Национальная академия наук Беларуси Министерство образования Республики Беларусь ОО «Белорусское физическое общество» Государственное научное учреждение «Институт физики имени Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси» Белорусский государственный университет Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований Научно-техническая ассоциация "Оптика и лазеры"

VII КОНГРЕСС ФИЗИКОВ БЕЛАРУСИ

Минск, Беларусь, 26-28 апреля 2023 г.

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Минск ООО «Ковчег» 2023 г. УДК 53

Редакционная коллегия

Могилевцев Д.С. (главный редактор), Андреев В.В., Анищик В. М., Апанасевич П.А., Белый В.Н., Богданович М.В., Власенко С.В., Гапоненко С.В., Джагаров Б.М., Казак Н.С., Килин С.Я., Курочкин Ю. А., Максименко С.А., Никончук И.С., Новицкий Д.В, Орлович В.А., Пенязьков О.Г., Поклонский Н.А., Симончик Л. В., Тарасенко Н. В., Тиванов М.С., Толстик А.Л., Усачёнок М.С.(ответственный секретарь),Федосюк В.М.

VII Конгресс физиков Беларуси (26-28 апреля 2023): Сборник научных трудов. / редкол.: С.Я. Килин (гл.ред.) [и др.]. – Минск : Ковчег, 2023. – 232 стр.

Данный сборник содержит материалы докладов VII Конгресса физиков Беларуси.

ISBN 978-985-884-254-3

© ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, 2023 © Регистрация, ООО «Ковчег», 2023

Организационный комитет

Председатель	Могилевцев Д.С.
Сопредседатель	Никончук И.С.
Заместитель председателя	Курочкин Ю.А.
Заместитель председателя	Новицкий Д.В.
Ученый секретарь	Власенко С.В.

Баран А.В., Богданович Я.И., Лахмицкий Н.В., Люшкевич В.А., Манько А.Ю., Науменко А.В., Невар Е.А., Пешко И.А., Сапрунов Е.В., Таболич А.А., Усачёнок М.С., Шабров Д.В., Шелковый Д.В.

Направления исследований:

- Пеоретическая физика, физика фундаментальных взаимодействий
- Оптика и спектроскопия
- Новые материалы и приборы
- Виофизика и медицинская физика
- 🙆 Физика плазмы
- Методология и преподавание

УДК 53.01, 530.12

С. О. Комаров^{1,2}, А. К. Горбацевич³, Г. В. Верещагин⁴ ОПРЕДЕЛЕНИЕ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ С БОЛЬШИМИ НОМЕРАМИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ЗАРЯДА, АСИМПТОТИЧЕСКИ ПРИБЛИЖАЮЩЕГОСЯ К ЧЕРНОЙ ДЫРЕ ШВАРЦШИЛЬДА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, ICRANet-Minsk, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь ² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

KomarovSO@bsu.by

³ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь

Gorbatsievich@bsu.by

⁴ Координационный центр ИКРАНет, Пескара, Италия, 65122 Italia, Pescara, Piazza della Repubblica, 10 veresh@icra.it

Теоретическое исследование движения заряженной частицы во внешнем гравитационном поле черной дыры является важным для понимания многих процессов, имеющих место вблизи черной дыры и наблюдаемых как квазары и гамма-всплески [1-3]. Одним из центральных и до конца не исследованных вопросов при решении данной задачи является вопрос о характере электромагнитного поля такой частицы, при ее приближении к черной дыре [4-5]. В настоящей работе, в рамках решения нестационарной задачи В общей относительности теории показано, что электромагнитное поле такой частицы, радиально падающей В сферически-симметричную черную дыру, не содержит компонент с большим значением мультипольного момента l, в пределе ее приближения к горизонту событий.

Сигнатура метрики (+++, -). Используется система единиц, в которой скорость света в вакууме с=1.

Электромагнитное поле радиально падающего заряда обладает аксиальной симметрией относительно траектории его движения. Все компоненты тензора электромагнитного поля F_{ij} могут быть выражены через коэффициенты мультипольного разложения b₁ (см. [5]), например:

$$F_{rt} = \sum_{l} P_{l}(\cos\theta) b_{l} \frac{l(l+1)}{r^{2}}.$$

Здесь 1-номер мультипольного момента, (r, θ , ϕ , t) - координаты Шварцшильда, P₁ (cos θ) - полиномы Лежандра. Фурье-образ коэффициентов мультипольного разложения $f_i(\omega, r)$ удовлетворяет следующему уравнению [5, 6]:

$$f_{i}^{**} + \left(\omega^{2} - \frac{l(l+1)}{r^{2}}(1 - 2M/r)\right)f_{i} = \frac{q(2l+1)}{ml(l+1)}\left(-T^{**} - i\omega(T^{*})^{2} + i\omega\right).$$
(1)

Здесь q – электрический заряд частицы, m – ее масса, М - масса черной дыры в геометрических единицах, T(r) – закон движения частицы в виде зависимости коорди-

натного времени от координаты r. Символ * означает дифференцирование по черепашьей координате r* [5]: $r^* = r - 2M \ln(|r - 2M|)$.

Уравнение (1) формально совпадает с квантовомеханическим уравнением для одномерного движения частицы в поле некоторого потенциального барьера, вид которого для l=1 представлен на Рис 1.



Рисунок 1. Эффективная потенциальная энергия U(r*) для уравнения (1).

Для больших значений 1 эффективную потенциальную энергию можно приближенно заменить дельта-функцией (с коэффициентом пропорциональности U). Решая полученное дифференциальное уравнение методом функции Грина и выполняя обратное преобразование Фурье, получим:

$$b_{l} = -q(2l+1)/ml(l+1), \qquad 1(r^{*}) < t < r^{*} + I(3M^{*}) - 3M^{*}; \\ b_{l} = (-q(2l+1)/ml(l+1)) Exp(\frac{U}{2}\omega(r^{*} + T(3M^{*}) - 3M^{*} - t)), \qquad t > r^{*} + T(3M^{*}) - 3M^{*}; \\ c_{l} = -q(2l+1)/ml(l+1) = 0$$

Таким образом, мы показали, что при неограниченном приближении частицы к горизонту событий ($t \rightarrow \infty$), компоненты электромагнитного поля, соответствующие большим номерам мультипольного момента l стремятся к 0. Этот результат находится в соответствии с предположением других авторов, которые исходили из решения стационарной задачи (см., напр. [4]).

- [1] R. Ruffini, The inner engine of Gev-radiation emitting gamma-ray barsts / R. Ruffini, J. A. Rueda, R. Moradi, et. al. // arXiv:1811.01839v4[astro-ph.HE]. 2019
- [2] R. Ruffini, On the Gev emission of the type I bdhn GRB 130427a / R. Ruffini, R. Moradi, J. A. Rueda, et. al. // The Astrophys. J. 2019. (82). P. 886
- [3] R. Ruffini, The blackholic quantum / R. Ruffini, J. A. Rueda // The European Physical Journal C. – 2020. – №30. – P. 300
- [4] K. S. Thorne, Black Holes: The membrane paradigm / K. S. Thorne, R. H. Price, D. A. MacDonald // Yale University Press. New Heaven and London. 1988
- [5] R. Ruffini, Fully Relativistic threatment of the brehmstrahlung radiation from a charge falling in a strong gravitational field / R. Ruffini // Phys. Lett. – 1972. – №41B. – Pp. 334-338
- [6] S. O. Komarov, Electromagnetic radiation and electromagnetic self-force of a point charge in the vicinity of Schwarzschild black hole / S. O. Komarov, A. K. Gorbatsievich, A. S. Garkun, G. V. Vereshchagin // preprint arXiv:2211.04544.

УДК 53

Y.A. Kulchitsky^{1,2}, P.V. Tsiareshka^{1,2}

Study of KNO scaling in pp-collisions at energies 0.9 -13 TeV with ATLAS at LHC

¹ State Scientific Institution B.I. Stepanov Institute of Physics NAS of Belarus, 220072, Belarus, Minsk, Nezavisimosti Ave., 68-2 <u>Iouuri.Koultchitski@cern.ch</u>, <u>Pavel.Tsiareshka@cern.ch</u>
² Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russian Federation

The study of charged-particle distributions in proton-proton (*pp*) collisions probes the strong interaction in the low-momentum transfer, non-perturbative region of quantum chromodynamics. The hypothesis that at very high energies the probability distributions P(n) of producing *n* particles in a certain collision process should exhibit a scaling relation was proposed in [1–3]. This scaling behaviour is a property of particle multiplicity distributions known as the KNO scaling hypothesis. The main assumption of KNO scaling is Feynman scaling [4], where was concluded that for asymptotically large energies the average total number of any kind of particle rises logarithmically with a centre-of-mass energy, \sqrt{s} . The KNO distributions calculated using ATLAS [5] at LHC results [6–10] and their ratios are presented in Fig. 1 [11]. The KNO scaling tends to be independent of energy at \sqrt{s} =8 and 13 TeV (which was measured in the first time) within ±8% for 0.2<*z*<2 and within error bars for *z*>2. The tendency of the KNO scaling to hold for the highest collision energies is observed on the deferential level.



Figure 1: Top panel: KNO scaled primary charged-particle multiplicity distributions as a function of the scaled multiplicity, z, for events with (left) $n_{ch} \ge 2$, $p_T > 100$ MeV and (right) $n_{ch} \ge 1$, $p_T > 500$ MeV for the module pseudorapidity less than 2.5 measurement by the ATLAS [5] at $\sqrt{s}=0.9$, 2.36, 7, 8 and 13 TeV [6–10]. The gray curve and band of the uncertainties are the result of the interpolation of the charged-particle multiplicity distribution at 13 TeV. The uncertainties represent the sum in quadrature of the statistical and systematic contributions. Bottom panel: The ratios of the KNO scaled primary charged-particle distributions to the interpolated distribution at $\sqrt{s}=13$ TeV are shown. Bands represent the uncertainties for the ratios as results of statistical and systematic uncertainties added in quadrature for both distributions.

The energy independence of the moments, C_q , of the probability distributions defined as $P(n_{ch})$ in the energy asymptotic was the precise finding of the KNO scaling [2]. The validity of KNO scaling is shown more integrality in Fig. 2 by the normalized moments C_q of the multiplicity distributions measurement by ATLAS, complemented with measurements by CMS at $\sqrt{s}=0.9$, 2.36 and 7 TeV and at lower energies experiments lower-energy experiments NA22, UA1 and UA5. For C_q based on the ATLAS results for kinematic region $n_{ch} \ge 2$ and p_T >100 MeV are shown in Fig. 2 (left). The values of C_q for presented experiments increase linearly with log *s* as illustrated by the fits in Fig. 2. For kinematic region $n_{ch} \ge 1$ and $p_T > 500$ MeV only the values of C_q calculated using multiplicity distributions measurement by the ATLAS are shown in Fig. 2 (right) and increase also linearly with log *s*. There is observed the tendency of the KNO scaling to hold for the highest collision energies on deferential level. On the integral level the moments of KNO functions increase linearly with log *s* and therefore the KNO scaling is violated for energy region from 0.2 to 13 TeV.



Figure 2: The normalized moments C_q of the primary charged-particle multiplicity distributions measurement by the ATLAS [5] for events with center-of-mass energies at $\sqrt{s}=0.9$, 2.36, 7, 8 and 13 TeV [6–10] for module pseudorapidity less than 2.5 and for two different phase spaces (left) $n_{ch}\geq 2$, $p_T>100$ MeV and (right) $n_{ch}\geq 1$, p_T >500 MeV. The C_2 , C_3 and C_4 , C_5 results are shown in bottom and top panels, respectively. The coloured symbols represent the data. The vertical bars represent statistical and squares represent systematic uncertainties. The lines show the results of the fits for C_q with statistical and systematic uncertainties added in quadrature. For $\sqrt{s}=0.9$ TeV data from experiments other than ATLAS were drawn shifted for clarity.

[1] A. M. Polyakov, A Similarity hypothesis in the strong interactions. 1. Multiple hadron production in e^+e^- annihilation. // Zh. Eksp. Teor. Fiz. **59** (1970) 542.

[2] Z. Koba, Scaling of multiplicity distributions in high-energy hadron collisions./ Z. Koba, H. B. Nielsen, P. Olesen // Nucl. Phys. B **40** (1972) 317.

[3] Z. Koba, Multi-body phenomena in strong interactions – description of hadronic multibody final States// in Proceedings CERN-JINR School of Physics, Ebeltoft, Denmark, 1973.

[4] R. P. Feynman, Very high-energy collisions of hadrons// Phys. Rev. Lett. 23 (1969) 1415.

[5] ATLAS Collaboration, The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider. // JINST **3** (2008) S08003.

[6] ATLAS Collaboration, Charged-particle multiplicities in pp interactions at $\sqrt{s}=900$ GeV measured with the ATLAS detector at the LHC // Phys. Lett. B **688** (2010) 21.

[7] ATLAS Collaboration, Charged-particle multiplicities in pp interactions measured with the ATLAS detector at the LHC. // New J. Phys. **13** (2011) 053033.

[8] ATLAS Collaboration, Charged-particle distributions in pp interactions at $\sqrt{s}=8$ TeV measured with the ATLAS detector. // Eur. Phys. J. C **76** (2016) 403.

[9] ATLAS Collaboration, Charged-particle distributions in $\sqrt{s}=13$ TeV pp interactions measured with the ATLAS detector at the LHC. // Phys. Lett. B **758** (2016) 67.

[10] ATLAS Collaboration, Charged-particle distributions at low transverse momentum in \sqrt{s} =13 TeV *pp* interactions measured with the ATLAS detector at the LHC. // Eur. Phys. J. C **76** (2016) 502.

[11] Y. Kulchitsky, Study of KNO scaling in pp collisions at \sqrt{s} from 0.9 to 13 TeV using results of the ATLAS at LHC. / Y. Kulchitsky, P. Tsiareshka // Eur. Phys. J. C 82 (2022) 462.

УДК 53

Y.A. Kulchitsky^{1,2}, E. M. Plotnikova², P.V. Tsiareshka^{1,2}

Two-particle Bose--Einstein correlations in pp-collisions at 13 TeV with ATLAS at LHC

¹ State Scientific Institution B.I. Stepanov Institute of Physics NAS of Belarus, 220072, Belarus, Minsk, Nezavisimosti Ave., 68-2 <u>Iouuri.Koultchitski@cern.ch</u>, <u>Pavel.Tsiareshka@cern.ch</u>
² Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russian Federation Elena.Plotnikova@cern.ch

Correlations between two identical bosons, called Bose-Einstein correlations (BEC) are a well-known phenomenon in high-energy and nuclear physics. The BEC constitute a sensitive probe of the space-time geometry of the hadronization region, and allow determination of the size and shape of the source from which particles are emitted. In [1] the results of the BEC study in pp collisions at $\sqrt{s}=13$ TeV, using data from the ATLAS [2] detector at the CERN LHC [3] are presented. Data were collected in a special low-luminosity configuration with a minimum-bias trigger (MB) and a high-multiplicity track (HMT) trigger. The BEC are measured for pairs of like-sign charged particles, each with module pseudorapidity less than 2.5, for two kinematic ranges: the first with particle transverse momentum more than 100 MeV and the second with more than 500 MeV. The BEC parameters, characterizing the source radius and particle correlation strength, are investigated as functions of charged-particle multiplicity (up to 300) and average transverse momentum of the pair (up to 1.5 GeV). The double-differential dependence on charged-particle multiplicity and average transverse momentum of the pair is also studied. The BEC radius is found to be independent of the charged-particle multiplicity for high charged-particle multiplicity (above 100), confirming a previous ATLAS observation at lower energy at 7 TeV [4]. In Fig. 1 (left) the BEC source parameter $\lambda(m_{ch})$ decreases with multiplicity for the lower p_T threshold and is lower for the higher p_T threshold but increases slightly with multiplicity. For $p_T > 500$ MeV it is constant within measurement uncertainties, indicating a relatively high level of incoherence. In Fig. 1 (right) the BEC source radius parameter $R(m_{ch})$ is found to increase as $\alpha m_{ch}^{1/3}$ for low multiplicity for both p_{T} thresholds. For p_{T} >100 MeV, $\alpha = 2.54^{+0.12}$.0.22 [fm], for scaled multiplicity up to $m_{ch} \approx 2$. For $m_{ch} \geq 3$, the source radius R saturates at a value 3.35^{+0.20}-0.09 [fm], confirming the previous observation of a high-multiplicity plateau by ATLAS at 7 TeV [4]. For $p_T > 500$ MeV, the behaviour of R is similar, but systematically lower and for $m_{ch}>4$: $R=2.78^{+0.23}$ -0.09 [fm]. In Fig. 2 the BEC parameters $\lambda(k_T)$ and $R(k_T)$ both decrease with increasing pair average transverse momentum $k_{\rm T}$. In Fig. 3 considering the two differential combined (m_{ch} , k_T) dependence, λ decreases with k_T in all m_{ch} intervals, for both $p_{\rm T}$ thresholds. The decrease is more pronounced at lower multiplicity. The BEC radius parameter R also decreases with $k_{\rm T}$ for $p_{\rm T}$ >100 MeV, decreasing more strongly in the lower $m_{\rm ch}$ intervals. For $p_{\rm T}$ >500 MeV the behaviour of R is rather flat with $k_{\rm T}$. As a function of $m_{\rm ch}$, R increases and reaches a plateau at large multiplicity in all m_{ch} intervals and for both p_{T} thresholds. Within the uncertainties of this analysis, the turn-on of the plateau occurs at the same value of m_{ch} in all k_{T} intervals and for both p_{T} thresholds. The measurements presented here complement the ATLAS measurements at 0.9 and 7 TeV [4] by extending the studies to higher multiplicities and pair average transverse momenta, and provide a more detailed study of the BEC parameters by exploring the double-differential (m_{ch} , k_{T})-dependence. The present results confirm the saturation of the source radius at higher multiplicities.



