6. No. 7. P. 860.
12. *Zhong T., Kindem J.M., Bartholomew J.G. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2018. V. 121. Art. No. 183603.

Non-adiabatic regime of fast quantum memory on an atomic resonator system implemented by optimal turn on of the control field

Yu. A. Kharlamova^a, N. M. Arslanov^a, S. A. Moiseev^{a, *}

^a *Kazan National Research Technical University, Kazan, 420111 Russia*

**e-mail: samoi@yandex.ru*

An optimal smooth mode of turning on the controlling field is found, which ensures high efficiency of non-adiabatic quantum memory in the Raman scheme of interaction of a photon with a three-level atom in a high-Q resonator. Proposals are considered to improve the basic parameters of the considered quantum memory using realistic experimental parameters.

Физика авроральных явлений

Редактор тематического выпуска
докт. физ.-мат. наук **А. Г. Демехов**

УДК 523.31.853:523.62.726

УТРЕННИЕ ГЕОМАГНИТНЫЕ БУХТЫ В ПОЛЯРНЫХ ШИРОТАХ И ИХ МАГНИТОСФЕРНЫЕ ИСТОЧНИКИ

© 2022 г. Н. Г. Клейменова¹, *, И. В. Дэспирак², А. А. Любчик²,
Л. М. Мальшева¹, Л. И. Громова³, С. В. Громов³

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт физики Земли имени О.Ю. Шмидта Российской академии наук”, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
“Полярный геофизический институт”, Апатиты, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн имени Н.В. Пушкова
Российской академии наук”, Москва, Россия

*E-mail: ngk1935@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследованы утренние полярные бухтообразные магнитные возмущения на широтах выше 70° MLAT, наблюдаемые при отсутствии одновременной геомагнитной активности на более низких широтах. Показано, что причиной таких возмущений может быть пространственная экспансия на утреннюю сторону как ночных суббурь, так и дневных полярных магнитных бухт, а также генерация конвективных бухт. Наиболее типичным является одновременное развитие ночных суббурь и конвективных полярных бухт. Показано, что отдельные события утренних полярных магнитных бухт, наблюдающиеся во время развития ночных суббурь, могут сопровождаться среднеширотными утренними положительными магнитными бухтами.

DOI: 10.31857/S0367676522120171

ВВЕДЕНИЕ

Бухтообразные магнитные возмущения, наблюдаемые в вечернее и ночное время на широтах выше 70° MLAT (в дальнейшем эти широты будем называть “полярными”) в 70-х годах прошлого века называли “суббурами на сжатом овале” [1–4], поскольку эти суббури обычно регистрируются в слабовозмущенных геомагнитных условиях, когда авроральный овал поджат к полюсу. Затем в работах [5–8], было предложено такие высокоширотные возмущения, сопровождаемые типичным для суббури комплексом геофизических явлений, называть “полярными суббурами”. “Полярные суббури” наблюдаются при низкой скорости солнечного ветра после прохождения высокоскоростного рекуррентного потока или во время медленного потока солнечного ветра, а также на поздней восстановительной фазе магнитной бури [8, 9].

В то же время, как показал наш анализ высокоширотных наблюдений на скандинавской сети магнитометров IMAGE, отрицательные магнитные бухты в полярных широтах могут наблюдаться не только в вечернее и ночное время, но и

утром в предполуденные часы. Если исследованию вечерних “полярных суббурь” посвящен целый ряд работ, например, [1–8], то утренние полярные бухты еще практически не изучены.

Целью данной работы является исследование пространственных особенностей и возможных магнитосферных источников утренних полярных отрицательных бухтообразных магнитных возмущений (далее “полярных магнитных бухт”), наблюдаемых на скандинавской сети магнитометров IMAGE на геомагнитных широтах выше 70° MLAT (рис. 1a).

МАГНИТНЫЕ БУХТЫ В УТРЕННЕМ СЕКТОРЕ ПОЛЯРНЫХ ШИРОТ

На рис. 1a показано географическое положение станций сети IMAGE (<http://space.fmi.fi/image/>). Обсуждаемые в данной работе полярные магнитные бухты наблюдались на архипелаге Шпицберген в отсутствие геомагнитных возмущений на материковых станциях. Промежуточной станцией между архипелагом и материком является станция Bear Island (BJN, 71.4° MLAT)

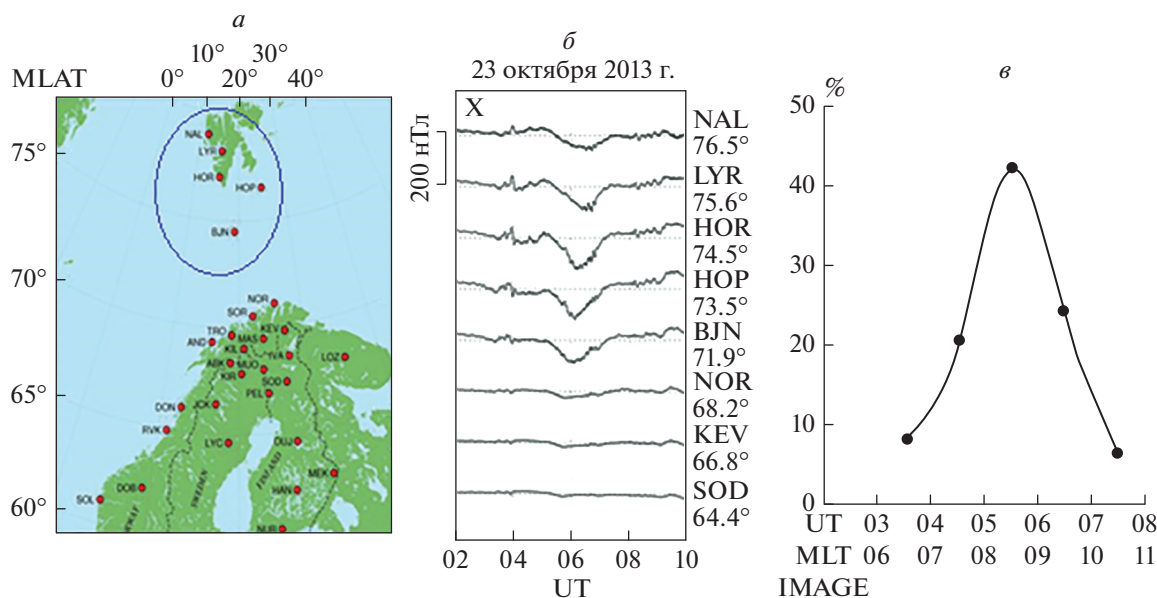


Рис. 1. Карта расположения станций скандинавской сети IMAGE, показана область, на которых наблюдались утренние полярные бухты (а); пример магнитограммы утренней полярной бухты, слева — коды станций и их геомагнитная широта (б); суточный ход появления утренних полярных бухт (в).

на острове Медвежий, южнее которого находится море, на берегу которого находится континентальная станция Nordkapp (NOR, 68.2° MLAT). Если магнитные бухты наблюдаются в BJN, но отсутствуют в NOR, то условной низкоширотной границей появления магнитных бухт можно считать середину расстояния между пунктами BJN и NOR, т.е. около 70° MLAT.

Магнитограмма, приведенная на рис. 1, показывает пример типичной утренней полярной магнитной бухты, зарегистрированной на сети IMAGE в виде отрицательного возмущения с плавным началом и таким же плавным окончанием, без резких импульсных интенсификаций. Отсутствие геомагнитных возмущений в более низких, авроральных широтах свидетельствует о том, что рассматриваемая бухта не является результатом полярной экспансии авроральной суббури и регистрируется, как и ночные полярные суббури, на сжатом овале. Как и ночные полярные суббури, утренние полярные бухты, как правило, наблюдаются при низкой скорости солнечного ветра ($V < 450$ км/с).

Максимальная амплитуда утренней полярной бухты обычно порядка 200–300 нТл, а длительность — не более двух часов. На рис. 1в показан построенный по 112 событиям в 2006–2017 гг. суточный ход появления утренних полярных бухт, виден четкий максимум в 08–09 MLT, т.е. в предполуденное время.

Для исследования планетарного распределения геомагнитной активности во время утренних

полярных бухт были использованы данные магнитной регистрации на 66 спутниках связи проекта AMPERE (Active Magnetosphere and Planetary Electrodynamics Response Experiment), одновременно работающих на высотах 780 км [10]. В нашей работе использовались общедоступные данные проекта AMPERE, представленные на сайте <http://ampere.jhuapl.edu/products> в виде обобщенных за 10 мин карт распределения геомагнитной возмущенности, построенных по результатам сферического гармонического анализа магнитных измерений и вычисленных по этим данным распределений продольных токов: втекающие в ионосферу токи показаны на картах синим, а вытекающие красным.

За период регистрации на спутниках AMPERE в 2010–2017 гг., на высокоширотных станциях профиля IMAGE (BJN–NAL) было выделено 48 случаев появления утренних полярных магнитных бухт.

Анализ распределения планетарной геомагнитной активности во время исследуемых утренних полярных магнитных бухт показал, что их источниками могут быть различные возмущения в высокоширотной магнитосфере такие как дневные полярные бухты, ночные суббури и конвективные бухты. Рассмотрим такие случаи более детально.

Дневные полярные бухтообразные возмущения

Ранее было установлено, например, в работах [11–13], что при северном направлении межпла-

нетного магнитного поля (ММП), т.е. во время спокойных условий, когда авроральный овал сжат и сдвинут к полюсу, в дневном секторе полярных широт могут наблюдаться магнитные бухтообразные возмущения большой интенсивности, временные вариации и знак которых обычно контролируются V_u -компонентой ММП, как это было показано в ряде работ, например, [13–15]. В работе [4] они были даже названы DPY -вариациями.

Анализ данных AMPERE показал, что ионосферный электроджет, ответственный за околополуденные полярные магнитные бухты, и усиленные продольные токи могут наблюдаться в достаточно широкой дневной долготной области от утреннего до послеполуденного сектора полярных широт, т.е. быть зарегистрированным на земной поверхности как отрицательная магнитная бухта в утреннем секторе полярных широт. Пример такого события показан на рис. 2а, на левой панели которого приведены магнитограммы высокоширотных станций профиля IMAGE, где видно развитие утренней магнитной бухты в 04–06 UT на Шпицбергене на широтах выше $\sim 70^\circ$ MLAT, а на правой панели – карты планетарного распределения электроджетов и продольных токов, построенные по данным сферического анализа магнитных измерений на спутниках AMPERE, во время этой бухты. Из приведенных графиков видно, что данная утренняя бухта является результатом азимутального развития (экспансии) дневного полярного электроджета в утренний сектор. К сожалению, наземных измерений в дневном секторе полярных широт во время данного события не имеется. На картах AMPERE видно, что это событие развивалось над просторами Ледовитого океана.

Из рассмотренных 48 случаев утренних полярных магнитных бухт подобная ситуация наблюдалась в 6 событиях, при этом все они были зарегистрированы в летнее время. Пять из них наблюдались при устойчиво отрицательной V_u -компоненте ММП, а в одном событии в рассматриваемый интервал произошел поворот V_u -компоненты от ~ -3 до $+6$ нТл.

Ночные суббури

Хорошо известно, что магнитосферные суббури, развивающиеся в ночном секторе, также могут наблюдаться в большом долготном интервале, от вечернего до утреннего сектора. Таким образом, зарегистрированные на профиле IMAGE утренние полярные магнитные бухты могут быть результатом азимутального продолжения ночных возмущений в утреннюю сторону. Чтобы показать это, необходимо рассмотрение распределения геомагнитной активности в глобальном мас-

штабе так, как это было выполнено в предыдущем разделе.

Пример результата такого анализа с использованием глобальных карт проекта AMPERE показан на рис. 2б для случая утренней полярной магнитной бухты, зарегистрированной 23 октября 2013 г. на сети IMAGE (магнитограммы в левой части рис. 2б).

На картах AMPERE (рис. 2б справа) видно, что в это время западный электроджет и усиленные продольные токи наблюдались с вечернего сектора до позднего утреннего. В послеполуденном секторе Земли ($\sim 00-01$ MLT) в это время наблюдалась “классическая” суббури, в которой высокоширотный западный электроджет сопровождался более низкоширотным восточным джетом, что типично для токового клина суббури. В рассматриваемом событии западный электроджет наблюдался и в позднем утреннем секторе. Можно заметить интересную особенность: как правило, в дополуночном секторе, где развивалась суббури, вытекающие токи (на картах показаны красным) были интенсивнее втекающих (показаны синим), а в утреннем секторе, где регистрировалась утренняя полярная бухта, – наблюдалась обратная картина: втекающие токи были интенсивнее вытекающих.

По данным наземных магнитометров SuperMAG в $\sim 05:30$ UT над Канадой и Гренландией наблюдалась суббури, наиболее интенсивные возмущения были над Гренландией, то есть в послеполуденном секторе. Центральный меридиан токового клина находился между станциями STJ (MLAT = 52.6° ; MLON = 31.6°) и VAL (MLAT = 49.1° ; MLON = 70.4°), западный край – около станции STJ, а восточный край токового клина – около станции ODE (MLAT = 42.1° ; MLON = 104.5°), (магнитограммы SuperMAG не показаны). Таким образом, мы видим, что токовый клин протягивался от станции St Johns до Одессы, т.е. до меридиана, на котором находятся станции IMAGE. Таким образом, в этом событии утренние полярные бухты, которые зарегистрированы на высокоширотных станциях IMAGE, являются продолжением в утренний сектор ночной суббури.

Подобных событий, когда во время развития утренней полярной бухты на профиле IMAGE, усиленный электроджет и продольные токи по данным AMPERE регистрировались в ночном и утреннем секторах и отсутствовали в послеполуденном и раннем вечернем секторах, в исследуемый период было 5.

Конвективные магнитные бухты

Известно, что в высокоширотной ионосфере практически постоянно наблюдается конвекция

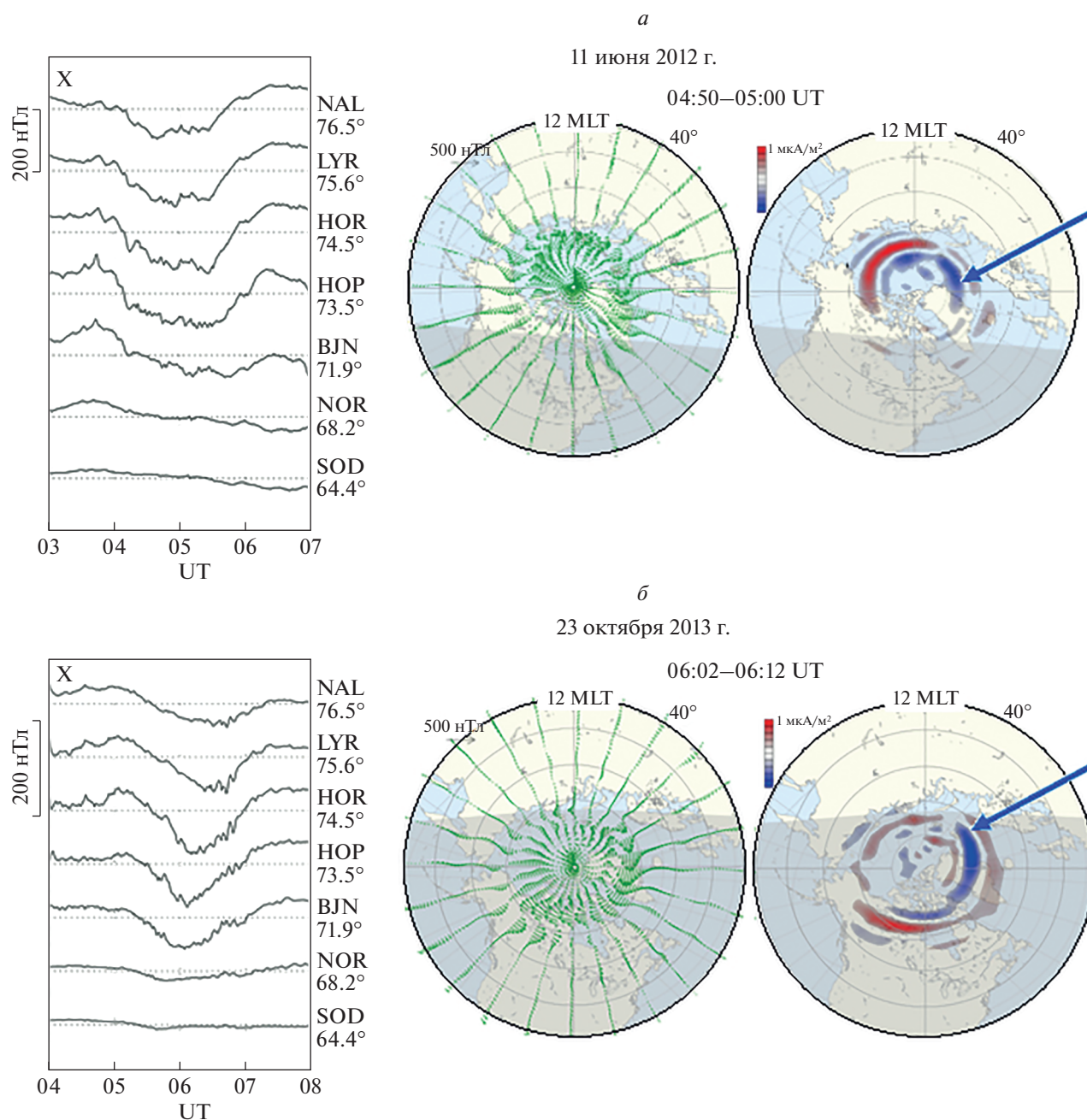


Рис. 2. Пример утренней полярной бухты (левая панель), глобальное распределение магнитной возмущенности и продольных токов (правые панели; красные – вытекающие токи, синие – втекающие токи) по данным проекта AMPERE (*a*). То же самое для утренней полярной бухты, являющейся азимутальным распространением ночной авроральной суббури (*b*).

плазмы, имеющая вид двух-вихревой структуры [16] с центрами вихрей в утреннем и вечернем секторах, и усиливающаяся с ростом ММП южного направления. Длительные периоды (несколько часов) устойчивого состояния южного ММП способствуют непрерывному поступлению энергии в хвост магнитосферы и установлению режима так называемой “стационарной конвекции” (“Steady Magnetospheric convection” – SMC), обсуждаемой во многих работах, например, [17–19]. Отдельные ее интенсификации были названы “конвективной бухтой” [20].

Имеются существенные различия между классической магнитосферной суббурей и конвективной бухтой [20–23]. В отличие от конвективной бухты с пологим началом, “классическая” суббу-

ри

ря характеризуется резким началом (substorm onset) с брейкапом полярных сияний, сопровождающимся формированием “токового клина суббури” (substorm current wedge), например, [23, 24], представляющего собой одно-вихревую ионосферную токовую систему *DP1* [24], наблюдаемую в околополуночном секторе, а также расширением активности к полюсу (poleward expansion) и т.д. Конвективная бухта представляет собой развитие двух-вихревой токовой системы *DP2* с центрами вихрей в утреннем (западный электроджет) и вечернем (восточный электроджет) секторах, как показано на схеме, представленной на рис. 3а, из работы [22].

Исследуемые утренние полярные магнитные бухты, наблюдаемые на Шпицбергене, имели пологое начало без значительного перемещения к полюсу, т.е. по морфологическим характеристикам они похожи на конвективные бухты. Для вывода, являются ли регистрируемые бухтообразные утренние полярные возмущения конвективными бухтами, было использовано планетарное распределение высокоширотной геомагнитной активности по данным AMPERE. Анализ этих данных показал, что большинство из рассмотренных 48 событий представляло собой сложную картину суперпозиции отдельных интенсификаций одновременно в различных временных секторах. Удалось выделить всего 5 “чистых” случаев, когда возмущения наблюдались одновременно только в утреннем и послеполуденном секторах, типичных для усиленной конвекции, как на схеме на рис. 3а, и отсутствовали в ночном секторе. Карта планетарного распределения высокоширотных магнитных возмущений во время одного из таких событий 17 июня 2013 г. приведена на рис. 3а справа, а соответствующая магнитограмма IMAGE на рис. 4а.

Это распределение полностью соответствует схеме планетарного распределения электроджетов во время конвективной бухты (левый график на рис. 3а), когда в утреннем секторе развивается западный электроджет (отрицательная магнитная бухта), а в послеполуденном – восточный электроджет (положительная магнитная бухта). На рис. 3а также показано, что в этот день отрицательные значения B_z -компоненты ММП (т.е. ММП южного направления) наблюдались в течение нескольких часов до обсуждаемой утренней суббури, что типично для конвективной бухты [19, 20, 22].

Суперпозиция разных источников

Анализ данных наблюдений показал, что большая часть (32 события из 48) утренних полярных отрицательных магнитных бухт являлась супер-

позицией возмущений, вызванных взаимодействием ночных суббуревых и конвективных явлений, разделение которых является очень сложной, не всегда решаемой проблемой, особенно в возмущенных условиях. На рис. 3б приведен пример одного из таких сложных случаев (7 декабря 2015 г.), когда на картах AMPERE одновременно регистрировались геомагнитные возмущения в утреннем, вечернем и послеполуденном секторах. На карте AMPERE на рис. 3б видно, что в дополуночном секторе западный электроджет сопровождался интенсивным восточным электроджетом на более низких широтах, что типично для токового клина суббури.

Это событие наблюдалось во время прохождения высокоскоростного потока солнечного ветра, скорость солнечного ветра была ~600–650 км/с, был зарегистрирован и скачок динамического давления. Все это, возможно, и привело к развитию такого сложного события, которое можно представить, как суперпозицию магнитных возмущений, вызванных взаимодействием ночных суббуревых и конвективных явлений.

Данный пример был выбран еще и потому, что в это время низкоапогейный (~830 км) спутник DMSP F16 [25], измеряющий потоки высыпавшихся электронов и протонов, пересекал ионосферные высоты над Шпицбергом в начале развития там утренней полярной бухты. На рис. 3б нисходящая часть пролета показана схематически, спутник пересекал сначала область втекающих продольных токов (показаны синим цветом), а затем область вытекающих токов (показана красным). Спектрограммы высыпавшихся частиц, полученные на спутнике F16 (<http://sd-www.jhuapl.edu/Auroga/spectrogram>), показаны на рис. 3б. Видно, что в 05:45 UT, когда спутник пересек область с центром ~70° MLAT, соответствующую положению вытекающих продольных токов (средняя панель на рис. 3б), отмечалось значительное усиление высыпавшихся электронов.

Известно, например, [26], что формирование в ночном секторе трехмерного токового клина суббури, центральная часть которого соответствует меридиану начала взрывной фазы суббури, сопровождается появлением ночных среднеширотных положительных магнитных бухт. Объектом наших исследований являлись утренние полярные магнитные бухты, максимум появления которых отмечается в 08–09 MLT. Этот долготный сектор не спроецируется в хвост магнитосферы, где формируется токовый клин суббури. Поэтому и не удивительно, что сопоставление случаев появления утренних полярных бухт на сети IMAGE с одновременными геомагнитными наблюдениями на среднеширотных станциях Бельск (BEL,

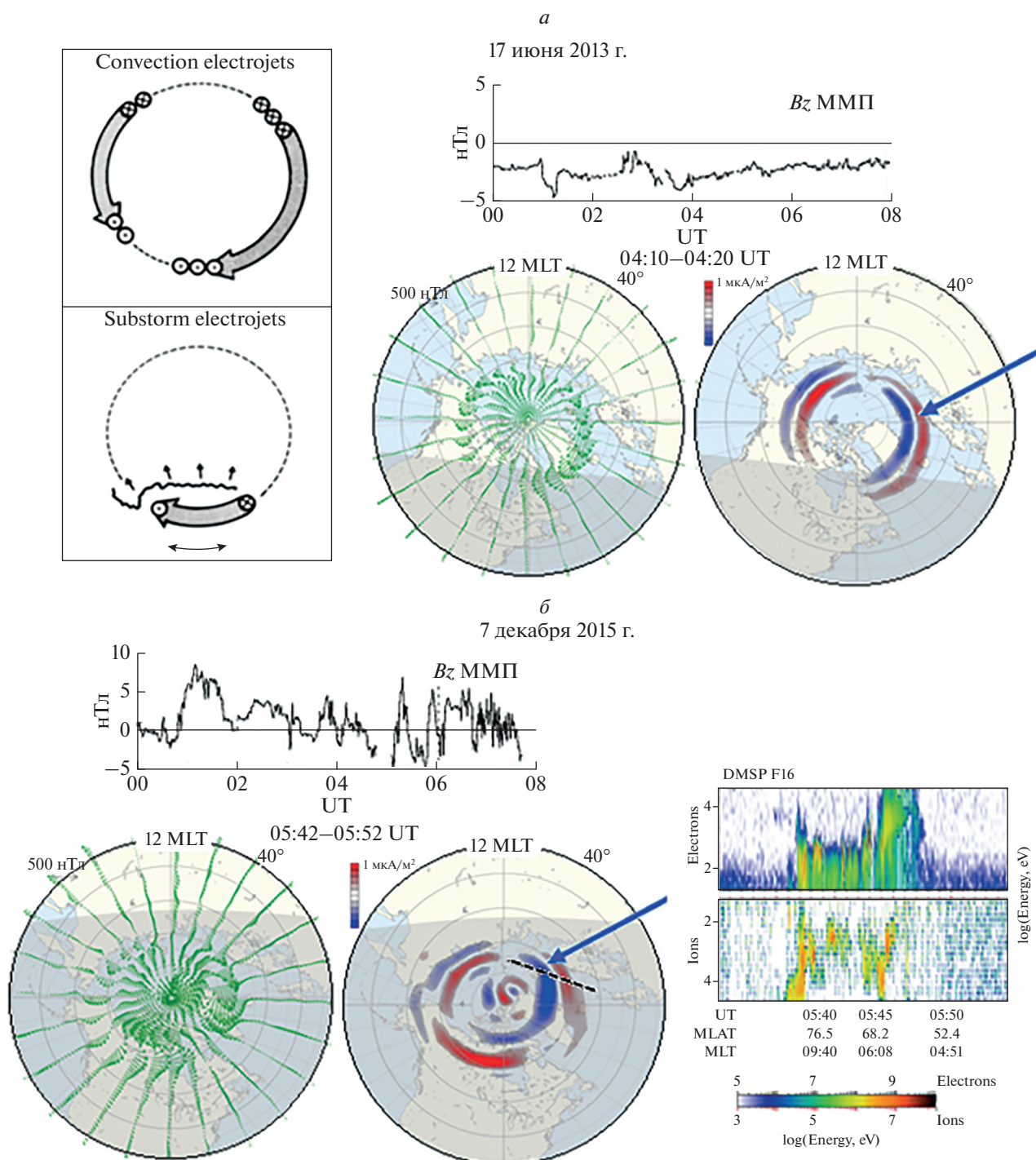


Рис. 3. Левая верхняя панель – схема распределения электроджета в случае конвективной бухты и классической суббури из работы [22]; пример глобального распределения магнитной возмущенности и продольных токов по данным AMPERE, а также вариации B_z ММП во время конвективной магнитной бухты (а); то же самое в случае сложного события утренней полярной бухты 7 декабря 2015 г. и измерение выпадающих электронов и ионов на низкополюсном спутнике DMSP F16 (б).