Figure 1: (Left) The dependence of the correlation strength, λ , on multiplicity normalized on average multiplicity, m_{ch} , obtained from the exponential fit of the two particles correlation functions for tracks with $p_T > 100$ MeV and $p_T > 500$ MeV at 13 TeV for the MB and HMT data. (Right) The dependence of the source radius, R, on m_{ch} is presented. The uncertainties represent the sum in quadrature of the statistical and asymmetric systematic contributions.



Figure 2: The $k_{\rm T}$ dependence of (left) the correlation strength, $\lambda(k_{\rm T})$, and (right) the source radius, $R(k_{\rm T})$, obtained from the exponential fit to the $R_2(Q)$ correlation functions for events with multiplicity $n_{\rm ch} \ge 2$ and transfer momentum of tracks with $p_{\rm T} > 100$ MeV and $p_{\rm T} > 500$ MeV at 13 TeV for the MB and HMT events. The uncertainties represent the sum in quadrature of the statistical and systematic contributions. The curves represent the exponential fits to $\lambda(k_{\rm T})$ and $R(k_{\rm T})$.



Figure 3: The two-dimensional dependence on *m*_{ch} and $k_{\rm T}$ for $p_{\rm T}>100$ MeV for the correlation strength, λ , and the source radius, *R*, obtained from the exponential fit to the two particles correlation functions using the MB sample for $m_{\rm ch}>3.08$ and the HMT sample for $m_{\rm ch}>3.08$.

[1] ATLAS Collaboration, Two-particle Bose–Einstein correlations in pp collisions at $\sqrt{s}=13$ TeV measured with the ATLAS detector at the LHC. / Eur. Phys. J. C 82 (2022) 608.

[2] ATLAS Collaboration, The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider. // JINST **3** (2008) S08003.

[3] L. Evans, LHC Machine. / L. Evans, P. Bryant // JINST 3 (2008) S08001.

[4] ATLAS Collaboration, Two-particle Bose–Einstein correlations in *pp* collisions at $\sqrt{s}=0.9$ and 7 TeV measured with the ATLAS detector. // Eur. Phys. J. C **75** (2015) 466.

УДК 538.93

Г. В. Грушевская, Г. Г. Крылов

НЕАБЕЛЕВА СТАТИСТИКА В КОРРЕЛЯЦИЯХ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ И ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ НЕТРИВИАЛЬНОСТЬ ПЛОСКИХ ЗОН В ГРАФЕНЕ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

krylov@bsu.by

В настоящее время актуальны исследования квантовых эффектов, обусловленных нетривиальной топологией зонной структуры. Топология пространства квазиимпульсов в модели свободных псевдо-дираковских фермионов в графене [1] характеризуется гомотопической группой Z_2 из-за наличия единственной особой точки – точки K(K) обратной решетки. Поскольку эта модель нерелятивистская, она неспособна адекватно описать магнитотранспорт (отрицательное магнитосопротивление), обусловленное существованием корреляций в топологических материалах. Квазирелятивистская модель графена с псевдомайорановскими фермионами, статистика которых неабелева, (см. [2] и библ. там) обладает существенно более сложной структурой обратного пространства: гомотопическая группа Z_{12} в точке K(K) деформируется в Z_8 для плоских зон. Интересной и все еще теоретически нерешенной задачей является корректное описание магнитно-резистивных свойств графена, которая решается в данной работе.

С использованием высокоэнергетического $(\vec{k} \cdot \vec{p})$ -гамильтониана квазирелятивистской модели графена для квазичастичных возбуждений можно получить систему уравнений майорановского типа [3]

$$\begin{bmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + \vec{\sigma} \cdot \hbar (\vec{K}_B - \vec{K}_A) \end{bmatrix} |\psi_{BA}^* \rangle - \gamma M(\vec{p}) \hat{\psi}_{-\sigma_A}^\dagger | 0, -\sigma \rangle = E_{qu} \hat{\psi}_{-\sigma_A}^\dagger | 0, -\sigma \rangle,$$

$$|\psi_{BA}^* \rangle = \Sigma_{BA} \hat{\psi}_{-\sigma_A}^\dagger | 0, -\sigma \rangle$$
(1)

где $\hat{\psi}_{-\sigma_A}^{\dagger} |0, -\sigma\rangle$ – волновая функция, $\vec{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y\}$ – двумерный вектор матриц Паули, $\vec{p} = \{p_x, p_y\}$ – двумерный оператор квазиимпульса, Σ_{AB}, Σ_{BA} – релятивистские обменные операторы для подрешеток *A*, *B* гексагональной решетки графена, явный вид которых можно найти в [3], $M(\vec{p}) = \Sigma_{AB} \Sigma_{BA}$ – майорановский массовый член, $\gamma = v_F / c$.

Метод расчета комплексной проводимости в рамках квази-релятивистской модели графена был разработан в [4]. Выражение для интересующей нас недиагональной (холловской) проводимости $\sigma_{xy}(\omega, \vec{k})$ включает в себя следующие внутризонный $\sigma_{xy}^{(in)}(\omega, \vec{k})$ и межзонный $\sigma_{xy}^{(ex)}(\omega, \vec{k})$ вклады:

$$\sigma_{xy}^{(in)}(\omega,\vec{k}) = \frac{\iota e^2}{\hbar\pi^2} \sum_{a=1,2} \int d^2 \vec{p} \operatorname{Tr} \left[M(\vec{p}) \frac{\partial^2 M(\vec{p})}{\partial p_x \partial p_y} \hat{v}_x(\vec{p}) \hat{v}_y(\vec{p}) \right] \frac{\left(f[\varepsilon_a(\vec{p}_-)] - f[\varepsilon_a(p\vec{p}_+)] \right)}{\left(\varepsilon_a(\vec{p}_+) - \varepsilon_a(\vec{p}_-) \right) \left(\omega - \varepsilon_a(\vec{p}_+) + \varepsilon_a(\vec{p}_-) \right)},$$
(2)

$$\sigma_{xy}^{(\text{ex})}(\omega,k) = \frac{2\iota e^2 \omega}{\hbar \pi^2} \int d^2 \vec{p} \operatorname{Tr} \left[M(\vec{p}) \frac{\partial^2 M(\vec{p})}{\partial p_x \partial p_y} \hat{v}_x(\vec{p}) \hat{v}_y(\vec{p}) \right] \frac{\left(f[\varepsilon_1(\vec{p}_-)] - f[\varepsilon_2(\vec{p}_+)] \right)}{\left(\varepsilon_1(\vec{p}_+) - \varepsilon_2(\vec{p}_-) \right) \left(\omega^2 - \left[\varepsilon_2(\vec{p}_+) - \varepsilon_1(\vec{p}_-) \right]^2 \right)}$$

где $\vec{p}_{\pm} = \vec{p} \pm \vec{k}/2$, $f - \phi$ ункция распределения Ферми-Дирака, индексы 1,2 вводятся для обозначения электронных и дырочных состояний, e -заряд электрона, $\hbar -$ постоянная Планка, деленная на 2π .

Частотная зависимость вещественной и мнимой частей комплексной холловской проводимости в оптическом режиме ($\vec{k} \rightarrow 0$) представлена на рис. 1.



Рис. 1. Частотная зависимость вещественной (черный цвет) и мнимой (красный цвет) частей холловской комплексной проводимости $\sigma_{xy}(\omega, \vec{k})$ в относительных единицах

 e^2/\hbar с учетом псевдомайорановского массового члена для квазирелятивистской модели графена. Расчет проводился для температуры 3 К и химического потенциала, равного 135 К.

Как видно из рисунка, моделирование предсказывает экспериментально наблюдаемый пик магнитосопротивления на малых частотах в нулевом магнитном поле, обусловленный нетривиальной топологией модели. Хиральная аномалия возникает за счет наличия майорановского массового члена в гамильтониане.

[1] Semenoff G. W. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. / G. W. Semenoff // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 53. – P. 2449.

[2] Grushevskaya H. Polarization in quasirelativistic graphene model with topologically non-trivial charge carriers. / H. Grushevskaya, G. Krylov // Quantum Rep. – 2022. –Vol. 4. –P. 1.
[3] Grushevskaya H. Vortex Dynamics of Charge Carriers in the Quasi-Relativistic Graphene Model: High-Energy kp Approximation. / H. Grushevskaya, G. Krylov // Symmetry. –2020.– Vol. 12. –P. 261

[4] Grushevskaya H. V. Two-Dimensional Braiding of Two-Dimensional Majorana Fermions: Manifestation in Band Structure of Graphene. / H.V. Grushevskaya, G. Krylov // Int. J. Nonlin. Phenom. Complex Sys. – 2019. – Vol. 22. – P. 41.

UDK 539.12

I.A. Serenkova¹

BOUNDS ON THE MASS AND MIXING OF Z' AND W' BOSONS DECAYING INTO DIFFERENT PAIRINGS OF W, Z OR HIGGS BOSONS USING CMS AND ATLAS DATA AT THE LHC

¹ Abdus Salam ICTP Affiliated Centre at Pavel Sukhoi Gomel State Technical University, Oct. Ave. 48, 246746, Gomel, Belarus serenkova@gstu.by

A variety of theoretical extensions to the standard model of particle physics (SM) predict new phenomena in high-energy proton-proton collisions, the discovery of which is one of the main goals of the CERN Large Hadron Collider (LHC). The LHC allows to probe new phenomena, new particles and interactions, at energies of several TeV. A wide range of models predicts the production of new heavy, TeV-scale, resonances or vector bosons decaying to pairs of SM electroweak vector bosons (jointly referred to as V in the following, with V=W, Z), and SM Higgs (H) bosons. Models studied in the literature include extended gauge models (EGM) [1-2], models of warped extra dimensions, technicolourmodels associated with technirho and other technimesons, composite Higgs, and the heavy vector-triplet (HVT) model, which generalises a large number of models that predict spin-1 neutral (Z') and charged (W') resonances.

The extended gauge models are among the best motivated theoretical scenarios beyond the SM that predict the existence of new heavy neutral and charged vector bosons (Z' and W') [3]. These models are considered as benchmark scenarios for diboson resonances having spin 1 (W' \rightarrow WZ or WH, Z' \rightarrow WW or ZH), produced predominantly via quark-antiquark annihilation ($q\bar{q}' \rightarrow W', q\bar{q} \rightarrow Z'$). The neutral and charged massive resonance production at hadron level and its subsequent decay to pairs of electroweak gauge and Higgs bosons can be expressed as, $pp \rightarrow Z'X \rightarrow WWX$, $pp \rightarrow Z'X \rightarrow ZHX$ and $pp \rightarrow W'X \rightarrow WZX$, $pp \rightarrow W'X \rightarrow WHX$.

We present results as constraints on the relevant Z-Z' (W-W') mixing angle, $\xi_{Z-Z'}(\xi_{W-W'})$ [4-5], and on the mass $M_{Z'}(M_{w'})$ and display the combined allowed parameter space for the benchmark $M_{Z'}(M_{w'})$ boson models, showing also indirect constraints from electroweak precision data (EW), previous direct search constraints from the LHC with 7 and 8 TeV in Run 1 (where available), as well as those obtained from the LHC at 13 TeV with the full CMS and ATLAS Run 2 data set of time-integrated luminosity of 137 fb^{-1} and 139 fb^{-1} in the semileptonic final states.

The total width $\Gamma_{Z'}(\Gamma_{W'})$ of the Z'(W') can be written as follows:

$$\Gamma_{Z'} = \sum_{f} \Gamma_{Z'}^{\bar{f}\bar{f}'} + \Gamma_{Z'}^{WW} + \Gamma_{Z'}^{ZH} , \ \Gamma_{W'} = \sum_{f} \Gamma_{W'}^{\bar{f}\bar{f}'} + \Gamma_{W'}^{WZ} + \Gamma_{W'}^{WH}$$
(1)

Different bounds on the Z' and W' parameter space are collected in Fig. 1 (left and right panel) for the EGM model, showing that at high masses, the limits on $\xi_{Z-Z'}$ ($\xi_{W-W'}$) obtained from the full Run 2 data set collected at $\sqrt{s} = 13$ TeV and recorded by the CMS and ATLAS detectors are substantially stronger than that derived from the global analysis of the precision electroweak data (EW), as well as the limits obtained from diboson data at the

Tevatron. Limits obtained separately with CMS and ATLAS from the two channels, $Z' \rightarrow W^+W^-$ ($W' \rightarrow WZ$) and $Z' \rightarrow ZH$ ($W' \rightarrow WH$), are shown for comparison. It turns out that the diboson channel in contrast to allows to place limits on Z - Z'(W - W') mixing in the narrow mass ranges, whereas in the rest of the resonance mass both channels demonstrate comparable sensitivity to $\xi_{Z-Z'}(\xi_{W-W'})$ mixing.



Fig1. Left panel: The Z'_{EGM} model: 95%*C.L*.exclusion regions in the two-dimensional $(M_{Z'}, \xi_{Z-Z'})$ plane obtained after incorporating indirect constraints from electroweak precision data (dashed curve labeled ``EW')' and direct search constraints from the Tevatron (dark shaded area) as well as from the LHC searches for and in semileptonic final states using the full Run 2 CMS and ATLAS data set. The region above the curves for the *WW* and *ZH* channels are excluded. Right panel: Same as in the left panel (W'_{EGM} model) but in the $(M_{W'}, \xi_{W-W'})$ plane.

Acknowledgements

This research has been partially supported by the Abdus Salam ICTP (TRIL Programme) and the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research.

- Altarelli, G. Searching for New Heavy Vector Bosons in pp Colliders. / G. Altarelli, B. Mele and M. Ruiz-Altaba // Z. Phys. C 45. 1989. P. 109 (1989). Erratum: [Z. Phys. C 47. 1990. P. 676].
- [2] Eichten, E. Super collider physics / E. Eichten, I. Hinchliffe, K.D. Kane and C. Quigg // Rev. Mod. Phys. 56. - 1984. – P. 579.
- [3] Zyla, P.A. Review of Particle Physics/ P.A. Zyla et al. [Particle Data Group] / /PTEP 2020. 2020. No.8. 083C01.
- [4] Osland, P. Updated constraints on Z' and W' bosons decaying into bosonic and leptonic final states using the run 2 ATLAS data / P. Osland, A. A. Pankov and I.A. Serenkova // Physical Review D103. – 2021. – No 5. – P. 053009.
- [5] Pankov, A. High-precision limits on W-W' and Z-Z' mixing from diboson production using the full LHC Run2 ATLAS data set / A. Pankov, P. Osland, I.A. Serenkova, V.A. Bednyakov // Eur. Phys. J. C. 80. 2020. P. 503.

УДК 535.12

I. D. Feranchuk¹, Nguyen Quang San¹, O.D. Skoromnik²

ALL-COUPLING SOLUTION FOR THE POLARON PROBLEM IN THE SCHRODINGER REPRESENTATION

¹Belarusian State University, Nezavisimosti Ave., 4, 220030 Minsk, Belarus <u>feranchuk@bsu.by</u>, quangsanbsu@gmail.com ²Independent researcher, Heidelberg, Germany <u>olegskor@gmail.com</u>

It is well known at present that the polaron problem has much more broad significance than simply a model for some form of the interaction between electron and phonons in the ionic crystal as it was introduced by Fröhlich [1]. It is important for description of the charge carriers in inorganic and organic matter interacting with ion vibrations. The corresponding electron-phonon interaction causes phase transformations, including superconductivity and dominates the transport properties of many metals and semiconductors [2]. The Hamiltonian of the polaron is also important as a fundamental model for interaction between particle and quantum field where various non-perturbative methods for the quantum field theory can be verified in the entire range of the coupling constant α [3]. Like any other quantum system, the polaron can be described both on the basis of the solution of the Schrodinger equation and by using the Feynman path-integral formalism [4]. The first way allowed us to introduce the idea of the self-localized polaron [5] and to find the exact asymptotic value for the ground state energy $E(\alpha)$ of the system in the strong coupling limit $\alpha \gg 1$. This solution qualitatively differs from the results in the case of weak coupling $\alpha \ll 1$ when the standard perturbation theory can be applied.

There were a lot of attempts to calculate the ground state energy by means of variational principle for the Schrodinger representation of this system and some of the trial functions led to peculiarity for the function $E(\alpha)$ near the point $\alpha \approx 7$. These results caused the discussion about the existence of the "phase transition" between two qualitatively different states of the polaron. In the series of papers [6] it was proved that the function $E(\alpha)$ is the analytical for any α and "phase transition" does not exist. However, it is important to stress that till now no constructive computational algorithm or trial wave function for variational approach are developed for all-coupling solution of the polaron problem in the Schrodinger representation. The construction of such an algorithm is of great interest not only for the polaron problem but also for non-perturbative description and analysis of the renormalization for other models in the quantum field theory [7].

The great advantage of the Feynman variational principle for the path integrals is the possibility to calculate the polaron binding energy $E(\alpha)$ as the continuous function for any α and to find the lowest estimation for the polaron binding energy in the intermediate coupling regime by means of numerical calculation of the functional integrals. The effective diagrammatic quantum Monte Carlo algorithm was developed for the Fröhlich polaron in the path integral representation [8]. It was considered as the important argument for more wide

possibilities of the functional approach in the quantum field theory in comparison with the Schrodinger representation.

In the present paper we use the operator method (OM) for calculation of the ground state energy of the considered system in the Schrodinger representation . The OM was introduced in the paper [9] and was effectively used later on for many quantum systems [10] It leads to the fast convergent series for the solutions of the Schrodinger equation. In the present paper it is shown for the first time that in the case of Fröhlich Hamiltonian two first terms of the OM series lead to the function $E(\alpha)$ and the effective mass $m(\alpha)$ of the polaron which fairly well coincide with Feynman's results. These functions can be calculated by means of rather simple analytical expressions which leads to the correct asymptotic limits and good accuracy for intermediate coupling with essentially less numerical efforts in comparison with the path integral representation. It seems to us that the results make more clear and descriptive the question about the ground states of the polaron and confirm the equivalence of the path integral and operator approaches for description of quantum systems. Our analysis may be important for application of the conception of self-localized states for other models of the particle-field interaction even in the case when conventional perturbation theory includes both the infrared and ultraviolet divergence [7].

- Frohlich H.Electrons in lattice fields/H. Frohlich // Advances in Physics 1954 V.3 P.325.
- [2] Alexadroy A.S *Advances in Polaron Physics* / A. S. Alexandrov and J. T. Devreese // Springer, Berlin, 2010.
- [3] Mitra T. Polarons / T. Mitra, A. Chatterjee, and S. Mukhopadhyay // Physics Reports 1987—V.153—P.91.
- [4] Feynman R.P.Electron in the ionic crystal / R. P. Feynman // Physical Review 1955 V.97—P.660.
- [5] Pekar S. Research in electron theory of crystals / S. Pekar // Tech. Rep 1963.
- [6] Gerlach B. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transition exists or not? // B. Gerlach and H. Lowen // Rev. Mod. Phys. – 1991 – V.63 – P.63.
- [7] Skoromnik O.D.O. D. Skoromnik, I. D. Feranchuk, and C. H. Keitel/Regularization of divergence for particle in scalar field // Phys. Rev.A – 2013 – V.87 – P 052107.
- [8] Mishchenko Polarons in Advanced Materials / A. A. Mishchenko and N.Nagaosa // Springer, 2007
- 19] Feranchuk I. I. Feranchuk and L. Komarov/Operator method for solution of the Schrodinger equation // Physics Letters A 1982 V.88 P.211.
- [10] Feranchuk I Nonperturbative Description of Quantum Systems / I. Feranchuk, A. Ivanov, V. H. Le, and A. Ulyanenkov // Springer, Berlin, 2015.

УДК 535

С. В. Гапоненко

ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ: ОТ НАНОСТРУКТУР ДО АСТРОФИЗИКИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>s.gaponenko@ifanbel.bas-net.by</u>

Плотность фотонных состояний (ПФС) определяет вероятность процессов спонтанного испускания и спонтанного рассеяния фотонов квантовыми системами, спектральную плотность равновесного (теплового) электромагнитного излучения, абсолютное значение лэмбовского сдвига в атомных спектрах [1-4]. В последние десятилетия модифицирование плотности фотонных состояний в структурах со сложной топологией составляет одно из существенных направлений оптики и смежных с ней областей: фотоники и плазмоники [5-7]. В докладе анализируется использование целенаправленного изменения ПФС в сложных структурах и неоднородных средах для управления вероятностями квантовых процессов, вклад модифицированной плотности фотонных состояний в формирование вторичного излучения в сложных системах и неоднородных средах, изменяющих ПФС в спектральном интервале порядка 10^2 — 10^3 нм, то есть в *нано*структурах:

- управление вероятностью спонтанных переходов в резонаторах и периодических средах (фотонных кристаллах);
- управление вероятностью спонтанных переходов с помощью металлических и диэлектрических наноантенн;
- принципиальная возможность управления ядерными процессами и ее возможная реализация для ²²⁹Th;
- вклад ПФС в гигантское комбинационное рассеяние (ГКР) света в металлодиэлектрических наноструктурах и объяснение на этой основе антистоксовых аномалий ГКР, включая возможное лазерное охлаждение вещества [8];
- интерпретация экспериментов по изменению спектра излучения в динамически перестраиваемом резонаторе на основе усиленного неупругого рассеяния фотонов в моду с высоким значением ПФС.

Наряду с наноструктурами, возможны различные проявления эффектов, обусловленных модифицированной ПФС в *макро*системах [9]:

- субъестественная ширина спектральных линий в ультрахолодной плазме;
- субпланковское тепловое излучение в астрофизических объектах;
- другие возможные проявления модифицированной ПФС в астрофизических объектах с сильным отличием диэлектрических свойств от вакуума.

Кроме квантовых процессов, ПФС задает значение лэмбовского сдвига, в связи с чем анализируется возможность его изменения в средах и структурах с измененной ПФС и трудности постановки соответствующих экспериментов [9]. Отмечается также возможный переход от систем с модифицированной плотностью фотонных состояний к совместным состояниям излучения и вещества, не описываемым теорией возмущений [10].

- Bose S. N. Planck's Gesetz und Lichtquantenhypothese. // Zs. Physik. 1924. V. 26. C. 178.
- [2] Purcell E. M. Spontaneous emission probabilities at radiofrequencies. // Phys. Rev. 1946. – V. 69. – P. 681.
- [3] Bethe H.A. The electromagnetic shift of energy levels. // Phys. Rev. 1947. V. 72. P. 339.
- [4] Gaponenko S.V. Effects of photon density of states on Raman scattering in mesoscopic structures. Phys. Rev. B – 2002. – V. 65. – P. 140303.
- [5] Gaponenko S. V. Satyendra Nath Bose and nanophotonics.// J. Nanophot. 2014. V. 8.
 P. 087599.
- [6] Gaponenko S. V., Guzatov D. V. Colloidal plasmonics for active nanophotonics. // Proc. IEEE – 2020. – V. 108. – P. 704.
- [7] Gaponenko S. V., Guzatov D. V., Strekal N. D. Strong selective anti-Stokes Raman scattering enhancement in plasmonics using photon density of states engineering. // J. Phys. Chem. C – 2021. – V. 125. – P. 27654.
- [8] Chen Y. C., Bahl G. Raman cooling of solids through photonic density of states engineering. // Optica – 2015. – V. 2. – P. 893.
- [9] Gaponenko S. V. Novitsky D. V., Guzatov D. V. Density of states effects on emission and scattering of photons in plasmas. // Phys. Scripta – 2023. – DOI: 10.1088/1402-4896/acc217.
- [10] Методы квантовой оптики структурированных резервуаров / Д. С. Могилевцев, С. Я. Килин. Минск : Белорусская наука, 2007. 174 с.

УДК 539.1

В. В. Гавриловец^{1,а}, В. В. Тихомиров¹, А.С. Лобко¹, Н.С. Сочивко^{1,2} УЧЁТ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ СРЕДЫ В GEANT4 ЧЕРЕЗ МОДИФИКАЦИЮ СТАНДАРТНОГО ТРЕККИНГА

¹Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь ^abycel@tut.by ²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Белорусскии государственныи университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Взаимодействие заряженных частиц и фотонов с кристаллической средой при энергиях более сотен МэВ может существенно зависеть от ориентации их движения относительно элементов пространственной симметрии кристаллов. Это проявление анизотропии вещества при высоких энергиях связано с эффектами сильного поля и требует учета при моделировании устройств и установок экспериментальной физики высоких энергий с использованием кристаллов.

Несмотря на заметный эффект в условиях малых углов, учёт влияния кристалличности среды на процесс взаимодействия высокоэнергетических частиц и излучения с веществом был реализован на хорошем уровне только для специальных условий при описании экспериментов направленных на изучение этих эффектов. В программах общего моделирования экспериментальных установок, например GEANT4, первая попытка полноценно включить кристаллическую среду была предпринята в [1]. Далее последовали другие, более убедительные попытки в [2, 3].

Мы предлагаем простую модель учёта кристалличности среды при моделировании в GEANT4. При реализации модели частично используется исходный код для GEANT4, описанный в работе [1], а физическая модель учета кристалличности среды основана на работе [2]. Модель предполагает упрощенный учет кристалличности среды через модификацию процессов тормозного излучения и рождения электрон-позитронных пар в GEANT4 без микроскопического моделирования движения в режиме каналирования. Модификация осуществляется через изменение сечения взаимодействия в зависимости от энергии частиц по коэффициентам полученным из моделирования процесса каналирования по микроскопической модели из работы [4].

В модели заменяются следующие стандартные электромагнитные процессы GEANT4 на модифицированные процессы, которые учитывают кристалличность структуры в отдельных объемах моделирования:

- Для гамма-квантов процесс *G4GammaConversion*.
- Для электронов и позитронов меняется процесс *G4eBremsstrahlung*.

Для возможности моделирования полной установки, у которой часть является кристаллической средой, разработана модификация, которая позволяет обозначать объемы моделируемой установки, которые должны моделироваться как кристаллические материалы применением модифицированных с процессов взаимодействия.

Предлагаемая гибридная реализация позволяет полноценно моделировать экспериментальную установку с элементами из кристаллов и пригодна для моделирования электромагнитных ливней. Анализ моделирования показывает, что длина развития электромагнитного ливня в кристалле увеличивается значительно слабее при увеличении энергии начальных частиц по сравнению с аморфным веществом, что приводит к уменьшению общей длины электромагнитного ливня и смещению максимума пика выделенной энергии к входной поверхности [5].

Возможность использования такой простой модели обусловлена тем, что первичные частицы, а так же высокоэнергетические вторичные частицы распространяются «вперед» в пространственном конусе с очень малым (несколько мрад) углом раствора по отношению к начальному направлению первичной частицы и отклоняются на значительные углы только тогда, когда энергия значительно падает и эффекты кристаллической среды существенно слабеют. В таком случае для упрощения расчетов, их дальнейшее распространение можно моделировать по сечениям стандартных физических процессов, как в аморфном веществе.

В этом случае основные эффекты связанные с симметрией вещества возникают только для высокоэнергетических частиц в «остром» конусе, а развитие ливня в низкоэнергетической части происходит стандартно и радиус Мольера для кристаллов не будет существенно изменяться из-за анизотропии среды. При этом, длина каскадного ливня по направлению движения начальной частицы вдоль кристаллической оси или плоскости существенно уменьшается, и таким образом увеличивается плотность поглощенной энергии.

Эффекты сильного поля в кристаллах возможно использовать для уменьшения размеров детекторов в экспериментах с высокими энергиями, если энергия детектируемых частиц достаточно большая. Кроме того предоставляется возможность уменьшить размеры и вес гамма-телескопов на околоземной орбите, детектирующие точечные источники гамма-излучения.

Работа поддержана грантом Ф22МЦ-006.

- Bagli E., Simulation of orientational coherent effects via Geant4 / E. Bagli et al // Journal of Physics: Conference Series. 2017. V. 898. P. 042041.
- [2] Baryshevsky V.G., On the influence of crystal structure on the electromagnetic shower development in the lead tungstate crystals / V.G. Baryshevsky, V.V. Haurylavets, V.V. Tikhomirov et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2017. – Vol. B 402. – P. 35–39.
- [3] Sytov A., Geant4 simulation model of electromagnetic processes in oriented crystals for the accelerator physics / A. Sytov et al. // arXiv:2303.04385 [physics.acc-ph]. – 2023. – Mode of access: https://arxiv.org/abs/2303.04385 – Date of access: 09.03.2023.
- [4] Bandiera L., Strong reduction of the effective radiation length in an axially oriented scintillator crystal / L. Bandiera, V.V. Tikhomirov et al. // Phys. Rev. Lett. – Vol. 121. – 2018. – P. 021603. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.021603.
- [5] Bandiera L., Compact electromagnetic calorimeters based on oriented scintillator crystals / L. Bandiera, V.V. Haurylavets, V.V. Tikhomirov // Nucl. Instrum. Meth. A. – 2019. – Vol. 936. – P. 124-126.

УДК 535.3

С. В. Власенко¹, А. Б. Михалычев¹, Д. С. Могилевцев¹

ЭМУЛЯЦИЯ КВАНТОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СМЕСИ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>svetlana.vlasenko@ifanbel.bas-net.by</u>

Известно, что операторы плотности могут быть разложены по когерентным состояниям [1]. Более того, даже небольшое количество когерентных состояний обеспечивает довольно точное представление многих типичных квантовых состояний [2]. Такое разложение продемонстрировало свою эффективность в квантовой томографии, где позволило избежать калибровки детекторов [3]. При этом томография работает с неизвестным состоянием, которое нужно восстановить, используя результаты измерений. Здесь мы решаем обратную задачу: используя известное, но недоступное состояние нужно воспроизвести (эмулировать) результаты измерения с ним. Так как состояние известно, такое представление может быть эффективно оптимизировано.

Суть предложенного метода эмуляции [4] заключается в представлении квантового состояния ρ_{true} , которое нужно эмулировать, в виде смеси пробных состояний ρ_j (обычно это проекторы на когерентные состояния $\rho_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$):

$$\rho_{true} \approx \rho = \sum_{j} c_{j} \rho_{j}, \qquad \sum_{j} c_{j} = 1.$$
(1)

Для неклассического состояния ρ такое представление обязательно включает хотя бы один отрицательный коэффициент с_i и не может быть интерпретировано как случайный выбор состояний ρ_i с вероятностями c_i . Это ограничение можно преодолеть за счет кодирования и передачи отдельно информации о знаке, используя дополнительную степень свободы (вспомогательный квантовый объект в двух взаимно ортогональных и, следовательно, классически различимых состояниях $|+\rangle$ и $|-\rangle$). состояния выбираются случайным Пробные (когерентные) образом сконструированного набора с вероятностями $p_i \propto |c_i|$. Кроме того, они получают дополнительную метку в виде состояния вспомогательного объекта $|\pm\rangle$ согласно знаку их веса с_i. Чтобы эмулировать измерение некоторой наблюдаемой 0, нужно ввести наблюдаемую $A \propto (|+\rangle\langle +|-|-\rangle\langle -|)$ для вспомогательной частицы и выполнить совместное измерение наблюдаемой О⊗А. Такая процедура обеспечивает одни и те же значения математического ожидания для эмулированного эксперимента и эксперимента с настоящим начальным состоянием. Таким образом, даже не имея в распоряжении самого квантового состояния, можно воспроизвести (эмулировать) результаты измерения с ним.

Предложенный подход позволяет выполнять точную эмуляцию экспериментов с однофотонными, двухфотонными и даже перепутанными (NOON) квантовыми состояниями, используя конечный набор фазово-усредненных когерентных состояний. Например, однофотонное состояние ρ_{true} может быть представлено, используя пять

фазово-усредненных когерентных состояний с амплитудами $|\alpha_j| = \{0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.00\}$ и коэффициентами разложения с $c_j = \{-21.8, 25.6, -3.1, 0.33, -0.0028\}$.

В данном исследовании мы применяем сконструированное разложение для эмуляции эффекта Хонга-У-Манделя (рисунок 1(а,б)) и интерферометрическому измерению фазы для NOON-состояний (рисунок 1(с)). Схемы для эмуляции могут быть реализованы экспериментально, используя только набор простых оптических устройств, таких как светоделители и фазовые элементы. Рисунок 1(с) показывает промоделированные результаты эмуляции оценки фазы с NOON-состоянием для N = 2 вместе с шумом, вносимым процедурой эмуляции.



(а) Схема для наблюдения эффекта Хонга-У-Манделя с однофотонными состояниями и (b) установка для его классической эмуляции. (c) Зависимость корреляционной функции от измеряемого фазового сдвига θ для NOON-состояния с N = 2.
 Рисунок 1 – Применение процедуры эмуляции к квантово-оптическим эффектам

Разработанная процедура может быть крайне полезной для эмуляции эффектов с яркими неклассическими состояниями. При работе с состояниями с несколькими фотонами не возникает серьезных проблем: существует множество способов генерации таких состояний. Однако, ситуация меняется, когда нужно провести эксперименты с состояниями с большим числом фотонов – здесь только определенные классы состояний могут быть сгенерированы. В этом случае возможность эмуляции таких экспериментов позволяет преодолеть эти трудности. Мы демонстрируем эмуляцию эффектов, характерных для ярких субпуассоновских состояний, в частности, «коллапсов» и «возрождений» для двухуровневой системы модели Джейнса-Каммингса.

Таким образом, предложен подход, позволяющий воспроизвести результаты квантовых измерений, используя только классические ресурсы. Продемонстрированный подход полезен для разработки недорогих лабораторных комплексов для студентов – источники квантового света могут быть крайне дорогостоящими. Также метод может быть применен для тестирования детектирующих систем.

[1] Glauber R. J. Coherent and incoherent states of the radiation field //Physical Review. – 1963. – Vol. 131. – No. 6. – P. 2766.

[2] Reut V., Mikhalychev A., Mogilevtsev D. Data-pattern tomography of entangled states //Physical Review A. – 2017. – Vol. 95. – No. 1. – P. 012123.

[3] Řeháček J., Mogilevtsev D., Hradil Z. Operational tomography: fitting of data patterns //Physical review letters. – 2010. – Vol. 105. – No. 1. – P. 010402.