47.7° MLAT) и Панагюриште (PAG, 42.6° MLAT), расположенных в долготном секторе сети IMAGE, показало отсутствие утренних положительных

среднеширотных бухт в подавляющем большинстве случаев. Не сопровождались среднеширотными эффектами и утренние конвективные бух-

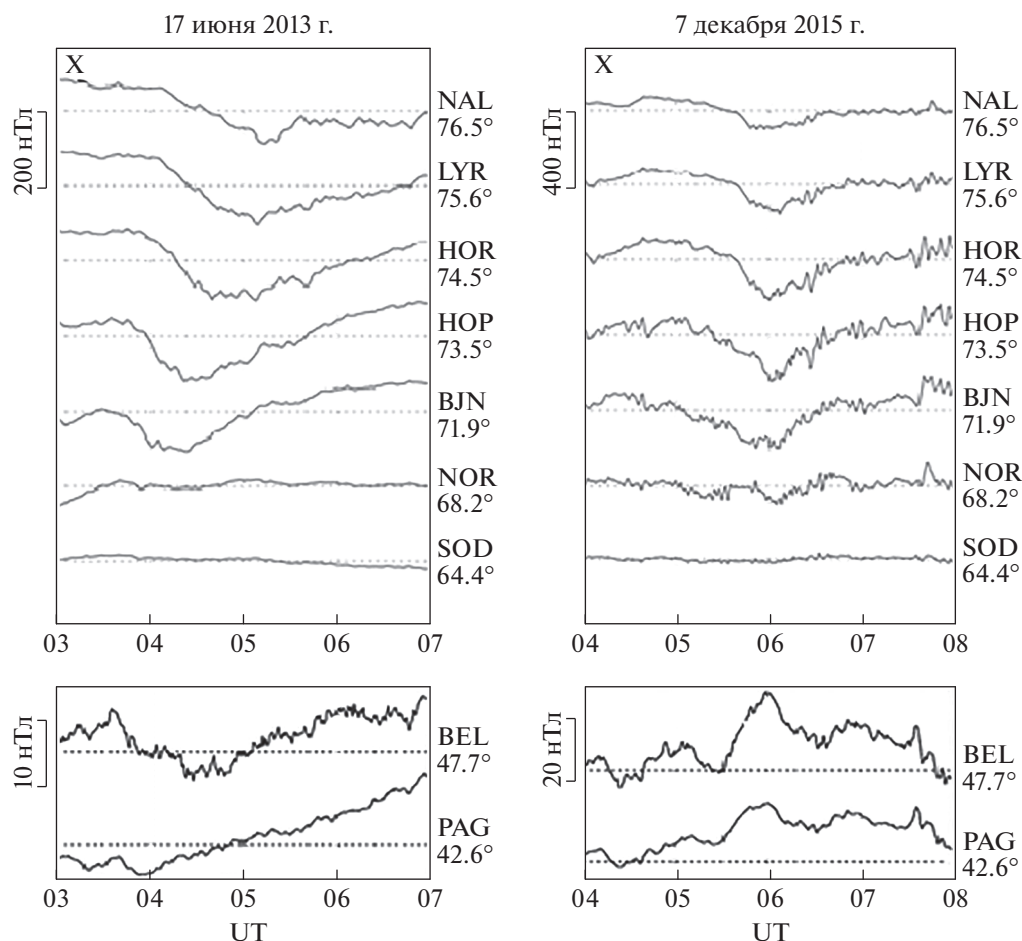


Рис. 4. Магнитограммы утренних полярных бухт, рассмотренных на рис. 3 (17 июня 2013 и 7 декабря 2015), и их среднеширотные эффекты.

ты, пример такого события приведен на рис. 3а, отсутствие его среднеширотного эффекта показано на рис. 4а.

Однако, в отдельных событиях, когда во время утренних полярных бухт на сети IMAGE, в ночном секторе по данным спутниковой регистрации AMPERE наблюдались суббуревые возмущения (усиленный западный электроджет, сопровождающийся развитием восточного электроджета на более низких широтах, что типично для токового клина суббури), утренние полярные бухты, сопровождались появлением положительных магнитных бухт в Бельске (обычно с амплитудой порядка 10–15 нТл) и в Панагюриште (порядка 6–10 нТл).

Одно из таких событий (7 декабря 2015 г.) показано на рис. 3б и 4б. Для этого события однозначно определить токовый клин по наземным данным трудно, так как мало наземных станций в нужном секторе. Однако, по данным SuperMAG видно, что в ночном секторе, близко к полуночи, над Канадой развивалась суббурия. Согласно дан-

ным наземных магнитометров, центральный меридиан этой суббури располагался близко к меридиану станции Ottawa (OTT, MLAT = 54.98°; MLON = 2.5°), западный край токового клина был на меридиане станции T16 Carson City (MLAT = 44.77°; MLON = -55.5°), восточный край точно определить не представляется возможным из-за отсутствия станций в нужном секторе (магнитограммы станций SuperMAG не показаны). По данным AMPERE (рис. 3б) также видно, что в это время в ночном секторе Земли к югу от западного электроджета наблюдался интенсивный восточный ток, что является типичной картиной развития токового клина суббури, развивающейся в ночном секторе. Он протягивается через всю Северную Америку, с запада до востока. И видно, что утренние бухты (08–09 MLT) не связаны с этой суббурей, а представляют отдельное явление. На рис. 4б также видно, что во время утренней полярной магнитной бухты на сети IMAGE, в средних широтах того же долготного сектора наблюдалась утренняя положительная

магнитная бухта, и трудно предположить, что она может быть связана с околополуночным токовым клином суббури.

Появление утренней положительной магнитной бухты на средних широтах во время развития утренней полярной (отрицательной) бухты в том же долготном секторе — явление довольно частое. Оно наблюдалось в 18 событиях в 2010–2017 гг., т.е. почти в половине сложных случаев утренних полярных бухт, зарегистрированных на Шпицбергене. Мы надеемся, что будущие детальные исследования этих событий позволят понять их природу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ наземных высокоширотных наблюдений на сети магнитометров IMAGE и сопоставление полученных результатов со спутниковой регистрацией AMPERE пространственного распределения планетарной геомагнитной активности показал, что источником выявленных утренних полярных магнитных бухт на Шпицбергене может быть пространственное затекание токов на утреннюю сторону ночных или дневных полярных электроджетов, а также генерация конвективных бухт. Наиболее типичной ситуацией является суперпозиция одновременного развития “классических” ночных суббурь и конвективных полярных бухт.

Авторы выражают благодарность создателям баз данных IMAGE (<http://space.fmi.fi/image/>) и AMPERE (<http://ampere.jhuapl.edu/>) за возможность их использования в работе. Исследования Дэспирак И.В., Клейменовой Н.Г., Громовой Л.И. и Любича А.А. выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Национального научного фонда Болгарии (проект № 20-55-18003); работа Громова С.В. — в рамках темы государственного задания ИЗМИРАН, Малышевой Л.М. — в рамках темы государственного задания ИФЗ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Akasofu S.-I., Perreault P.D., Yasuhara F., Meng C.I. // J. Geophys. Res. 1973. V. 78. No. 31. P. 7490.
2. Lui A.T.Y., Anger C.D., Akasofu S.-I. // J. Geophys. Res. 1975. V. 80. No. 25. P. 3603.
3. Lui A.T.Y., Akasofu S.-I., Hones E.W. et al. // J. Geophys. Res. 1976. V. 81. No. 7. P. 1415.
4. Kamide Y., Perreault P.D., Akasofu S. // J. Geophys. Res. 1977. V. 82. No. 35. P. 5521.
5. Клейменова Н.Г., Антонова Е.Е., Козырева О.В. и др. // Геомагн. и аэроном. 2012. Т. 52. № 6. С. 785; Kleimenova N.G., Antonova E.E., Kozyreva O.V. et al. // Geomagn. Aeron. 2012. V. 52. No. 6. P. 746.
6. Safargaleev V.V., Kozlovsky A.E., Mitrofanov V.M. // Ann. Geophys. 2020. V. 38. No. 4. P. 901.
7. Дэспирак И.В., Любич А.А., Клейменова Н.Г. // Геомагн. и аэроном. 2014. Т. 4. № 5. С. 619; Despirak I.V., Lyubchich A.A., Kleimenova N.G. // Geomagn. Aeron. 2014. V. 54. No. 5. P. 575.
8. Дэспирак И.В., Клейменова Н.Г., Любич А.А. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 3. С. 340; Despirak I.V., Kleimenova N.G., Lyubchich A.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2022 V. 86. No. 3. P. 266.
9. Despirak I.V., Lyubchich A.A., Kleimenova N.G. // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. 2018. V. 177. P. 54.
10. Anderson B.J., Korth H., Waters C.L. et al. // Geophys. Res. Lett. 2014. V. 41. No. 9. P. 3017.
11. Клейменова Н.Г., Громова Л.И., Дремухина Л.А. и др. // Геомагн. и аэроном. 2015. Т. 55. № 3. С. 185; Kleimenova, N.G., Gromova, L.I., Dremukhina L.A. et al. // Geomagn. Aeron. 2015. V. 55. No. 2. P. 174.
12. Левитин А.Е., Клейменова Н.Г., Громова Л.И. и др. // Геомагн. и аэроном. 2015. Т. 55. № 6. С. 755; Levitin A.E., Kleimenova N.G., Gromova L.I. et al. // Geomagn. Aeron. 2015. V. 55. No. 6. P. 730.
13. Gromova L.I., Kleimenova N.G., Levitin A.E. et al. // Sun Geosphere. 2017. V. 12. No. 7. P. 125.
14. Friis-Christensen E., Kamide Y., Richmond A.D. et al. // J. Geophys. Res. 1985. V. 90. No. A2. P. 1325.
15. Gromova L., Gromov S.V., Kleimenova N.G. et al. // Sun Geosphere. 2019. V. 14. No. 7. P. 31.
16. Heppner J.P. // J. Geophys. Res. 1977. V. 72. No. 7. P. 11115.
17. Yahnin A.G., Malkov M.V., Sergeev V.A. et al. // J. Geophys. Res. 1994. V. 99. P. 4039.
18. Sergeev V.A., Pellinen R.J., Pulkkinen T.I. // Space Sci. Rev. 1996. V. 75. P. 551.
19. Kissinger J., McPherron R.L., Hsu T.-S. et al. // J. Geophys. Res. 2011. V. 116. Art. No. A119.
20. Pytte T., McPherron R.L., Hones E.W. et al. // J. Geophys. Res. 1978. V. 83. P. 663.
21. Sergeev V.A., Kubyschkina M.V., Liou K. et al. // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. No. A9. Art. No. 18843.
22. Baumjohann W. // Adv. Space Res. 1983. V. 2. No. 10. P. 55.
23. McPherron R.L., Russell C.T., Aubry M.P. // J. Geophys. Res. 1973. V. 78. No. 16. P. 3131.
24. Rostoker G., Akasofu S.-I., Foster J. et al. // J. Geophys. Res. 1980. V. 85. P. 1663.
25. Redmon R.J., Denig W.F., Kilcommons L.M., Knipp D.J. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2017. V. 122. P. 9056.
26. McPherron R.L., Chu X. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2018. V. 123. No. 4. P. 2831.

Morning geomagnetic bays at polar latitudes and their magnetospheric sources

**N. G. Kleimenova^{a,*}, I. V. Despirak^b, A. A. Lubchich^b, L. M. Malysheva^a,
L. I. Gromova^c, S. V. Gromov^c**

^aSchmidt Institute of Physics of the Earth, Moscow, 123995 Russia

^bPolar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia

^cPushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere, and Radio Wave Propagation, Moscow, 108840 Russia

**e-mail: ngk1935@yandex.ru*

Morning polar bay-like magnetic disturbances, observed at latitudes above 70° MLAT in the absence of simultaneous geomagnetic activity at lower latitudes, have been studied. It is shown that such disturbances could be caused by the spatial expansion on the morning side of both nighttime substorms and daytime polar magnetic bays as well as the generation of convective magnetic bays. The most typical is the simultaneous development of nighttime substorms and convective polar bays. It is shown that individual events of morning polar magnetic bays, observed during the development of nighttime substorms, can be accompanied by mid-latitude positive morning magnetic bays.

УДК 523.31.853:523.62.726

ПОЛЯРНЫЕ ГЕОМАГНИТНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ И АВРОРАЛЬНЫЕ СУББУРИ В МАГНИТНУЮ БУРЮ 20 АПРЕЛЯ 2020 г.

© 2022 г. Л. И. Громова¹*, Н. Г. Клейменова², И. В. Дэспирак³,
С. В. Громов¹, А. А. Любчик³, Л. М. Мальшева²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт Земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн имени Н.В. Пушкова
Российской академии наук”, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт физики Земли имени О.Ю. Шмидта Российской академии наук”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
“Полярный геофизический институт”, Апатиты, Россия

*E-mail: gromova@izmiran.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследованы высокоширотные геомагнитные возмущения ($MLAT > 70^\circ$) во время магнитной бури 20 апреля 2020 г. — первой бури нового солнечного цикла. Основываясь на наблюдениях наземных магнитометров глобальных сетей SuperMAG, INTERMAGNET и IMAGE, показана высокая геоэффективность бури несмотря на низкую скорость магнитного облака, ее вызвавшую. В высоких широтах обнаружены вихри геомагнитного поля, свидетельствующие о локальной интенсификации продольных токов.

DOI: 10.31857/S0367676522120110

ВВЕДЕНИЕ

Новый, 25-й цикл солнечной активности, начался в январе 2020 г. [1]. Первой магнитной бурей этого цикла была умеренная буря 20 апреля 2020, вызванная приходом к орбите Земли медленного магнитного облака (magnetic cloud, MC), источником которой был корональный выброс массы (Coronal Mass Ejection, CME). Начальная скорость рассматриваемого CME около Солнца оценивалась в ~ 330 км/с. Особенности возмущений на Солнце, вызвавшие CME и эту бурю, подробно обсуждены в работах [2, 3].

Вариации параметров межпланетного магнитного поля (ММП) и солнечного ветра 20 апреля 2020 г., приведенные на рис. 1, показывают низкую скорость солнечного ветра и большие значения напряженности ММП. На рис. 1 видно, что подошедшее магнитное облако характеризовалось значительной амплитудой вертикальной компоненты межпланетного магнитного поля южного направления (B_z ММП достигало -15 нТл), наблюдавшаяся в течение около 4 ч. По-видимому, это и привело к развитию в магнитосфере Земли умеренной магнитной бури с минимальным значением $SUM/H \sim -70$ нТл.

Обычно геоэффективность медленных магнитных облаков невелика [4], они не вызывают интенсивных бурь, поэтому и неудивительно, что магнитная буря 20 апреля 2020 г. была небольшой.

Изучению интенсивных магнитных бурь, вызванных быстрыми магнитными облаками, посвящено множество работ, например, [5–8], магнитным бурям, связанным с медленными магнитными облаками, — лишь незначительное число публикаций, например, [9], их высокоширотные геомагнитные эффекты практически не исследовались. Низкая, практически не изменяющаяся во время бури, скорость солнечного ветра (~ 350 – 400 км/с) позволяет, с одной стороны, выявить геомагнитные возмущения, не связанные со скоростью солнечного ветра, а, с другой стороны, рассмотреть влияние на них компонент ММП.

Целью данной работы было исследование высокоширотных геомагнитных возмущений во время обсуждаемой магнитной бури для выявления их особенностей в условиях медленного солнечного ветра. Работа была основана на анализе данных наблюдений наземных магнитометров глобальных сетей SuperMAG (<http://supermag.jhuapl.edu/>), INTERMAGNET (<https://www.intermag-net.org/>) и IMAGE (<http://space.fmi.fi/image/>).

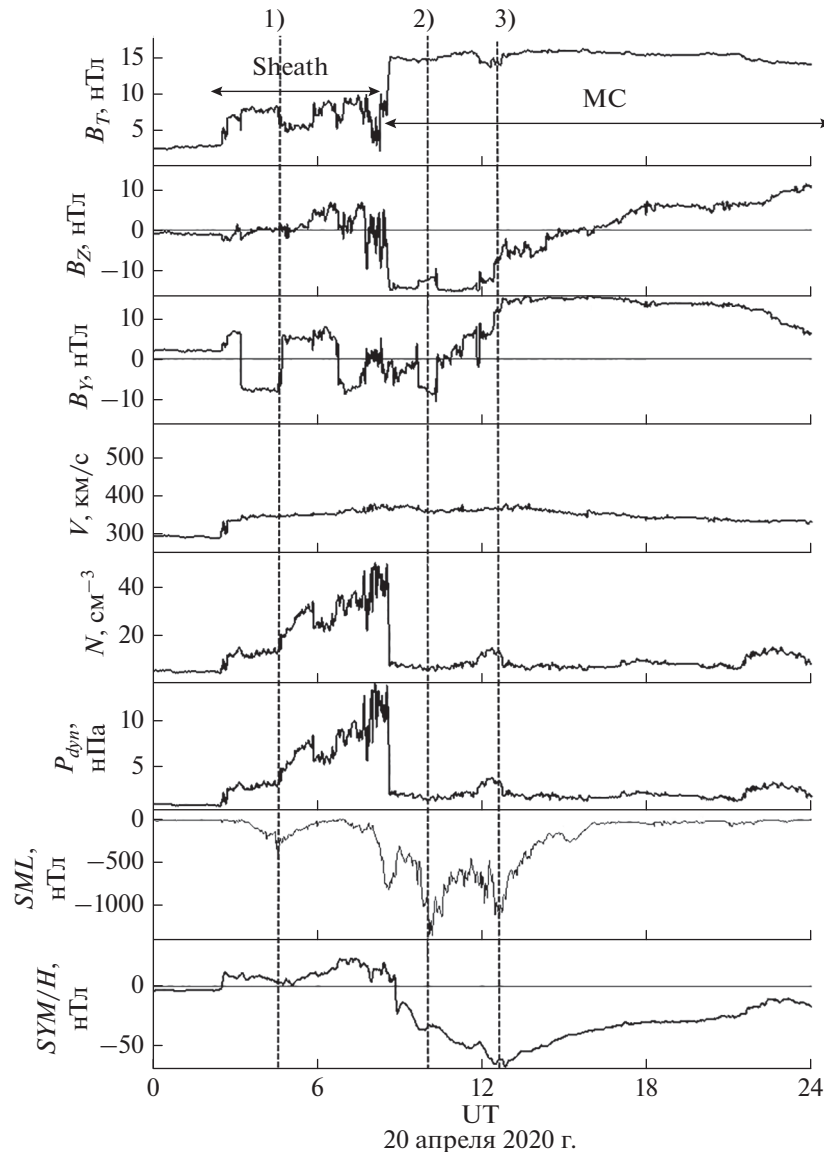


Рис. 1. Космическая погода 20 апреля 2020 года. Вариации параметров: полного межпланетного магнитного поля (ММП) B_T , B_Z и B_Y -компонент ММП, скорости V , плотности N и динамического давления P_{dyn} солнечного ветра, а также SYM/H -индекса геомагнитной активности, и SML -индекса суббуревой активности. Горизонтальными линиями со стрелками обозначены границы крупномасштабных потоков солнечного ветра: области сжатия (SHEATH) и магнитного облака (MC).

НАЧАЛЬНАЯ ФАЗА МАГНИТНОЙ БУРИ

Начальная фаза магнитной бури является результатом реакции магнитосферы на подход к ней плотной плазмы передней оболочки магнитного облака (SHEATH), передний фронт которой подошел к Земле 20 апреля 2020 г. при небольших знакопеременных значениях B_Z -компоненты ММП, и при небольшом динамическом давлении солнечного ветра (< 2 нПа), обусловленном как малой плотностью ($N < 5$ см $^{-3}$), так и небольшой скоростью ($V < 300$ км/с) солнечного ветра (см. рис. 1). Магнитопауза была удалена от Земли на расстояние ~ 13 Re (по оценке согласно формулам работы [10]).

Во время начальной фазы бури B_Z - и B_Y -компоненты ММП варьировались от +5 до -5 нТл и от +6 до -7 нТл соответственно. При практически постоянной скорости солнечного ветра ($V \sim 350$ км/с) значительно выросла плотность (от 5 до 50 см $^{-3}$) и давление солнечного ветра (от 1.5 до 15 нПа). Усиление динамического давления солнечного ветра привело к поджатию магнитосферы, в результате которого магнитопауза значительно, до 7–8 Re, приблизилась к Земле.

На рис. 2а видно, что во время начальной фазы бури наблюдалось два «корытообразных» интервала (в 03:10–04:40 UT и 06:45–07:45 UT) с устойчивыми и почти не изменяющимися отрицательными

20 апреля 2020 г.

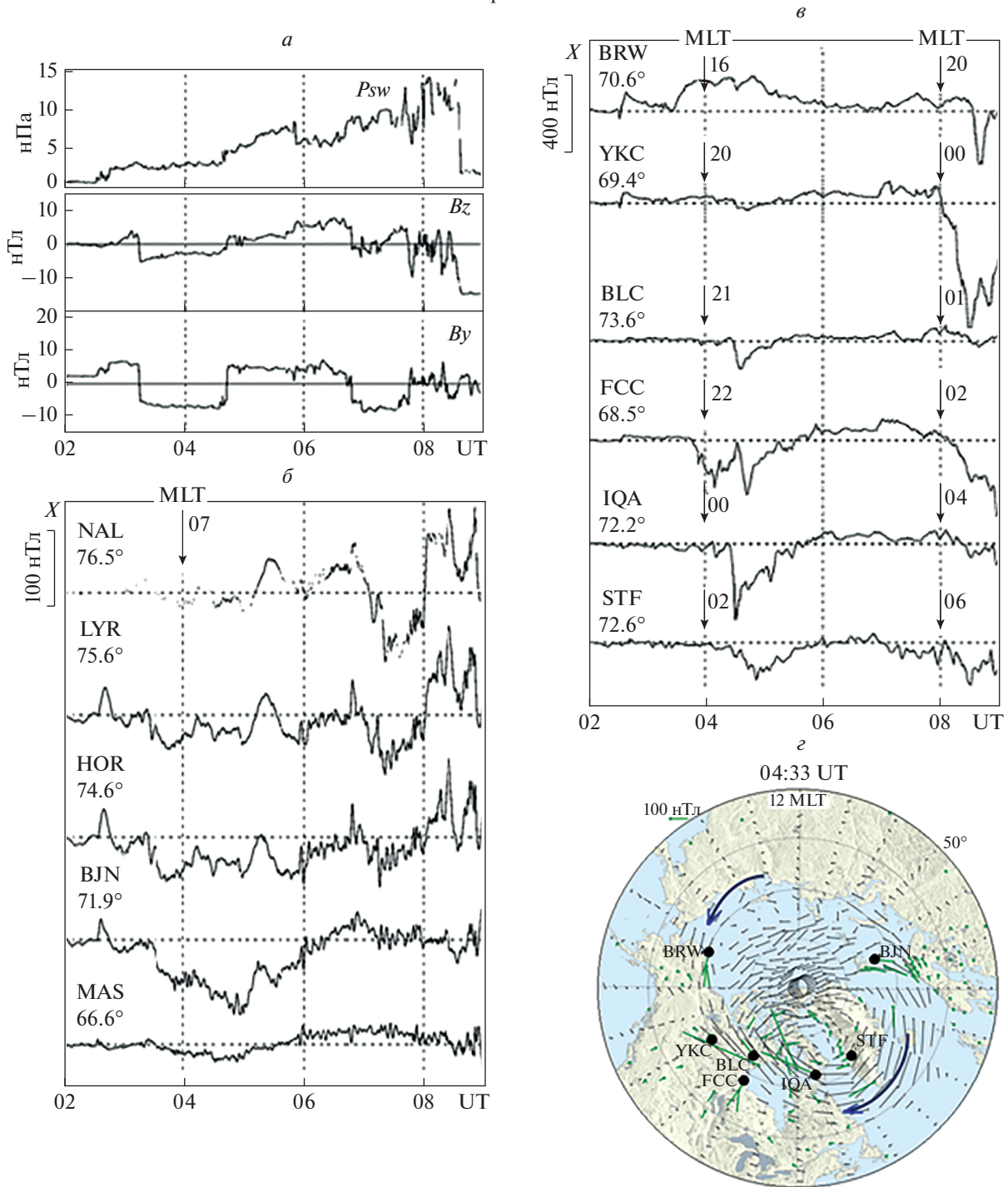


Рис. 2. Межпланетные параметры и вариации геомагнитного поля в интервале 02–09 UT, в начальную фазу бури: динамическое давление солнечного ветра (P_{dyn}), B_z , B_y -компоненты ММП (а); вариации геомагнитного поля на станциях профиля IMAGE, находящихся в утренне-дневном секторе высоких широт (б) и на высокоширотных станциях американского сектора по данным (https://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/plot_realtime/quick/202004/), находящихся в ночном секторе (в); мгновенная (в 04:33 UT – максимум суббури) карта пространственного распределения магнитных векторов по данным SuperMAG (г); вектора магнитного поля повернуты на 90° по часовой стрелке, чтобы они совпали с направлением ионосферного тока.

ными значениями B_y ММП $\sim -(7-8 \text{ нТл})$. На высокоширотных (выше 71° геомагнитной широты, в дальнейшем – MLAT) станциях скандинавской цепочки IMAGE (рис. 2б), в эти интервалы видны, как и в B_y -компоненте ММП, небольшие отрицательные бухтообразные магнитные возмущения, т.е. формировался полярный эдектроджет западного направления [11]. При этом первая бухта была более интенсивна на станциях NOR и LYR, а вторая – на более высокоширотных станциях LYR и NAL (рис. 2б). Заметим, что во втором случае динамическое давление солнечного ветра было почти вдвое больше, чем в первом. Следовательно, перемещение второй бухты на более высокие широты может быть результатом расширения дневного полярного каспа с ростом динамического давления солнечного ветра.

Из-за небольшой скорости и плотности солнечного ветра на переднем фронте SHEATH, скачок динамического давления и амплитуда внезапного начала магнитной бури (SSC в 02:31 UT) были незначительными, однако наблюдались при слабых отрицательных значениях B_z ММП. Это привело к последующему развитию небольшой магнитосферной суббури с максимумом около 04:30 UT, что видно на вариациях SML -индекса на рис. 1. Магнитограммы станций, находящихся в это время в ночном секторе, представлены на рис. 2в, а карта мгновенного распределения магнитных векторов по данным SuperMAG, на которых показано положение этих станций, – на рис. 2г. Согласно [12] на таких картах вектора магнитного поля даются повернутыми на 90° по часовой стрелке, чтобы они совпадали с направлением ионосферного тока, и по ним можно охарактеризовать глобальное пространственное распределение ионосферного электроджета. В момент максимума суббури на карте видно наличие двух крупномасштабных вихрей магнитного поля с центрами в послеполуночном и послеполуденном секторах.

Перед началом главной фазы бури, в конце SHEATH (в интервале $\sim 08-09$ UT) на фоне больших значений динамического давления солнечного ветра (до $\sim 15 \text{ нПа}$) в магнитосфере наблюдалось развитие магнитной суббури, вызванной кратковременным экскурсом B_z ММП от положительных ($\sim +5 \text{ нТл}$) к отрицательным ($\sim -10 \text{ нТл}$) значениям. Детали этой суббури не будут обсуждаться в данной работе ввиду сложного влияния на ее развитие резко изменившихся условий в межпланетной среде на границе между SHEATH и магнитным облаком.

ГЛАВНАЯ ФАЗА МАГНИТНОЙ БУРИ

Главная фаза бури начинается с момента смены знака B_z и знака Dst -вариации (или ее минутного аналога SYM/H) с положительного на отри-

цательный. На рис. 1 видно, что это произошло около 09 UT после резкого поворота B_z ММП к югу и такого же резкого возрастания полного магнитного поля (B_T ММП), а также и падения плотности (N) и, соответственно, динамического давления солнечного ветра (P_{dyn}), свидетельствующих о приходе к магнитосфере Земли тела коронального выброса массы – магнитного облака, следующего за областью плотной турбулентной плазмы – SHEATH.

В главную фазу этой магнитной бури наблюдались две очень сильные суббури ($S1$ и $S2$ на рис. 3б) с амплитудой в максимумах (т.е., около 10:00 и 12:30 UT) 1300 и 1100 нТл. Карты пространственного распределения электроджетов в это время по данным глобальной наземной сети магнитометров SuperMAG приведены на рис. 3а.

На картах видно, что ионосферный ток в первую суббурю наблюдался с вечерних ($\sim 21 \text{ MLT}$) до ранних утренних ($\sim 06 \text{ MLT}$) часов, а второй суббури – с полуночи до почти 08 MLT. Из магнитограмм на рис. 3в видно, что в обоих событиях центр электроджета наблюдался в околополуночном секторе на широтах ниже 65° MLAT (положительные отклонения Z -компоненты магнитного поля в BRW и в СМО, рис. 3е).

Для исследования возможных среднеширотных эффектов этих суббурь были сопоставлены данные наблюдений на ст. Yellowknife (YKC, 69° MLAT) с данными наблюдений на ст. Newport (NEW, 55° MLAT) и Fresno (FRN, 43° MLAT), расположенными вблизи геомагнитного меридиана YKC (рис. 3а).

Магнитограммы этих трех станций, построенные относительно спокойного уровня данной станции, приведены на рис. 3г. Спокойный уровень выбирался для каждого дня каждой станции как вариация соответствующей компоненты магнитного поля в спокойный день, ближайший к рассматриваемой дате. Четко видно, что обе суббури, показанные на рис. 3б, сопровождалась положительными магнитными бухтами в X -компоненте магнитного поля в средних широтах. Большие значения Y -компоненты поля в NEW и FRN во время последней суббури свидетельствуют о том, что эти станции находились на значительном азимутальном расстоянии от меридиана развития суббури, т.е. в долготной области, где отрицательные отклонения X -компоненты магнитного поля максимальны, а Y -компонента переходит через нулевую отметку.