[4] Mikhalychev A. et al. Emulation of quantum measurements with mixtures of coherent states //Physical Review A. – 2022. – Vol. 105. – No. 5. – P. 052206. УДК 5304

V.G. Baryshevsky

TIME REVERSAL INVARIANCE VIOLATING INTERACTIONS OF HIGH ENERGY SHORT-LIVED PARTICLES IN BENT AND STRAIGHT CRYSTALS

Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 11 Bobruiskaya str., 220030, Minsk, Belarus

bar@inp.bsu.by

The spin rotation phenomenon of channelled particles, moving in a bent crystal, which was theoretically predicted in [1] and observed in [2], gives us the opportunity to measure anomalous magnetic moment of high energy short-lived particles. The appearance of beams with energies up to 7 Tev on LHC and further growth of particles' energy and beams' luminosity on FCC do essentially improve the possibility of using the phenomenon of spin rotation of the high energy particles in bent crystals and spin depolarization of such particles for measuring anomalous magnetic moments of positively charged, as well as neutral and negatively charged short-lived baryons, and τ -lepton [3,4].

The detailed analysis of conditions of the experiment on measuring magnetic dipole moment (MDM) have shown that strong electric field of a bent crystal due to the spin rotation phenomenon of the channelled particle allows to obtain information about the possible value of the electric dipole moment (EDM) of short-lived baryons too [5-7]. Elementary particles can obtain EDM as a result of the violation of the T-invariance. It should be noted, that besides electromagnetic interaction the channelled particle moving in a crystal experiences weak interaction with electrons and nuclei as well as strong interaction with nuclei [6,7]. Mentioned interactions lead to the fact, that in the analysis of the particle's spin rotation, caused by electric dipole moment interaction with electric field, both P-odd, T-even and Podd, T-odd non-invariant spin rotation, resulting from weak interaction should be considered [6,7].

As obtained here, spin precession and scattering of particles in crystals at the LHC gives unique possibility for measurements as electric and magnetic moments of charm, beauty and strange charged baryons, neutral and negatively charged short-lived baryons, and τ -lepton so and constants determining CP (T-odd, P-odd) violation interactions and P-odd, T-even interactions of baryons with electrons and nucleus (nucleons). According to [6,7] due to nonelastic processes, along with the spin precession around three directions (the direction of the effective magnetic field, the direction of electric field and the direction of the particle

momentum) the spin rotation to the mentioned directions also appears. Results [7] were recommended by Physics Briefing Book, Input for the European Strategy for Particle Physics Update 2020 [8] (see p 71, cite [269]) for development this new science research direction in CERN.

- Baryshevsky V.G. Spin rotation of ultrarelativistic particles passing through a crystal. / V.G. Baryshevsky // Pis'ma. Zh. Tekh. Fiz. – 1979. – Vol. 5(3). – P. 182
- [2] Baublis V.V. First observation of spin precession of polarisid hyperons channeled in bent crystals. / V.V. Baublis et al., LNPI Research Report E761 Collaboration, 1990–1991.
- [3] Baryshevsky V.G. *High-Energy Nuclear Optics of Polarized Particles.* / V.G. Baryshevsky // World Scientific Publishing Company, Singapore, 2012.
- [4] Baryshevsky V.G. The possibility to measure the magnetic moments of short-lived particles (charm and beauty baryons) at LHC and FCC energies using the phenomenon of spin rotation in crystals. / V.G. Baryshevsky // Physics Letters B. – 2016. – Vol. 757. – P. 426.
- [5] Bagli E.E. Electromagnetic dipole moments of charged baryons with bent crystals at the LHC/E.E.Bagli et.el. // Eur. Phys J. C. 2017. Vol. 77(12). P. 828.
- [6] Baryshevsky V.G. Electromagnetic dipole moment and time reversal invariance violating interactions of high energy short-lived particles in bent and straight crystals. / V.G. Baryshesky // Phys. Rev. Accelerators and Beams. – 2019. – Vol. 22. – 081004.
- [7] Baryshevsky V.G. Electromagnetic dipole moments and time reversal violating interactions for high energy charged baryons in bent crystals / V.G. Baryshesky // Eur. Phys. J. C. – 2019. – Vol. 79. – P. 350.
- [8] Physics Briefing Book, Input for the European Strategy for Particle Physics Update 2020 CERN-ESU-004 30 September 2019.

УДК 530.145

А.В. Баран, В.В. Кудряшов

РЕШЕНИЕ КВАЗИУГЛОВОГО УРАВНЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ ЛОБАЧЕВСКОГО

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, np. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.baran@dragon.bas-net.by kudryash@dragon.bas-net.by

Квантовомеханическая задача о движении частицы в поле двух кулоновских центров с зарядами Z_1 и Z_2 исследовалась как в двумерном евклидовом пространстве [1], так и в двумерном пространстве Лобачевского [2]. В обоих случаях уравнение Шредингера допускает разделение переменных. В [2] введена такая специальная система координат, что для константы разделения Λ искомая функция v(x) квазиугловой переменной x представляется в виде

$$v(x) = (x-a)^{a_+} f(x)$$

а функция f(x) удовлетворяет квазиугловому уравнению Гойна

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \left(\frac{1}{2x} + \frac{1}{2(x-1)} + \frac{2\alpha_+ + 1/2}{(x-a)}\right)\frac{df}{dx} + \frac{(Ax-p)f}{x(x-1)(x-a)} = 0.$$
 (1)

Здесь использованы следующие обозначения

$$Z_{-} = Z_{1} - Z_{2}, \quad \alpha_{\pm} = \frac{1}{4} \left(1 + \sqrt{-8E\rho^{2} \pm 8Z_{-}\rho + 1} \right),$$
$$a = -\frac{(\gamma - 1)^{2}}{4\gamma}, \quad A = (\alpha_{+} + \alpha_{-})(\alpha_{+} - \alpha_{-} + 1/2), \quad p = \frac{A}{2} + \frac{\Lambda}{4\gamma},$$

где ρ – радиус кривизны, 0 < x < 1, $\gamma > 1$, γ – параметр, характеризующий выбранную систему координат.

В [2] решение уравнения (1) получено в виде разложения по гипергеометрическим функциям

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j F(-j, j; 1/2; x),$$

коэффициенты которого подчиняются найденному рекуррентному соотношению

$$\alpha_j c_{j+1} + \beta_j c_j + \gamma_j c_{j-1} = 0,$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_{j} &= 2\varepsilon(j+1-d_{+})(j+1-d_{-}),\\ \beta_{j} &= -j^{2} + \Lambda/(\gamma^{2}+1),\\ \gamma_{i} &= 2\varepsilon(j-1+d_{+})(j-1+d_{-}). \end{aligned}$$

Здесь

$$d_{+} = \alpha_{+} + \alpha_{-}, \quad d_{-} = \alpha_{+} - \alpha_{-} + 1/2, \quad \varepsilon = \gamma/2(\gamma^{2} + 1).$$

Рассмотренное в [2] решение уравнения (1) можно дополнить вторым линейно независимым решением. Применив подстановку

$$f(x) = x^{1/2} (1-x)^{1/2} \tilde{f}(x)$$

находим для $\tilde{f}(x)$ следующее уравнение Гойна.

$$\frac{d^2\tilde{f}}{dx^2} + \left(\frac{3}{2x} + \frac{3}{2(x-1)} + \frac{2\alpha_+ + 1/2}{(x-a)}\right) \frac{d\tilde{f}}{dx} + \frac{(\tilde{A}x - \tilde{p})f}{x(x-1)(x-a)} = 0,$$
(2)

где

$$\tilde{A} = A + 2\alpha_{+} + 3/2, \quad \tilde{p} = a + \alpha_{+} + 1/4 + \frac{A}{2} + \frac{\Lambda}{4\gamma}$$

Следуя [3], представим функцию $\tilde{f}(x)$ в виде следующего разложения по гипергеометрическим функциям

$$\tilde{f}(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{c}_j F(-j+1, j+1; 3/2; x).$$

Коэффициенты \tilde{c}_i удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\tilde{\alpha}_{j}\tilde{c}_{j+1}+\tilde{\beta}_{j}\tilde{c}_{j}+\tilde{\gamma}_{j}\tilde{c}_{j-1}=0,$$

где

$$\begin{split} \tilde{\alpha}_{j} &= 2\varepsilon(j+1-d_{+})(j+1-d_{-})\left(\frac{j}{j+1}\right), \\ \tilde{\beta}_{j} &= -j^{2} + \Lambda/(\gamma^{2}+1), \\ \tilde{\gamma}_{j} &= 2\varepsilon(j-1+d_{+})(j-1+d_{-})\left(\frac{j}{j-1}\right). \end{split}$$

Полученное рекуррентное соотношение позволяет найти собственные значения константы разделения Λ в случае второго решения квазиуглового уравнения в пространстве Лобачевского. Эти собственные значения переходят в собственные значения, приведенные в [1], если проделать предельный переход от пространства Лобачевского к евклидовому пространству.

 Бондарь Д. И., Гнатич М., Лазур В. Ю., Двумерная задача двух кулоновских центров при малых межцентровых расстояниях, ТМФ. — 2006. — Т. 148, №2. — С. 269-287.
 Отчик В. С., Задача двух кулоновских центров на плоскости Лобачевского, Ковариантные методы в теоретической физике. — Минск, 2005. — С. 111-116.
 Славянов С. Ю., Лай В. Специальные функции: Единая теория, основанная на анализе особенностей. — Санкт-Петербург, 2002. — 312с. УДК 537

S.V. Anishchenko, A.A. Gurinovich

PHASE DIFFUSION IN RELATIVISTIC REFLEX TRIODES

Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 11 Bobruiskaya str., 220030, Minsk, Belarus

sanishchenko@inp.bsu.by

In low-current electronics, the nature of noise was established at the first half of the past century [1]. Investigation of noise and fluctuations made it possible to understand spectral lines broadening, amplitude fluctuations, and phase diffusion in physical oscillators, study oscillators' synchronization in detail. However, in relativistic electronics, noise is not studied so well. Despite the fact that the first high-current oscillators appeared in the 70s of the last century [2], only a few works devoted to noisy effects have been published to date [3]. In accordance with the published material, the main source of noise in HPM sources is the ecton structure of electron beams produced due to explosive electron emission.



Fig. 1. Measured microwave pulse (left) and normalized autocorrelation function (right).

It is obvious that ecton structure of e-beams affects the statistical properties of the radiation emitted by high-current e-beams and synchronization of several HPM sources. In this regard, we present an approach to the experimental study of noise in HPM sources. The approach is based on the determination of the phase diffusion coefficient D by means of radiation field autocorrelation $\langle E(t)E(t+\tau) \rangle \sim e^{-D\tau} \cos(\omega \tau)$. The fruitfulness of the approach is demonstrated by the example of a relativistic reflex triode operating at $\omega/2\pi \approx 3.3$ GHz [4] (see Fig. 1).

Using experimentally determined diffusion coefficient for reflex triode (D=0.06 rad²ns⁻¹), we study synchronization of two reflex triodes theoretically. The synchronization is investigated with the help of the Langevin equations describing phase dynamics

$$d\Phi_1/dt = \omega + \varepsilon \sin(\Phi_2(t - t_d) - \Phi_1(t)) + \xi_1(t), \qquad (1)$$

$$d\Phi_2/dt = \omega + \varepsilon \sin(\Phi_1(t - t_d) - \Phi_2(t)) + \xi_2(t).$$
(2)

Here, $\langle \xi_i(t_1)\xi_j(t_2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1-t_2)$, $\Phi_{1,2}$, ε and t_d are standard autocorrelations for white noise, oscillator's phases, coupling coefficient and time delay between HPM sources, respectively. To make radiation sources oscillate in-phase, ωt_d should be equal to an integer number of 2π . For stationary operation and $\varepsilon t_d < 1$, we find that the phase difference $\psi = \Phi_2 - \Phi_1$ obeys the time-independent Stratonovich distribution

$$P(\psi) = e^{\alpha \cos \psi} / 2\pi I_0(\alpha), \qquad (3)$$

where I_0 and $\alpha \approx \epsilon/D(1+\epsilon t_d)$ are the modified Bessel function and the dimensionless parameter, respectively. The quantity

determines the average radiation intensity of two HPM sources $J_2=2J_1(1+A)$ (J_1 is radiation intensity of a single source).



Fig. 2. Mean value A (left) and average synchronization time T (right). For ϵ =0.6 ns⁻¹, D=0.06 rad²ns⁻¹, and ϵ t_d=1, we get A≈0.9. As a result, rather high

synchronization level can be obtained in 2 ns (see Fig. 2).

- [1] Malakhov A.N. Fluctuations in self-oscillating systems. -M: Nauka, 1967 [in Russian].
- [2] Kovalev N.F. et. al. Generation of powerful electromagnetic radiation pulses by a beam of relativistic electrons. JETP Lett. -1973. -Vol. 18. -P. 138.
- [3] Abubakirov E.B., Konyushkov A.P., Sergeev A.A. Influence of noise in electron beams generated by explosive-emission cathodes on the operation of a relativistic backward wave oscillator. Radiotehnika i electronika. –2009. –Vol. 54. –P. 1009 [in Russian].
- [4] Baryshevsky V., Gurinovich A., Gurnevich E., Molchanov P. Exerimental study of a triode reflex geometry vircator. IEEE Trans. Plasma Sci. –2017. –Vol. 45. –P. 631.

УДК 539.12-17

Е. С. Кокоулина¹, М. Л. Левчук^{2,3}, М. Н. Невмержицкий³, Р. Г. Шуляковский^{3,4}

СЕЧЕНИЯ И ОДНОСПИНОВЫЕ АСИММЕТРИИ В РЕАКЦИИ НЕКОГЕРЕНТНОГО ФОТОРОЖДЕНИЯ ПИОНА НА ДЕЙТРОНЕ В ПОРОГОВОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ

¹ Объединенный институт ядерных исследований, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

kokoulina@jinr.ru

² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

mlevchuk@yandex.ru

³ Институт прикладной физики НАН Беларуси, ул. Академическая, 16, 220072 Минск, Беларусь

nevmerzhmn@gmail.com ⁴ Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь shulyakovsky@iaph.bas-net.by

Реакции на дейтроне являются основным источником информации о реакциях на нейтроне. Это является следствием ряда причин, основными из которых являются отсутствие свободной плотной нейтронной мишени и простота структуры дейтрона по сравнению с более тяжелыми ядрами.

Реакция фоторождения пиона на нуклоне интересна тем, что она предоставляет возможность изучения структуры нуклона. Из данных о реакции можно извлечь ценную информацию, такую, как коэффициенты мультипольного разложения нуклона.

Хорошо известно, что некогерентное фоторождение пионов на дейтроне подвержено сильному влиянию так называемых взаимодействий в конечном состоянии (см., например, [1]). Это явление заметно в области энергий первого резонанса и ниже. В то время как в области первого резонанса проведено множество как теоретических, так и экспериментальных исследований (что, однако, не решило все имеющиеся проблемы, например, остаётся расхождение между предсказаниями и экспериментом в реакции $\gamma d \rightarrow \pi^0 np$), пороговая область энергий остаётся слабо изученной. Это можно объяснить отсутствием технических возможностей для изучения низкоэнергетической реакции, изза чего экспериментальные данные по реакции ниже 200 МэВ были скудны и неточны. Что касается полного сечения реакции, то в пороговой области энергий были получены экспериментальные данные только для $\gamma d \rightarrow \pi^+ nn$, которые к тому же обладали малой погрешностью и хорошо описывались существующими моделями.

В 2020 году были опубликованы данные о полном сечении фоторождения π^- мезона на дейтроне в области пороговых энергий до 160 МэВ [2]. На сегодняшний день ни одно из известных теоретических предсказаний не даёт приемлемого описания этих данных на всём диапазоне энергий.

Поляризационные наблюдаемые являются более мощным инструментом для изучения механизма реакций, чем полное сечение. Они включают в не только квадраты парциальных амплитуд, но и интерференционные члены и сложные комбинации,

благодаря чему поляризационные наблюдаемые дают больше информации о поведении самих парциальных амплитуд. В этом контексте детальное как экспериментальное, так и теоретическое исследование поляризационных наблюдаемых реакции в области пороговых энергий может стать потенциальным способом решения проблемы возникающих расхождений.

В настоящей работе для описания реакции фоторождения пиона на дейтроне нами Учтен вклад построена диаграммная модель. диаграмм, соответствующих плосковолновому импульсному приближению, а также NN- и *π*N-перерассеяниям в конечном состоянии. В рамках модели получены неполяризованные полные сечения и поляризационные наблюдаемые: скалярные, векторные и тензорные асимметрии – для всех трёх зарядовых каналов реакции. Результаты по полным сечениям хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными в случае реакции с рождением π^+ -мезона, а также в случае фоторождения π^- -мезона в диапазоне энергий до 155 МэВ. При энергиях 158 и 160 МэВ в реакции $\gamma d \rightarrow \pi^- pp$ наблюдается заметное превышение экспериментальных данных. Эта же проблема наблюдается и в работах других исследователей (расчёт работы [3], приведенный также в [2], [4]). Нами исследована зависимость предсказаний от используемых моделей. Результаты позволили сделать вывод о том, что расхождение теоретических предсказаний с экспериментальными данными в реакции в окрестности порога реакции не обусловлено ни энергетическими зависимостями элементарных амплитуд, как это предполагалось в пионерской работе [2], ни количеством учитываемых парциальных волн.

Также показано, что, несмотря на малый вклад пион-нуклонных взаимодействий в конечном состоянии в полное сечение реакции, их в расчетную модель оказывает заметное влияние на структуру. Это позволяет предположить, что реакция некогерентного фоторождения пиона на поляризованном дейтроне может быть хорошим источником данных о пион-нуклонных взаимодействиях, что особенно интересно для нейтрального пиона, проведение прямого эксперимента с которым невозможно ввиду малости его времени жизни.

Работа поддержана грантом БРФФИ (проект № Ф22М-093).

[1] Laget, J. M. Pion photoproduction on few body systems / J. M. Laget // Phys. Rep. – 1981. – Vol. 69, N_2 1 – P. 1–84.