ОБСУЖДЕНИЕ

Во время начальной фазы бури 20 апреля 2020 г. высокоширотные бухтообразные возмущения наблюдались на профиле IMAGE в утренне-дневном секторе полярных широт (выше 70° MLAT) и

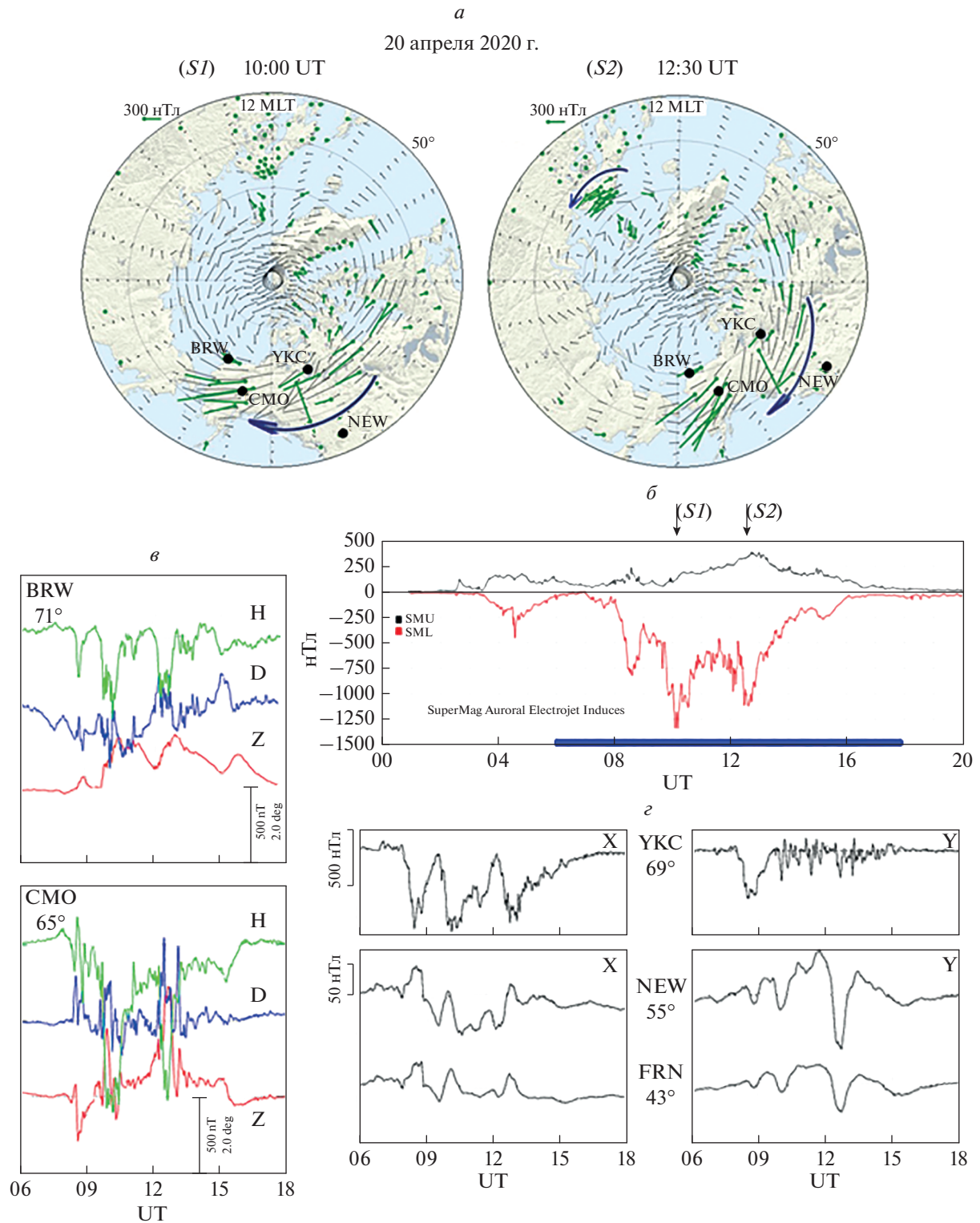


Рис. 3. Характеристики суббурь в главной фазе бури: мгновенные карты пространственного распределения магнитных векторов по данным SuperMAG в максимумах суббурь (*a*); вектора магнитного поля повернуты на 90° по часовой стрелке, чтобы они совпали с направлением ионосферного тока; вариации SML-индекса (*б*); вертикальные стрелки отмечают время максимумов суббурь, синяя горизонтальная линия показывает временной интервал (06–08 UT), соответствующий магнитограммам (*в*) и (*г*); магнитограммы *H*-, *D*-, *Z*-компонент геомагнитного поля станций BRW и CMO (*в*) и вариации *X*- и *Y*-компонент магнитного поля высокоширотной станции YKC и среднеширотных станций NEW и FRN (*г*).

контролировались знаком V_z -компоненты ММП, что согласуется с полученными ранее результатами (см. например [13]).

В главную фазу этой магнитной бури наблюдалось развитие двух достаточно интенсивных (более 1000 нТл) магнитосферных суббурь, первая из которых, практически не повлияла на развитие кольцевого тока (вариации SYM/H -индекса). Это ставит под сомнение популярную в 60-е годы [14] гипотезу о том, что именно суббури являются источником заметного понижения SYM/H . Сомнения в правильности этой гипотезы высказывались и ранее в ряде работ, например, [15–17]. Более того, в работах [18–21] рассматривались магнитные бури, в главную фазу которых вообще не было суббурь. Следуя результатам работы [17], можно сделать вывод, что нет четкой связи между развитием суббурь и усилением кольцевого тока в главную фазу магнитной бури. Оба эти явления имеют общую причину – южное направление ММП (B_z ММП < 0), но пока еще не известно, как разделить следствия этих явлений. Однако не следует полностью исключать влияние суббурь на динамику кольцевого тока, поскольку, как показано, например, в работе [23] интенсификация кольцевого тока может определяться комбинацией крупномасштабных электрических полей конвекции и мелкомасштабных импульсных источников, связанных с развитием суббурь.

Следует отметить, что согласно вариациям SML -индекса (рис. 1) вторая суббуря наблюдалась вблизи минимума SYM/H , после чего оба явления (буря и суббуря) стали затухать синхронно с уменьшением отрицательных значений B_z ММП. Это свидетельствует о том, что интенсивность обоих явлений контролируется B_z ММП.

Представленные на рис. 3а карты пространственного распределения ионосферных электроджетов в максимумах первой и второй рассматриваемых суббурь позволяют отнести ионосферные токи в максимуме первой суббури к одновихревой эквивалентной токовой системе $DP1$ с центром вихря около полуночи на широтах порядка 70° MLAT. Ионосферные токи в максимуме второй суббури можно рассматривать как двух-вихревую токовую систему $DP2$, когда в авроральных широтах развивается одновременно два крупномасштабных вихря – в ранее-утреннем секторе (западный электроджет) и в послеполуночном секторе (восточный электроджет). Детальное представление о развитии таких одно- и двух-вихревых токовых систем приведено, например, в работах [23, 24].

В утренне-дневном секторе высоких широт были выявлены локальные вихревые структуры геомагнитного поля. Они могут быть интерпретированы как индикаторы локальной интенсификации продольных электрических токов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Первая умеренная магнитная буря 20 апреля 2020 г. нового цикла солнечной активности, несмотря на низкую скорость солнечного ветра, привела к развитию в магнитосфере Земли значительной геомагнитной активности.

В начальную фазу бури впервые обнаружено развитие двух высокоширотных вихрей магнитного поля с центрами в послеполуночном и послеполуночном секторах, свидетельствующих о локальном усилении продольных токов на фоне практически не меняющейся низкой скорости солнечного ветра. Это позволяет предположить, что интенсификация локальных продольных токов не зависит от скорости солнечного ветра.

В главную фазу бури, при прохождении “тела” магнитного облака с большим значением модуля ММП при неизменно низкой скорости солнечного ветра наблюдались две интенсивные (более 1000 нТл) магнитосферные суббури, по-видимому, вызванные появлением больших амплитуд вертикальной компоненты ММП южного направления.

Показано, что обе суббури сопровождалась положительными магнитными бухтами в средних широтах, что может свидетельствует о развитии токового клина.

Авторы выражают благодарность создателям баз данных OMNI, IMAGE, INTERMAGNET и SuperMAG, МЦД в Киото, а также каталога крупномасштабных явлений солнечного ветра за возможность использования их в работе.

Работа Громовой Л.И., Клейменово Н.Г., Дэспирак И.В., Любича А.А. выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Национального научного фонда Болгарии № 20-55-18003; работа Громова С.В. выполнена в рамках темы государственного задания ИЗМИРАН; работа Малышевой Л.М. – в рамках темы государственного задания ИФЗ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ишков В.Н. // Астрон. журнал. 2022. Т. 99. № 1. С. 54; Ishkov V.N. // Astronomy Rep. 2022. V. 66. No. 1. P. 48.
2. Davies E.E., Möstl C., Owens M.J. et al. // A&A. 2021. V. 656. Art. No. A2.
3. O’Kane J., Green L.M., Davies E.E. et al. // A&A. 2021. V. 656. Art. No. L6.
4. Richardson I.G., Cane H.V. // J. Space Weather Space Clim. 2012. V. 2. Art. № A01.
5. Tsurutani B.T., Gonzalez W.D., Tang F. et al. // Geophys. Res. Lett. 1992. V. 19. No. 1. P. 73.
6. Echer E., Gonzalez W.D., Tsurutani B.T. et al. // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. No. A5. Art. No. A05221.

7. *Kashcheyev A., Migoya-Oru e Y., Amory Mazaudier C. et al.* // J. Geophys. Res. Space Phys. 2018. V. 123. P. 5000.
8. *Клейменова Н.Г., Громова Л.И., Громов С.В. др.* // Геомагн. и аэроном. 2021. Т. 61. № 4. С. 457; *Kliemenova N.G., Gromova L.I., Gromov S.V. et al.* // Геомагн. Аeron. 2021. V. 61. No. 4. P. 520.
9. *Nitta N.V., Mulligan T., Kilpua E.K.* // Space Sci. Rev. 2021. V. 217. Art. No. 82.
10. *Кузнецов С.Н., Суворова А.В., Дмитриев А.В.* // Геомагн. и аэроном. 1998. Т. 38. № 6. С. 7.
11. *Gromova L.I., F orster M., Feldstein Y.I. et al.* // Ann. Geophys. 2018. V. 36. P. 1361.
12. *Gjerloev J.W.* // J. Geophys. Res. 2012. V. 117. Art. No. A09213.
13. *Громова Л.И., Клейменова Н.Г., Левитин А.Е. и др.* // Геомагн. и аэроном. 2016. Т. 56. № 3. С. 302; *Gromova L.I., Kliemenova N.G., Levitin A.E. et al.* // Геомагн. Аeron. 2016. V. 56. No. 3. P. 281.
14. *Akasofu S-I.* // Front. Astron. Space Sci. 2020. V. 7. Art. No. 604755.
15. *Burton R.K., McPherron R.L., Russell C.T.* // J. Geophys. Res. 1975. V. 80. P. 4204.
16. *Iyemori T., Rao D.R.K.* // Ann. Geophys. 1996. V. 14. No. 6. P. 608.
17. *Maltsev Y.P.* // Proc. XXVI Ann. Sem. "Physics of Auroral Phenomena". (Apatity, 2003). P. 33.
18. *Мальков М.В., Сергеев В.А.* // Геомагн. и аэроном. 1991. Т. 31. С. 722.
19. *Yahnin A.G., Malkov M.V., Sergeev V.A. et al.* // J. Geophys. Res. 1994. V. 99. P. 4039.
20. *Sergeev V.A., Pellinen R.J., Pulkkinen T.I.* // Space Sci. Rev. 1996. V. 75. P. 551.
21. *Золотухина Н.А., Полех Н.М., Рахматулин Р.А., Харченко И.П.* // Геомагн. и аэроном. 1999. Т. 39. № 1. С. 47.
22. *Ganushkina N.Yu., Pulkkinen T.I., Fritz T.* // Ann. Geophys. 2005. V. 23. P. 579.
23. *Troshichev O.A., Kuznetsov V.M., Pudovkin M.I.* // Planet. Space Sci. 1974. V. 22. P. 1403.
24. *Clauer C.R., McPherron R.L.* // J. Geophys. Res. 1974. V. 79. No. 19. P. 2811.

Polar geomagnetic disturbances and auroral substorms in the magnetic storm on April 20, 2020

**L. I. Gromova^{a, *}, N. G. Kleimenova^b, I. V. Despirak^c, S. V. Gromov^a,
A. A. Lubchich^c, L. M. Malysheva^b**

^a*Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere, and Radio Wave Propagation, Moscow, 108840 Russia*

^b*Schmidt Institute of Physics of the Earth, Moscow, 123995 Russia*

^c*Polar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia*

^{*}*e-mail: gromova@izmiran.ru*

The high-latitude geomagnetic disturbances (MLAT > 70°) during the first magnetic storm of the new solar cycle on April 20, 2020 were studied. Basing on the measurements of the ground-based magnetometers of the SuperMAG, Internmaget, IMAGE global networks, it was shown that the geoeffectiveness of the storm was rather high despite the low speed of the magnetic cloud caused the storm. The high-latitude vortices of the geomagnetic field were found that could indicate the local intensification of the field-aligned currents.

УДК 550.338.2

СЕЗОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ФАЗОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НАВИГАЦИОННЫХ СИГНАЛОВ И ОШИБОК ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ В АВРОРАЛЬНОЙ И ПОЛЯРНОЙ ИОНОСФЕРЕ

© 2022 г. И. И. Шагмуратов¹ *, М. В. Филатов², И. И. Ефишов¹,
Н. Ю. Тепеницына¹, Г. А. Якимова¹

¹Калининградский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки
“Институт земного магнетизма ионосферы и распространения радиоволн Российской академии наук”,
Калининград, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Полярный геофизический институт Кольского научного центра Российской академии наук”, Апатиты, Россия
*E-mail: shagimurатов@mail.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучена статистика проявления фазовых флуктуаций GPS сигналов и ошибок позиционирования по станциям Ну-Ålesund (78.9° с.ш., 11.9° в.д.) и Тромсø (69.60° с.ш., 19.20° в.д.) для марта, июня, октября и декабря 2015 г. Для Ну-Ålesund максимум флуктуаций наблюдается около магнитного полудня, а по Тромсø около полуночи. В сезонно/суточном поведении флуктуаций и ошибок позиционирования наблюдается их высокое согласие.

DOI: 10.31857/S0367676522120250

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что трансionoсферные сигналы подвержены флуктуациям/сцинтилляциям амплитуды и фазы (амплитудные, фазовые флуктуации) [1]. Флуктуации GPS сигналов обусловлены присутствием в ионосфере неоднородностей различных масштабов. Флуктуации зависят от широты, солнечной геомагнитной активности и местного времени [2]. Неоднородности структурированы по широте в соответствии с разделением высокоширотной ионосферы на субавроральную, авроральную, полярную шапку, касп. Высокочастотные (быстрые) флуктуации, носящие название сцинтилляций, обусловлены дифракцией сигналов на мелкомасштабных неоднородностях, размеры которых сравнимы с зоной Френеля. Низкочастотные (медленные) флуктуации обусловлены рефракцией сигнала на крупномасштабных неоднородностях размерами более 300 м [1]. Медленные флуктуации характеризуют флуктуации полного электронного содержания (TEC – Total Electron Content) вдоль луча спутник–приемник. На высоких широтах доминирующими являются фазовые флуктуации/сцинтилляции [3, 4]. В качестве меры интенсивности фазовых сцинтилляций может использоваться индекс $\delta\phi$ [2, 3]. При этом используются специализированные сцинтилляционные приемники с

высокой частотой измерений (50 Гц). Причем, данные с таких приемников, как правило, не доступны для большинства пользователей. В настоящее время в мире насчитывается большое количество станций, обеспечивающих регулярные стандартные GPS/ГЛОНАСС наблюдения, доступные для всех пользователей. Стандартные измерения позволяют получать данные о TEC с 30 с интервалом. Наиболее широко используемым индикатором флуктуационной активности являются параметр ROT (Rate OF TEC) и индекс интенсивности флуктуаций ROTI [5]. Индекс позволяет детектировать наличие ионосферных неоднородностей. Доступность, широкое повсеместное использование стандартных 30-секундных измерений во многом определило его использование в рассматриваемой работе. Между этими индексами выявлен достаточно значимый коэффициент корреляции 0.76 [6]. Следует отметить, что невозможно ожидать высокой, однозначной корреляции между ними. Во всяком случае, $\delta\phi$ характеризует флуктуации фазы сигнала, а ROT флуктуации TEC.

В полярной области (78°–82° магнитной широты) интенсивные флуктуации ассоциируются с полярными пятнами повышенной ионизации (polar patches), высыпаниями частиц в авроральном овале и каспе [7, 8]. В авроральной области фазовые флуктуации обычно наблюдаются в пе-

Таблица 1. Географические, исправленные геомагнитные координаты станций и время магнитной полуночи (UT)

Станция	Географические координаты		Исправленные геомагнитные координаты		UT (для магнитной полуночи)
	широта, град	долгота, град	широта, град	долгота, град	
NYA1	78.9	11.9	76.6	109.4	21:12
TRO1	69.7	18.9	66.9	102.2	21:14

риоды авроральных возмущений вблизи местной магнитной полуночи и тесно связаны с динамикой аврорального овала [9, 10]. В работе [11] показано, что при прохождении сигналов через области дискретных форм полярных сияний интенсивность флуктуаций и, соответственно, ошибки позиционирования существенно увеличиваются. Дискретные сияния характеризуются большой динамикой. На коротком интервале времени положение и форма сияний может существенно изменяться, что влияет на величину и динамику ошибок.

Сезонные проявления флуктуаций мало представлены в литературе. По GPS наблюдениям канадской сети высокоширотных станций дан анализ сезонных проявлений фазовых флуктуаций за период 2008–2013 гг. [4], для европейского сектора – за период 2010–2017 гг. по станции Ny-Ålesund [12].

В рассматриваемой работе представлен анализ сезонных проявлений фазовых флуктуаций и ошибок позиционирования в авроральной и полярной ионосфере в максимуме солнечной активности. В качестве меры интенсивности фазовых флуктуаций использовался индекс *ROTI*. Флуктуации могут вызывать сбои навигационных сигналов, срывы, скачки фазы и в конечном итоге могут приводить к нарушениям работы навигационных систем [13, 14]. Анализ ошибок навигационных измерений представлен в большей части для сильных магнитных бурь. В данной работе мы акцентировали внимание на оценках ошибок для условий слабо возмущенной ионосферы. Сезонное поведение ошибок позиционирования практически не представлено в литературе. Данные о вариациях ошибок особенно важны для навигации в Арктике.

ДАННЫЕ И МЕТОДОЛОГИЯ

В качестве исходных данных служили стандартные 30-секундные двухчастотные GPS измерения. Привлекались GPS наблюдения полярной

станции Ny-Ålesund (NYA1) и авроральной станции Tromsø (TRO1) (табл. 1).

Для оценки флуктуационной активности использовался индекс *ROTI*. Единица измерения *ROTI* – TECU/мин: 1 TECU = 10^{16} электрон/м². Основные аспекты методики освещены в работе [15, 16]. Индекс рассчитывался на 5 мин интервале для всех видимых станций спутников с углами возвышения спутников выше 20°. Мы применили дополнительную обработку полученных данных с целью выявления и коррекции фазовых сдвигов (cycle slips, потеря фазы, “перескок” фазы), а также устранения возможных выпадающих значений. Измерения корректировались на скачки фазы (cycle-slips) при их величине более 5 TECU на интервале 30 с [17].

В настоящее время разработаны методы и алгоритмы определения координат потребителя с точностью до сантиметров по измерениям одного приемника, при этом не привлекают измерения опорных станций PPP (Precise Point Positioning). Мы анализировали связь между интенсивностью ГЕС флуктуаций и ошибками позиционирования, используя GIPSY программу NASA (<http://apps.gdgps.net>). В алгоритме учитываются многие факторы, которые влияют на точность определения координат местоположения приемника [18]. В качестве входных данных использовались RINEX файлы, содержащие групповые и фазовые задержки сигналов с 30-секундным интервалом измерений. В процессе обработки удалялись данные с выбросами [6]. На выходе формировались x, y, z координаты точки наблюдения. На основе их рассчитывались 3D-ошибки (P_{3D}):

$$P_{3D}(i) = \sqrt{(x(i) - x_0)^2 + (y(i) - y_0)^2 + (z(i) - z_0)^2}, (1)$$

где x_0, y_0, z_0 – осредненные координаты точки наблюдения.

Ошибки определялись с 5 мин интервалом в кинематическом режиме.

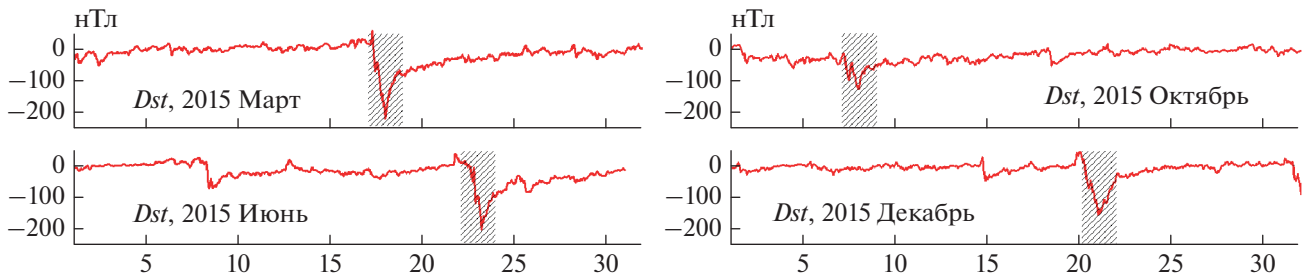


Рис. 1. Вариации Dst для марта, июня, октября и декабря 2015 г. Штриховкой отмечены интервалы, исключенные из анализа.

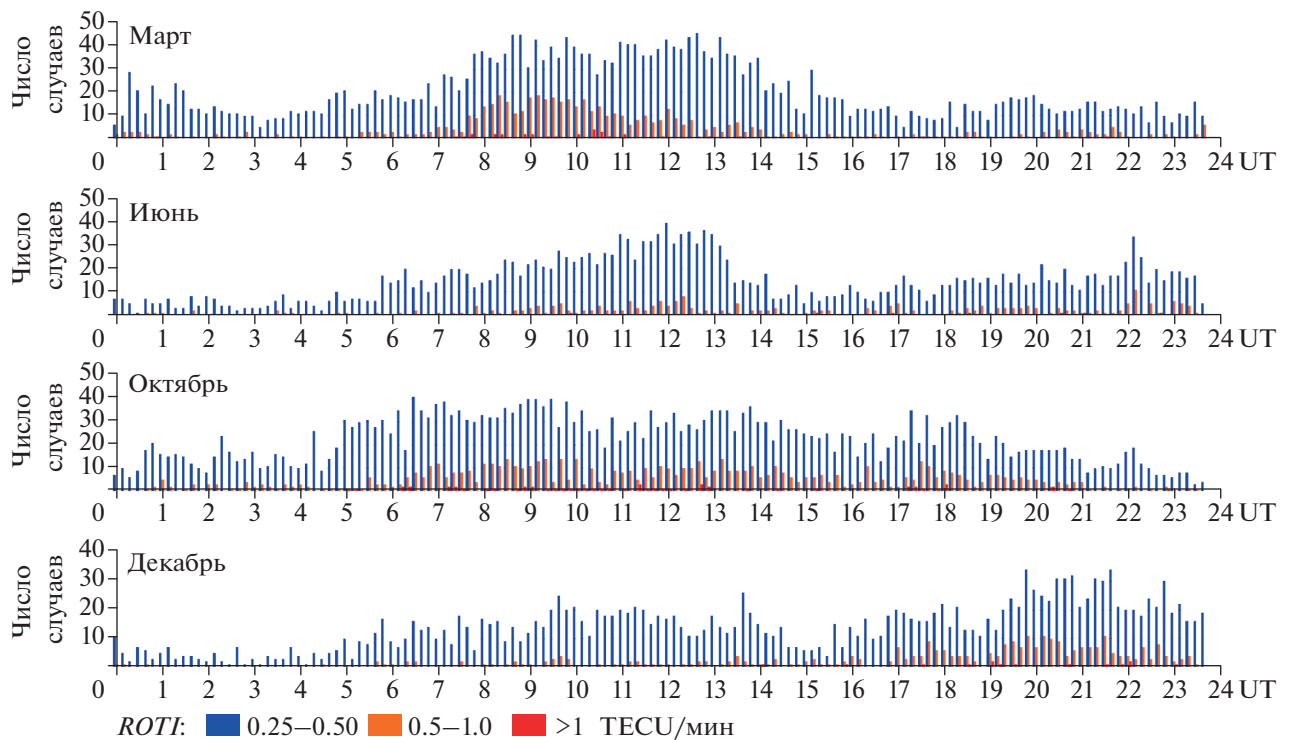


Рис. 2. Сезонно/суточное проявление интенсивности флуктуаций ($ROTI$) для каждого месяца по станции NYA1.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Геомагнитная обстановка

На рис. 1 показана геомагнитная обстановка для рассматриваемых месяцев. Известно, что во время магнитных бурь существенно увеличивается вероятность проявления флуктуаций и ошибки позиционирования [19, 20]. Анализ эффектов бурь показал, что проявления флуктуаций навигационных сигналов и их влияние на точность позиционирования являются индивидуальными для каждой бури. Для корректного анализа сезонных эффектов мы исключали из рассмотрения наиболее возмущенные дни. Следует отметить, что число дней, соответствующих умеренным

возмущениям, не превышало 5–10% от общего количества случаев.

Сезонные эффекты в полярной ионосфере

На рис. 2 показано суточное распределение интенсивности фазовых флуктуаций ($ROTI$) по станции NYA1 для разных месяцев. При этом исключались данные, которые приходились на магнитные бури. Индекс $ROTI$ рассчитывался день за днем в течение каждого месяца. Количество данных составляло около 8000 для каждого рассматриваемого периода. На рис. 2 показано суточное поведение $ROTI$ интенсивностью более 0.25 TECU/мин. Значения $ROTI$ меньше этой ве-

личины (слабые флуктуации) не зависят от времени суток и не представлены на рисунке.

Станция Ny-Ålesund обеспечивает мониторинг ионосферы в радиусе около 600 км в широтном диапазоне 78–82° магнитной широты [3, 12]. Проявления флуктуаций на этой станции ассоциируются с каспом, полярной шапкой, авроральными овалам [2]. Фазовые флуктуации часто наблюдаются на дневной стороне каспа на магнитных широтах 73.5°–80° в интервале 09–15 MLT (06–12 UT), полярной шапке на широтах выше 75° за исключением каспа, в области аврорального овала на широтах 65°–75° в интервале 19–02 MLT [4].

Как следует из рис. 2, в основном максимум проявления флуктуаций по станции Ny-Ålesund приходится на дневное время (около магнитного полудня), за исключением декабря. Обычно слабые флуктуации ($ROTI < 0.1–0.25$ TECU/мин) наблюдаются в любое время суток (не показано на рисунке). В марте просматривается четкий максимум в поведении интенсивности флуктуаций, вероятность проявления более интенсивных (сильных) флуктуаций ($ROTI > 0.5$ TECU/мин) приходится на время около 07–14 UT. Полученные результаты согласуются с данными работы [2]. Для июня в суточном распределении флуктуаций наблюдается похожее поведение. Существенно, что вероятность проявления сильных флуктуаций в июне в 1.5–2 два раза меньше, чем в марте равноденствие (рис. 2). В октябре дневной максимум в проявлении флуктуаций сохраняется, но менее выражен по сравнению с мартом и продлевается до вечерних часов в части интенсивных флуктуаций. В целом же в марте и октябре наблюдается подобие в суточном распределении проявления флуктуаций (в части преобладания дневных флуктуаций).

В декабре суточное распределение фазовых флуктуаций претерпевает существенное изменение. Известно, что максимум проявления флуктуаций зимой обычно приходится на магнитный полдень, исключением является максимум солнечной активности. Из рис. 2 следует, что для декабря дневной максимум менее выражен, в то же время интенсивность и вероятность флуктуаций хорошо проявляется в вечернее время.