[2] Near-threshold π^- photoproduction on the deuteron / B. Strandberg [et al.] // Phys. Rev. C. - 2020. - Vol. 101, Iss. 3. - 035207(7).

[3] Extracting the photoproduction cross sections off the neutron, via the $\gamma n \rightarrow \pi \bar{p}$ reaction, from deuteron data with final-state interaction effects / V. E. Tarasov.[et al.] // Phys. Rev. C - 2011. – Vol. 84, Iss. 3. – 035203(14).

[4] Near-threshold incoherent pion photoproduction on the deuteron with final-state interaction effects / E. M. Darwish [et al.] // Annals of Physics – 2019. – Vol. 411. – 167990(26).

УДК 543.429.3

A. Naumenko¹, S. Andrukhovich, E. Saprunov

UNDERWATER IN SITU GAMMA SPECTROMETERS BASED ON NAI(TL) AND SRI2(EU2+) SCINTILLATORS: COMPARISON, TEMPERATURE DEPENDENCES, METHODS OF TEMPERATURE STABILIZATION OF SPECTRA

Institute of Physics, National Academy of Science of Belarus, 68 Niezaliežnasci pr., 220072 Minsk, BELARUS ¹ anaum@dragon.bas-net.by

Underwater / submersible in situ gamma spectrometers are designed for radiation monitoring of the aquatic environment and can measure the concentration of activity of dissolved radionuclides directly at the dive site, in contrast to traditional spectroscopy, where samples are required to be collected and transported to the laboratory with subsequent laboratory analysis. NaI(Tl) -scintillator based detectors are the most common choice for in situ gamma- radiation spectroscopy in water environment since they combine good detection efficiency, high light yield, stable performance, wide operating temperature range, low consumption and low price [1,2]. Due to the relatively low energy resolution of NaI(Tl) detectors based on scintillation crystals with better resolution has become topical in recent years. The recently rediscovered europium-doped strontium iodide (SrI₂:Eu²⁺) material has been found to possess exceptional scintillation properties including extremely high light yield, excellent energy resolution and proportional response compared to traditional NaI(Tl) scintillators. The disadvantages of the former include relatively high cost and not fully developed manufacturing process.

The main difficulty when using in situ gamma spectrometers is the significant dependence of the positions of the detected photopeaks in the spectrograms on the ambient temperature, since the brightness of scintillators depends on temperature. In this work, a comparative study of submersible in situ NaI(Tl) and $SrI_2(Eu^{2+})$ gamma spectrometers in a wide temperature range is performed, and, in particular, methods of passive and active temperature stabilization of the spectra are investigated and tested. Two detectors based on 3"×3" NaI(Tl) scintillation crystals with "hidden" and "open" architecture of electronic components are considered along with two detectors based on $1.5^{"}\times 1.5^{"}$ SrI₂(Eu²⁺) crystals with "open" architecture and different resolution. The "open" architecture allow an explicit setting of both the parameters of digital signal processing (DSP) of the multichannel analyzer (MCA) and the high voltage of the photomultiplier (PMT). Measurements of the calibration gamma spectra of ¹⁵²Eu radionuclide were carried out with the gamma spectrometers placed in a temperature chamber in the temperature range of $-10^{\circ}C \div +50^{\circ}C$ both at a constant high voltage, as well as with the active high voltage control stabilizing the position of the photopeaks. The DSP parameters of the MCA such as the "integration time" of scintillation pulses or the "pile-up filtration time" (pulse rejection algorithm), et al. also varied in the experiments. Based on the measured spectra, the temperature dependences of a number of characteristics of well-resolved ¹⁵²Eu photopeaks are obtained, namely: the positions of the Gaussian centers of the photopeaks, their Gaussian widths, Gaussian areas, background bias, etc. The temperature dependences of the form-factors of scintillation pulses such as the average times of the total and partial decay and decay exponents are retrieved from an analysis of the time response of the scintillation crystal to the events of registration of gamma quanta. More sophisticated temperature models for the energy scale are obtained, relating the position of the peak in the spectrum to the pulse energy, taking into account the DSP parameters and pulse form-factors depending on temperature and high voltage, which makes it possible to solve optimization and control problems.

In particular, as the temperature decreases, the brightness (or the integral energy of scintillation pulses) increases for both the NaI(Tl) and $SrI_2(Eu^{2+})$ scintillators, while the duration of the scintillation pulses increases for NaI(Tl) crystals and decreases for $SrI_2(Eu^{2+})$ crystals. For NaI(Tl) detectors in the case of passive stabilization of spectra (when the high voltage of the PMT is not changed with temperature), this behavior, can lead to the appearance of a quadratic maximum in the functional dependence of the position of photopeak centers on temperature. It is shown that the temperature of reaching the quadratic maximum is determined by the choice of the "integration time" with respect to the duration of the stabilizing high voltage acquires similar (inverse) functional features. Comparison of the temperature dependences of the characteristics of the photopeaks with those obtained for the "open" detectors makes it possible to determine the hidden parameters of the digital signal processing of the detector with the "hidden" architecture.

Due to the difference in the manufacturing process and the likely presence of defects, one of the $SrI_2(Eu^{2+})$ crystals (#1) has a lower resolution and lower efficiency than the other (#2). The performed calibration experiments demonstrated the presence of a significant temperature hysteresis for the $SrI_2(Eu^{2+})$ #2 detector in the position of the ¹⁵²Eu calibration photopeaks between the temperature increase and decrease branches in the range of +30°C ÷ +40°C. The change in temperature in this range is characterized by an asymmetric sharp jump (jumps) in the position of photopeaks (instabilities / multistability), poor controllability. In a narrow temperature range near the jump, degradation of the spectra with splitting of the photopeaks into two is observed. For the $SrI_2(Eu^{2+})$ #1 scintillation crystal, a small hysteresis is observed at low temperatures near 0°C, while the jump in the position of photopeaks is not pronounced. A working hypothesis is proposed to explain the presence of regions of temperature hysteresis by the phenomenon of thermoluminescence in $SrI_2(Eu^{2+})$ crystals.

The resolution calibrations of the detectors are constructed based on the results of measurements of the spectra of a number of calibration radionuclides at a constant temperature. In addition, the temperature effects are incorporated in the calibrations from thermal chamber experiments. In order to determine the detection efficiency, experiments were carried out to measure the spectra of certified aqueous solutions of ¹³⁹Ce, ¹³⁷Cs, ⁴⁰K and ⁸⁸Y radionuclides in an $8m^3$ water tank.

- Tsabaris C. An autonomous in situ detection system for radioactivity measurements in the marine environment. / C. Tsabaris, C. Bagatelas, T. Dakladas, et al. // Appl. Radiat. Isot. – 2008. – T. 66. – C. 1419–1426.
- [2] Naumenko A. Autonomous NaI(Tl) gamma-ray spectrometer for in situ underwater measurements. / A. Naumenko, S. Andrukhovich, V. Kabanov, et al. // Nuclear Inst. and Methods, A – 2018. – T. 908. – C. 97–109.

УДК 539.172

А. Ю. Манько¹, Р. Г. Шуляковский²

ДВУХ-ФОТОННОЕ WW ПАР НА LHC : ЛЕПТОННЫЙ И АДРОННЫЙ КАНАЛ РАСПАДА.

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

andrej.j.manko@gmail, andrej.j.manko@mail.ru

² Институт прикладной физики НАН Беларуси ул. Академическая, 16, 220072, Минск,

Беларусь

shulyyakovsky@iaph.bas-net.by

Стандартная Модель (СМ) электрослабого [1, 2] и сильного [3-5] взаимодействия была успешно проверена во многих экспериментах. Несмотря на это в СМ имеются проблемы: много свободных параметров: около 30, три поколения кварков и лептонов, различие масс частиц по поколениям. Для решения этих проблем СМ были предложены различные расширения СМ: «новая физика», например, Суперсимметрия [6], и др. Чтобы найти эффекты «новой физики» необходимо аккуратно измерять полные сечения, константы взаимодействий СМ и аккуратно калибровать светимость ускорителя. Одними из важнейших констант взаимодействия СМ являются константы трех- и четырех бозонного взаимодействия. Данные константы взаимодействия могут быть использованы для поиска эффектов «новой физики» (аномальные константы взаимодействия). Процесс двух-фотонного рождения W бозонов [1-5] может быть использован для калибровки светимости ускорителя и поиска эффектов «новой и поиска аномальных констант взаимодействий, использовать физики» для прецизионного изучения параметров СМ [6, 7]. В данной работе изучается механизм двух-фотонного рождения WW пар в ускорителе LHC в лидирующем порядке теории возмущений. В работе исследуются лептонные и адронные каналы распада. В работе использовалось приближение Вайцзеккера – Вильямса для расчета полных и дифференциальных сечений. Для протона данное приблежение дается формулой [8, 9]:

$$f_p(x) = \frac{\alpha}{\pi x} \left(1 - \frac{1}{x} \right) \left(\varphi \left(\frac{q_{\text{max}}^2}{q_0^2} \right) - \varphi \left(\frac{q_{\text{min}}^2}{q_0^2} \right) \right), \tag{1}$$

функция ф имеет вид:

$$\varphi(\xi) = \left(1 + ay\right) \left(\sum_{k=1}^{3} \frac{1}{k(1+x)^{k}} - \ln(1+\xi^{-1})\right) - \frac{(1-b)y}{4\xi(1+\xi)^{3}} + c\left(1 + \frac{y}{4}\right) \left(\ln\left(\frac{1+\xi-b}{1+\xi}\right) + \sum_{k=1}^{3} \frac{b^{k}}{k(1+\xi)^{k}}\right)$$
(2)

где a = 7,16, b = -3,96, c = 0,028, $q_0^2 = 0,71$ ГэВ², $q_{max}^2 = 2$ ГеВ², $q_{min}^2 = \frac{m_p^2 x^2}{1-x}$, $y = \frac{x^2}{1-x}$,

*т*_{*p*} – масса адрона.

Сечение в упругом случае дается формулой:

$$\sigma(s) = \int dx_1 \int dx_2 f_p(x_1) f_{p(\bar{p})}(x_2) \hat{\sigma}(x_1 x_2 s) \,. \tag{3}$$

Результаты моделирования для дифференциального сечения в зависимости инвариантной массы лептонов представлены на рис.1



Рисунок 1 Дифференциальное сечение в зависимости от инвариантной массы лептонов.

Литература

- 1. Measurement of exclusive $\gamma\gamma \rightarrow W^+W^-$ production and search for exclusive Higgs boson production in pp collisions at $\sqrt{s} = 8.0$ TeV using the ATLAS detector. [Electronic resource]/M. Aaboud [et al.]// Mode of access: <u>http://arxiv.org/abs/1607.03745v1</u> - Date of access: 21.01.2016.
- 2. The CMS Collaboration. Study of exclusive two-photon production W^+W^- in pp collisions at $\sqrt{s} = 7.0$ TeV and constraints on anomalous quartic gauge couplings / The CMS Collaborations //JHEP. 2013 Vol. 07. P. 116.
- 3. Буднев В.М. Двухфотонное рождение частиц и приближение эквивалентных фотонов. / В.М. Буднев [и др]// ЭЧАЯ. 1973. том 3.- вып 1. с. 239-284.
- 4. J de Favereau de Jeneret. High energy photon interaction at the LHC [Electronic resource]/ J de Favereau de Jeneret [et al.]// Mode of access: <u>http://arxiv.org/abs/0908.2020v1</u> Date of access: 24.01.2016.
- 5. Howard Baer. The International linear collider: Technical design report in vol 4. /ed.: Baer Howard [et al.]. CERN. 2013. vol. 2.
- Marfin I, Shishkina T. Electroweak radiative effects in the process gamma gamma ---> W+ W- process. Automatic loop calculations using FeynArts, FormCalc, and LoopTools./I. Marfin, T. Shishkina// NPCS. – 2005. – Vol. 8. – No. 4. – P. 409-420.
- 7. Marfin I. B., Shishkina T. V., Mosolov B.A. The investigation of the $\gamma\gamma \rightarrow W^+W^-$ including electromagnetic corrections at the TESLA kinematics[Electronic resource]./I. B. Marfin, V.A. Mossolov, T.V. Shishkina// Mode of access: https://arxiv.org/abs/hep-ph/0305153 Date of access: 12.06.2016.
- 8. Weizsäcker, C.F. Radiation emitted in collisions of very fast electrons/ C.F. Weizsäcker //Z.Phys. 1934. Vol.88. P. 612-625.
- Williams, E.J. Nature of the high-energy particles of penetrating radiation and status of ionization and radiation formula / E.J. Williams //Phys. Rev. – 1934. – Vol. 45. – P.729-730.

јУДК 539.12

Н. Г. Крылова¹, В. М. Редьков²

ГЕОМЕТРИЗАЦИЯ ТЕОРИИ СПИНОРНОЙ ЧАСТИЦЫ В ПРОСТРАНСТВЕ НЬЮМЕНА-УНТИ-ТАМБУРИНО

¹ Белорусский государственный аграрный технический университет, пр. Независимости, 99, 220023 Минск, Беларусь <u>nina-kr@tut.by</u> ² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072

институт физики им. Б.И.Степанова ПАП Беларуси, пр. пезависимости, 08, 220072 Минск, Беларусь v.redkov@ifanbel.bas-net.by

Нерешенные до настоящего времени проблемы космологии, связанные с эффектами темной материи и темной энергии, делают актуальным развитие альтернативных моделей гравитации, включая f(R)-гравитацию, супергравитацию и теорию струн. В связи с этим возникает новый интерес к некоторым известным метрикам, ранее рассматриваемым как нефизические. В частности, особое внимание в литературе уделяется метрикам, содержащим параметр Ньюмена–Унти–Тамбурино (HVT), который интерпретируется как магнитный аналог шварцшильдовой массы [1, 2].

Математические подходы, основанные на геометрических методах, широко используются в космологии. Так, теория элементарных частиц на фоне римановой геометрии пространства-времени является математической основой исследования материальных полей в релятивистской космологии; риманова и лагранжева геометрии используются для описания гравитационного взаимодействия в рамках общей теории относительности и в обобщенных космологических моделях [3]. Ранее нами было предложено использование математической теории Косамби-Картана-Черна (КСС) для анализа ряда задач квантовой механики [4]. Целью данной работы является применение КСС-теории к исследованию частицы со спином ½ в пространстве с НУТ-метрикой.

В рамках тетрадного формализма для НУТ-метрики

$$ds^{2} = \Phi\left(dt + 4a\sin^{2}\left(\frac{\theta}{2}\right)d\varphi\right)^{2} - \frac{dr^{2}}{\Phi} - \left(a^{2} + r^{2}\right)\left(d\theta^{2} + \sin^{2}(\theta)d\varphi^{2}\right),$$

получено следующее представление для уравнения Дирака

$$\begin{bmatrix} i\left(\gamma^{0}\frac{\rho}{\sqrt{\Delta}}+\gamma^{3}\frac{2a}{\rho}\sqrt{\frac{1-\cos\theta}{1+\cos\theta}}\right)\frac{\partial}{\partial t}-i\gamma^{1}\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{\rho}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{r\sqrt{\Delta}}{2\rho^{3}}-\frac{\Delta'}{4\rho\sqrt{\Delta}}\right)\\ -i\gamma^{0}\gamma^{2}\gamma^{3}\frac{a\sqrt{\Delta}}{2\rho^{3}}-i\gamma^{2}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{2\tan\theta}\right)-i\gamma^{3}\frac{1}{\rho}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}-M\end{bmatrix}\Psi=0,$$

где $\Delta = r^2 - r r_g - a^2$, $\rho^2 = r^2 + a^2$, $\Phi = \Delta / \rho^2$, a - HYT-параметр.

Проведено разделение переменных и получена система уравнений

$$\sqrt{\Delta} \frac{dR_1}{dr} - \left(\frac{r\sqrt{\Delta}}{\rho^2} + \frac{\Delta'}{2\sqrt{\Delta}} - \frac{i\tau\rho^2}{\sqrt{\Delta}}\right)R_1 - (iMr + \lambda)R_2 = 0,$$

35

$$\sqrt{\Delta} \frac{dR_2}{dr} - \left(\frac{r\sqrt{\Delta}}{\rho^2} + \frac{\Delta'}{2\sqrt{\Delta}} + \frac{i\tau\rho^2}{\sqrt{\Delta}}\right)R_2 + (iMr - \lambda)R_1 = 0,$$

которая сводится к одному дифференциальному уравнению второго порядка:

$$\Delta R_{1}'' - A(r)R_{1}' + B(r)R_{1} = 0, \qquad (1)$$

где A(r) и B(r) – известные функции, явный вид которых сложен и здесь не приводится. Радиальная компонента R_2 является комплексно сопряженной к функции R_1 ($R_2 = R_2^*$). Уравнение (1) анализируется с использованием второго инварианта КСС-теории, полученного в явном виде

$$P = \frac{B}{\Delta} - \frac{1}{4} \frac{A^2}{\Delta^2} + \frac{1}{2\Delta} \frac{\partial A}{\partial r} - \frac{A\Delta'}{2\Delta^2}.$$

Зависимость второго инварианта от переменной *r* при различных значениях НУТпараметра представлены на рисунке. Видно, что как в случае массивной частицы, так и в безмассовом случае действительная часть второго инварианта положительна вблизи горизонта $r = 1/2(r_g + (r_g^2 + 4a^2)^{-1/2})$ и на бесконечности. Это свидетельствует о расходимости конгруэнции геодезических и ассоциируется с отсутствием связанных состояний в системе.