Такому сезонному поведению флуктуаций можно сделать следующее пояснение. В полярной области наблюдаются различные виды возмущений, с которыми могут ассоциироваться флуктуации. Чаще всего интенсивные флуктуации ассоциируются с полярными патчами, полярными суббуриями [8]. Анализ данных магнитометров сети “image” (<http://space.fmi.fi/image>) по станции Ny-Ålesund показал, что в 30% случаев в

декабре 2015 г. регистрировались полярные суббури после 16–18 UT, что существенно больше, чем для марта. Дополнительно к этому можно указать следующее замечание. Степень проявления флуктуаций зависит от уровня солнечной активности: высокая в максимуме и более низкая в минимуме [2]. В декабре солнечная активность по отношению к марту уменьшилась почти в два раза (www.swpc.noaa.gov). Мы проанализировали результаты данных, представленных в работе [12], и выявили, что количественное проявление дневных флуктуаций в ноябре–декабре 2015 г. снизилось к мартовскому значению почти в 3 раза. В то время как для ночных это соотношение практически не изменилось. Это сказалось на соотношении степени дневного и вечернего проявления флуктуаций. Вероятно, с этими факторами связано наблюдаемое в суточном распределении усиление интенсивности флуктуаций на станции NYA1 для декабря в вечернее время.

Сезонные эффекты флуктуаций в авроральной ионосфере

На рис. 3 представлено проявление фазовых флуктуаций по станции TRO1 для рассматриваемых периодов. Станция TRO1 в ночном секторе чаще находится в области аврорального овала. Флуктуации навигационных сигналов в этой области ассоциируются с авроральной возмущенностью, высыпаниями энергичных частиц, полярными сияниями и тесно связаны с динамикой аврорального овала [9–11].

Для всех месяцев проявление флуктуаций и их интенсивность наблюдаются в районе магнитной полуночи. Минимальная флуктуационная активность, также как для Ny-Ålesund, наблюдается в июне. Особенно это характерно для сильных флуктуаций ($ROTI > 0.5$ TECU/мин). Вероятность проявления флуктуаций в июне в два с лишним раза меньше, чем в марте. В сезонном проявлении фазовых флуктуаций максимум приходится на март и октябрь. В декабре флуктуационная активность (в части сильных флуктуаций) в целом наблюдалась выше, чем в марте. Временной интервал проявления флуктуаций расширился в сторону более ранних часов.

Сезонные проявления ошибок позиционирования

На рис. 4 представлено временное распределение числа случаев, когда регистрировались ошибки определенной величины для разных месяцев.

В сезонно/суточной зависимости поведения интенсивности флуктуаций ($ROTI$) и ошибок по-

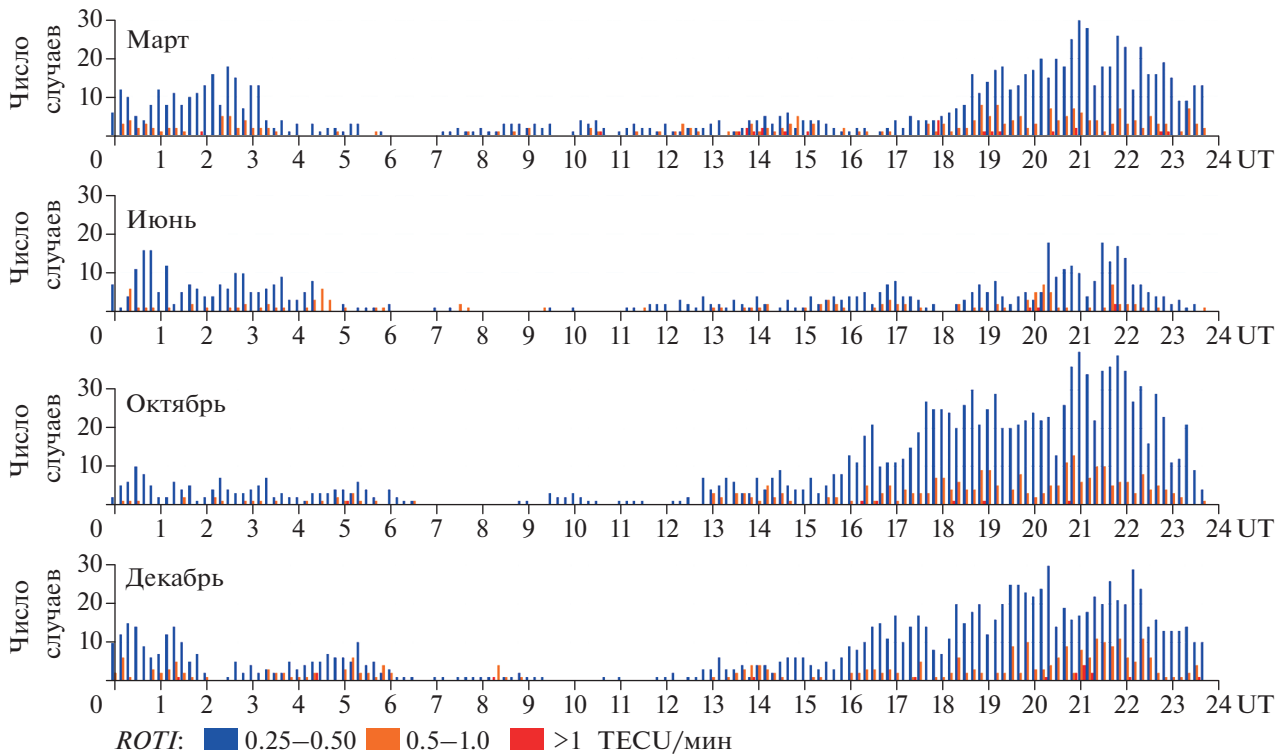


Рис. 3. Сезонно/суточное проявление флуктуаций по станции TRO1.

позиционирования наблюдается хорошее соответствие.

В работе [18] представлена статистика индекса ROTI и его корреляция с PPP ошибками. Выявлена нелинейная корреляция между этими величинами. По станции NYA1 коэффициент корреляции составил 0.39, а по TRO1 – 0.67.

Основное отличие в поведении ошибок по обеим станциям заключается в следующем. Для NYA1 максимальные ошибки регистрируются в дневное время (за исключением декабря), а для TRO1 в вечерние часы в районе магнитной полуночи. Для обеих станций магнитная полночь приходится примерно на 21 UT (табл. 1). В целом число случаев ошибок более 0.1 м для TRO1 в 2–3 раза больше, чем для NYA1.

Как следует из рис. 4, максимальная вероятность ошибок по станции NYA1, за исключением декабря, приходилась на дневное время. При этом в марте количество случаев ошибок в диапазоне 0.2–0.5 м составило около 10–12%. Процент ошибок выше 1 м составил величину около 4%. Минимальное число случаев ошибок выше 0.5 м регистрировалось в июне, и несколько больше в октябре. В декабре максимальное число случаев, когда регистрировались ошибки выше фоновой величины (0.03–0.05 м), приходилось на вечернее время, что согласуется с поведением индекса ROTI.

По станции TRO1 процент ошибок в рассматриваемом диапазоне максимален в марте и минимален в июне. Максимальные ошибки позиционирования на станции TRO1 наблюдаются в районе магнитной полуночи для всех месяцев. В июне число случаев ошибок более 0.2 м является редким событием.

Хорошо известно, что сильные флуктуации обуславливают увеличение погрешностей навигационных измерений. Следует отметить, что важным фактором, определяющим точность позиционирования, является не только интенсивность флуктуаций. Не менее важным является количество спутников, сигналы которых подвержены флуктуациям, что проявляется во время прохождения навигационных сигналов через дискретные формы полярных сияний [11]. При увеличении числа спутников, сигналы которых подвержены флуктуациям, максимальные ошибки могут превышать 5–10 м.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована статистика проявления фазовых флуктуаций GPS сигналов и ошибок позиционирования в полярной и авроральной ионосфере для марта, июня, октября и декабря 2015 г. Анализ касается спокойных и слабо возмущенных геомагнитных условий. В качестве исходных данных

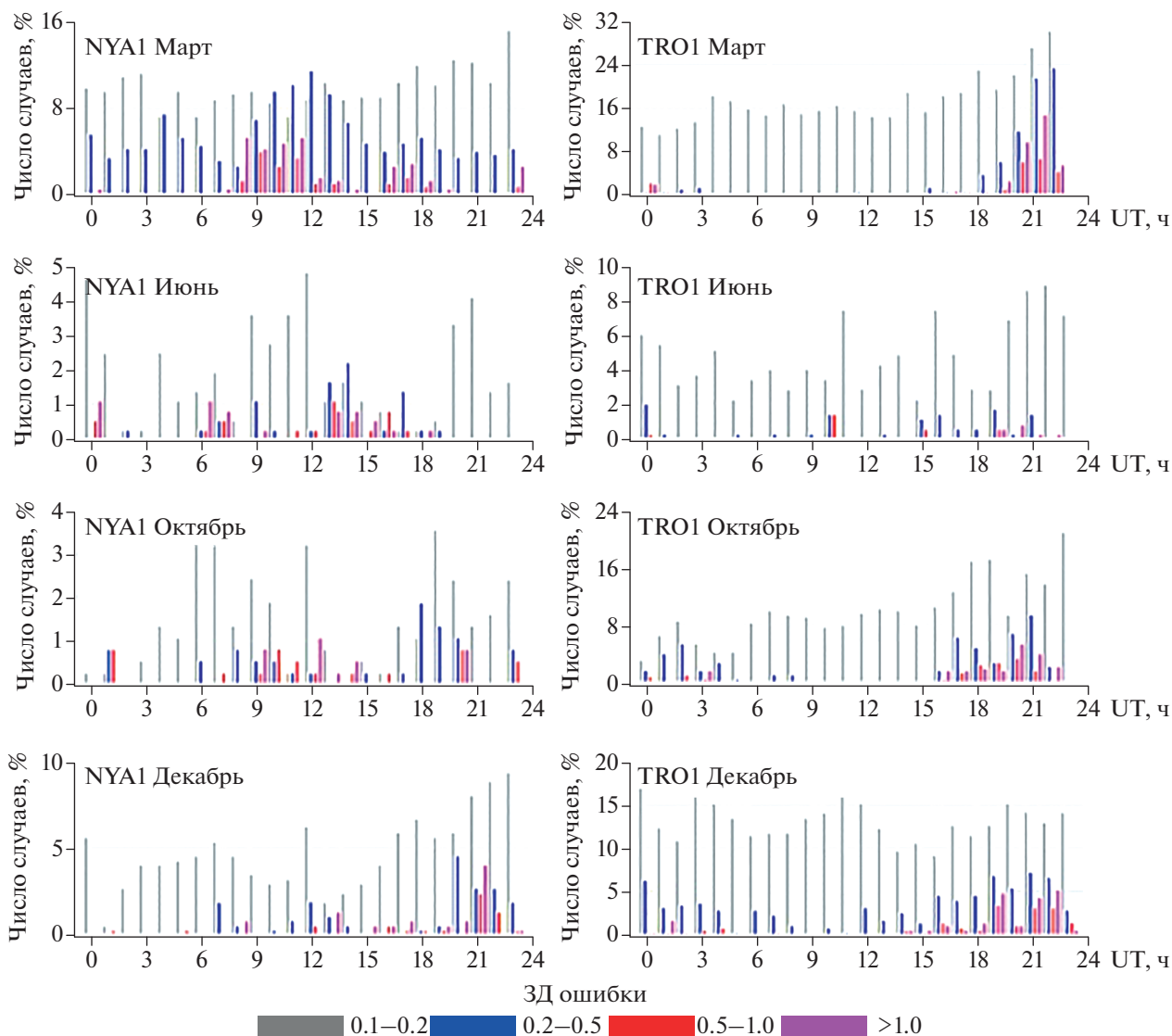


Рис. 4. Распределение 3D ошибок позиционирования в зависимости от времени для разных месяцев.

использованы GPS наблюдения станций NYA1 (76.6° с.ш. MLAT) и TRO1 (66.73° с.ш. MLAT). Активность флуктуаций оценивалась индексом *ROTI*. В целом, максимальная активность флуктуаций по станции NYA1 приходилась на дневные часы (8–13 UT), с максимумом в марте. Характерная особенность проявления флуктуаций наблюдалась в декабре, когда максимум флуктуаций был зарегистрирован в вечернее время (около магнитной полуночи). Вероятно, это обусловлено реакцией ионосферы на изменение солнечной активности, которая существенно снижалась после марта. По станции TRO1 флуктуации обычно регистрировались в районе магнитной полуночи. Наиболее низкая активность флуктуаций на обеих станциях регистрировалась в июне.

В целом ошибки позиционирования и интенсивность флуктуаций (*ROTI*) находятся в хорошем согласии. Крайне низкая вероятность проявления ошибок (более 0.1–0.2 м) была зарегистрирована в июне.

Максимальные величины ошибок могут составлять более 1 м, а в отдельные моменты превышать 5–10 м. Полученные результаты позволяют оценить влияние флуктуаций на точность позиционирования в Арктике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kintner P.M., Ledvina B.M., de Paula E.R. // Space Weather. 2007. V. 5. No. 9. Art. No. S09003.
2. Franceschi G., Spogli L., Alfonsi L. et al. // Sci. Rep. 2019. V. 9. P. 9232.

3. Spogli L., Alfonsi L., de Franceschi G. et al. // Ann. Geophys. 2009. V. 27. P. 3429.
4. Prikryl P., Jayachandran P.T., Chadwick R. et al. // Ann. Geophys. 2015. V. 33. P. 531.
5. Pi X., Mannucci A.J., Lindqwister U.J. et al. // Geophys. Res. Lett. 1997. V. 24. No. 18. P. 2283.
6. Pi X., Mannucci A.J., Valant-Spaight B. et al. // Proc. ION 2013 Pacific PNT Meeting (Honolulu, 2013). P. 752.
7. Jin Y., Moen J.I., Oksavik K. et al. // J. Space Weather Space Clim. 2017. V. 7. Art. No. A23.
8. Belakhovsky V.B., Jin Y., Miloch W.J. // Ann. Geophys. 2021. V. 39. P. 687.
9. Shagimuratov I.I., Chernouss S.A., Despirak I.V. et al. // Sun Geophys. 2018. V. 13. P. 89.
10. Черноус С.А., Филатов М.В., Шагимурастов И.И. и др. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 5. С. 77; Chernouss S.A., Filatov M.V. Shagimuratov I.I. et al. // Russ. J. Phys. Chem. 2018. V. 12. No. 3. P. 562.
11. Шагимурастов И.И., Филатов М.В., Ефишов И.И. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 3. С. 433;
12. Jin Y., Miloch W.J., Moen J.I., Clausen B.N. // J. Space Weather Space Clim. 2018. V. 8. Art. No. A48.
13. Jin Y., Oksavik K. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2018. V. 123. P. 7943.
14. Захаров В.И., Ясюкевич Ю.В., Тумова М.А. // Косм. иссл. 2016. Т. 54. № 1. С. 23.
15. Shagimuratov I.I., Krankowski A., Ephishov I. et al. // Earth Planets Space. 2012. V. 64. No. 6. P. 521.
16. Захаренкова И.Е., Черняк Ю.В., Шагимурастов И.И. и др. // Геомагн. и аэронаом. 2018. Т. 58. № 1. С. 76.
17. Sieradzki R., Paziewski J. // J. Space Weather Space Clim. 2019. V. 9. Art. No. A5.
18. Jacobsen K.S., Dähnn M. // J. Space Weather Clim. 2014. V. 4. Art. No. A27.
19. Yang Z., Morton Y., Zakharenkova I. et al. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2020. V. 125. No. 7. Art. No. e2019JA027681.
20. Yasyukevich Y., Vasilyev R., Ratovsky K. et al. // Remote Sens. 2020. V. 12. No. 10. P. 1579.

Seasonal features of phase fluctuations occurrence of navigation signals and positioning errors at auroral and polar ionosphere

I. I. Shagimuratov^{a,*}, M. V. Filatov^b, I. I. Ephishov^a, N. Yu. Tepenitsyna^a, G. A. Yakimova^a

^a*Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation of the Russian Academy, West Department, Kaliningrad, 236035 Russia*

^b*Polar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia*

*e-mail: shagimuratov@mail.ru

We presented a statistical study of the GPS signals phase fluctuations occurrence and positioning errors at Ny-Ålesund (78.9° N, 11.9° E) and Tromsø (69.60° N, 19.20° E) for March, June, October, and December 2015. The highest fluctuations activity at Ny-Ålesund was occurred around magnetic noon while at Tromsø do magnetic midnight. The seasonal/diurnal course of fluctuations and positioning errors show match well coincidence.

УДК 523.165

СТАТИСТИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ ФЛЮЕНСА МАГНИТОСФЕРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ БОЛЕЕ 2 МэВ С ГЕОМАГНИТНЫМИ И МЕЖПЛАНЕТНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В 1987–2021 гг.

© 2022 г. О. Н. Крякунова^{1, 2, *}, А. В. Белов³, А. Ф. Яковец¹, А. А. Абуни³, И. Л. Цепакина¹, Б. Б. Сейфуллина¹, М. А. Абунина³, Н. Ф. Николаевский¹, Н. С. Шлык³

¹Дочернее товарищество с ограниченной ответственностью
“Институт ионосферы”, Алматы, Казахстан

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн имени Н.В. Пушкова
Российской академии наук”, Москва, Россия

*E-mail: krolganik@yandex.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

По данным за 35 лет (1987–2021 гг.) измерений потоков магнитосферных электронов с энергией более 2 МэВ на геостационарных орбитах, скорости солнечного ветра и геомагнитной активности рассчитаны коэффициенты корреляции между суточным флюенсом электронов, скоростью солнечного ветра и A_p -индексом геомагнитной активности с различными временами запаздывания, а также между флюенсами электронов, рассчитанными в соседние дни. Разработана трехпараметрическая модель, позволяющая прогнозировать флюенс высокоэнергичных магнитосферных электронов на следующие сутки, основанная на предыстории поведения флюенса, данных об A_p -индексе геомагнитной активности и измерениях скорости солнечного ветра. Модельные расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными с высоким коэффициентом корреляции (0.82) для всего периода 1987–2021 гг.

DOI: 10.31857/S0367676522120213

ВВЕДЕНИЕ

Исследование связи потоков релятивистских электронов в радиационном поясе с различными параметрами межпланетной среды началось довольно давно, когда в статье [1] были рассмотрены корреляции между потоками электронов различных энергий >0.7 , >1.55 и >3.9 МэВ, скоростью солнечного ветра (V_{sw}), межпланетным магнитным полем и другими межпланетными параметрами. Была обнаружена корреляция потоков электронов радиационного пояса с V_{sw} . Зависимость потока электронов от скорости солнечного ветра и состояния межпланетного поля рассматривалась и в работах [2–5]. Однако в работе [6] на экспериментальных данных 1989–2010 гг. было получено, что связь потока электронов с V_{sw} гораздо сложнее, чем предполагалась ранее. Вместо примерно линейной корреляции между V_{sw} и логарифмом потока электронов авторы показывают распределение в форме треугольника, в котором средние потоки электронов с энергией 1.8–

3.5 МэВ с усреднением за 1 сутки имеют четко выраженный нижний предел, который линейно зависит от V_{sw} , и практически не зависящий от V_{sw} верхний предел. Хотя V_{sw} связана с потоком электронов сложным образом, она все же является ключевым параметром для прогнозирования уровня потока электронов.

Сложность физических процессов во взаимодействии солнечного ветра с магнитосферой, в результате чего происходит ускорение электронов и пополнение ими радиационных поясов, ведет к многофакторности зависимости потоков релятивистских электронов от состояния межпланетной среды и магнитосферы. Потоки высокоэнергичных электронов изменяются при взаимодействии магнитосферы с высокоскоростными потоками солнечного ветра, в результате чего происходят магнитные бури [7–11]. Однако далеко не все магнитные бури приводят к увеличению потока электронов во внешнем радиационном поясе. Часто во время магнитных бурь и после них проис-

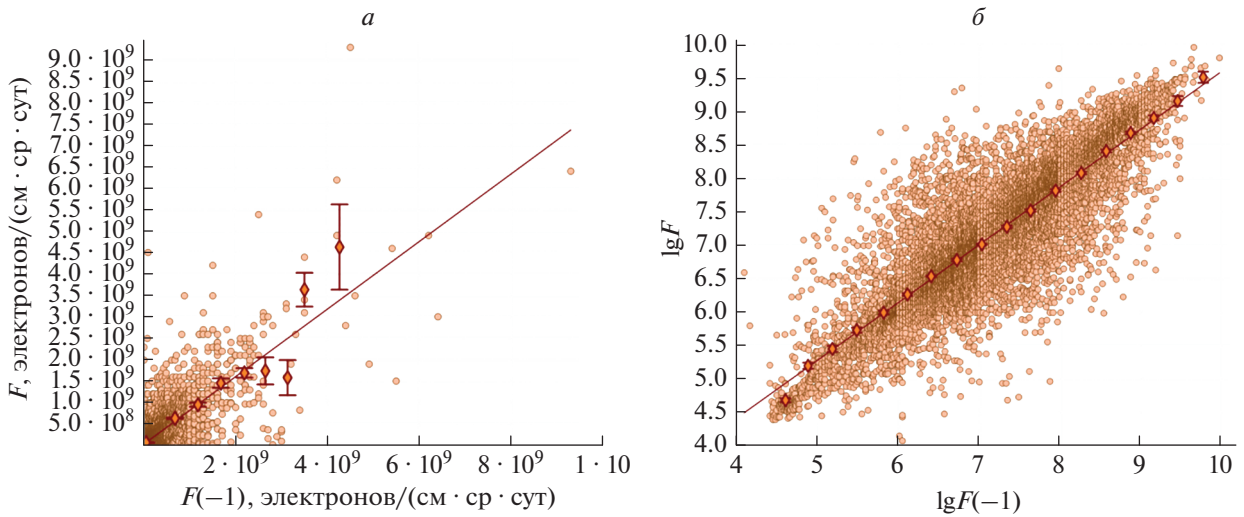


Рис. 1. Связь суточного флюенса высокоэнергичных (>2 МэВ) электронов $F(0)$ с флюенсом в предыдущий день $F(-1)$. Прямая соответствует линейной регрессии (а). Связь флюенса электронов с флюенсом в предыдущий день в случае степенного представления (б).

ходит уменьшение потоков электронов [12]. Зависимость потока высокоэнергичных электронов от возмущения магнитосферы неоднозначна и требует дальнейшего исследования.

В настоящей работе мы остановимся только на исследовании корреляционных связей суточных флюенсов электронов с параметрами околоземного и межпланетного космического пространства с различным временем запаздывания.

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДАННЫЕ

В качестве характеристик поведения электронов магнитосферного происхождения на геостационарных орбитах был выбран суточный флюенс (суммарный поток за сутки) релятивистских магнитосферных электронов с энергиями более 2 МэВ. Информация о высокоэнергичных электронах, характеристиках солнечной и межпланетной активности собрана в базе данных SGA (Solar and Geomagnetic Activity), созданной и поддерживаемой в ИЗМИРАН. Эта база данных содержит информацию о суточных флюенсах электронов, измеряемых на космических аппаратах серии GOES (<ftp://ftp.swpc.noaa.gov/pub/lists/particle/>) за 36-летний период (1986–2021 гг.), информацию о параметрах солнечного ветра из базы данных OMNI [ftp://spdf.gsfc.nasa.gov/pub/data/omni/high_res_omni], информацию о геомагнитной активности – K_p [<ftp://ftp.gfz-potsdam.de/pub/home/obs/kp-ap/wdc>], Dst [<http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp>] и A_p -индексы [<ftp://ftp.gfz-potsdam.de/pub/home/obs/kp-ap/wdc>]. База данных SGA обновляется в ежедневном режиме.

СВЯЗЬ ИЗМЕНЕНИЙ СУТОЧНОГО ФЛЮЕНСА ЭЛЕКТРОНОВ С МЕЖПЛАНЕТНЫМИ И ГЕОМАГНИТНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

Чтобы изучить связь изменений суточного электронного флюенса с межпланетными и геофизическими характеристиками, мы использовали различные среднесуточные параметры за период наблюдений высокоэнергичных (>2 МэВ) электронов на спутниках GOES (июнь 1987–2021 гг.).

Связь флюенса электронов со значениями флюенса за предыдущие дни

В поведении флюенса высокоэнергичных (>2 МэВ) электронов случаются резкие изменения ото дня ко дню, но в целом видна его значительная инерционность. Это предполагает значимую статистическую связь текущего значения $F(0)$ со значениями флюенса, наблюдавшимися в предыдущие дни $F(-1)$, $F(-2)$.

Из рис. 1 следует, что связь флюенсов $F(0)$ и $F(-1)$ за соседние дни достаточно тесная (коэффициент корреляции $K_F = 0.79$, рис. 1а). Если сравнивать флюенс $F(0)$ с $F(-2)$, то связь становится слабее (коэффициент корреляции $K_F = 0.55$), но остается достаточно явной. Наибольший коэффициент корреляции можно видеть в случае степенного представления (рис. 1б). В этом случае коэффициент корреляции $K_F = 0.86$.

Положительная корреляция (коэффициент корреляции 0.79) также существует между $F(0)$ и F_R – средним суточным флюенсом электронов за последний солнечный оборот (последние 27 дней).

Кроме инерционности в поведении флюенса электронов наблюдается и очевидная квазидвадцатисемидневная повторяемость. Поэтому существует корреляция между сегодняшним флюенсом и флюенсом, измеренным 27 дней назад. Учитывая, сдвиги солнечных структур (в первую очередь, корональных дыр), вращающихся вместе с Солнцем, лучше усреднять флюенс за 26–28 дни от сегодняшнего. Полученный таким образом индекс F_{27} коррелирует с $F(0)$ с коэффициентом 0.39. Напомним, что коэффициент корреляции суточного флюенса электронов с флюенсом в предыдущий день равен 0.79, что говорит, в целом, об инерционности потока высокоэнергичных электронов.

Таким образом, все обсуждавшиеся индексы, связанные с предысторией динамики электронного флюенса, а именно $F(-1)$, $F(-2)$, F_R , F_{27} , положительно коррелируют с текущим значением суточного флюенса и могут быть полезны для прогностических моделей.

Связь с индексами геомагнитной активности

Во время геомагнитных возмущений высокоэнергичные электроны ведут себя сложным образом, и их поток может изменяться на несколько порядков, как вверх, так и вниз [13, 14]. Поэтому трудно ожидать тесной связи электронного флюенса с геомагнитными индексами. Действительно, коэффициент корреляции между флюенсом $F(0)$ и Ap -индексом геомагнитной активности в тот же день $Ap(0)$ около нуля $K_{Ap} = 0.03$. Но корреляция возрастает, если использовать Ap -индексы предыдущих дней. Коэффициент корреляции между флюенсом $F(0)$ и $Ap(-1)$ $K_{Ap} = 0.17$. Если сдвинуться еще на день или два раньше, то коэффициент корреляции между флюенсом $F(0)$ и $Ap(-2)$ становится $K_{Ap} = 0.3$, а между флюенсом $F(0)$ и $Ap(-3)$ $K_{Ap} = 0.32$. Такая корреляция уже должна быть полезна для прогнозирования электронного флюенса. При сдвиге еще на день корреляция несколько уменьшается и коэффициент корреляции между флюенсом $F(0)$ и $Ap(-4)$ $K_{Ap} = 0.29$.

Еще лучшие результаты дает нелинейная корреляция степенной функцией. В этом случае коэффициент корреляции между логарифмом Ap в (-3) день и логарифмом электронного флюенса равен 0.43 (рис. 2). Максимальный коэффициент

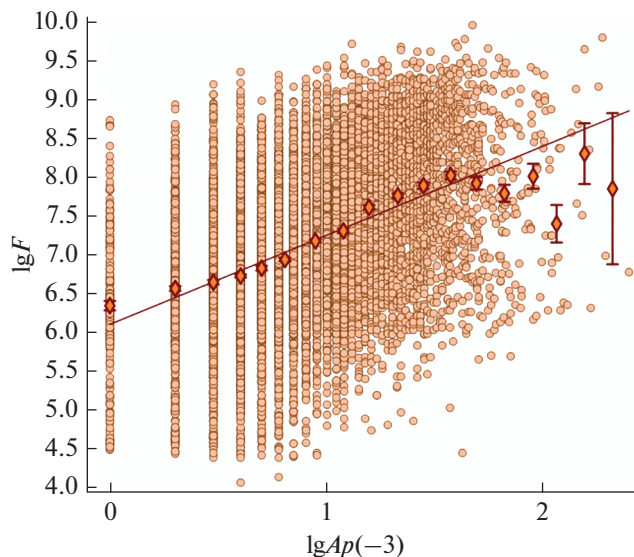


Рис. 2. Связь электронного флюенса и Ap -индекса геомагнитной активности в –день “–3”.

корреляции наблюдается с Ap -индексом, измеренным на 3 дня ранее.

Связь со скоростью солнечного ветра

Из всех характеристик межпланетной среды наиболее тесная связь флюенса высокоэнергичных магнитосферных электронов обнаружена со скоростью солнечного ветра.

Мы рассчитали характеристики линейной регрессии для связи электронного флюенса со скоростью солнечного ветра со сдвигом: от 0 до 3 дней. Соответствующие коэффициенты корреляции приведены в табл. 1 вместе с ранее обсуждавшимися результатами. При всех сдвигах имеется значимая корреляция, и она максимальна для скорости солнечного ветра при сдвиге на 2 дня.

Еще лучшие результаты дает нелинейная корреляция степенной функцией (рис. 3). В этом случае коэффициент корреляции между логарифмом V_{sw} в (-2) день и логарифмом флюенса равен 0.60. Поскольку V_{sw} меняется в сравнительно узких пределах, а флюенс меняется на несколько порядков, зависимость получается очень сильная: $F \propto V^{6.51 \pm 0.08}$.

Таблица 1. Коэффициенты корреляции между суточным флюенсом электронов и различными параметрами

Параметр	0 день	–1 день	–2 день	–3 день	–4 день
Флюенс электронов	–	0.79	0.55	–	–
Ap -индекс	0.03	0.17	0.30	0.32	0.29
Скорость СВ	0.24	0.37	0.43	0.38	–

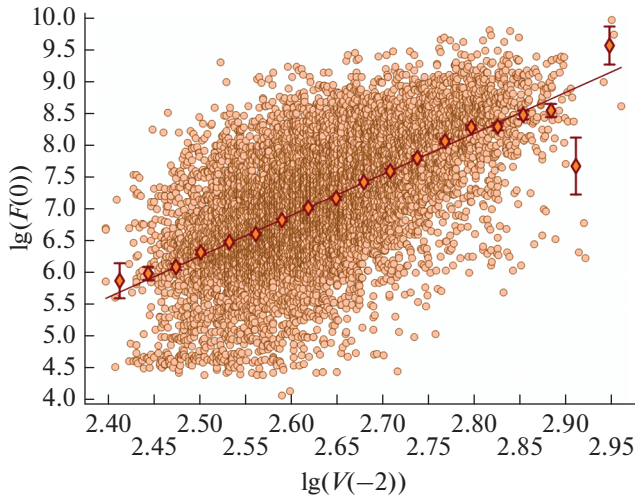


Рис. 3. Связь суточного электронного флюенса и скорости солнечного ветра со сдвигом на 2 дня в случае степенного представления.

Тесная корреляция флюенса потока электронов с флюенсом в предыдущий день ожидаема и определяется высокой инерционностью наблюдений потоков электронов. После спокойного дня с низкими значениями потока электронов почти всегда следует похожий спокойный день, а электронные возмущения длятся достаточно долго, поэтому вероятность высокого флюенса в следующий день достаточно велика. Корреляция со скоростью солнечного ветра и Ap -индексом может показаться низкой и недостаточно убедительной, но из-за длительного периода исследования ошибка коэффициентов корреляции мала, и не приходится сомневаться в прогностической значимости этих параметров.

На основе проведенного анализа был сделан вывод, что для создания эффективной прогностической модели флюенса высокоэнергичных магнитосферных электронов целесообразно комбинировать индексы, связанные с предысторией флюенса, с индексами, включающими скорость солнечного ветра и уровень геомагнитной активности.

Именно комбинирование таких индексов полезно для создания многопараметрической модели суточного флюенса высокоэнергичных магнитосферных электронов по формуле (1), в которой

$$F_M = a + bF + cV + dAp. \quad (1)$$

Моделирование суточного флюенса высокоэнергичных (>2 МэВ) магнитосферных электронов с помощью трех различных индексов дало наилучшие результаты (коэффициент корреляции $K_N = 0.82$) при использовании флюенса за предыдущий день $F(-1)$, скорости солнечного ветра за предыдущий день $V(-1)$ и Ap -индекса

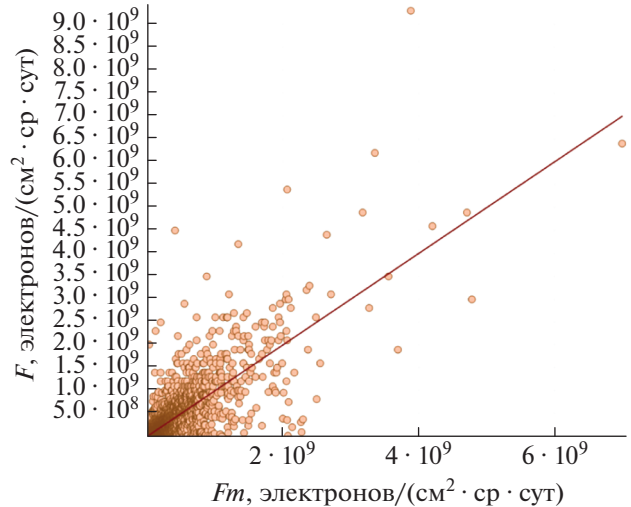


Рис. 4. Связь измеренного суточного флюенса высокоэнергичных (>2 МэВ) электронов с флюенсом, рассчитанным по трехпараметрической модели. Прямая соответствует линейной регрессии.

геомагнитной активности на 2 дня ранее $Ap(-2)$ (рис. 4).

Вместе со статистическими погрешностями регрессионных коэффициентов для выбранных параметров, имеем:

$$F_M = (-1.29 \pm 0.11) \cdot 10^8 + \\ + (0.882 \pm 0.010) F(-1) + \\ + (1.62 \pm 0.21) \cdot 10^6 V(-1) + \\ + (3.65 \pm 0.38) \cdot 10^5 Ap(-2).$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитанные коэффициенты корреляции между флюенсом высокоэнергичных магнитосферных электронов с энергией >2 МэВ, скоростью солнечного ветра и Ap -индексом геомагнитной активности за период (1988–2021 гг.) показали, что флюенс высокоэнергичных магнитосферных электронов практически не связан с уровнем геомагнитной активности в тот же день, но коррелирует с Ap -индексом геомагнитной активности, наблюдавшимся на 2–4 дня ранее с коэффициентами корреляции 0.30, 0.32 и 0.29 соответственно. Корреляция между логарифмом флюенса электронов и логарифмом Ap -индекса возрастает до 0.44. Флюенс электронов достаточно тесно связан со скоростью солнечного ветра, особенно со скоростью, измеренной на 2 дня ранее, с коэффициентом корреляции 0.43. Корреляция между логарифмом флюенса электронов и логарифмом скорости солнечного ветра составляет 0.60, что говорит о сильной связи между флюенсом электронов и скоростью солнечного ветра, так как скорость

солнечного ветра меняется в довольно узких пределах, а флюенс электронов меняется на несколько порядков.

На основе полученных зависимостей между флюенсом высокоэнергичных электронов и параметрами околоземной и межпланетной среды нами разработана трехпараметрическая модель, позволяющая прогнозировать суточный флюенс высокоэнергичных магнитосферных электронов, основанная на предыстории поведения флюенса, данных об *Ap*-индексе геомагнитной активности и измерениях скорости солнечного ветра. Модель показывает хорошее согласие с экспериментальными данными с коэффициентом корреляции 0.82 для всего периода 1987–2021 гг.

Работа выполнена при поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № AP08855916) и Аэрокосмического комитета Министерства цифрового развития, инноваций и аэрокосмической промышленности Республики Казахстан (программа BR11265408).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Paulikas G.A., Blake J.B. // Geophys. Monogr. Ser. AGU. 1979. V. 21. P. 180.
2. Blake J.B., Baker D.N., Turner N. et al. // Geophys. Res. Lett. 1997. V. 24. No. 8. P. 927.
3. Li X., Temerin M., Baker D.N. et al. // Geophys. Res. Lett. 2001. V. 28. No. 9. P. 1887.
4. Li X., D. N. Baker, M. Temerin et al. // Space Weather. Int. J. Res. Appl. 2005. V. 3. Art. No. S04001.
5. Lyons L.R., Lee D.-Y., Thorne R.M. et al. // J. Geophys. Res. 2005. V. 110. Art. No. A11202.
6. Reeves G.D., Morley S.K., Friedel R.H.W. et al. // J. Geophys. Res. 2011. V. 116. Art. No. A02213.
7. Reeves G.D., Morley S.K., Cunningham G. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2013. V. 118. P. 1040.
8. Mathie R.A., Mann I.R. // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. Art. No. 29783.
9. Miyoshi Y., Kataoka R. // Geophys. Res. Lett. 2005. V. 32. Art. No. L21105.
10. Miyoshi Y., Kataoka R. // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. Art. No. A03S09.
11. Reeves G.D. // Geophys. Res. Lett. 1998. V. 25. No. 11. P. 1817.
12. Reeves G.D., McAdams K.L., Friedel R.H.W., O'Brien T.R. // Geophys. Res. Lett. 2003. V. 30. No. 10. P. 1529.
13. Simms L.E., Pilipenko V.A., Engebretson M.J. et al. // J. Geophys. Res. Space Phys. 2014. V. 119. No. 9. P. 7297.
14. O'Brien T.P., McPherron R.L., Sornette D. et al. // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. No. A8. Art. No. 15533.

Statistical relationship of the fluence of magnetospheric electrons with the energy more than 2 MeV with geomagnetic and interplanetary characteristics in 1987–2021

O. N. Kryakunova^{a, b, *}, A. V. Belov^c, A. F. Yakovets^a, A. A. Abunin^c, I. L. Tsepakina^a, B. B. Seifullina^a, M. A. Abunina^c, N. F. Nikolaevsky^a, N. S. Shlyk^c

^a SLLP “Institute of Ionosphere”, Almaty, 050020 Kazakhstan

^b Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

^c Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 108840 Russia

*e-mail: krolganik@yandex.ru

Using dataset for 35 years (1987–2021) of measurements of >2 MeV magnetospheric electron fluxes in geostationary orbits, solar wind velocity, and geomagnetic activity, we calculated the correlation coefficients between the daily electron fluence, solar wind velocity, and the *Ap*-index of geomagnetic activity with different delay time, as well as between electron fluxes calculated on successive days. Based on the history data of fluence behavior, on data of the *Ap*-index of geomagnetic activity, and measurements of the solar wind speed, the three-parameter model was developed to predict the fluence of high-energy magnetospheric electrons for the next day. The model shows good agreement with experimental data with a high correlation coefficient (0.82) for the entire period 1987–2021.

УДК 550.338.1

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ВЫСЫПАНИЙ ДНЕВНОГО ПОЛЯРНОГО КАСПА ПРИ СЕВЕРНОМ МЕЖПЛАНЕТНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2022 г. В. Г. Воробьев¹, *, О. И. Ягодкина¹¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
“Полярный геофизический институт”, Апатиты, Россия

*E-mail: vorobjev@pgia.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Рассмотрены уникальные траектории спутников DMSP относительно дневного полярного каспа, позволяющие на временных интервалах 2–3 мин определить характеристики каспических высыпаний в различных секторах местного геомагнитного времени. Показано, что широтные размеры каспа зависят от местного геомагнитного времени и существенно различаются в предполуденном и послеполуденном секторах. В каспе может наблюдаться как крупномасштабный тренд изменения потоков энергии ионов с изменением местного геомагнитного времени, так и более мелкомасштабные вариации потоков энергии с долготными размерами ~100–150 км. Широтные размеры каспа определяются, главным образом, динамическим давлением солнечного ветра (P_{sw}). При уровне $P_{sw} = 17–19$ нПа ширина каспа составляет $2.0^{\circ}–2.5^{\circ}$ широты, в то время как при $P_{sw} \sim 1.0$ нПа – только $\sim 0.3^{\circ}$.

DOI: 10.31857/S0367676522120304

ВВЕДЕНИЕ

Дневные полярные каспы (по одному в каждом полушарии) представляют собой воронкообразную структуру в геомагнитном поле, через которую вдоль силовых линий возможно непосредственное проникновение плазмы солнечного ветра на высоты ионосферы. Исследование морфологии каспа, динамики и структуры каспических высыпаний является важным звеном в изучении процессов взаимодействия межпланетного магнитного поля (ММП) и плазмы солнечного ветра с магнитосферой Земли и механизмов проникновения в магнитосферу солнечной плазмы.

По сопоставлению спутниковых наблюдений на различных высотах получены характеристики частиц в различных областях высыпаний дневного сектора и определены критерии, позволяющие по наблюдениям высыпающихся частиц на низковысотных спутниках идентифицировать высыпания в каспе и в соседних с ним областях [1]. Создана автоматизированная система определения структуры высыпаний дневного сектора по данным низкоорбитальных спутников серии DMSP [2]. Быстрые орбиты и наличие нескольких спутников способствовали частым пересечениям области дневных высыпаний. Все это уже к началу 90-х гг. прошлого столетия позволило накопить достаточный наблюдательный материал для определения морфологических характеристик и динамики полярного каспа.

Статистические исследования (см. например, [1–3]) способствовали формированию некой усредненной модели каспа. Показано, что на высотах ионосферы касп представляет собой область с размерами $\sim 1^{\circ}$ по широте и ~ 2.5 ч местного геомагнитного времени (MLT) по долготе. Касп примерно симметричен относительно своей центральной части, как правило, расположенной в районе полуденного меридиана, и смещается в северном полушарии на ~ 1 ч MLT в предполуденную (послеполуденную) сторону при отрицательных (положительных) значениях V_z -компоненты ММП. Пик потоков энергии внутри каспа, в среднем, располагается ближе к его экваториальному краю, чем к приполюсному. Среднегодовая композиция спектрограмм высыпаний указывает на то, что свойства каспа сравнительно мало меняются с MLT. Такая среднестатистическая картина каспа поддержана схемами распределения высыпаний дневного сектора (см., например, [4]) и цитируется в целом ряде обзоров и научных исследований.

На больших и средних высотах свойства каспа наиболее детально исследовались по наблюдениям спутника Polar [5] и в рамках проекта Cluster [6]. Статистика наблюдений на этих спутниках, в целом, согласуется с результатами DMSP, добавляя некоторую детализацию. Так, например, в [5] исследованы 459 пересечений спутником Polar области каспа и показано, что в полдень среднее

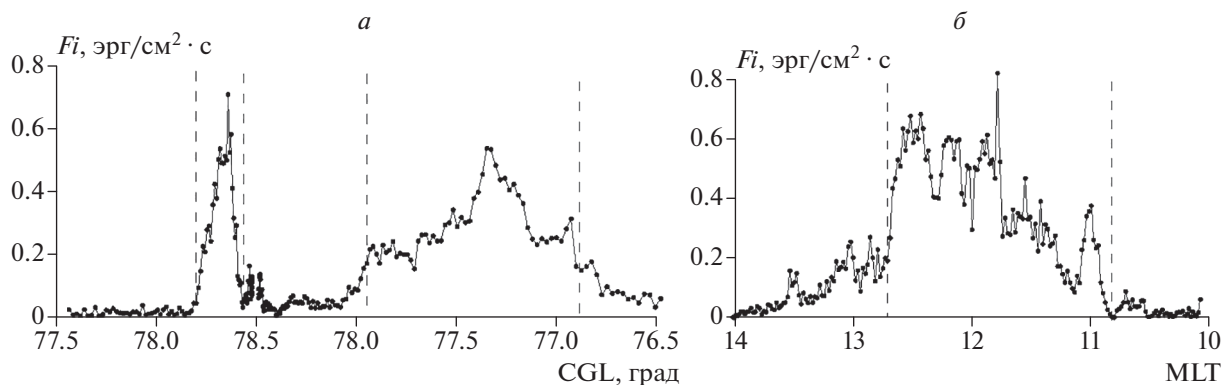


Рис. 1. Наблюдения каспа спутником F13. Вариации потоков энергии высыпающихся ионов (F_i , эрг \cdot см $^{-2}$ \cdot с $^{-1}$): 18 марта 2002 г. в интервале 10:06–10:10 UT (а) и 19 марта 2002 г. в интервале 11:35–11:38 UT (б). Границы каспа отмечены вертикальными штриховыми линиями.

положение центра каспа $\sim 80.3^\circ$ инвариантной широты и смещается к экватору на $\sim 1.5^\circ$ широты к 08:00 MLT и 16:00 MLT. Структура и динамика каспа определяются параметрами ММП и уровнем динамического давления солнечного ветра. Наблюдения на разных высотах в каспе указывают на его сильную изменчивость. В работе [6] (см. также ссылки там) отмечается быстрая реакция каспа на изменения ММП: в течение всего нескольких минут изменяется скорость конвекции в каспе и его конфигурация.

В этой связи разумно предположить, что рассмотренные выше среднестатистические характеристики каспа в естественных условиях наблюдаются крайне редко. Особенно это может касаться долготных характеристик каспа. Спутники при каждой регистрации каспа позволяют получить информацию только в очень ограниченной по MLT области, в то время как параметры каспа в других секторах MLT в этот период остаются неизвестными.

Целью настоящей работы является показать крайне редкие, уникальные конфигурации траектории спутников DMSP относительно каспа, позволяющие на коротких временных интервалах определить характеристики каспальных высыпаний в различных секторах MLT. В работе исследованы широтные размеры каспа в зависимости от параметров межпланетной среды и в отдельных, специально отобранных пролетах проведен анализ структуры высыпаний каспа при экстремальных значениях динамического давления солнечного ветра.

ДОЛГОТНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫСЫПАНИЙ

Все рассмотренные в настоящей работе индивидуальные пролеты спутников DMSP были зарегистрированы в северном полушарии при положительных значениях B_z компоненты ММП и

отрицательных значениях B_y компоненты. Орбиты спутников солнечно ориентированы, поэтому MLT и угол пересечения спутником дневного каспа сильно зависят от угла наклона геомагнитного диполя к плоскости эклиптики и от широтного положения самой области каспа. На рис. 1 представлены два уникальных пролета спутника F13, конфигурация орбит которого относительно каспа позволяет на коротких временных интервалах проследить характеристики высыпаний в различных секторах MLT. Положение экваториальной и приполюсной границ каспа определялось по критериям [1] и отмечены на рисунках вертикальными штриховыми линиями. На рис. 1а показаны вариации потока энергии высыпающихся ионов (F_i , эрг \cdot см $^{-2}$ \cdot с $^{-1}$) в интервале 10:06–10:10 UT 18 марта 2002 г. По горизонтальной оси отложена исправленная геомагнитная широта (CGL) траектории спутника на высоте 110 км. Сначала, по мере увеличения широты спутник пересек касп в послеполуденном секторе, экваториальную границу на $\sim 78.20^\circ$ CGL и ~ 13.1 MLT и приполюсную на $\sim 78.45^\circ$ CGL и ~ 12.6 MLT. Выше каспа по широте были зарегистрированы высыпания мантии. Затем с уменьшением широты спутник вновь пересекал область каспа, но уже в предполуденном секторе, приполюсную границу на $\sim 77.95^\circ$ CGL и ~ 11.2 MLT и экваториальную на $\sim 76.90^\circ$ CGL и ~ 10.40 MLT. В каспе поток энергии высыпающихся ионов максимален по сравнению с соседними областями высыпаний — мантией, полюсное каспа, и низкоширотным граничным слоем (LLBL) экваториальнее него. Положение максимумов F_i в каспе было зафиксировано на 12.8 MLT и 10.6 MLT с разницей по времени регистрации в ~ 2 мин. Поток энергии высыпающихся ионов в максимуме составляет ~ 0.6 эрг \cdot см $^{-2}$ \cdot с $^{-1}$ и был несколько больше в послеполуденном секторе, чем в предполуденном. Примерные широтные размеры каспа определялись по разности широт его приполюсной и экваториальной гра-

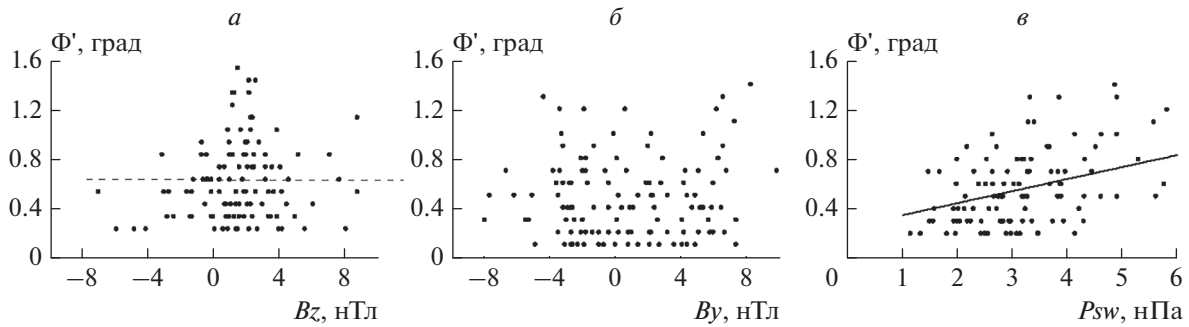


Рис. 2. Широтные размеры каспа ($\Delta\Phi'$) в градусах широты относительно Bz (а) и Vy (б) компонент ММП и динамического давления солнечного ветра (в).

ниц. В послеполуденном секторе ширина каспа составляла $\sim 0.25^\circ$, но касп значительно шире $\sim 1.0^\circ$ в предполуденные часы MLT. Узкий касп в послеполуденном секторе располагался в более высоких широтах, чем даже приполюсная граница каспа в предполуденные часы. Таким образом, центр каспа от предполуденных к послеполуденным часам смещается в более высокие широты под углом $\sim 10^\circ$ к геомагнитной параллели.

На рис. 1б показаны потоки энергии высыпавшихся ионов 19 марта 2002 г. в интервале 11:35–11:38 UT. В этом событии по горизонтальной оси показано положение спутника по MLT. Как и в предыдущем пролете, спутник начал регистрировать высыпания каспа в послеполуденном секторе и находился внутри каспа в течение ~ 1.5 мин в интервале долгот от 12.7 MLT до 10.8 MLT. Очень незначительные изменения широты спутника (менее 0.05°) на границах каспа дают основание полагать, что в этом пролете был зарегистрирован весь долготный интервал каспанных высыпаний. По крайней мере, как минимальный долготный интервал можно рассматривать размеры каспа ~ 2 ч MLT. Внутри каспа широта спутника менялась в пределах $80.90^\circ \pm 0.15^\circ$ CGL.

Как видно на рис. 1б, потоки энергии высыпавшихся ионов значительно изменялись в зависимости от MLT. Потоки максимальны в послеполуденном секторе ~ 0.65 эрг \cdot см $^{-2}$ \cdot с $^{-1}$ и быстро падают к предполуденным часам MLT. На примерно линейный тренд уменьшения Fi с уменьшением MLT накладываются крупномасштабные вариации потоков энергии с долготными размерами ~ 100 – 150 км. Геомагнитная активность в периоды регистрации каспа на рис. 1 была низкая ($AL > -200$ нТл), динамическое давление солнечного ветра $P_{sw} \sim 2.4$ нПа.

ШИРОТНЫЕ РАЗМЕРЫ КАСПА ПРИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УРОВНЯХ P_{sw}

Широтные размеры каспа меняются в пределах от нескольких десятых градуса до нескольких

градусов широты. Спутниковые наблюдения на различных высотах указывают на некоторое увеличение ширины каспа с ростом динамического давления солнечного ветра (P_{sw}). На статистическом материале наблюдений спутников DMSP в [7] показана тенденция к увеличению ширины каспа при больших абсолютных значениях Bz и Vy компонент ММП, однако разброс данных очень значительный. Трудность заключается в том, что большим значениям компонент ММП, как правило, сопутствуют большие уровни P_{sw} . Разделить влияние различных параметров солнечного ветра на размеры каспа не представляется возможным из-за небогатой в такие периоды статистики. Так, по наблюдениям спутников Polar и Cluster [5, 6] было только отмечено, что касп несколько шире при положительной полярности Bz компоненты ММП, чем при отрицательной.

В этой связи мы провели дополнительное изучение ширины каспа в зависимости от параметров межпланетной среды. Для этой цели использована база данных за 1986 г., созданная в [8] на основе данных спутника F7 для исследования структуры дневных высыпаний. Были отобраны пролеты спутника с зарегистрированной классической последовательностью областей дневных высыпаний с увеличением широты: LLBL-касмантия. Регистрация соседних к каспу областей является гарантией того, что спутник пересекал касп полностью, от его экваториальной до приполюсной границ. Рассматривались только области, которые более 4 раз (более 4 с полетного времени) регистрировались спутником. Всего за годовой период наблюдений было обнаружено 142 пересечения каспа, для которых были в наличии данные по плазме солнечного ветра и ММП.

На рис. 2а–2в показаны широтные размеры каспа ($\Delta\Phi'$) относительно Bz и Vy компонент ММП и P_{sw} соответственно. Рисунки 2а и 2б демонстрируют отсутствие в нашем наборе данных связи между шириной каспа и компонентами ММП. Расположение точек от Bz ММП (рис. 2а) скорее напоминает нормальное распределение ши-

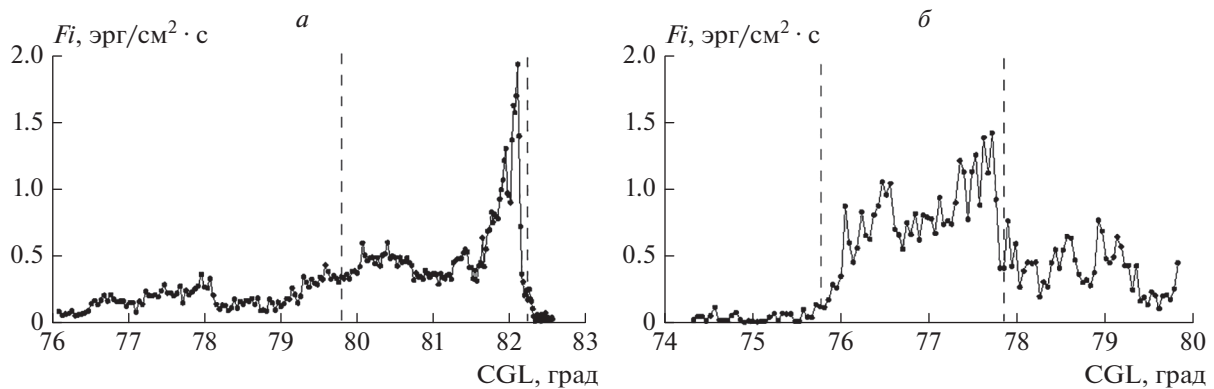


Рис. 3. Структура каспных высыпаний при экстремально высоких значениях динамического давления солнечного ветра 17.5 (а) и 19.0 нПа (б). Поток энергии высыпающихся ионов по наблюдениям спутников F14 в 14:23 UT (а) и F15 в 16:16 UT (б) 18 марта 2002 г.

рины каспа относительного среднего $Bz = -0.5$ нТл при средней/медианной ширине каспа $\langle \Delta\Phi' \rangle = 0.6^\circ$. Отсутствует какая-либо зависимость ширины каспа от знака и величины Bu компоненты ММП (рис. 2б). Однако рис. 2в при значительном разбросе данных ясно демонстрирует тенденцию к росту $\Delta\Phi'$ с увеличением P_{sw} . Сплошная линия на рисунке соответствует уравнению линейной регрессии $\Delta\Phi' = 0.25 + 0.10 P_{sw}$, коэффициент корреляции $r = 0.52$. В целом, рис. 2 дает основание полагать, что на ширину каспа наиболее эффективно влияет динамическое давление солнечного ветра, а не компоненты ММП, особенно при его положительной полярности, когда положение границ каспа фактически не меняется в зависимости от величины Bz компоненты.