Рисунок – Зависимость действительной части второго инварианта от радиальной переменной, (а) безмассовый случай (*M* = 0), (б) *M* = 1; *a* = 0,7 (сплошная), 0,5 (штриховая), 0,1 (пунктирная).

Таким образом, с использованием КСС-теории проведена геометризация задачи спинорной частицы в НУТ-пространстве, проанализировано поведение радиальной компоненты волновой функции и показана расходимость конгруэнции геодезических.

- [1] Гальцов Д. В. Гамма-метрики с параметром Ньюмена-Унти-Тамбурино. / Д. В. Гальцов, К. В. Кобялко // УЗФФ. 2017. № 4. С. 1740901.
- [2] Bradley M. Rotating perfect fluid sources of the NUT metric. / M. Bradley, G. Fodor, L.A. Gergely, M. Marklund, Z. Perjes // Class. Quantum Grav. – 1999. – Vol. 16. – P. 1667–1675.
- [3] Redkov V. M. Quantum mechanics in spaces of constant curvature. / V. M. Redkov, E. M. Ovsiyuk New York: Nova Science Publishers, Inc., 2012.
- [4] Krylova N. Application of geometrical methods to study the systems of differential equations for quantum-mechanical problems / N. Krylova, Y. Voynova, V. Balan // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – Vol. 1416. – P. 012021.
A.V. Ivashkevich, V.M. Red'kov

NONRELATIVISTIC APPROXIMATION IN THE PAULI – FIERZ THEORY FOR A SPIN 3/2 PARTICLE IN PRESENCE OF EXTERNAL FIELDS

Department «Fundamental interactions and astrophysics» B.I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus Republic of Belarus, 220072, Minsk, Independence Avenue 68-2

ivashkevich.alina@yandex.by, v.redkov@ifanbel.bas-net.by.

We start with the relativistic system of equations in Cartesian coordinates for 16-component wave functions with transformation properties of the vector-bispinor under the Lorentz group. When performing the nonrelativistic approximation, for separating in the complete wave function large and small components we apply the method of projective operators. Correspondingly, the complete wave function is presented as a sum of three parts: the large depending on 6 variables, and the small ones depending on 14 variables. There are found two linear constraints on large components, and two constraints on the small ones. After performing the procedure of non-relativistic approximation we derive 6 equations with the needed non-relativistic structure, in which only 4 large components enter. It is proved that only 4 equations are independent, so we arrive at the generalized Pauli-like equation for 4-component wave function. Analysis of transformation properties of the nonrelativistic wave function permits us to generalize the structure of the derived equation to an arbitrary curved 3-space.

Key words: spin 3/2 particle, external electromagnetic field, Cartesian coordinates, nonrelativistic approximstion, projective operators, curved 3-space.

In the present paper we derive the nonrelativistic equation for spin 3/2 particle in presence of external electromagnetic and gravitational fields. We start with the relativistic system of equations for wave function with transformation properties of vector-bispinor [1-6].

When performing the non-relativistic approximation, for separating in the complete wave function large and small components we apply the method of projective operators. Correspondingly, the complete wave function is presented as a sum of three parts: the large Ψ_+ , depending on 6 variables, and the small Ψ_0 and Ψ_- , depending on 14 variables. There are found 2 linear constraints on big components. The system of equations is presented in explicit form with the use of 20 new variables.

We derive 6 equations with the needed non-relativistic structure, in which enter only 4 main primary large components. It is proved that only 4 equations are independent, so we arrive at the generalized Pauli-like equation for 4-component wave function. Finally we derive non-relativistic equation in any curved 3-space within the tetrad method by Fock-Weyl-Ivanenko:

$$iD_{0}\Psi_{6} = \frac{1}{2M} [K^{j}(x)(\frac{\partial}{\partial x^{j}} + \Gamma_{j}(x) + ieA_{j}(x))]^{2}\Psi_{6},$$

$$K^{j}(x) = K_{i}e^{j}_{(i)}(x), \quad \Gamma_{j}(x) = \frac{1}{2}J^{kl}e^{n}_{(k)}(x)\nabla_{j}e_{(l)n}(x),$$
(20)

where the generalized derivatives are determined by the formulas

$$D_{0}(x) = \partial_{0} + ieA_{0}(x) + \frac{1}{2}(\sigma^{ps} \otimes I + I \otimes j^{ps})\gamma_{[ps]0}(x),$$

$$D_{k}(x) = e_{(k)}^{j}(x)(\partial_{j} + ieA_{j}(x)) + \frac{1}{2}(\sigma^{ps} \otimes I + I \otimes j^{ps})\gamma_{[ps]k}(x), k = 1, 2, 3.$$
(21)

The definition of the 6 large components remains the same, two linear constraints preserve their form as well. All algebraic transformations proving existence of only 4 independent equations also are the same. The difference consists only in the new and more complicated expressions for generalized derivatives according to (44). Correspondingly, we obtain the generalized equation

$$iD_0(x)\Psi = -\frac{1}{2M}(D_1^2(x) + D_2^2(x) + D_3^2(x))\Psi + \frac{1}{2M}(D_{[23]}S_1 + D_{[31]}S_2 + D_{[12]}S_3)\Psi_4,$$
(22)

where the commutators

$$D_{[kl]} = D_k(x)D_l(x) - D_l(x)D_k(x)$$

are used.

References

- [1].Pauli, W. Über relativistische Feldleichungen von Teilchen mit beliebigem Spin im elektromagnetischen Feld / W. Pauli, M. Fierz // Helvetica Physica Acta. – 1939. – Bd. 12. – S. 297–300.
- [2].Fierz, M. On relativistic wave equations for particles of arbitrary spin in an electromagnetic field / M. Fierz, W. Pauli // Proc. Roy. Soc. London. A. – 1939. – Vol. 173. – P. 211–232.
- [3].Rarita, W. On a theory of particles with half-integral spin / W. Rarita, J. Schwinger / Phys. Rev. 1941. Vol. 60, № 1. P. 61–64.
- [4].Ginzburg, V. L. To the theory of particles of spin 3/2 / V. L. Ginzburg // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1942. – Vol. 12. – P. 425–442.
- [5].Elementary particles with internal structure in external fields. I. General theory, II. Physical problems. / V. V. Kisel [et al.]. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2018. – 402 p., 404 p.
- [6].Spherical solutions of the wave equation for a spin 3/2 particle / Ivashkevich A.V. [et al.] // Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus. – 2019. – Vol. 63, № 3. – P. 282–290 (in Russian).

УДК 53

А.К. Горбацевич¹, Г.С. Верещагин², А.С. Гаркун³, С.О. Комаров⁴, Я.Д. Коробов⁵ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ОДНОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В СИЛЬНЫХ ГРАВИТАЦИОННЫХ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

^{1,4,5}Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

 $^1a.gorbatsievich@gmail.com,~^4staskomarov@tut.by,~^5ianbelarus@gmail.com$

²Координационный центр ИКРАНет, Пескара, Италия, 65122 Italia, Pescara,

Piazza della Repubblica, 10

veresh@icra.it

³Институт прикладной физики НАН Беларуси, ул. Академическая, 16, 220072, г. Минск, Беларусь garkuniaph.bas-net.by

Интерес к проблеме движения атома во внешнем гравитационном поле обусловлен двумя причинами. Во-первых, знание закона движения атома необходимо при учете влияния внешнего гравитационного поля на его спектр. Однако это влияние оказы-

вается существенным либо в экстремально сильных гравитационных полях, либо при ультрарелятивистском движении атома как целого [1]. Очевидно, что как в первом, так и во втором случаях *движение атома нельзя a priori считать геодезическим*. Во-вторых, атом представляет собой конкретную физическую систему, обладающую конечными размерами и внутренней структурой, а движение протяженных тел в рамках общей теории относительности широко обсуждается в литературе [2].

Атом водорода будем рассматривать как квантовомеханическую задачу двух тел (электрон – протон), исходя из общерелятивистского уравне5нием Дирака. Так как $\frac{\mathfrak{v}}{c} \ll 1$, где \mathfrak{v} — средняя **относительная** скорость электрона в атоме, c — скорость света, то в сопутствующей атому система отсчета можно ограничиться квазирелятивистским приближением. В этом случае, следуя [1], оператор Гамильтона в сопутствующей системе отсчета одиночного наблюдателя может бцыть представлен в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_{12},\tag{1}$$

где

$$\hat{H}_{1,2} = \frac{\hat{\mathscr{P}}_{1,2}^2}{2m_{1,2}} + m_{1,2}c^2\hat{\theta}_{1,2} + \frac{c}{2}\left(e^{(\sigma)(\alpha)(\tau)}\frac{\partial\hat{\theta}_{1,2(\sigma)}}{\partial X_{1,2}^{(\alpha)}}\hat{S}_{1,2(\tau)} - \left\{\hat{\theta}_{1,2}^{(\beta)}, \hat{\mathscr{P}}_{1,2(\beta)}\right\}\right) - \omega^{(\beta)}\left(\hat{L}_{1,2(\beta)} + \hat{S}_{1,2(\beta)}\right) - \left(m_1X_1^{(\alpha)} + m_2X_2^{(\alpha)}\right)W^{(\alpha)}$$
(2)

— операторы Гамильтона первой и второй частиц во внешних гравитационном и электромагнитном полях, соответственно, а оператор \hat{H}_{12} описывает их взаимодействие. В работе [3] было найдено электромагнитное поле в небольшой окрестности точечного заряда, движущегося произвольно во внешнем гравитационном поле. Используя эти выражения, можно показать, что в хорошем приближении оператор взаимодействия можно представить как

$$\hat{H}_{12} = -\frac{e^2}{\left|X_1^{(\alpha)} - X_2^{(\alpha)}\right|} \,. \tag{3}$$

Здесь $\mathscr{P}_{\alpha} = \hat{P}_{(\alpha)} - \frac{e}{c}A_{(\alpha)}, A_{(i)} - 4$ -потенциал внешнего электромагнитного поля; греческие индексы принимают значения от 1 до 3, латинские — от 1 до 4; $X_{1,2}^{(\alpha)}$ обобщенные координаты Ферми, введенные вдоль мировой линии, задающей систему отсчета; $W^{(\alpha)}$ и $\omega^{(\alpha)}$ — тетрадные компоненты (соответствующие индексы заключены в скобки) 4-ускорения и угловая скорость системы отсчета, соответственно; $\hat{\theta}_{1,2} = \frac{1}{2}R_{(4)(\alpha)(4)(\beta)}X_{1,2}^{(\alpha)}X_{1,2}^{(\beta)}; \hat{\theta}_{1,2(\sigma)} = -\frac{2}{3}R_{(4)(\alpha)(\sigma)(\beta)}X_{1,2}^{\alpha}X_{1,2}^{(\beta)}; R_{(i)(j)(k)(l)} = h^a_{(i)}h^b_{(k)}h^c_{(k)}h^d_{(l)}R_{abcd}$ — тетрадные компоненты тензора кривизны; $e^{(\alpha)(\beta)(\gamma)}$ — трехмерный символ Леви-Чивита; $\hat{S}_{1,2(\alpha)}$ операторы спина первой и второй частиц, соответственно.

Говорить об уравнении движении атома как целого можно лишь в том случае, если электрон находится в стационарном или квазистационарном состоянии. В этом случае среднее значение любой наблюдаемой \hat{L} , не зависящей явно от времени, будут приближенно удовлетворять соотношению

$$\frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}\tau} = \left\langle \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{L} \right] \right\rangle \cong 0.$$
(4)

Используя последнее равенство и явное выражение для оператора Гамильтона (1), находим 4-ускорение Центра инерции атома, определенного в сопутствующей системе отсчета, в которой он (центр инерции) покоится. В результате после перехода от сопутствующих координат Ферми к глобальным координатам, получаем, что в хорошем приближении движение атома описывается следующей системой уравнений:

$$(m_p + m_e)\frac{Du^i}{D\tau} = \frac{1}{2c}R^i_{jkl}u^j\varepsilon^{klmn}u_nJ_m + \frac{1}{c}F^{\ddot{u}}_{m;n}\varepsilon^{mnkl}M_ku_l\,,\tag{5}$$

$$\frac{DJ^i}{D\tau} = \frac{1}{c^2} u^i J_n \frac{Du^i}{D\tau}, \quad J_m u^m = 0.$$
(6)

Здесь F_m^i тензор внешнего электромагнитного поля, ε^{klmn} псевдотензор Леви-Чивита, J_n — полный момент импульса атома, M_k — его магнитный момент, которые в сопутствующей систем отсчета имеют следующие компоненты:

$$J_{(\alpha)} = \bar{S}_{(\alpha)} + \left\langle \left(\hat{L}_{A(\alpha)} + \hat{S}_{A(\alpha)} \right) \right\rangle_0, \quad J_{(4)} = 0,$$

$$\tag{7}$$

$$M_{(\alpha)} = \frac{e}{2mc} \left\langle \left(\hat{L}_{(\alpha)} + 2\hat{S}_{(\alpha)} \right) \right\rangle_0 + \frac{eg_p}{2m_p c} \bar{S}_{(\alpha)}, \quad M_{(4)} = 0.$$
(8)

- [1] Горбацевич А.К. Квантовая механика в общей теории относительности./А.К. Горбацевич – М.: УРСС, 2022 – 160 С.
- Plyatsko R. Highly relativistic spin-gravity coupling for fermions./R Plyatsko, M Fenyk// Physical Review D.-2015. - 91, 064033
- [3] Gorbatsievich A. On the equation of motion of a one-electron atom in an external gravitational field./A. Gorbatsievich// Acta Physica Polonica, Series B. – 1986.– V.17.–C.111.

УДК 535.3

А.В. Новицкий¹, Д.В. Новицкий², А.Н. Фурс¹, Ф.М. Морозько^{1,3}, А. Коробчевская³

НЕЭРМИТОВОСТЬ В НАНООПТИКЕ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

novitsky@bsu.by

² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

dvnovitsky@gmail.com ³ Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva 8410501, Israel <u>alinak@bgu.ac.il</u>

В пионерской работе [1] было показано, что некоторые неэрмитовые гамильтонианы, как и эрмитовые гамильтонианы в квантовой механике, могут иметь вещественные собственные значения. Позднее неэрмитовость была перенесена в оптику, которая является надежной платформой для изучения физических явлений, непосредственное исследование которых ограничено: горизонт черной дыры, топологический изолятор, инфляционная космология и др. Оптическая неэрмитовость часто ассоциируется с наличием симметрии по отношению к одновременной инверсии координат и обращению времени (РТ симметрии). РТ-симметричные гамильтонианы систем обладают спектром действительных собственных значений, при этом система имеет комплексную диэлектрическую проницаемость, распределенную в пространстве согласно $\varepsilon(-x, -y, -z) = \varepsilon^*(x, y, z)$ [2]. Это значит, что материалы РТ-симметричной структуры характеризуются потерями и усилением. Выделяют два режима. В РТсимметричном режиме потери энергии собственными модами в одном материале полностью компенсируются усилением в другом. При изменении параметра системы РТ симметрия может нарушиться, и система переходит в не-РТ-симметричный режим. В этом случае собственные моды являются затухающими или усиливающимися, а гамильтониан более не коммутирует с произведением операторов инверсии координат и обращения времени. Точка, в которой происходит нарушение РТ симметрии, называется особой точкой. В ней происходит не только вырождение собственных значений, но и собственных функций гамильтониана, а матрица гамильтониана принимает жорданову форму. Именно вблизи особой точки происходят наиболее интересные физические явления.

В данной работе рассмотрены лишь некоторые аспекты неэрмитовости, связанные с нанооптикой. В литературе отмечалось, что скорость спонтанного испускания увеличивается или подавляется вблизи особой точки РТ-симметричной системы, представляющей собой систему связанных резонаторов. Однако такое поведение характерно не для всех неэрмитовых систем. В [3] на основе численного моделирования и теории связанных мод было получено, что в особой точке РТ-симметричного гамильтониана для пары связанных волноводов не происходит изменения фактора Парселла в особой точке. Этот результат объясняется наличием у

волноводов больших излучательных потерь, не скомпенсированных усилением материала.

В последующей работе [4] нами была построена теория возмущений вблизи особой точки высшего порядка, в которой более двух собственных значений равны. Решения представлены с использованием вырожденных собственных значений и набора неортогональных обобщенных собственных векторов, вводимых для жордановой матрицы. В результате были записаны разложения собственных значений и векторов по малому параметру возмущений $\varepsilon^{1/n}$, где n – порядок особой точки. Возмущение снимает вырождение, приводя к расщеплению собственного значения на *n* ветвей. Важно, что такие решения можно использовать для построения функции Грина вблизи особой точки и, следовательно, вычислять локальную фотонную плотность состояний и резонансный перенос энергии между донорной и акцепторной молекулами. При высоком качестве резонанса локальная плотность состояний имеет ярко выраженный пик. Он размывается при больших потерях, подтверждая высказанное в [3] обоснование. Полученные результаты проверены численными расчетами для пары резонаторов, обладающей особой точкой четвертого порядка [4].

На границе раздела полубесконечных гиротропных слоев без поглощения и усиления обнаружены поверхностные электромагнитные волны дьяконовского типа [5]. Такие поверхностные волны распространяются лишь в определенном секторе углов, причем распространение в противоположном направлении запрещено. Полученные вентильные свойства волн могут быть важны для однонаправленного переноса энергии между молекулами, осуществляемого за счет бездиссипативного транспорта энергии на границе раздела сред.

Таким образом, неэрмитовость расширяет наши представления о взаимодействии света и материи на наномасштабах, открывая новые горизонты для использования рассмотренных эффектов на практике.