Уровень динамического давления солнечного ветра, в среднем, составляет 2–3 нПа, а интервал наиболее вероятных изменений $P_{sw} \sim 1$ –6 нПа. Анализ характеристик высыпаний полярного каспа при экстремальных значениях P_{sw} , выходящих за рамки этого интервала, возможен только в отдельных, специально выбранных для этих целей спутниковых пролетах. На рис. 3а и 3б показана структура каспных высыпаний при экстремально высоких значениях динамического давления 17.5 и 19.0 нПа соответственно. По оси X на рисунке отложена исправленная геомагнитная широта. Как и на рис. 1, положение границ каспа отмечено вертикальными штриховыми линиями. На рис. 3а показана регистрация каспа спутником F14 18 марта 2002 г. в 14:23 UT. Ширина каспа в этом пролете, зарегистрированная на долготе 11.5 MLT, составляла $\sim 2.4^\circ$ широты. Поток энергии высыпающихся ионов демонстрирует ярко выраженный максимум на приполюсной границе каспа, менее ярко выраженное увеличение Fi наблюдалось около его экваториального края. На рис. 3б представлены данные по пересечению каспа спутником F15 в этот же день, но в 16:16 UT.

Ширина каспа в этом пролете составляла 2.1° на долготе ~ 11.0 MLT. Поток высыпающихся ионов вновь максимальны на приполюсной границе каспа, но демонстрируют и второй максимум меньшей амплитуды в его экваториальной части.

На рис. 4 представлены наблюдения каспа при экстремально низких значениях P_{sw} . На рис. 4а показана регистрация каспа спутником F18 31 мая 2013 г. около 13:44 UT на меридиане 11.7 MLT. При уровне динамического давления солнечного ветра $P_{sw} = 0.87$ нПа широтные размеры каспа очень незначительные и составляют 0.3° широты. Поток энергии ионов в каспе выше, чем в окружающих его областях высыпаний, но даже в максимуме всего $0.1 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Сравним с рис. 1а: здесь при $P_{sw} = 2.4$ нПа потоки энергии ионов достигали величин $\sim 0.6 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$.

При уровнях $P_{sw} < 0.5$ нПа нам не удалось обнаружить регистраций дневного полярного каспа. Это может быть по двум причинам. Во-первых, долготные размеры каспа в такие периоды могут быть очень незначительными, что существенно понижает вероятность попадания спутников в область каспных высыпаний. Во-вторых, очень низкие P_{sw} соответствуют очень низким потокам энергии солнечного ветра. В этом случае критерии определения каспа, выведенные в [1] для средне нормальных условий в солнечном ветре, могут быть сильно завышены, особенно по уровню потоков энергии ионных высыпаний. Крайне редко, но иногда, в околополуденном секторе наблюдаются небольшие области высыпаний, подобные высыпаниям каспа, но с потоками энергии ионов ниже уровня, определенного по критериям [1]. Один из таких примеров показан на рис. 4б при уровне динамического давления солнечного ветра 0.27 нПа, компоненты ММП: $Bz = 1.5$ нТл, $Bu = -1.3$ нТл. По горизонтальной оси, как и на рис. 1б, здесь отложено MLT траектории спутника. Область высыпаний, по-

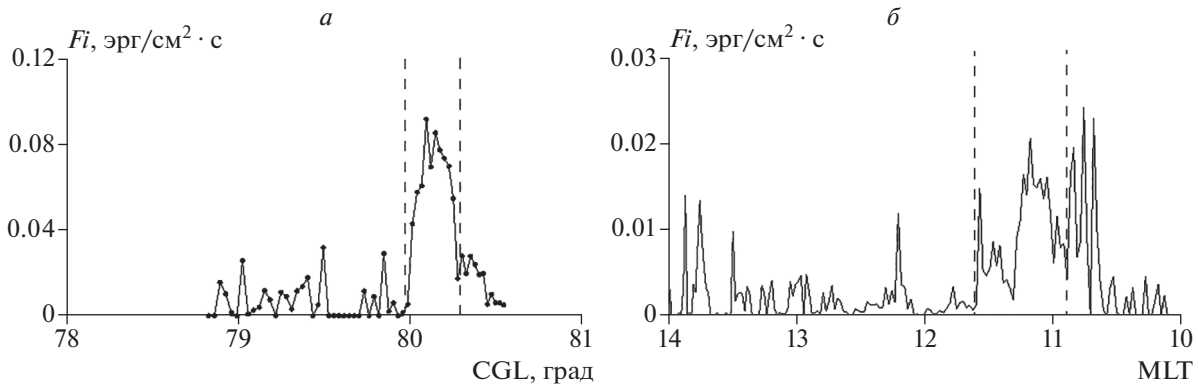


Рис. 4. Потоки энергии высыпавшихся ионов при экстремально низких значениях P_{sw} : наблюдения спутника F18 31 мая 2013 г. в интервале 13:43 UT–13:45 UT (а) и – 30 мая 2013 г. в интервале 11:25–11:28 UT (б).

добная высыпаниям каспа, зарегистрированная 30 мая 2013 г. спутником F16 в интервале 11:25–11:28 UT, выделена на рисунке вертикальными штриховыми линиями. В этой области средние энергии электронов и ионов и потоки энергии электронов соответствуют критериям [1], но потоки энергии ионов ниже стандартно регистрируемых в каспе. Размер такой каспообразной области по долготе составляют ~ 0.7 ч в интервале 10.9–11.6 MLT, а поток энергии высыпавшихся ионов в максимуме ~ 0.02 эрг \cdot см $^{-2}$ \cdot с $^{-1}$, что почти на порядок меньше, чем в событии на рис. 4а.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данные спутников серии DMSP использованы для исследования структуры ионных высыпаний дневного полярного каспа при северной ориентации B_z компоненты ММП. Рассмотрены уникальные конфигурации траектории спутников относительно каспа, позволяющие на коротких временных интервалах определить характеристики каспенных высыпаний в различных долготных секторах. Показано, что широтные размеры каспа зависят от MLT и существенно различаются в предполуденном и послеполуденном секторах. Обнаружено, что узкий касп в послеполуденном секторе располагался в более высоких широтах, чем даже приполюсная граница каспа в предполуденные часы. Это указывает на смещение центра каспа к полюсу от предполуденных к послеполуденным часам под углом $\sim 10^\circ$ к геомагнитной параллели.

В каспе может наблюдаться как крупномасштабный тренд изменения потоков энергии ионов с изменением MLT, так и более мелкомасштабные вариации потоков энергии с долготными размерами ~ 100 – 150 км. Последние, по всей вероятности, связаны с развитием неустойчивостей в области каспа.

Широтные размеры каспа определяются, главным образом, динамическим давлением солнечного ветра. При уровне $P_{sw} = 17$ – 19 нПа ширина каспа составляет 2.0° – 2.5° широты, в то время как при P_{sw} около 1.0 нПа – только $\sim 0.3^\circ$. Большим уровням P_{sw} в рассмотренных на рис. 3 событиях сопутствовали большие положительные значения B_z компоненты. Это создает определенные трудности в разделении влияния разных параметров на ширину каспа. Однако статистические исследования и данные по широтным размерам каспа при экстремальных уровнях P_{sw} позволяют нам сделать вывод о доминирующем влиянии динамического давления солнечного ветра на ширину каспа при северной ориентации ММП.

При больших уровнях P_{sw} поток энергии высыпавшихся ионов демонстрирует ярко выраженный максимум на приполюсной границе каспа. Второе, менее ярко выраженное увеличение потоков энергии наблюдалось около его экваториального края.

Возможное существование двойного максимума в потоках энергии высыпавшихся ионов при южной ориентации ММП было показано в [7]. В этой же работе представлена модель, основанная на теории магнитного пересоединения, предсказывающая появление двойного максимума при небольшой южной B_z компоненте и сильной азимутальной B_y компоненте ММП. Моделирование каспа при северном ММП, проведенное в [9], не показывает четко выраженного двойного максимума в ионной популяции. Возможно, наличие двойного максимума при $B_z > 0$ является атрибутом экстремально больших значений P_{sw} . В такие периоды возможно наличие двух источников ионов каспа из высокоширотного и низкоширотного переходного слоя.

При уровнях $P_{sw} < 0.5$ нПа по данным спутников DMSP не удалось обнаружить регистраций дневного полярного каспа. Предполагается, что в

периоды экстремально низких значений динамического давления солнечного ветра критерии определения каспа, выведенные в [1] для средне нормальных условий в солнечном ветре, могут быть сильно завышены.

Данные спутников DMSP взяты на страницах <http://sd-www.jhuapl.edu>; параметры ММП, плазмы солнечного ветра и индексы магнитной активности взяты на страницах <http://wdc.kugi.kyoto-u.ac.jp/> и <http://cdaweb.gsfc.nasa.gov/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Newell P.T., Meng C.-I.* // J. Geophys. Res. 1988. V. 93. No. A12. Art. No. 14556.
2. *Newell P.T., Wing S., Meng C.-I., Sigillito V.* // J. Geophys. Res. 1991. V. 96. No. A4. P. 5877.
3. *Newell P.T., Meng C.-I., Sibeck D.G., Lepping R.* // J. Geophys. Res. 1989. V. 94. P. 8921.
4. *Newell P.T., Meng C.-I.* // J. Geophys. Res. 1994. V. 99. No. A1. P. 273.
5. *Zhou X.W., Russell C.T., Le G., Fuselier S.A., Scudder J.D.* // J. Geophys. Res. 2000. V. 105. No. A1. P. 245.
6. *Pitout F., Bogdanova Y.V.* // J. Geophys. Res. 2021. V. 126. No. 9. Art. No. e2021JA029582.
7. *Wing S., Newell P.T., Rouhoniemi J.M.* // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. No. A11. Art. No. 25571.
8. *Старков Г.В., Реженев Б.В., Воробьев В.Г. и др.* // Геомагн. и аэронаом. 2002. Т. 42. № 2. С. 186.
Starkov G.V., Rezhenov B.V., Vorobjev V.G. et al. // Geomagn. Aeron. 2002. V. 42. No. 2. P. 176.
9. *Esmaili A., Kalaee M.J.* // Astrophys. Space Sci. 2017. V. 362. P. 124.

Features of the daytime polar cusp precipitation structure during the northward interplanetary magnetic field

V. G. Vorobjev^{a, *}, O. I. Yagodkina^a

^a*Polar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia*

^{*}*e-mail: vorobjev@pgia.ru*

The unique trajectories of DMSP spacecraft relative to the daytime polar cusp are considered, which make it possible to determine the features of the cusp precipitation in different longitude sectors for short 2–3 min time intervals. It is shown that the latitudinal widths of the cusp depend on the MLT and differ significantly in the pre-noon and afternoon sectors. A large-scale trend in ion energy fluxes with a change in MLT as well as smaller-scale variations in energy fluxes with longitude dimensions of ~100–150 km can be observed in the cusp. The latitudinal widths of the cusp are determined mainly by the solar wind dynamic pressure (P_{sw}). At $P_{sw} = 17–19$ nPa, the width of the cusp was $2.0^{\circ}–2.5^{\circ}$ latitude, while at $P_{sw} \sim 1.0$ nPa it was only $\sim 0.3^{\circ}$.

УДК 524.1-352

СОБЫТИЕ GLE73 (28.10.2021) В СОЛНЕЧНЫХ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧАХ**© 2022 г. Ю. В. Балабин¹, *, Б. Б. Гвоздевский¹, А. В. Германенко¹,
Е. А. Маурчев¹, Е. А. Михалко¹**¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
“Полярный геофизический институт”, Апатиты, Россия

*E-mail: balabin@pgia.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Представлен результат анализа события GLE73 в солнечных космических лучах. Событие GLE73 вызвало возрастание счета на 2–6% на полярных станциях мировой сети нейтронных мониторов. С помощью разработанной методики выполнено прямое решение обратной задачи, получены энергетические спектры солнечных космических лучей на границе магнитосферы, а также питч-угловое распределение потока.

DOI: 10.31857/S0367676522120067

ВВЕДЕНИЕ

События GLE (Ground Level Enhancement) обусловлены эруптивными процессами на Солнце, сопровождающимися солнечными вспышками или корональными выбросами масс. Такие процессы часто приводят к генерации на Солнце и испусканию в межпланетное пространство энергичных частиц (SEP) (в основном, протонов) с энергиями до сотен МэВ. События GLE – это экстремальные случаи SEP, когда энергия протонов превышает 430 МэВ (1 ГВ) [1].

Первое событие GLE нового 25 цикла солнечной активности произошло 28.10.2021 и было отмечено как на космических аппаратах, так и наземными станциями мировой сети нейтронных мониторов (НМ). В основном это были НМ, имеющие атмосферную жесткость обрезания 1 ГВ или близкую к ней геомагнитную.

Стоит отметить, что новое событий GLE продолжает серию событий малой амплитуды, начавшуюся еще в середине 24 цикла. Однако, достаточное число станций, зарегистрировавших его с амплитудой более 1% (средний порог флуктуаций на стандартном НМ), позволяет провести анализ события с использованием разработанной методики без упрощений. Методика требует наличия данных минимального количества станций с амплитудой более 2% [2]. Это количество строго не установлено, зависит от амплитуды возрастания на НМ. Из опыта анализа многих событий GLE минимальное число НМ для корректной работы методики составляет около двух десятков.

СОБЫТИЕ 28.10.2021

Продолжительность события составила ~3 ч, максимальная амплитуда составила 6%. Наибольшая амплитуда отмечена на станциях Калгари и Форт Смит в Северной Америке. Нейтронные мониторы в Апатитах и Баренцбурге (Шпицберген) отметили амплитуду в 2–4%. Событие (ему присвоено обозначение GLE73) произошло от активной области A2887 типа Beta-Gamma с координатами S28W02, вспышка класса X1.0, максимум рентгеновского излучения достигнут в 15:35 UT, тип вспышки II/VI. Самое раннее начало события отмечено в 15:55 UT на станции Южный полюс. Событие GLE73 вызвало возрастание потока космических лучей на 2–6% на полярных НМ; низкоширотные станции возрастания не отметили. Что касается среднеширотных станций, то небольшое число НМ, асимптотические конусы приема которых располагались вблизи оси анизотропии, возрастание тоже зарегистрировали. Это в первую очередь НМ Калгари, расположенный на высоте 1200 м. Приведенные факты указывают на то, что спектр солнечных космических лучей (СКЛ) был мягким. Межпланетная и геомагнитная обстановка в течение суток, когда произошло событие GLE, была спокойной, Kp-индекс составлял 1, Dst-индекс находился около 0, скорость и плотность солнечного ветра были умеренными. Это означает, что конфигурация межпланетного магнитного поля (ММП) в целом соответствовала типичной паркеровской спирали.

Созданная и используемая нами методика определения параметров потока первичных про-

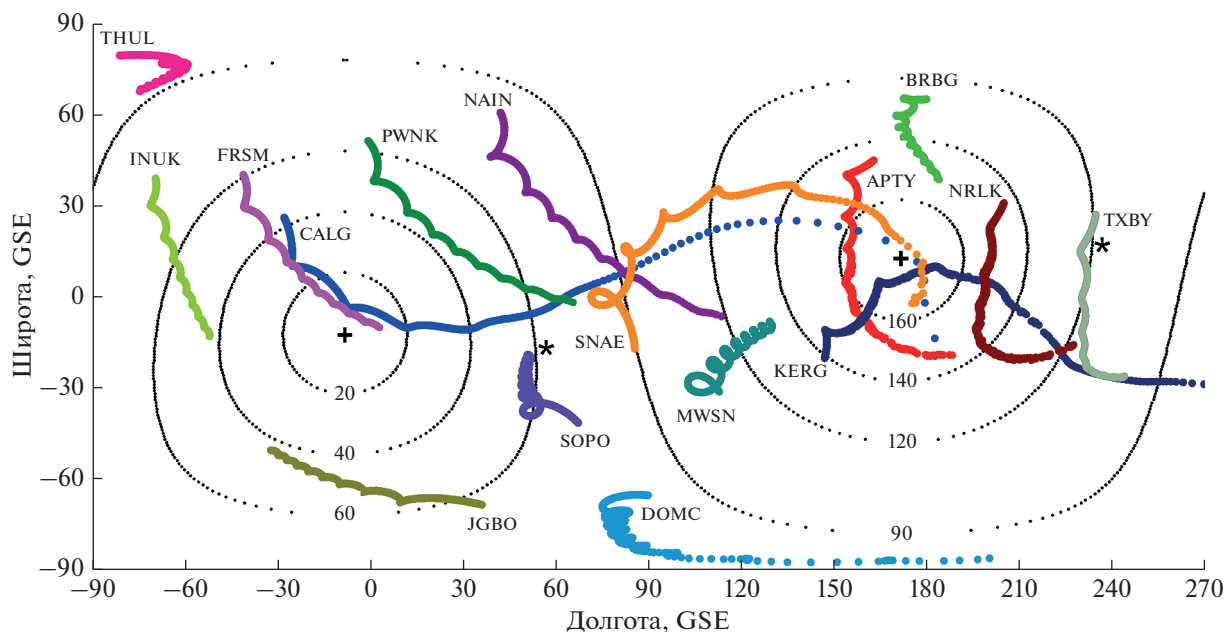


Рис. 1. Карта асимптотических конусов приема ряда высокоширотных станций для 17 UT. Обозначено: Thul – Туле, Inuk – Инувик, Frsm – Форт Смит, Calg – Калгари, Pwnk – Певанук, Jgbo – Джан Бого, Nain – Наин, SNAE – СА-НАЕ, SoPo – Южный полюс, Domc – Дом-Си, Mwsn – Моусон, Kerg – Кергелен, Apty – Апатиты, Brbg – Баренцбург, Nrlk – Норильск, Txby – Тикси. Знаками “+” обозначена вычисленная ось анизотропии СКЛ, знаками “*” – точки пересечения небесной сферы с осью ММП. Линии равных питч-углов показаны черными точками, числа около них показывают значение питч-угла.

тонов на границе магнитосферы требует расчета асимптотических конусов (АК) приема НМ с высокой точностью и с применением модели магнитосферы, наиболее точно описывающей состояние магнитосферы Земли. Использована хорошо зарекомендовавшая себя при анализе других событий GLE модель Цыганенко Т-01 [3], расчет АК выполнялся для всех станций в диапазоне жесткостей от атмосферного обрезания 1 до 20 ГВ. В нашей методике никакого усреднения и вычисления эффективной жесткости пенумбры (полутени) не производится, поскольку АК всех станций рассчитываются в указанном интервале жесткостей 1–20 ГВ с постоянным шагом 0.001 ГВ, а “запрещенные” жесткости (значения жесткости частиц, которые не способны проникнуть из межпланетного пространства к данной станции НМ) помечаются в специальном массиве и при вычислении отклика данного НМ исключаются из расчета. Такой путь устраняет ошибку, вносимую вычислением эффективной жесткости пенумбры, поскольку эта величина зависит от вида спектра, который до начала решения обратной задачи еще не известен. Рассчитанная нами карта асимптотических конусов приема ряда станций представлена на рис. 1. Названия станций помещены в края АК, соответствующего 20 ГВ. Положение оси анизотропии отмечено “+”, линии равных питч-углов показаны черными точками и указаны соответствующие значения

питч-угла. АК рассчитаны на 17:00 UT, использована модель магнитосферы Т-01.

В событии GLE73 станции НМ Калгари и Форт Смит имеют профили возрастания (рис. 2), типичные для GLE: довольно резкий фронт и медленный спад. Такое наблюдается, когда конусы приема станций оказываются вблизи оси анизотропии и принимают анизотропный поток, распространяющийся вдоль оси анизотропии с малым рассеянием и достигающий Земли первым. Плавное нарастание указывает на то, что станция принимает рассеянный поток частиц, плотность которого нарастает постепенно и с задержкой.

Небольшое число НМ располагается в горах. Из-за наличия барометрического эффекта амплитуда возрастания на этих станциях существенно больше, чем в случае расположения НМ на уровне моря в этой же географической точке. Это связано с тем, что эффективные длины пробега в атмосфере у галактических и солнечных космических лучей разные (~140 и ~100 г/см² соответственно); СКЛ сильнее поглощаются атмосферой [4]. Требуется приведение величины возрастания на разных высотах к единому барометрическому уровню. Поскольку большинство НМ располагаются вблизи уровня моря, за базовый уровень удобно взять 1000 мб. Приведение к одному барометрическому уровню проводится по методу двух

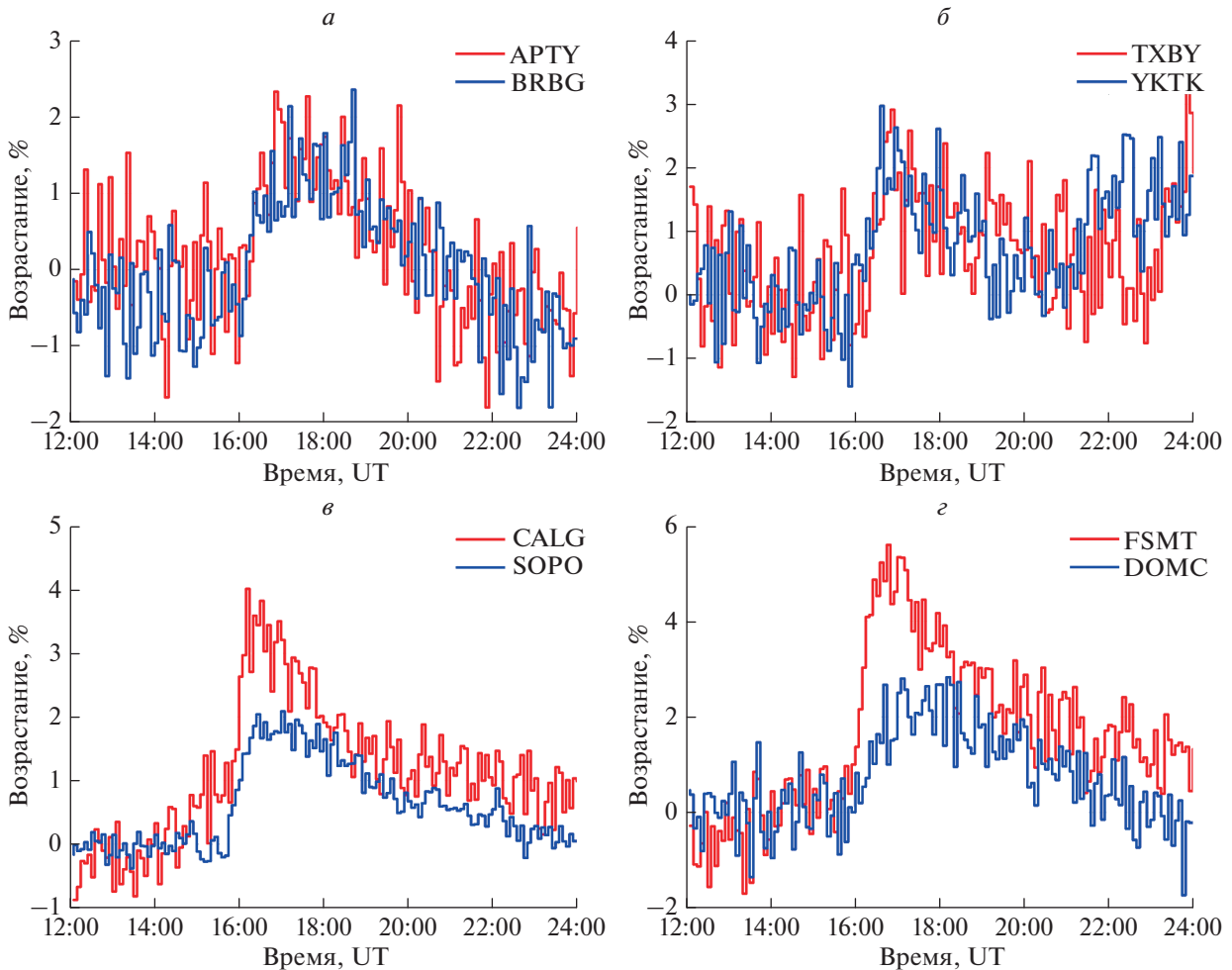


Рис. 2. Профили возрастания счета на станциях НМ: Apty – Апатиты, Brbg – Баренцбург (а), Txby – Тикси, Yktk – Якутск (б), Calg – Калгари, SoPo – Южный полюс и станция с наибольшей амплитудой возрастания, и станция с наибольшей амплитудой в событии GLE73 оказались Форт Смит и Певанук. Лишь после выполнения всех описанных процедур данные НМ могут быть использованы при решении обратной задачи.

длин ослабления [5]. Именно после внесения барометрической поправки НМ Южный полюс и Дом-Си перестали быть в числе станций с наибольшей амплитудой возрастания, и станция с наибольшей амплитудой в событии GLE73 оказались Форт Смит и Певанук. Лишь после выполнения всех описанных процедур данные НМ могут быть использованы при решении обратной задачи.

Несмотря на то, что средне- и низкоширотные НМ не показали возрастания потока СКЛ в событии GLE73, некоторое число НМ с нулевым возрастанием необходимо иметь в списке используемых станций. Такие станции с нулевым возрастанием задают лимит сверху на энергетический спектр СКЛ. Среднеширотные станции имеют протяженный АК, охватывающий у экватора более 180 градусов по долготу: наличие в потоке СКЛ частиц выше порога обрезания таких стан-

ций привело бы возрастанию потока на них. Используются российские и европейские среднеширотные НМ с жесткостью обрезания 3–5 ГВ: Новосибирск, Москва, Юнгфрау и др. Однако, избыток таких станций нежелателен, поскольку уменьшается средняя амплитуда возрастания (средняя по числу использованных НМ), уменьшается невязка, поиск минимума затрудняется. Поэтому низкоширотные станции Германус, Потшефсрум и др., которые заведомо не могли показать возрастания, при решении обратной задачи не использовались. Всего для анализа события отобраны 27 станций НМ, из них два десятка являются полярными и околополярными станциями.

От правильного вычисления АК зависит сходимость решения, поэтому требуется оценить соответствие установленных даты и времени, других параметров и вычисленных АК реальному положению.

нию Земли в пространстве. 17 UT соответствует повороту нулевого гринвичского меридиана на 75° в системе координат GSE от направления на Солнце. Апатиты располагаются на $\sim 35^\circ$ в.д. Снос протонов с жесткостью 10–20 ГВ в магнитосфере Земли составляет 40° – 60° в зависимости от состояния магнитосферы. В итоге АК Апатитов в области 10–20 ГВ должен располагаться в пределах долгот 150° – 170° . Межпланетное магнитное поле в спокойной обстановке протягивается от Солнца к Земле по паркерской спирали. На орбите Земли угол касательной к этой спирали отстоит от направления на Солнце к западу на 30° – 60° в зависимости от скорости солнечного ветра. Также известно, что АК Кергелена и Апатитов всегда пересекаются при не слишком возмущенной магнитосфере. Все сказанное соответствует карте на рис. 1.

МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Определение параметров СКЛ, приходящих на границу магнитосферы из межпланетного пространства, производится путем решения обратной задачи по данным наземной сети НМ. Другими словами, подбираются такие характеристики потока СКЛ (энергетический спектр, питч-угловое распределение, направление прихода), чтобы рассчитанные по этим характеристикам возрастания (отклики) на мировой сети НМ имели наименьшее расхождение с теми, которые реально зарегистрированы. Общая методика решения обратной задачи впервые предложена в [6].

Стоит отметить важный момент в любой методике решения обратной задачи. Формы функциональных зависимостей, задающих связь характеристик, неявно определяют и точность получаемого решения, и сам вид этих зависимостей. К примеру, задание степенной формы спектра ограничивает возможные решения только степенными зависимостями, и в случае, когда реальный спектр СКЛ имеет другую форму (к примеру, экспоненциальную), любое полученное решение будет иметь большую ошибку, которую невозможно устранить оптимизацией алгоритма или подбором других параметров.

Поэтому следует задавать вид зависимостей в самом общем виде. В нашей методике реализован такой подход. Жесткостной спектр СКЛ $I(R)$ задается в виде:

$$I(R) = J_0 R^{-\gamma - \Delta\gamma(R-1)}, \quad (1)$$

где J_0 – поток СКЛ при $R = 1$, γ – показатель спектра, $\Delta\gamma$ – поправка спектра.

Такая форма задания спектра была предложена в [7] и активно применяется в наших работах (см. например, [8]). Она позволяет получать раз-

нообразные формы спектра. При $\Delta\gamma = 0$ получается степенной спектр. Эмпирически установлено, что для любого разумного значения R_0 существует пара таких значений $(\gamma, \Delta\gamma)$, что на конечном интервале жесткостей 1–20 ГВ функциональная зависимость (1) будет с хорошей точностью совпадать с экспонентой с характеристической жесткостью R_0 . Другие значения пары $(\gamma, \Delta\gamma)$ задают спектр, промежуточный между степенной и экспоненциальной формами.

Питч-угловое распределение СКЛ может иметь различную форму [9]. Наиболее простая форма питч-углового распределения (ПУР) имеет вид гауссиана и использовалась в [6], когда вычислительные возможности были скромными, однако, она не всегда соответствует условиям распространения и рассеяния СКЛ в межпланетном пространстве. В событиях GLE наблюдались ПУР с линейной зависимостью [10], с провалом на углах $\sim 90^\circ$, с дополнительным потоком из обратного (антисолнечного) направления. Последнее возможно, когда в межпланетном пространстве от Солнца вытягиваются магнитные петлевые структуры, как показано в [11, 12]. Как и при задании спектра, важно создать наиболее общую форму, которая при разном значении параметров может принимать различные виды функциональной зависимости: гауссиан, линейная форма, двунаправленная и др. Нами была выбрана следующая форма задания питч-углового распределения:

$$F(\theta) = \exp\left(\frac{-\theta^2}{c}\right) \cdot \left[1 - a \exp\left(\frac{-\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^2}{b}\right) \right], \quad (2)$$

где θ – питч-угол, c – параметр, определяющий ширину ПУР, a множитель, стоящий в квадратных скобках, формирует особенность ПУР на углах, близких к 90° . Исследование выражения (2) показало, что возможности этой формы гораздо шире, чем просто формирование особенности на углах $\sim 90^\circ$. При этом все разнообразие форм ПУР достигается всего тремя параметрами. Комбинациями параметров (c, a, b) можно получить ПУР, имеющее линейную форму. При $a = 0$ выражение (2) приобретает вид простого гауссиана. При значениях $1 > a > 0$ и $b \ll c$ получается провал на питч-углах около 90° . При $a < 0$ в ПУР возникает “горб” около 90° . При $b \approx c$ возможно как смещение положения максимума ПУР с 0° на любой угол до 90° , если $a < 0$, так и линейное ПУР при $a > 0$. Выражение (2) использовалось при поиске решения обратной задачи для целого ряда событий GLE в [8, 11, 12].

Таблица 1. Параметры потока СКЛ в некоторые моменты времени

Время UT	J_0	E_0/γ	c	a	b	Ω	Φ
16:25	$3.12 \cdot 10^3$	0.58	5.4	0.86	4.88	5	13
16:30	$9.50 \cdot 10^2$	0.57	6.0	0.62	0.32	6	11
16:40	$1.87 \cdot 10^4$	0.34	7.9	0.75	7.01	-10	5
16:55	$3.70 \cdot 10^4$	5.3	9.9	0.58	1.51	3	-16
17:05	$9.80 \cdot 10^4$	5.6	10.4	0.84	6.36	-13	-11
17:45	$4.88 \cdot 10^4$	6.5	12.3	0.64	4.39	-15	-9

Окончательно выражение для вычисления отклика L -го НМ имеет вид:

$$\Delta N_L = \sum_{R=1}^{20} I(R) F(\theta_L(R)) S(R) A_L(R) dR, \quad (3)$$

где ΔN – возрастание на L -ой станции НМ, $S(R)$ – удельная функция сбора, заданная в табличном виде, $A_L(R)$ – массив, содержащий список разрешенных и запрещенных жесткостей для L -го НМ, который формируется при расчете АК. Суммирование ведется с тем же шагом по жесткости $dR = 0.001$ ГВ, как и расчет АК. Левая часть выражения является функцией от шести параметров (γ , $\Delta\gamma$, c , a , b , Ω , Φ). Углы Ω и Φ определяют положение оси анизотропии. Они неявно входят в (2), поскольку питч-угол определяется относительно некоторого направления, задаваемого углами Ω и Φ в сферической системе координат. Общая невязка по всей сети НМ выражается следующим образом:

$$G(\gamma, \Delta\gamma, c, a, b, \Theta, \Phi) = \sum_L (\Delta N_L(\gamma, \Delta\gamma, c, a, b, \Theta, \Phi) - \delta N_L)^2, \quad (4)$$

где δN_L – реально измеренное возрастание на L -ой станции НМ. G выражает сумму квадратов разностей между расчетным откликом НМ на поток СКЛ, заданный параметрами (γ , $\Delta\gamma$, c , a , b , Ω , Φ), и реальным возрастанием на НМ. Минимум функции G соответствует решению обратной задачи.

Поиск минимума многопараметрической функции является сложным делом, однако современные вычислительные возможности и новые численные методы позволяют получать вполне устойчивое решение выражения (4). Отметим, что исходя из предварительного анализа профилей возрастания, описанного выше, начальные значения параметров, перечисленных в функции G , могут быть установлены недалеко от точки минимума. Например, как было отмечено ранее, ось анизотропии находится между АК Инувика и Певанука вблизи АК Форга Смита и Калгари, показавших максимальное возрастание и резкий передний фронт. Это позволяет оставаться в обла-

сти устойчивого решения, облегчает и ускоряет поиск минимума выражения (4).

СПЕКТРЫ СКЛ

Для решения обратной задачи обычно используются пятиминутные данные НМ. Результатом является последовательность спектров и других параметров потока СКЛ в течение основного периода GLE, определенная с тем же пятиминутным шагом. Такая последовательность хорошо показывает динамику спектров СКЛ на протяжении GLE. Несмотря на то, что самое раннее начало возрастания отмечено в 15:55 UT, решение обратной задачи возможно выполнить только с 16:25 UT, потому что только к этому времени достаточное число НМ отметили амплитуду хотя бы в 2%. После 18:00 UT число станций, показавших достаточную для решения задачи амплитуду, снова стало меньше необходимого.

На рис. 3 представлены пересчитанные в энергетическую шкалу спектры СКЛ в некоторые моменты времени, а в табл. 1 даны численные значения параметров. Поток определен в единицах, указанных на графике спектров, во второй колонке приведена характеристическая энергия E_0 (ГэВ) или спектральный индекс γ ; значения E_0 стоят в колонке левее, а значения γ – правее), Ω и Φ приведены в градусах. На рис. 4 показаны питч-угловые распределения СКЛ.

Спектр в начале события (16:25 и 16:30 UT) имел экспоненциальную форму, затем начался переход к степенной форме спектра. Такое поведение соответствует большинству событий GLE, обработанных по нашей методике [11]. В 16:40 UT спектр еще экспоненциальный по форме, но существенно мягче: характеристическая энергия E_0 меньше. И далее ко времени достижения максимума к 17:00 UT спектр становится степенным. Интересно отметить, что, если судить по спектру, то поток в 16:30 UT уменьшился более чем в два раза. Однако, по ПУР видно, что уменьшение произошло только на малых питч-углах ($<40^\circ$), а на больших питч-углах уменьшение несущественное. Этому имеется простое объяснение: в случае кратковременной инжекции на Солнце движущиеся с малыми питч-углами частицы быстро достигли Земли единым сгустком и ушли дальше, что и показывает падение плотности потока на малых питч-углах, а рассеянные на больших питч-углах частицы медленнее дрейфуют вдоль линий ММП, расплывшись вдоль них. Также по ПУР видно, что после прохождения первого сгустка форма ПУР не меняется существенно, происходит только пропорциональное увеличение потока на всех углах с одновременным умягчением спектра.

На рис. 1 знаками “*” отмечено пересечение с небесной сферой прямой, вдоль которой расположен вектор ММП (назовем эту прямую “осью

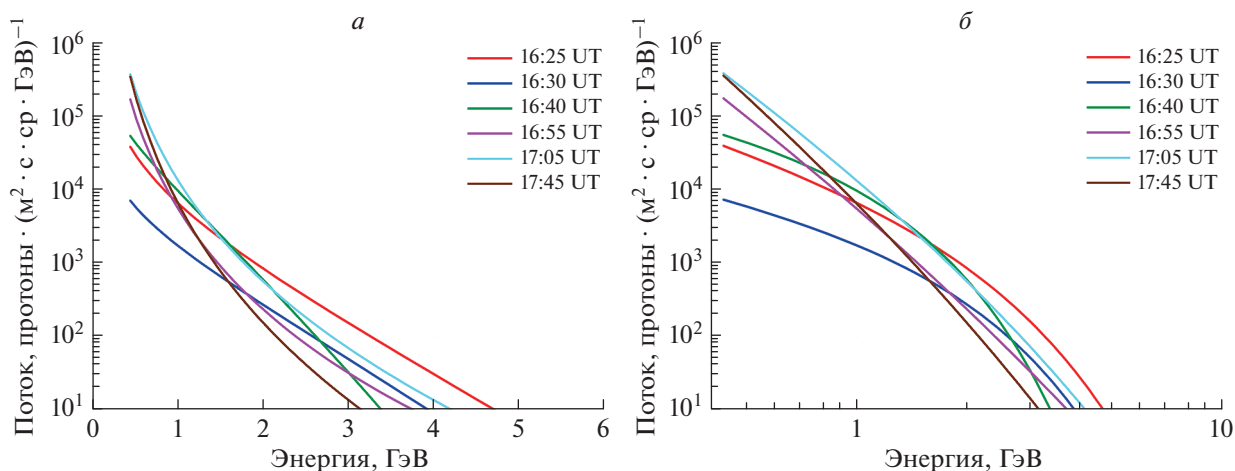


Рис. 3. Энергетические спектры СКЛ для характерных моментов времени в полулогарифмическом (*а*) и в двойном логарифмическом масштабе (*б*). Прямые линии на графике слева означают экспоненциальную зависимость. Прямые линии справа означают, что зависимость степенная.

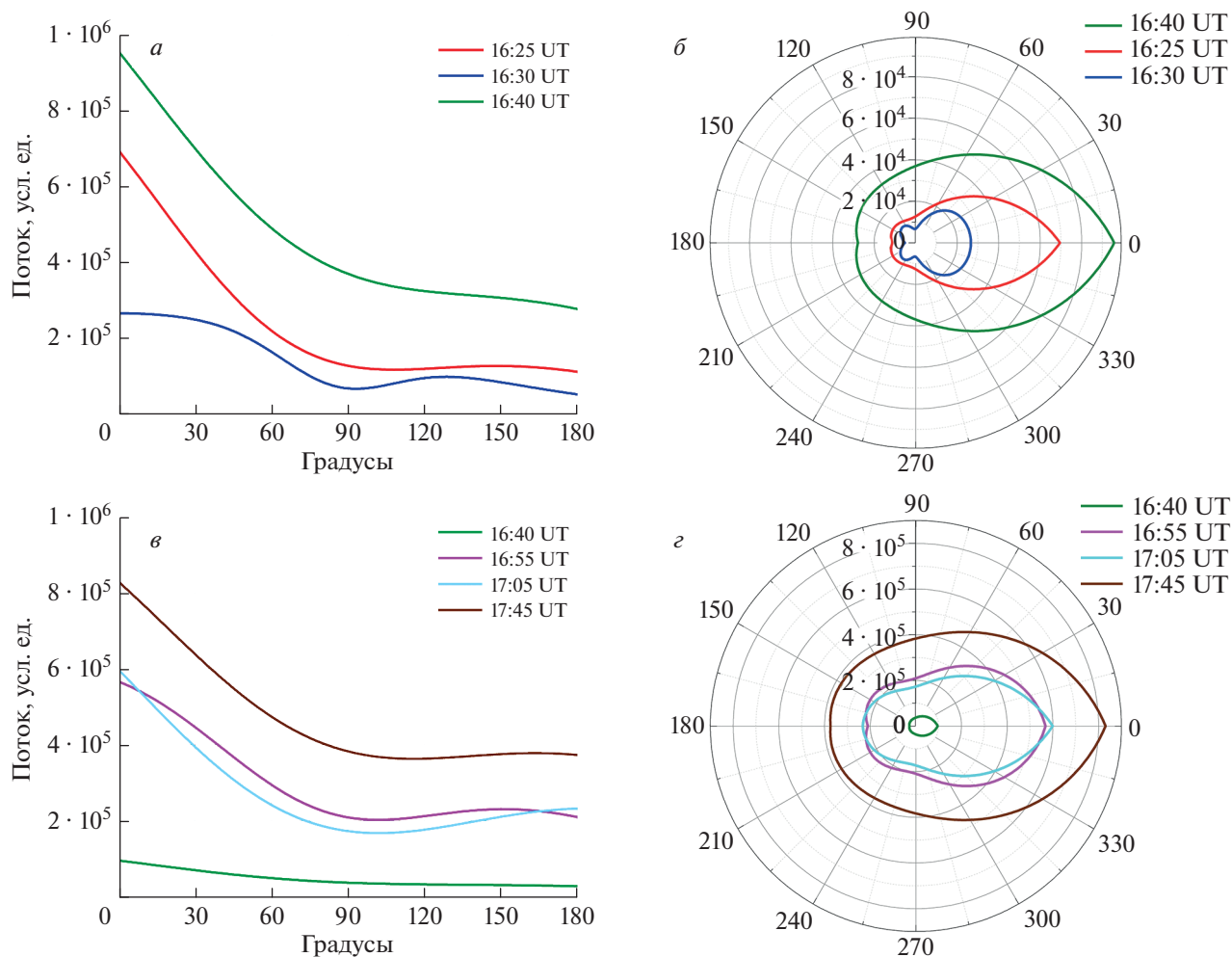


Рис. 4. Питч-угловые распределения потока СКЛ в 16:25, 16:30 и 16:40 UT в декартовых координатах (*а*); эти же ПУР в полярных координатах (*б*). Питч-угловые распределения СКЛ в 16:40, 16:55, 17:05 и 17:45 UT в декартовых координатах (*в*); эти же ПУР в полярных координатах (*д*). ПУР в 16:40 показано для соотнесения масштабов.

ММП”). Для распространяющихся в ММП протонов СКЛ направление вектора магнитного поля (от Солнца или к Солнцу) не имеет значения, важна силовая линия. Как видим, “ось ММП” располагается довольно далеко от вычисленной оси анизотропии. Причина в следующем. В течение второй половины дня 28 октября, как показывают данные АСЕ, напряженность ММП была слабой, всего ~ 3 нТл, компонента V_x сильно колебалась от -2 до 2 нТл, меняя знак, значение V_z держалось почти все время на положительных значениях, а V_y устойчиво имело отрицательные значения. При положительном V_x долгота “оси ММП” сместится к -60 градусам, при отрицательном — к 60 градусам. Именно это положение оси отражено на карте на 17 УТ. К таким быстрым колебаниям направления вектора ММП поток СКЛ малочувствителен. Вычисления показывают, что ларморовский радиус протона с жесткостью 1 ГВ в магнитном поле 3 нТл составляет более миллиона км. Таким образом, на движение СКЛ, которые имеют жесткость от 1 до нескольких ГВ, эта мелкомасштабная структура ММП не сказывается.

В целом событие GLE73 рядовое. Оно не выделяется ни по своим параметрам, ни по формам профилей. В течение всего 24 цикла GLE тоже имели малую амплитуду, и GLE73 в новом 25 цикле продолжает эту серию.

Обращает на себя внимание линейная форма ПУР (на пичч-углах $<90^\circ$) в течение почти всего события. Подобное наблюдалось в событиях GLE70 13.12.2006 [8] и в GLE71 (17.05.2012), тогда как в событиях 2000–2005 гг. и ранее подобное встречается очень редко [11]. Причина может быть в особенностях источника на Солнце в момент инжекции частиц. Возможно, причина также в слабом межпланетном магнитном поле и его слабой возмущенности. Эта особенность ПУР может быть предметом отдельной задачи исследования состояния ММП по СКЛ. Напомним, что линейная форма ПУР при решении обратной задачи не задавалась; она возникает в результате особой комбинации параметров (c , a , b), определяющих общую форму ПУР.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты анализа первого события 25 цикла в солнечных космических лучах (GLE73 28.10.21). Путем решения обратной задачи получены энергетические спектры и другие параметры потока солнечных космических лучей за пределами магнитосферы Земли на протяжении большей части события. GLE73 является рядовым событием. На начальной фазе спектр СКЛ имеет экспоненциальную форму, затем плавно переходит в степенной. Значения характеристической энергии $E_0 \approx 0.6$ ГэВ, показатель спектра равен $\gamma \approx 5.5$. Эти величины являются самыми типичными среди GLE [11].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-77-10018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Miroshnichenko L.I.* // J. Space Weather Space Clim. 2018. V. 8. Art. No. A52.
2. *Miroshnichenko L.I., Klein K.-L., Trotter G. et al.* // J. Geophys. Res. 2005. V. 110. Art. No. A09S08.
3. *Tsyganenko N.A.* // J. Geophys. Res. 2002. V. 107. P. 1176.
4. *Дорман Л.И.* Экспериментальные и теоретические основы астрофизики космических лучей. М.: Наука, 1975, 462 с.
5. *Каминер Н.С.* // Геомагн. и аэрон. 1967. Т. 7. № 5. С. 806.
6. *Shea M.A., Smart D.F.* // Space Sci. Rev. 1982. V. 32. P. 251.
7. *Cramp J.L., Duldig M.L., Flückiger E.O. et al.* // J. Geophys. Res. 1997. V. 102. № A11. Art. No. 24237.
8. *Вашенюк Э.В., Балабин Ю.В., Гвоздевский Б.Б., Шур Л.И.* // Геомагн. и аэрон. 2008. Т. 48. № 2. С. 157.
9. *Bieber J.W., Evenson P.A., Pomerantz M.A.* // J. Geophys. Res. 1986. V. 91. No. A8. P. 8713.
10. *Bieber J.W., Evenson P.A., Pomerantz M.A. et al.* // Astrophys. J. 1994. V. 420. P. 294.
11. *Vashenyuk E.V., Balabin Yu.V., Gvozdevsky B.B.* // Astrophys. Space Sci. Trans. 2011. V. 7. P. 459.
12. *Балабин Ю.В., Вашенюк Э.В., Мингалев О.В. и др.* // Астроном. журн. 2005. Т. 82. № 10. С. 940.

GLE73 28.10.2021 event in solar cosmic rays

Yu. V. Balabin^a, B. V. Gvozdevsky^a, A. V. Germanenko^a, E. A. Mauricev^a, E. A. Michalko^a

^a Polar Geophysical Institute, Apatity, 184209 Russia

*e-mail: balabin@pgia.ru

The result of the analysis of the GLE73 event in solar cosmic rays is presented. The GLE73 event caused an increase in the count by 2–6% at the polar stations of the world network of neutron monitors. With the help of the developed technique, a direct solution of the inverse problem was performed, the energy spectra of solar cosmic rays at the magnetosphere boundary, as well as the pitch-angle distribution of the flux, were obtained.

УДК 539.1.047:633.491:632.4:631.559

ВЛИЯНИЕ ПУЧКА УСКОРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 1 МэВ НА РОСТ И МИКРОФЛОРУ КАРТОФЕЛЯ

© 2022 г. Н. С. Чуликова¹, А. А. Малюга¹, У. А. Близнюк^{2, 3, *}, А. П. Черняев^{2, 3},
П. Ю. Борщеговская^{2, 3}, С. А. Золотов², А. Д. Никитченко², Я. В. Зубрицкая², Д. С. Юров³

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Сибирский федеральный научный центр агробиотехнологий Российской академии наук, Краснообск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,

Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва, 119991 Россия

*E-mail: uabliznyuk@gmail.com

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Изучено влияние электронного излучения с энергией 1 МэВ на продуктивность и фенологию картофеля, зараженного фитопатогеном *Rhizoctonia solani* Kühn. Установлено, что предпосадочное облучение семенных клубней низкоэнергетичным электронным излучением в дозе 30 Гр приводит к снижению количества пораженных заболеванием клубней в два раза, при этом урожайность картофеля уменьшается на 30%.

DOI: 10.31857/S0367676522120080

ВВЕДЕНИЕ

Применение ядерных технологий и сопутствующих им методов в аграрной промышленности способствует устойчивому развитию данного сектора экономики и позволяет эффективно решать целый ряд проблем в таких сферах, как контроль почвы, безопасность окружающей среды, селекция и генетика растений, борьба с насекомыми-вредителями и фитосанитарный контроль, продление сроков хранения, безопасность пищевой продукции и т.д. [1]. Эффективное использование малых доз ионизирующего излучения для продления сроков хранения овощей и фруктов, дезинфекции широкого спектра сельхозпродукции и ингибирования прорастания овощей при их длительном хранении подтверждается большим количеством отечественных и зарубежных исследований [2, 3].

Поражение культур грибковыми, вирусными и бактериальными заболеваниями снижает качество и количество производимой сельхозпродукции. Каждая культура имеет свой спектр заболеваний. Так фомоз (болезнь растений, вызываемая несовершенными грибами из рода *Phoma*) более свойственен капусте, томатам и свекле, в то время как фузариоз (заболевание растений, вызываемое

грибами рода *Fusarium*) имеет очень широкий круг хозяев [4–8].

Для картофеля одним из самых распространенных и вредоносных грибковых заболеваний является ризоктониоз (черная парша), которое поражает культуры в широком диапазоне температур и влажности почвы. Источником инфекции служат больные растения картофеля и некоторые сорные растения. Главными факторами передачи возбудителя являются почва и сами клубни картофеля. Ежегодные мировые потери картофеля от этого заболевания колеблются в диапазоне от 7 до 36%, а в Западной Сибири ежегодно теряется больше 50% продукции [9–11].

Источники ионизирующего излучения широко используются для обеззараживания микотоксинов и инактивации грибов в пищевой и сельскохозяйственной отраслях [12], а также для фитосанитарной обработки, где возможно как снижение, так и увеличение вирулентности и агрессивности фитопатогенов [13, 14].

Для радиационной обработки сельскохозяйственных культур разрешено применение рентгеновского и гамма-излучения с энергией до 5 МэВ, а также пучков ускоренных электронов с энергией до 10 МэВ. В последнее время в литературе обсуждается применение низкоэнергетич-

Таблица 1. Параметры облучения клубней

№ сеанса	Время облучения с двух сторон Δt , с	Ток пучка I , мкА	Значение заряда, поглощенного пластиной, при облучении с каждой из двух сторон, нКл	Поглощенная доза, Гр
1	32 ± 1	0.1 ± 0.002	$1270 \pm 40/1270 \pm 40$	20 ± 0.4
2	50 ± 1	0.1 ± 0.002	$4120 \pm 70/4080 \pm 70$	40 ± 0.8
3	100 ± 1	0.1 ± 0.002	$10170 \pm 200/10240 \pm 200$	100 ± 2
4	150 ± 1	0.1 ± 0.002	$15430 \pm 300/15220 \pm 300$	150 ± 3
5	200 ± 1	0.1 ± 0.002	$20320 \pm 400/20360 \pm 400$	200 ± 4

ного электронного излучения, требующего меньшей степени защиты персонала и позволяющего проводить поверхностную обработку биоматериалов без воздействия на их внутреннюю структуру [15, 16].

Целью данной работы являлось исследование влияния электронного излучения с энергией 1 МэВ на продуктивность и фенологию картофеля, зараженного *Rhizoctonia solani* Kühn.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Клубни картофеля сорта Lina в количестве 96 штук диаметром (4 ± 1) см с естественным заражением грибом *Rhizoctonia solani* Kühn с глубиной залегания склероциев гриба около 2 мм подвергали воздействию ионизирующего излучения. Источником излучения являлся линейный ускоритель электронов непрерывного действия УЭЛР-1-25-Т-001 с энергией 1 МэВ и средней мощностью пучка 25 кВт (НИИЯФ МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия).

Для облучения электронами в дозах 20, 40, 100, 150 и 200 Гр образцы клубней в количестве 8 шт. выкладывали на дюралюминиевую пластину с размерами 35 см \times 3 см. Количество клубней, облученных в одной дозе, составляло 16 шт. В целях равномерного распределения дозы по объему клубней проводили двухстороннее облучение картофеля. Контрольные образцы содержались в тех же условиях, что и образцы, подвергшиеся обработке. В каждом сеансе облучения измеряли значение заряда, поглощенного пластиной Q_{exp} , при этом погрешность определения заряда не превышала 3%. Значения заряда при обработке клубней с двух сторон, ток пучка, времена облучения и рассчитанные значения доз, поглощенные образцами, представлены в табл. 1.

Дозы облучения, поглощенные клубнями, рассчитывали с помощью компьютерного моделирования с использованием программного кода GEANT4, базирующегося на методе Монте-Карло. Клубни моделировали водным шаром диамет-

ром 4 см, облучаемым электронами с энергией 1 МэВ с двух противоположных сторон.

Расчет дозы, поглощенной водным шаром, осуществлялся по формуле

$$D_{model} = \frac{\Delta E_{model}}{M_{model}}, \quad (1)$$

где M_{model} – масса водного шара, ΔE_{model} – энергия, поглощенная шаром. Также в ходе моделирования фиксировался заряд Q_{model} , поглощенный водным шаром.

Зная значение заряда Q_{exp} , поглощенного дюралюминиевой пластиной в ходе облучения, ток пучка и время облучения, а также количество образцов в одном сеансе облучения (8 шт.), величину поглощенного каждым образцом заряда можно получить по формуле:

$$Q_{obj} = \frac{Q_{full} - Q_{exp}}{8}, \quad (2)$$

$$Q_{full} = \frac{I \Delta t}{2}, \quad (3)$$

где I – ток пучка, Δt – время двухстороннего облучения образцов.

Зная значения Q_{model} и Q_{obj} полученные в результате моделирования и экспериментального измерения, доза, поглощенная клубнем, вычислялась по формуле

$$D_{obj} = \left(\frac{Q_{obj}}{Q_{model}} \right) D_{model}. \quad (4)$$

По результатам расчетов проводили картирование распределения дозы по срезам водного фантома. Для расчета распределения поглощенной дозы в различных сечениях водного шара пространство вокруг него, представляющее собой куб с ребром 4 см, разбивалось на $40 \times 40 \times 40$ кубических ячеек с ребром 1 мм. Центр куба совпадал с центром шара. В объеме каждой ячейки фиксировалась сумма энергий E_i , поглощенных в результате взаимодействий электронов с веществом шара, значения квадратов энергий E_i^2 , а

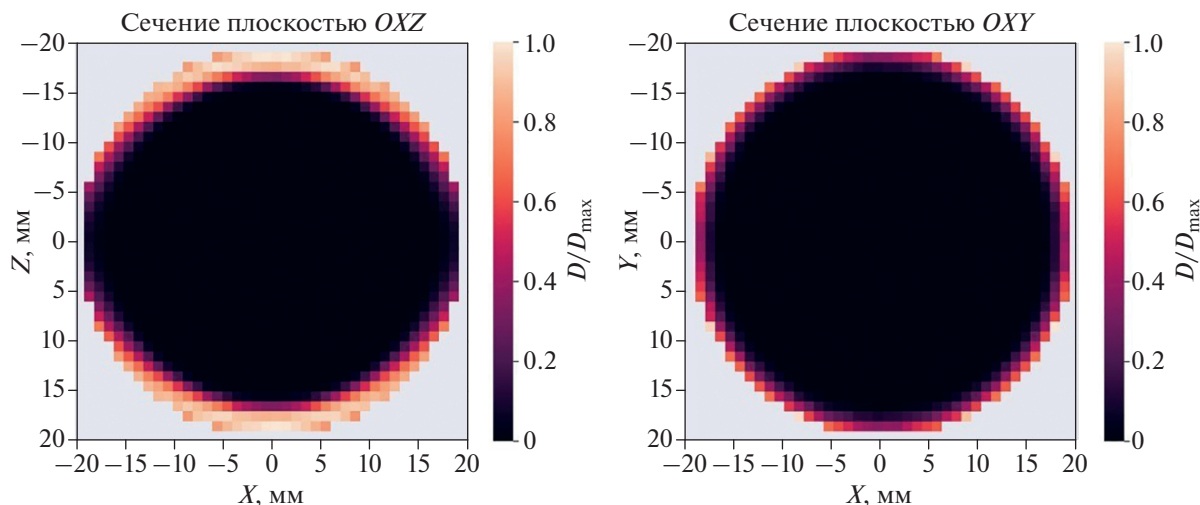


Рис. 1. Карта распределения относительной поглощенной дозы в перпендикулярном и параллельном первоначальному направлению пучка срезах, диаметр которых соответствовал диаметру водного шара, при двустороннем облучении пучком ускоренных электронов с энергией 1 МэВ.

также число произошедших в ячейке взаимодействий. Для каждой ячейки оценивалась величина поглощенной дозы и среднеквадратичное отклонение для оценки ошибки определения поглощенной дозы:

$$D_i = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} E_{ij}}{m_i}, \quad (5)$$

$$S_i = \sqrt{\frac{1}{N_i - 1} \sum_{j=1}^{N_i} E_{ij}^2 - \left(\frac{1}{N_i - 1} \sum_{j=1}^{N_i} E_{ij} \right)^2}, \quad (6)$$

где $\sum_{j=1}^{N_i} E_{ij}$ – сумма потерь энергии в i -й ячейке, $\sum_{j=1}^{N_i} E_{ij}^2$ – сумма квадратов потерь энергии в i -й ячейке, N_i – количество событий, произошедших в i -й ячейке.