- Bender C.M. Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry / C. M. Bender, S. Boettcher // Phys. Rev. Lett. – 1998. – Vol. 80. – P. 5243.
- [2] Зябловский А.А. РТ-симметрия в оптике / А.А. Зябловский, А.П. Виноградов, А.А. Пухов, А.В. Дорофеенко, А.А. Лисянский // УФН.– 2014.– Т. 184.– С. 1177.
- [3] Morozko F. Modal Purcell factor in PT-symmetric waveguides / F. Morozko, A. Novitsky, A. Karabchevsky // Phys. Rev. B.– 2020.– Vol. 102.– 155303.
- [4] Novitsky A. Resonance energy transfer near higher-order exceptional points of non-Hermitian Hamiltonians / A. Novitsky, F. Morozko, D. Gao, L. Gao, A. Karabchevsky, D.V. Novitsky // Phys. Rev. B.– 2022.– Vol. 106.– 195410.
- [5] Фурс А.Н. Оптические вентили на поверхностных электромагнитных волнах в РТсимметричных гиротропных структурах. І. Частные случаи // А.Н. Фурс, А.В. Новицкий // Кристаллография.– 2023.– Т. 68, № 1.– С. 62.

SPIN 3/2 PARTICLE IN THE COULOMB FIELD, TETRAD FORMALISM, NONRELATIVISTIC APPROXIMATION

Department «Fundamental interactions and astrophysics» B.I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus Republic of Belarus, 220072, Minsk, Independence Avenue 68-2 ivashkevich.alina@yandex.by, v.redkov@ifanbel.bas-net.by.

In the present paper, the system of radial equations describing the nonrelativistic spin 3/2 particle in presence if external Coulomb field has been derived. The known on the use of projective procedure for performing the nonrelativistic approximation is based on the method of projective operators. In the present paper, this approach has been is applied directly in the relativistic system of radial equation derived previously for a free spin 3/2 particle for states with the spherical symmetry within the covariant tetrad formalism. The system of two 2-nd order differential equations describing the nonrelativistic particle has been derived. It refers to states with quantum number of energy, square and the third projection of the total angular momentum, and parity. The wave function contains four components. Solutions of radial equation have been constructed in terms of confluent hypergeometric functions, the energy spectra are found.

Key words: spin 3/2, Coulomb field, method of projective operators, non-relativistic approximation, wave functions, energy spectra

In the present paper, we will study the nonrelativistic approximation for a spin 3/2 particle [1-3] in the external Coulomb field. In [4] (see also [5, 6]), the nonrelativistic equation was derived from the relativistic Pauli–Fierz theory; in this case, the Cartesian coordinates were used and the presence of an arbitrary electromagnetic field was taken into account. In the present paper, the system of radial equations describing the nonrelativistic spin 3/2 particle in the Coulomb field will be obtained. Exact solutions are found in terms of the confluent hypergeometric functions, and the corresponding energy spectra are obtained.

In [4, 5], the system of radial equations for spin 3/2 particle in absence of external fields was derived. After needed calculations, in the nonrelativistic approximation we obtain the system of two radial equations

$$[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2m(E + \frac{\alpha}{r})]L_1 = \frac{1}{r^2}[b^2L_1 + 3bL_2],$$

$$[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2m(E + \frac{\alpha}{r})]L_2 = \frac{1}{r^2}[\frac{2a(a+3) + b^2 + 10}{3}L_2 + bL_1].$$

Let us introduce the notation for the 2nd order operator (we recall the expressions for a, b):

$$\Delta = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2m(E + \frac{\alpha}{r}), \quad a = j + 1/2, \quad b = \sqrt{(j - 1/2)(j + 3/2)};$$

then the system of equations can be written in matrix form

$$\Delta \begin{vmatrix} L_1 \\ L_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{r^2} \begin{vmatrix} b^2 & 3b \\ b & c \end{vmatrix} \begin{vmatrix} L_1 \\ L_2 \end{vmatrix}, \quad c = \frac{2a(a+3)+b^2+10}{3}, \quad \Delta \begin{vmatrix} L_1 \\ L_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{r^2} A \begin{vmatrix} L_1 \\ L_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta L = \frac{1}{r^2} A L.$$

Let us find the matrix, which makes the matrix A diagonal. From here we find two identical subsystems for the elements of the first and second row,

$$\begin{vmatrix} b^2 - \lambda & b \\ 3b & c - \lambda \end{vmatrix} \begin{vmatrix} s_{i1} \\ s_{i2} \end{vmatrix} = 0, \quad i = 1, 2$$

From the vanishing of the determinant, we obtain the equation for determining the eigenvalues λ

$$\lambda_1 = (j+2)^2 - \frac{1}{4}, \quad \lambda_2 = j^2 - \frac{1}{4},$$

After performing the transformation, we have the separate equations for the functions $\overline{L}_1, \overline{L}_2$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2m(E + \frac{\alpha}{r}) - \frac{(j+2)^2 - 1/4}{r^2}\right]\overline{L}_1 = 0, \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2m(E + \frac{\alpha}{r}) - \frac{j^2 - 1/4}{r^2}\right]\overline{L}_2 = 0,$$

they have the same structure, they have the following solutions

$$E_{2} = -\frac{\alpha^{2}m}{2N^{2}} = -\frac{\alpha^{2}m}{2(j+1/2+n)^{2}}, \quad \overline{L}_{2} = r^{j-1/2}e^{-\sqrt{-2mEr}}F(-n,2j+1,x).$$

$$E_{1} = -\frac{\alpha^{2}m}{2N^{2}} = -\frac{\alpha^{2}m}{2(j+5/2+n)^{2}}, \quad \overline{L}_{1} = r^{j+3/2}e^{-\sqrt{-2mEr}}F(-n,2j+5,x).$$

References

- [1]. Fierz M. Über die relativistische theorie Kraftefreier Teilchenmit beliebigem Spin. Helvetica Physica Acta, 1939, vol. 12, pp. 3–37.
- [2].Pauli, W. Über relativistische Feldleichungen von Teilchen mit beliebigem Spin im elektromagnetishen Feld / W. Pauli // Helv. Phys. Acta. 1939. Vol. 12. P. 297–300.
- [3].Rarita, W. On a theory of particles with half–integral spin / W. Rarita, J. S. Schwinger // Phys. Rev. 1941. Vol. 60, № 1. P. 61–64.
- [4].Ivashkevich, A.V. Solutions with spherical symmetry of the equation for a spin 3/2 Particle / A.V. Ivashkevich // Chapter in: Understanding Quaternions. – Eds. Du Peng, Haibao Hu, Dong Ding, and Zhouyue Li. New York: Nova Science Publishers Inc., 2020. – P. 67–104.
- [5].Massless spin 3/2 field, spherical solutions, Eliminating the gauge degrees of freedom / A.V. Ivashkevich, E.M. Ovsiyuk, V.V. Kisel, V.M. Red'kov // Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus. – 2021. – Vol. 65, no. 6. – P. 668–679.
- [6].Red'kov, B.M. Tetrad formalism, spherical symmetry, and Schrodinger basis. Minsk: Belarussian science, 2011. 339 p.
- [7].Ivashkevich, A.V. Nonrelativistic approximation in the Pauli Fierz theory for a spin 3/2 particle in presence of external fields / A.V. Ivashkevich, V.M. Red'kov // Report to: 21th International Conference Foundations & Advances in Nonlinear Science and 6th International Symposium Advances in Nonlinear Photonics 26 29 September, 2022. Minsk, Belarus.

УДК 681.785.57

А. В. Саечников, Э. А. Чернявская, В.А. Саечников

МАТРИЦА АКТИВНЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ ДЛЯ ВЫСОКОЧУВИТЕЛЬНОГО БИОХИМИЧЕСКОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь asaetchnikov@bsu.by

Оптические методы детектирования биохимических объектов основаны на регистрации взаимодействии оптического поля с аналитом. Компактность, доступность и высокая чувствительность являются основными преимуществами оптических сенсоров, они могут обеспечивать дистанционный кроме этого, опрос И мультиплексное обнаружение на одном устройстве. Сенсоры на основе оптических микрорезонаторов является дальнейшим развитием волноводного подхода с увеличенной длиной взаимодействия оптического поля с исследуемым раствором. Здесь планарная геометрия волновода преобразуется в замкнутую кольцевую петлю двумерной или трехмерной геометрии, где локализуется оптическое поле для тех длин волн, которые распространяются вдоль периферии полости и интерферируют между собой после одного обхода. Собственные моды, которые удовлетворяют критерию конструктивной интерференции называются резонансами мод шепчущей галереи (МШГ) и характеризуются высоким коэффициентом добротности, которая, однако, всегда ограниченна потерями на поглощение в среде. Это может быть компенсировано путем внедрения в материал резонатора усиливающей среды (обычно органических флуоресцентных красителей) и называется активацией. Моды, существующие в области максимального усиления, которые преодолевают порог генерации, начинают излучать с увеличенной добротностью и таким образом улучшается предел обнаружения. Однако потенциал микролазеров ДЛЯ анализа динамических биохимические процессов зачастую ограниченно реализован из-за малой разрешающей способности стандартных спектроскопических приборов. Одним из перспективных методов реализации является датчик в виде матрицы микрорезонаторов, где возможность многократного использования и параллельного опроса до тысячи микрорезонаторов делают эту платформу особенно привлекательной [1-4]. В работе представлена методика идентификации динамических биохимических процессов на основе оптической схемы параллельного опроса матрицы активных микрорезонаторов.

Для изготовления микрорезонаторов был использован золь-гель фоторезист SZ2080, смешанный с фотоинициатором 4,4'-Bis-(diethylamino)-benzophenon, дополнительным мономером DMAEMA а также флуоресцентным красителем родамин 4В. Для испарения растворителя и обеспечения стабильной связи полимерной структуры с предварительно силанизированной подложкой, проба нагревалась при 80°C в течение 30 минут. Схема прямой лазерной печати на основе двухфотонной полимеризации реализована с стандартной схеме облучения материала на основе фемтосекундной импульсной титан-сапфировой лазерной системы [2]. Среди известных решений только схема на основе оптической призмы обладает

возможностью мультиплексного возбуждения без изменения геометрии и поэтому была выбрана в качестве способа инициации генерации лазерного излучения в активированных микрополостях. При этом, в отличие от обычного способа последовательного анализа спектров генерации для каждого отдельного микролазера, была предложена схема параллельного съема сигнал в дальней зоне с помощью цифровой камеры при его распространении через спектральный фильтр, в качестве которого выступает Фабри-Перо интерферометр (период 200 пм, полуширина 2 пм). Для одновременной генерации излучения во всей совокупности микрорезонаторов используется перестраиваемый наносекундный лазер (выставленный на длину волны 530 нм) с частотой повторения 10 Гц и максимальной энергией 10 мДж.

На единой подложке формируется матрица с девятью отдельными каналами со 100 резонаторами в каждом. В качестве биохимических объектов исследования были выбраны иммуноглобулины двух типов: человеческий, кроличий. Для избирательной регистрации соответствующие ИМ антигены предварительно осаждались на поверхностях микрорезонаторов. В процессе формирования связи антиген-антитело на поверхности микрорезонатора наблюдаются динамические измерения интенсивности свечения микрорезонаторов, интенсивность которой определяется динамически изменяемыми спектрами микрорезонаторов И ИХ положением относительно периодической структуры спектра пропускания фильтра. Динамический отклик характеризуется долговременным процессом избирательного связывания и описывает спектральный отклик из-за одновременной реакции на осаждение объектов на поверхности сенсора, а также сил набухания/сжатия. Посредством обучения нейронной сети долгой краткосрочной памяти на основе экспериментальных данных для 4 измерительных каналов с различной функциональной избирательностью иммуноглобулины, необработанные (человеческий, кроличий И контрольные (>99%) резонаторы) была продемонстрирована возможность точной оценки концентрации иммуноглобулинов в диапазоне концентраций 100-50000 нг/мл.

- [1] Saetchnikov A. V. Reusable Dispersed Resonators-Based Biochemical Sensor for Parallel Probing. / Saetchnikov A. V., Tcherniavskaia E. A., Skakun V. V., Saetchnikov V. A., Ostendorf A. // IEEE Sensors Journal. – 2019. – Vol. 19, No. 17. – P. 7644-7651.
- [2] Saetchnikov A. V. Deep-learning powered whispering gallery mode sensor based on multiplexed imaging at fixed frequency. / Saetchnikov A. V., Tcherniavskaia E. A., Saetchnikov V. A., Ostendorf A. // Opto-Electronic Advances. – 2020. – Vol. 3. – P. 200048.
- [3] Saetchnikov A. V. Intelligent optical microresonator imaging sensor for early stage classification of dynamical variations. / Saetchnikov A. V., Tcherniavskaia E. A., Saetchnikov V. A., Ostendorf, A. // Advanced Photonics Research. – 2021. – Vol. 7. – P. 2100242.
- [4] Saetchnikov A. V. A Laser Written 4D Optical Microcavity for Advanced Biochemical Sensing in Aqueous Environment. / Saetchnikov A. V., Tcherniavskaia E. A., Saetchnikov V. A., Ostendorf A. // Journal of Lightwave Technology. – 2020. – Vol. 38, No. 8. – P. 2530-2538.

УДК535.243; 535.36

М. М. Кугейко

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИКИ РАССЕИВАЮЩИХ СРЕД

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь kugeiko.bsu.by

Большинство оптико-физических измерений относится к классу косвенных, заключающихся в определении искомого значения физической величины на основании результатов прямых измерений других физических величин, функционально связанных с искомой величиной.

Задача количественной оценки определяемых параметров объектов обычно реализуется в два этапа. На первом этапе определяются оптические параметры объекта ИЗ получаемой измерительной информации (обычно путём сравнения экспериментальной и расчетной, в рамках модели переноса и взаимодействия света). Для обеспечения необходимой для практики точности необходимо использование методов теории переноса излучения не использующих различные приближения о доминирующем процессе взаимодействия, что, в свою очередь, требует больших вычислительных затрат И, поэтому, исключает возможность интерпретации экспериментальных данных режиме реального времени (например, В при использовании наиболее точного метода Монте-Карло). На втором этапе решается обратная задача по восстановлению определяемых параметров (микрофизических, биофизических и т.п.) из полученных значений оптических параметров.

Практически во всех случаях задача интерпретации получаемой косвенной информации является многопараметрической и часто некорректной обратной задачей. Вследствие этого для получения количественных значений определяемых величин требуется использование априорной информации или допущений об исследуемом объекте, т. е. решение проводится в рамках математической модели объекта исследования. Для некорректных обратных задач устойчивость решения к тому же зависит от погрешности получения косвенной информации [1].

Разработан регрессионный подход к решению обратных задач оптического зондирования биологических и аэродисперсных сред, заключающийся в извлечении из регистрируемых оптических сигналов линейно-независимых компонент, как проекций

сигналов на пространство из собственных векторов их ковариационной матрицы, и определении искомых параметров среды на основе их устойчивых регрессионных связей с линейно-независимыми компонентами сигналов [2–5]. Использование в регрессиях линейно-независимых величин, соответствует извлечению из исходных (обращаемых) данных "полезного сигнала" и отбрасыванию "шума", что позволяет строить решения обратных задач, которые устойчивы к случайным «возмущениям» этих данных.. Вышеотмеченные собственные векторы и регрессионные решения обратных задач получают путем статистического моделирования оптических сигналов при максимальной вариативности параметров среды, влияющих на процесс переноса в ней излучения. В последующем это позволяет выполнять оперативную обработку измеряемых оптических сигналов без решения уравнения переноса излучения в исследуемой среде, доопределения и регуляризации обратной задачи.

В докладе возможности регрессионного подхода продемонстрированы на основе анализа информативности спектральных коэффициентов ослабления и направленного светорассеяния разбавленной и цельной крови, аэрозолей естественного и антропогенного происхождений, газовых компонент в условиях перекрытия их спектральных линий. Установлены длины волн оптического зондирования и углы приема рассеянного излучения, оптимальные для определения микрофизических параметров эритроцитов и аэрозолей (показателя преломления, счетной и объемной концентраций, характеристик распределения частиц по размерам), биофизических параметров тканей человека, получены соответствующие множественные регрессии, позволяющие определять искомые микрофизические и биофизические параметры в широких пределах их вариаций без решения некорректных обратных задач.

- [1] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука. 1974. –509 с.
- [2] Кугейко М.М., Лысенко С.А. Лазерная спектронефелометрия аэродисперсных сред. –Минск: БГУ. 2012. –208 с.
- [3] Лысенко С.А. Методы оптической диагностики биологических объектов. Минск: БГУ. – 2014. – 250 с.
- [4] Кугейко М.М. Методы определения микрофизических параметров эритроцитов по поляризационно-нефелометрическим измерениям. / Кугейко М.М., Смунев Д.А. // Электроника-инфо. – 2016. № 2. – С. 41–49.
- [5] Кугейко М.М. Определение концентрации компонентного состава газов методом оптической спектроскопии в условиях перекрытия их спектральных линий. / Кугейко М.М., Баравик А.А. // Оптика и спектроскопия, – 2021. – Т. 129, –выпуск 10. – С.1221-1227.

УДК 521.31

А.А. Спиридонов, В.С. Баранова, В.Е. Черный, Д.В. Ушаков, В.А. Саечников

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОРБИТЫ СВЕРХМАЛОГО КОСМИЧЕСКОГО АППАРАТА

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

spirid@bsu.by

Согласно статистике, на февраль 2023 г., запущено более 2 тысяч сверхмалых космических аппаратов (СМКА) массой от 0,1 до 10 кг, разворачиваются 62 группировки этих спутников, решающих задачи связи, дистанционного зондирования Земли, исследования погодных явлений, автоматического слежения за подвижными объектами, научных исследований. По мере развития СМКА и повышения уровня сложности выполняемых ими задач, ужесточаются требования к точности определения положения спутника на орбите и прогнозирования его движения. Поэтому для СМКА актуальной является проблема определения орбиты для решения задач баллистико-навигационного обеспечения как в процессе его проектирования так при эксплуатации.