Далее каждой ячейке присваивался квазицвет, значение которого соответствовало значению относительной поглощенной дозы, нормированной на максимальное значение дозы по объему шара, на шкале квазицвета.

На рис. 1 представлены карты распределений относительной поглощенной дозы в перпендикулярном и параллельном первоначальному движению электронов сечениях шара. Диаметр центральных срезов соответствовал диаметру модельного шара клубня при двухстороннем облучении пучком ускоренных электронов.

Как видно из рис. 1, вся доза поглотилась в поверхностных слоях водного шара. Таким образом, в ходе обработки электронами с энергией 1 МэВ облучались только поверхностные слои клубней

картофеля, при этом внутренние слои не были затронуты облучением.

В ходе эксперимента изучали фенологию культуры, распространенность форм ризоктониоза, а также продуктивность растений картофеля после проведения обработки электронным излучением.

Полевые исследования проведены в почвенно-климатических условиях, типичных для лесостепной зоны Западной Сибири. Почвенный покров опытного поля представлен типичным для зоны черноземом. В ходе полевых исследований оценивали предпосадочное воздействие доз облучения на клубни картофеля. При посадке культуры повторность опыта была 8-кратная, густота посадки клубней – 35.7 тыс. раст./га, площадь питания картофеля – 0.35 м × 0.7 м.

Статистическая обработка полученных данных проводилась с помощью пакета прикладных программ SNEDECOR (Россия) [17], Microsoft Excel (США) и Origin (Origin Lab Corporation, США).

Метеоданные вегетационного периода существенно отличались от среднесезонных значений по температурному режиму и количеству выпавших осадков. Анализ погодных условий вегетационного периода (холодная погода в период посадки и до появления всходов, а также сильное переувлажнение почвы), показал, что они благоприятствовали развитию заболевания и заселению клубней картофеля склероциями *R. solani*.

РЕЗУЛЬТАТЫ

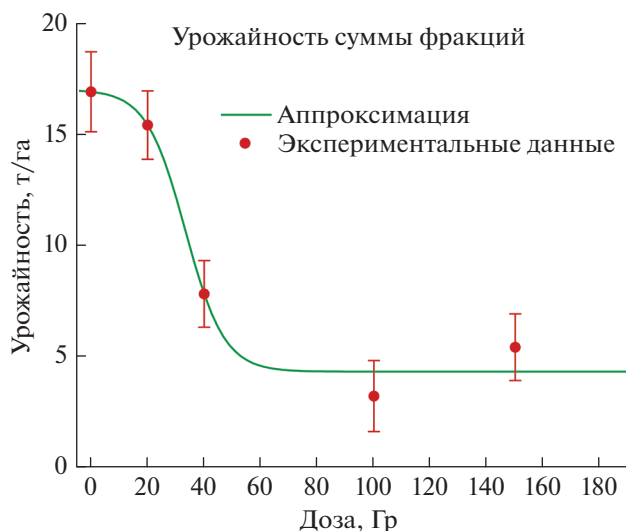
Зависимость кинетики развития растений, выращенных из облученных клубней, от дозы излучения носила нелинейный характер. Начало всходов растений, выросших из необработанного

Таблица 2. Параметры урожайности картофеля и его фракционный состав

Доза облучения, Гр	Фракции картофеля			Урожайность, т/га
	крупная, %	средняя, %	мелкая, %	
0	68.1	31.2	0.7	16.9
20	56.3	36.6	7.1	15.4
40	43.1	52.7	4.2	7.8
100	41.3	47.7	11.0	3.2
150	89.0	11.0	0	5.4

картофеля, зафиксировали на 15 день после посадки. Всходы растений, выросших из облученного картофеля, появились позже контрольных показателей: при облучении посадочного материала в дозе 20 Гр – на 5 дней, в дозах 40 и 150 Гр – на 10 дней, а в дозе 100 Гр – на 12 дней. В дальнейшем, в течение периодов вегетации, бутонизации и цветения также наблюдалась значительная задержка развития растений картофеля, выросших из облученных клубней. Так, например, начало цветения было зафиксировано на 72 и 57 день после посадки только в образцах, выросших из клубней, облученных в дозах 20 и 40 Гр соответственно. Для контрольных образцов данная фенофаза наступила на 43 день после посадки, что на 29 и 14 дней раньше, чем для образцов, обработанных в дозах 20 и 40 Гр соответственно. Обработка клубней в дозах 100 и 150 Гр не позволила растениям зацвести. Количество взошедших и полноценно вегетирующих в дальнейшем растений уменьшалось с увеличением дозы обработки посадочного материала. При этом обработка клубней в дозах свыше 200 Гр привела к полному ингибированию их прорастания.

Наблюдаемые процессы всхожести, бутонизации и вегетации повлияли на урожай культуры и

**Рис. 2.** Зависимость суммарной урожайности от дозы облучения посадочных клубней.

его фракционный состав. Было получено, что чем выше доза облучения, тем меньшую урожайность показали растения (табл. 2). При определении фракционного состава урожая выделяли три типа фракций клубней картофеля: мелкая – вес клубней меньше 40 г, средняя – от 40 до 80 г и крупная – более 80 г. Из таблицы 2 видно, что при обработке семенного картофеля в диапазоне доз от 20 до 100 Гр сформировалось больше мелких и средних клубней, а крупных клубней – меньше, чем в контрольных образцах. При облучении в дозе 150 Гр мелкая фракция картофеля отсутствовала совсем, а преобладала крупная.

На рис. 2 представлена зависимость суммарной урожайности картофеля от дозы облучения посадочного материала. Данная зависимость описывается сигмоидальной функцией вида:

$$U(D) = \frac{u_1}{1 + e^{u_2 \cdot (D - u_3)}} + u_4, \quad (7)$$

где u_1 – максимальная суммарная урожайность, равная 15.8 ± 1.1 т/га, которая соответствует урожайности контрольных клубней; u_2 – параметр, характеризующий ширину распределения функции урожайности $U(D)$ клубней по ее устойчивости к дозе облучения посадочного материала, равный 8.3 ± 1.1 Гр⁻¹ в диапазоне доз от 20 до 150 Гр; u_3 – доза облучения, при которой урожайность клубней, восприимчивых к облучению электронами в дозах от 20 до 150 Гр, уменьшается в 2 раза по сравнению с ее контрольным показателем, равная 36.6 ± 2.1 Гр; u_4 – уровень урожайности при обработке посадочного материала в дозе до 150 Гр, равный 4 ± 1.5 т/га. Параметры функции (7) рассчитаны методом наименьших квадратов, коэффициент корреляции составил 0.93. По данным исследований [18], обработка ионизирующим излучением в дозе 150 Гр полностью ингибирует прорастание картофеля, и соответственно полностью подавляет урожайность. Недостижение полного ингибирования урожайности при обработке в дозе 150 Гр в данном исследовании, по всей видимости, связано с недооблучением отдельных участков поверхности клубней (рис. 1).

На рынке производства картофеля средняя фракция клубней является наиболее востребованной. На рис. 3 представлена зависимость урожайности, представленной средней фракцией, от

дозы облучения посадочных клубней. Данная зависимость также описывается сигмоидальной функцией вида:

$$U_1(D) = \frac{a_1}{1 + e^{a_2*(D-a_3)}}, \quad (8)$$

где a_1 – максимальная урожайность, представленная средней фракцией, равная 5.2 ± 0.6 т/га, которая соответствует урожайности контрольных клубней; a_2 – параметр, характеризующий ширину распределения функции урожайности клубней средней фракции $U_1(D)$ по ее устойчивости к дозе облучения семенного картофеля, равный $32.1 \pm \pm 2.1$ Гр⁻¹; a_3 – доза облучения, при которой урожайность уменьшается в 2 раза по сравнению с ее контрольным показателем, равная 66.5 ± 5.8 Гр. Параметры функции (8) рассчитаны методом наименьших квадратов, коэффициент корреляции составил 0.94.

При фитоэкспертизе клубней картофеля нового урожая было зафиксировано их поражение как несклероциальными, так и склероциальными формами ризиктониоза (табл. 3).

Из несклероциальных форм преобладали сетчатый некроз и трещины. После облучения посадочного материала в дозе 20 Гр присутствовала уродливость клубней нового урожая. Углубленная пятнистость обнаружена только у клубней, посадочный материал которых был облучен в дозах 20 и 40 Гр, но распространенность данной формы поражения на поверхности клубней значительно меньше контрольных показателей. При обработке посадочного материала в дозе 150 Гр клубни нового урожая картофеля были поражены только сетчатым некрозом.

Склероциальные формы ризиктониоза присутствовали практически во всех образцах (исключение составили клубни, посадочный материал которых был облучен в дозе 150 Гр). В большей степени эти формы поражения наблюдались у клубней, посадочный материал которых был обработан в дозе 20 Гр. Меньшая распространен-

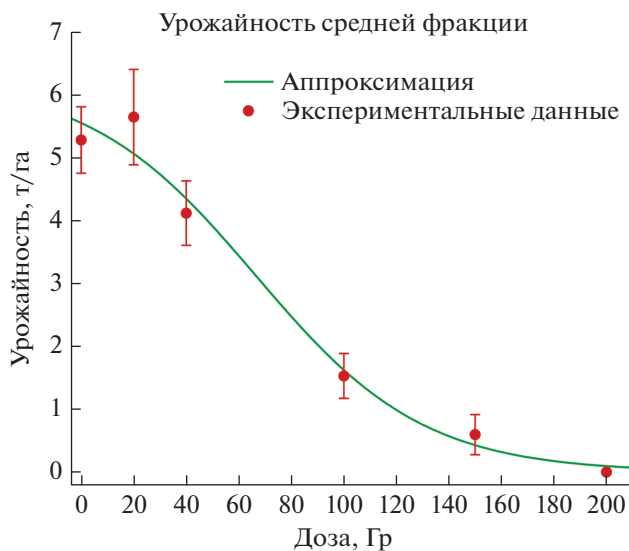


Рис. 3. Зависимость урожайности, представленной средней фракцией, от дозы облучения посадочных клубней.

ность склероциев на поверхности клубней при обработке посадочного материала в диапазоне доз от 40 до 150 Гр в сравнении с контрольными показателями объясняется более длительным процессом формирования растений, более коротким периодом клубненакопления и соответственно меньшим периодом времени, когда клубни могут быть заселены грибом *R. solani* (табл. 3).

На рис. 4 представлена зависимость распространенности сетчатого некроза на поверхности клубней нового урожая от дозы облучения посадочных клубней. Данная зависимость описывается сигмоидальной функцией вида

$$f_1(D) = \frac{b_1}{1 + e^{b_2*(D-b_3)}} + b_4, \quad (9)$$

где b_1 – максимальная доля клубней урожая, для которой в результате облучения электронами подавилось развитие сетчатого некроза, равная

Таблица 3. Распространенность форм ризиктониоза на клубнях картофеля, %, доверительный интервал $\alpha \leq 0.05$

Формы ризиктониоза	Доза облучения, Гр				
	0	20	40	100	150
Несклероциальные формы					
Сетчатый некроз	97.8 ± 0.9	100	87.5 ± 1.6	70.0 ± 1.8	66.6 ± 2.5
Углубленная пятнистость	91.3 ± 1.3	17.6 ± 0.7	18.7 ± 0.8	0	0
Трещины	13.0 ± 0.4	11.8 ± 0.6	6.2 ± 0.7	10.0 ± 0.4	0
Уродливость	2.2 ± 0.2	11.8 ± 0.1	0	0	0
Склероциальные формы (% поверхности)					
Всего	100.0	100.0	56.2 ± 0.6	10.0 ± 1.1	0
Склероции на 1/10 поверхности клубня	32.6 ± 1.0	52.9 ± 0.8	25.0 ± 0.9	10.0 ± 1.1	0
Склероции на 1/4 поверхности клубня	32.6 ± 0.8	41.2 ± 0.7	25.0 ± 0.3	0	0
Склероции на 1/2 поверхности клубня	34.8 ± 0.6	5.9 ± 0.8	6.2 ± 0.7	0	0

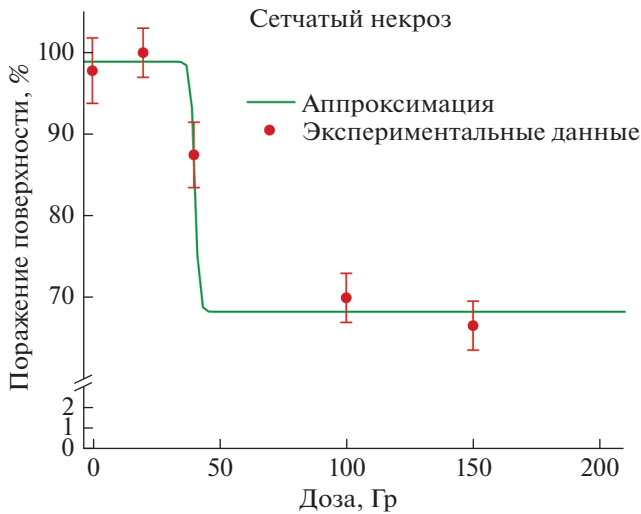


Рис. 4. Зависимость распространности сетчатого некроза на поверхности клубней нового урожая от дозы облучения посадочных клубней.

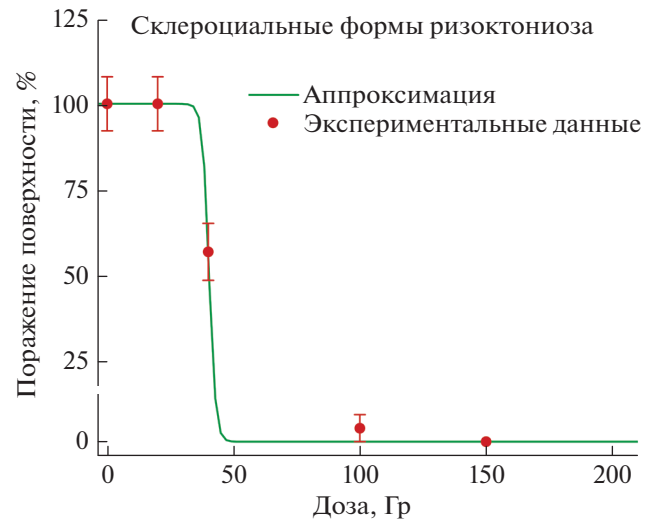


Рис. 5. Зависимость распространности склероциальных форм ризоктониоза на поверхности клубней нового урожая от дозы облучения посадочных клубней.

$30.6 \pm 1.6\%$; b_2 – параметр, характеризующий ширину распределения функции $f_1(D)$ распространности сетчатого некроза на поверхности клубней, по восприимчивости данного заболевания к дозе излучения, равный $0.8 \pm 0.2 \text{ Гр}^{-1}$; b_3 – доза облучения, при которой количество зараженных клубней, восприимчивых к воздействию излучения (30.6% всех клубней), уменьшается в 2 раза, равная $30.4 \pm 3.7 \text{ Гр}$; b_4 – доля зараженных клубней нового урожая, невосприимчивых к воздействию электронного излучения в дозах до 150 Гр на семенной картофель, равная $69.3 \pm 2.7\%$. Параметры функции (9) рассчитаны методом наименьших квадратов, коэффициент корреляции составил 0.92 .

На рис. 5 представлена зависимость распространности склероциальных форм ризоктониоза на поверхности клубней нового урожая от дозы облучения посадочных клубней. Данная зависимость также описывается сигмоидальной функцией вида

$$f_2(D) = \frac{c_1}{1 + e^{c_2 \cdot (D - c_3)}}, \quad (10)$$

где c_1 – доля клубней, для которых воздействие электронами в диапазоне доз от 20 до 150 Гр подавило склероциальную форму ризоктониоза, равная 100% ; c_2 – параметр, характеризующий ширину распределения функции $f_2(D)$ зараженных клубней по восприимчивости данного заболевания к дозе излучения, равный $1.3 \pm 0.1 \text{ Гр}^{-1}$; c_3 – доза облучения, при которой количество зараженных клубней уменьшается в 2 раза, равная $32.3 \pm 3.5 \text{ Гр}$. Параметры функции (10) рассчитаны методом наименьших квадратов, коэффициент корреляции составил 0.92 .

ОБСУЖДЕНИЕ

Исходя из сигмоидальной зависимости суммарной урожайности от дозы облучения, можно предположить, что клубни семенного картофеля представляют собой статистический ансамбль с различной радиоустойчивостью к воздействию ионизирующего излучения в диапазоне доз от 20 до 200 Гр . Для каждого клубня характерно определенное пороговое значение дозы $D_{\text{пор}}$, после воздействия которой он перестает давать урожай. Таким образом, клубни подчиняются нормальному распределению:

$$f_N(D_{\text{пор}}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(D_{\text{пор}} - \overline{D_{\text{пор}}})^2}{2\sigma^2}}, \quad (11)$$

где $\overline{D_{\text{пор}}}$ – среднее по ансамблю N семенных клубней пороговое значение дозы, σ – среднеквадратическое отклонение. Величина пороговой дозы формирования плодов для каждого клубня определяется его состоянием, зависящим от многих параметров, таких, как сорт, химический состав, содержание витаминов, наличие грибковых, вирусных и бактериальных заболеваний, температурно-влажностные условия становления культуры, и многое другое. При воздействии ионизирующим излучением в дозе D будет отсутствовать урожай у семенных клубней, для которых $D_{\text{пор}}$ будет меньше дозы D облучения.

Сигмоидальная зависимость степени заражения ризоктониозом от дозы облучения указывает на различную восприимчивость данного заболевания, распространившегося на N клубнях нового урожая, к воздействию ионизирующего излу-

чения на заболевание в семенных клубнях, которая также распределена по нормальному закону:

$$f_N(D_{\text{риз}}) = \frac{1}{\sigma_{\text{риз}}\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(D_{\text{риз}} - \overline{D_{\text{риз}}})^2}{2\sigma_{\text{риз}}^2}}, \quad (12)$$

где $\overline{D_{\text{риз}}}$ – среднее по ансамблю N семенных клубней значение дозы, посадочным материалом, подавляющей развитие ризоктониоза, $\sigma_{\text{риз}}$ – среднеквадратическое отклонение.

Биологические эффекты от воздействия ионизирующего излучения, наблюдаемые в исследовании, зависели от количества актов ионизации, приходящихся на единицу поверхности клубней. При этом распределение глазков и склероциев на поверхности семенных клубней не было равномерным. Также, для подавления роста культуры и фитопатогена необходимо определенное минимальное количество актов ионизации, приходящихся на глазок или склероцию. При этом, чем больше полученная доза облучения, тем больше актов ионизации, приходящихся на единицу поверхности клубня.

На рис. 6а представлены экспериментальные данные и аппроксимирующие функции зависимостей доли суммарной урожайности картофеля, которую подавило воздействие электронного излучения в диапазоне доз от 20 до 150 Гр, и урожайности, представленной средней фракцией, нормированных на контрольные значения показателей, а также зависимости степени распространенности склероциальной и несклероциальной форм ризоктониоза от дозы облучения. Продифференцировав функциональные зависимости, можно получить функции распределения плотности вероятностей подавления урожая и заражения ризоктониозом и определить дозы, ингибирующие развитие урожайности $\overline{D_{\text{пор}}}$ и заболеваемости $\overline{D_{\text{риз}}}$ для половины клубней нового урожая (рис. 6б).

Из рис. 6б видно, что снижение общей урожайности в два раза по сравнению с контрольными показателями происходит при обработке посадочного материала в дозе 36.6 ± 2.1 Гр; для средней фракции данный показатель составил 66.5 ± 5.8 Гр. Чувствительность склероциальных и несклероциальных форм ризоктониоза к воздействию электронного излучения практически одинакова. Доза, ингибирующая развитие сетчатого некроза у половины клубней нового урожая, составила 30.4 ± 3.7 Гр, при этом данный показатель для склероциальных форм ризоктониоза составил 32.3 ± 3.5 Гр. Однако заболеваемость сетчатым некрозом не была ингибирована полностью при обработке семенного картофеля в дозах до 200 Гр. Растения нового урожая, выросшего из облученных клубней, показали снижение скорости роста, что приводило к увеличению времени нахождения клубней нового урожая в почве и тем самым

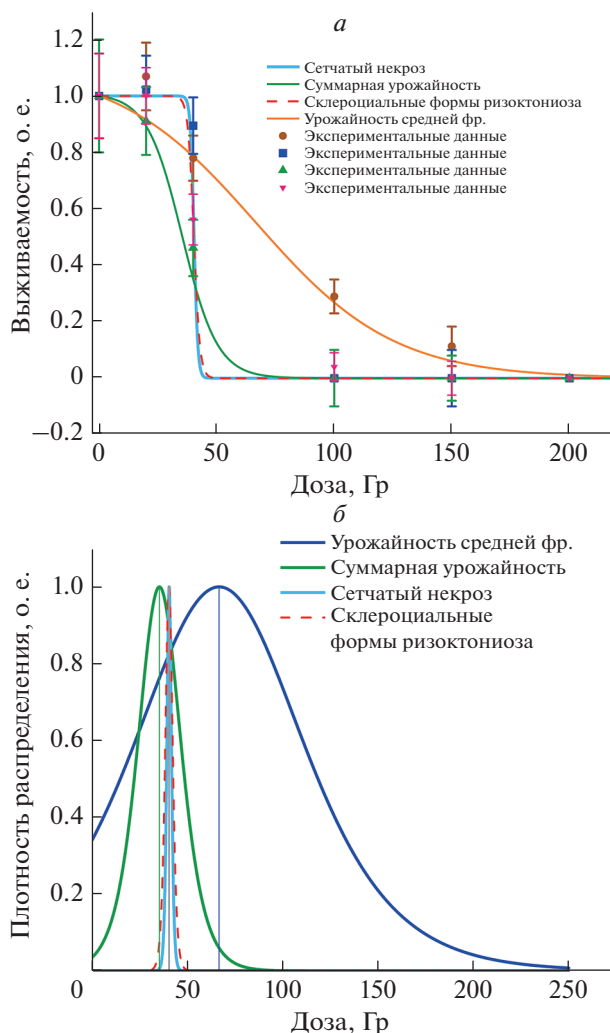


Рис. 6. Экспериментальные данные и аппроксимирующие функции зависимостей доли суммарной урожайности картофеля и доли средней фракции, нормированных на контрольные значения показателей, а также зависимости степени распространенности склероциальной и несклероциальной форм ризоктониоза от дозы облучения (а). Функции распределения плотности вероятностей подавления суммарной урожайности и доли средней фракции в ней, а также подавления распространенности склероциальной и несклероциальной форм ризоктониоза при воздействии электронного излучения в диапазоне доз от 20 до 200 Гр (б).

повышало вероятность развития различных форм ризоктониоза привнесенного извне, несмотря на подавление заболевания в семенном картофеле.

Таким образом, обработка семенного картофеля низкоэнергетическим электронами в дозе 30 Гр позволяет снизить в два раза распространенность заражения ризоктониозом среди клубней нового урожая, при этом общая урожайность картофеля снижается на 30%, а доля наиболее востребованной в производстве средней фракции картофеля снижается всего лишь на 15%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам проведенного исследования было установлено, что предпосадочное облучение семенных клубней картофеля электронами с энергией 1 МэВ в диапазоне доз от 20 до 150 Гр приводит к задержке развития взошедших растений, а свыше 200 Гр – к полному ингибированию прорастания клубней. Чем выше доза облучения посадочного материала, тем позже наступают фазы всходов, бутонизации и цветения растений. Однако, некоторые дозы показали нелинейный отклик развития различных фаз становления растений от дозы облучения.

Было отмечено снижение урожайности облученных образцов с увеличением дозы облучения семенного картофеля в диапазоне от 20 до 150 Гр, однако процент зараженных ризоктониозом клубней в урожае также снижался с увеличением дозы. Обработка посадочного материала также повлияла на фракционный состав клубней нового урожая.

Обработка клубней низкоэнергетичными ускоренными электронами воздействует только на верхние, пораженные грибом участки клубней, что делает ее наиболее предпочтительным способом обработки корнеплодов.

Исходя из сигмоидального характера зависимостей урожайности картофеля и распространенности ризоктониоза среди клубней нового урожая от дозы облучения, обработка семенного картофеля в дозе 30 Гр позволяет в два раза подавить заболеваемость среди клубней и при этом лишь частично снизить урожайность картофеля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-63-00075).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chernyaev A.P., Varzar S.M., Borschegovskaya P.Yu. et al. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2016. V. 13. No. 7. P. 988.
2. Singh B., Singh J., Kaur A. // IJBRR. 2013. V. 4. No. 3. P. 167.
3. Санжарова Н.И., Козьмин Г.В., Бондаренко В.С. // Инноватика и экспертиза. 2016. Т. 1. № 16. С. 197.
4. Козьмин Г.В., Гераськин С.А., Санжарова Н.И. Радиационные технологии в сельском хозяйстве и пищевой промышленности. Обнинск: ВНИИРАЭ, 2015. 400 с.
5. Антонова Т.С., Маслиенко Л.В., Мурадосилова Н.В., Саукова С.Л. Современная микология в России. М.: НАМ РФ, 2002. С. 171.
6. Бердыш Ю.И. Распространение основных вредителей и болезней сельскохозяйственных культур в Краснодарском крае в 2003 г. и прогноз их появления в 2004 г. Краснодар, 2004.
7. Вянгеляускайте А.П., Жуклене Р.М., Жуклис Л.П. Вредители и болезни овощных культур. М.: Агропромиздат, 1989. 462 с.
8. Жуковская С.А., Овчинникова А.М. Возбудители болезней сельскохозяйственных растений Дальнего Востока. М.: Наука, 1980. С. 5.
9. Котова В.В. Корневые гнили гороха и вики и меры борьбы с ними. СПб: ВИЗР, 2004. С. 144.
10. Евстратова Л.П., Николаева Е.В., Кузнецова Л.А., Харин В.Н. // Агро XXI. 2006. № 4–6. С. 10.
11. Малюга А.А., Маринкина Г.А., Баранов Д.С., Васильев В.Г. // Защита и карантин растений. 2011. № 1. С. 28.
12. Халиков С.С., Малюга А.А., Чуликова Н.С. // Агротехника. 2018. № 10. С. 46.
13. Akhila P.P., Sunooj K.V., Aaliya B. et al. // Trends Food Sci. Technol. 2021. V. 114. P. 399.
14. Филипас А.С., Лой Н.Н., Ульяненко Л.Н., Степанчикова Н.С. // Докл. РАСХН. 2008. № 6. С. 18.
15. Лой Н.Н., Санжарова Н.И., Гулина С.Н., Суслова О.В. // В кн.: Сб. мат. III междунар. науч.-практ. конф. “Инновационные исследования и разработки для научного обеспечения производства и хранения экологически безопасной сельскохозяйственной и пищевой продукции”. Ч. 1. (Краснодар, 2019). С. 434.
16. Чередниченко Д.В., Савилов В.А., Федосенко Р.В., Вишнева Н.В. // В кн.: Сб. докл. междунар. науч.-практ. конф. “Радиационные технологии в сельском хозяйстве и пищевой промышленности: состояние и перспективы”. (Обнинск, 2018). С. 28.
17. Сорокин О.Д. Прикладная статистика на компьютере. Краснообск: ГУП РПО СО РАСХН, 2004. 162 с.
18. Близняк У.А., Леонтьев В.А., Черняев А.П. и др. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физ. и астроном. 2021. № 1. С. 45.

Impact of 1 MeV electron beam irradiation on phenology and microflora of potatoes

N. S. Chulikova^a, A. A. Malyuga^a, U. A. Bliznyuk^{b, c, *}, A. P. Chernyaev^{b, c}, P. Yu. Borschegovskaya^{b, c}, S. A. Zolotov^b, A. D. Nikitchenko^b, Ya. V. Zubritskaya^b, D. S. Yurov^c

^aSiberian Federal Scientific Centre of Agro-BioTechnologies of the Russian Academy of Sciences, Krasnoobsk, 630501 Russia

^bLomonosov Moscow State University, Physics Department, Moscow, 119991 Russia

^cSkobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: uabliznyuk@gmail.com

The effect of 1 MeV electron irradiation on the productivity and phenology of potatoes infected with *Rhizoctonia solani* Kuhn was studied. It was found that pre-planting irradiation of potato seed tubers with low-energy electron radiation at a dose of 30 Gy leads to a twofold decrease in the number of diseased tubers, while the potato yield decreases by 30%.