Предполетная оценка орбитальных параметров СМКА проводится при отсутствии данных траекторных измерений. Это необходимо для планирования работы космического аппарата (КА) в первые сутки полета, его поиска, идентификации (при групповом запуске), проведения первоначальных сеансов радиосвязи. Особенно это стало актуальным в последние годы в связи с ростом числа запусков и количества КА, участвующих в одном запуске. Существует много примеров запуска СМКА, когда аппарат был утерян после запуска. Перед запуском наноспутника БГУ CubeBel-1 была поставлена задача проанализировать предыдущие запуски с китайского космодрома Цзюцюань двухступечатыми paкeтами Long March 2C и 2D на солнечно-синхронную орбиту, оценить его предполагаемые орбитальные параметры. Для этого были разработаны методы краткосрочного предполетного прогнозирования солнечносинхронной и эллиптической орбиты СМКА [1], учитывающие историю динамики полета КА предыдущих запусков с целевого космодрома, данные провайдера запуска (широта и долгота стартовой площадки, профиль полета ракеты, время запуска, наклонение, период или высота орбиты), которые позволили определить вектор состояния, закон движения наноспутника CubeBel-1 на первых витках, сгенерировать TLE (two-line elements – двухстрочный набор элементов) файл начальных орбитальных данных. Это позволило радиолюбителям по всему миру спрогнозировать сеансы радиосвязи, параметры наведения антенн и доплеровский сдвиг частоты наноспутника CubeBel-1 при отсутствии информации траекторных измерений, а НСП БГУ первой в мире принять и декодировать его телеметрию [1].

При эксплуатации СМКА определение его орбитальных параметров необходимо для прогнозирования движения, слежения, проведения сеансов радиосвязи, обработки данных. Для прогнозирования будущих пролетов СМКА используются начальные орбитальные данные в формате TLE объединённого центра космических операций США (JSpOC- Joint Space Operations Center USA), которые в случае военных конфликтов будут недоступны. Поэтому разработчики СМКА уделяют большое

внимание получению собственных начальных данных для моделей прогнозирования движения СМКА на основе траекторных измерений. В рамках проекта «Разработка и научно-образовательной сети приема и обработки создание информации образовательных КА» был создан экспериментальный образец НСП, оснащённый орбиты доплеровских измерений определения системой И с временной синхронизацией. Разработана модель начального определения орбиты СМКА (период, наклонение, долгота восходящего узла, аргумент широты) [2], использующая результаты доплеровских измерений на одном или нескольких пролетах над НСП и статистический анализ относительной частоты успеха параметров пролета (угол места, доплеровский сдвиг частоты) для двух характерных типов орбит (низкая солнечносинхронная и орбита МКС) без данных в формате TLE. Предложенная модель апробирована в задачах определения орбиты неизвестных СМКА, пролетающих над университетской НСП. Так на основе 20 доплеровских измерений неизвестного СМКА на 12 пролетах над НСП за период от 06.10.2019 до 09.10.2019 г. удалось определить начальный вектор состояния и идентифицировать китайский наноспутник LUOJIA-1 01 с абсолютными ошибками прогнозирования угла места и азимута $< 3^{\circ}$, доплеровского сдвига частоты радиосигналов телеметрии <250 Гц, что позволило успешно декодировать принимаемые пакеты телеметрии. Для одного пролета наноспутника БГУ CubeBel-1 над НСП от 05:54:00 до 06:03:30 для 01.11.2019 г. (UTC) получено, что при отсутствии данных в формате TLE достаточно 20 доплеровских измерений для определения усредненного вектора состояния с абсолютными средними ошибками по координатам и проекциям скорости до 17 км и 20 м/с, что использовалось для последующего уточнения орбиты методом дифференциальной коррекции. При этом наиболее вероятные значения аргумента широты и долготы восходящего узла определялись однозначно по максимальной относительной частоте успеха, в то время как наиболее вероятные значения периода и наклонения орбиты определялись на интервалах, которые уменьшались при выборе расчетного момента времени ближе к центру доплеровской кривой (минимальное сближение СМКА и НСП). Также новая модель тестировалась для определения орбиты СМКА в групповом запуске 01.04.2022 г. из 40 КА, в этом случае диапазоны поиска орбитальных параметров были уменьшены за счет моделирования запуска. На основе обработки доплеровских измерений на 11 пролетах над НСП БГУ за период с 14.04.2022 г. по 15.04.2022 г. получена наиболее вероятная оценка вектора состояния неизвестного СМКА, которая позволила спрогнозировать последующие сеансы радиосвязи, успешно принять, декодировать радиосигналы телеметрии и идентифицировать чилийский наноспутник PlantSat.

- [1] Spiridonov A. Orbital Parameters Pre-launch Calculation Methods for a Piggyback Launched University Small Satellite / A. Spiridonov, V. Baranova , D. Ushakov V. Saechnikov, V. Cherny // Proc. 2022 IEEE 9th International Workshop on Metrology for AeroSpace, Pisa, Italy, 27-29 June 2022. –2022. – P. 486-490.
- [2] Spiridonov A.A. Small Satellite Orbit Determination Using Single Pass Doppler Measurements. / A.A. Spiridonov, V.A. Saetchnikov, D.V. Ushakov, V.E. Cherny, A.G. Kezik // IEEE Journal on Miniaturization for Air and Space Systems. -2022. -Vol.3, № 4. - P. 162-170.

УДК 53

И. В. Саечников, В. В. Скакун, Э. А. Чернявская

АДАПТИРОВАННАЯ ТЕХНИКА ДЕТЕКТИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ДИНАМИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ОПТИЧЕСКОМ ПОТОКЕ ДЛЯ ЗАДАЧ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь saetchnikovivan@gmail.com

За последние пару лет наблюдается значительный прогресс в разработке методов глубокого обучения в области семантического анализа и распознавания образов. [1] В частности, значительный рывок произошел в области практического применении методов на основе глубокого обучения для решения широкого ряда задач компьютерного зрения: от распознавания образов, детектирования объектов и классификации, до отслеживания динамических объектов и построения 3d траекторий. [2] Высокая точность, адаптивность и доступность предварительно размеченных данных являются основными преимуществами использования методов на основе глубокого обучения для анализа динамических объектов в оптическом потоке, в том числе, они могут обеспечить перенос заранее предобученных методов на аппаратную основу для решения практических задач аэрокосмического мониторинга. [3] Однако, несмотря на высокую точность семантического анализа динамических объектов, подобные методы требует тонкой настройки и специфических техник адаптации к [4] В частности, это связано с дополнительными ограничениями, задаче. накладываемыми на данные методы исходя из условий регистрирования семантических данных об объектах: ухудшения качества изображения вследствие флуктуаций движения регистрирующего устройства, вариативность высоты и угла обзора объектов и т.д. [5] Одна из наиболее перспективных областей практического применения является анализ и обработка динамических объектов для аэрокосмического мониторинга. [6]

В данной работе мы предлагаем адаптированную технику детектирования и анализа динамических объектов SL-DETTRACK для задач аэрокосмического мониторинга. Данная техника включает передачу экземпляров изображений динамических объектов в сеть на базе архитектуры YOLOv5cut для формировании карт признаков и распознавании объектов на изображениях и дальнейшее пропускание интересующихся семантической репрезентации динамических объектов с соответствующими полученными ограничительными рамками через адаптированную для работы с изображениями двунаправленную сеть долгой краткосрочной памяти для обработки пространственно-временной корреляционной информации об динамических объектах. Последняя В свою очередь включает конвертацию классических слоев сверточные и оптимизацию параметров полносвязных на фильтров «запоминания» и «забывания».

Для тестирования предложенной адаптированной техники детектирования и анализа динамических объектов SL_Detrack был сформирован набор данных

trackUAVmod, включающий порядка 130 видеопоследовательностей со средним количество фреймов 325 с аэрокосмическими снимками динамических объектов в городской среде с предварительно отмаркированными «object of interest». Для увеличения датасета использовалась flipping, rotation и occlusion аугментации. Для предотвращения смещения второго момента на первых этапах обучения использовался адаптированный RAdam метод обучения с параметрами learning rate 0.01, beta1 0.9, beta2 0.999 и decay 0.0001. Для детектора использовался non-maximum suppression с IoU 0.65, conf-threshold 0.30 и max_det 900. Оценка анализа и точности детектирования проводилась, используя метрики IoU, mAP метрики, а также MOTA, MT и ML. В ходе оптимизации была найдена оптимальная длина скользящего окна в 11 фреймов.

По результатам теста адаптированной техники детектирования и анализа динамических объектов SL-DETTRACK на основе датасета trackUAVmod были достигнуты параметры по точности, а именно, 0.62 IoU, 45.1 mAP, 0.38 MOTA, 637 MT и 511 ML. Стоит отметить, что несмотря на значительные оптимизационное затраты, подобная техника имеет широкие перспективы практическое применения не только в текущих задачах анализа и детектирования объектов, но и в том числе и решении обратных задач. Например, прогнозирование поведения динамических объектов, классификация объектов по вторичным несемантическим признакам, а также уточнение физических характеристик и на основе этих данных генерация новых синтетических экземпляров схожих по физическим параметрам генеративными методами и т.д.

- [1] K. He. Deep Residual Learning for Image Recognition. / K. He., X. Zhang, S. Ren and J. Sun. // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR) 2016. pp. 770-778.
- [2] I. Saetchnikov. Pattern recognition on aerospace images using deep neural networks. / . Saetchnikov, V. Skakun and E. Tcherniavskaia. // IEEE 7th International Workshop on Metrology for AeroSpace (MetroAeroSpace). – 2020. - pp. 336-340.
- [3] I. Saetchnikov. Robust S-Y-biLSTM object tracking method for on-road objects shoot from an unmanned aerial vehicle. / I. Saetchnikov, V. Skakun and E. Tcherniavskaia. // IEEE 9th International Workshop on Metrology for AeroSpace (MetroAeroSpace). – 2022 - pp. 270-274.
- [4] I. V. Saetchnikov. Object Detection for Unmanned Aerial Vehicle Camera via Convolutional Neural Networks. / I. V. Saetchnikov, E. A. Tcherniavskaia and V. V. Skakun // IEEE Journal on Miniaturization for Air and Space Systems. – 2020 – vol. 2, no. 2, pp. 98-103.
- [5] I. Saetchnikov. Efficient objects tracking from an unmanned aerial vehicle. / I. Saetchnikov, V. Skakun and E. Tcherniavskaia. // IEEE 8th International Workshop on Metrology for AeroSpace (MetroAeroSpace). – 2021 – pp. 221-225.
- [6] И.В. Саечников. Разработка и программная реализация метода прогнозирования траектории движения объектов для систем компьютерного зрения малых беспилотных летательных аппаратов / Саечников И. В., Скакун В. В // VIII Белорусский космический конгресс. – 2022 – стр. 124 – 127.

УДК 535.1, 535.3

В.П.Стефанов, И.А.Пешко

ИЗЛУЧЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИПОЛЕЙ В СЛОЕ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ГАУССОВЫМ ПУЧКОМ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.stefanov@ifanbel.bas-net.by

Важность задачи по исследованию распространения электромагнитных полей трудно переоценить: она имеет огромное количество приложений как и инженерно-практического толка, так и научно-исследовательского. Одной из таких прикладных задач является многофотонная микроскопия [1], успешно применяемая для медицинских исследований.

В настоящей работе изучена излучательная система, также пригодная для ближнеполевой микроскопии. Возбуждая тонкий слой, содержащий ап-конверсионные излучатели, гауссовым пучком, оказывается возможным получения вторичного излучения более сфокусированного, чем возбуждающее излучение. При этом сужение пучка происходит даже при дробных степенях ап-конверсии и постоянном накачивающем поле. Однако стоит отметить значительные математические трудности, возникающие при изучении такого рода задач, так как фазовые скорости, нормальные к границе раздела, различаются в двух средах, а контуры постоянной фазы должны совпадать на границе раздела. Качественно происходит то, что возбуждаются как однородные, так и исчезающие моды в среде. Помимо математической сложности, связанной со специальными функциями, входящими в формальное решение, при его применении возникают численные проблемы.

Используя для излучателей в слое модель простого диполя, можно рассчитать интенсивность электромагнитного поля в предположении, что дипольный момент случайно ориентирован [2].



Рис. 1. Среднеквадратичное отклонение для слоя толщиной $h=10\lambda$ при ширине гауссова пучка $\omega_0=1\lambda$ (а) и $\omega_0=10\lambda$ (б) на расстоянии $z=0.1\lambda$ от поверхности слоя в зависимости от коэффициента нелинейности m, т.е., фотонности процесса (желтые линии) при расположении перетяжки гауссова пучка на границе слоя и среднеквадратичное отклонение для гауссова пучка (синие линии)

На рис. 1 можно видеть полученный численным моделированием пример того, как многофотонный процесс сужает излучённый пучок.

На рис.1 желтыми линиями изображено среднеквадратичное отклонение для слоя толщиной $h=10\lambda$, (λ — длина падающей волны) при ширине гауссова пучка $\omega_0=1\lambda$ (рис. 1 (а)) и $\omega_0=10\lambda$ (рис. 1 (б)) на расстоянии $z=0.1\lambda$ от поверхности слоя. Видно характерное сужение излучение относительно накачивающего гауссова пучка (синие линии на рис. 1). Полученный результат позволяет использовать данную систему в качестве оптического элемента для приложений микроскопии.

[1] Göppert-Mayer M. Über Elementarakte mit zwei Quantensprüngen // Ann Phys. — 1931. — T. 9. — C. 273—295.

[2] Polerecký L., Hamrle J., MacCraith B. D. Theory of the radiation of dipoles placed within a multilayer system // Applied Optics. – 2000. – T. 39. – №. 22. – C. 3968-3977.

УДК 539.122.2; 539.124; 548.732.2

С. Н. Сытова

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, Минск, Беларусь sytova@inp.bsu.by

Дан обзор цикла работ, выполненных автором в 1998 – 2022 годах. Его цель – исследование методами математического моделирования нелинейной динамики процессов излучения пучков заряженных частиц при движении в неодномерных пространственно-периодических структурах (резонаторах) на примере объемных лазеров на свободных электронах (ОЛСЭ). Принципы работы ОЛСЭ основаны на взаимодействии электронного пучка с формирующимися в области генерации двумя или более сильно связанными электромагнитными волнами в существенно неодномерной геометрии вследствие динамической дифракции Брэгга вблизи пересечения корней дисперсионного уравнения ([1, 2] и обзор [3]). Общие принципы моделирования различных вакуумных электронных приборов, в том числе ОЛСЭ, рассмотрены в обзоре [4].

В [5] впервые была предложена система уравнений, описывающая нелинейную стадию работы ОЛСЭ в двухволновой геометрии, полученная из уравнений Максвелла в приближении медленно меняющихся амплитуд, и методы ее решения. Пучок моделируется усреднением по фазам влета релятивистских электронов в область взаимодействия – по моменту времени и поперечной координате влета. Аналогичные системы уравнений были получены и исследованы в различных трех- и многоволновых геометриях ОЛСЭ для различных спектральных диапазонов [6, 7]. Для экспрессмоделирования ОЛСЭ был разработан комплекс программ VOLC (*VOL*ume Code).

Численно продемонстрировано выполнение всех основных физических законов ОЛСЭ, полученных теоретически. Исследована пороговая зависимость поведения решения от различных факторов в системе – от плотности тока пучка, длины мишени, поглощения в системе, факторов асимметрии и др. Показано, что существует оптимальный набор параметров для эффективной генерации излучения в каждом из рассмотренных случаев. Промоделированы режимы работы экспериментальных установок ОЛСЭ, созданных в Институте ядерных проблем БГУ [8]. Получено хорошее согласие численных данных с экспериментальными.

Впервые показано [9], что ОЛСЭ является динамической хаотической системой, где неодномерная геометрия дифракции обеспечивает сложные переходы между различными динамическими режимами и позволяет выбором параметров геометрии получить большие значения амплитуд полей при генерации ОЛСЭ, а также принципиально другие типы решения [10].

В частности, рассмотрено влияние внешних сигналов на характер решения в ОЛСЭ. Показано, что специальным выбором параметров внешних сигналов можно получить большие значения амплитуд полей и принципиально другой тип решения,

продемонстрирована эффективность использования многосекционных геометрий ОЛСЭ на процессы генерации.

Исследования многопучковых и многопотоковых лазеров и мазеров на свободных электронах ведутся начиная с начала 80-х годов XX века [7]. Здесь несколько электронных пучков проходят через резонатор и находятся в синхронизме с разными электромагнитными волнами в системе. Вариант электронных пучков со слегка различающимися скоростями, находящихся в синхронизме с одной волной, соответствует многопотоковой неустойчивости. В настоящее время в СВЧ-электронике возрождается интерес к явлению многопучковой неустойчивости и созданию многопучковых вакуумных электронных приборов и устройств.

В ходе работ предложена общая система уравнений, описывающая нелинейную стадию работы ОЛСЭ в самом общем виде, включая многоволновой многопучковый случай [7]. Проведено компьютерное моделирование двухпучкового двухволнового ОЛСЭ, где оба электронных пучка находятся в синхронизме с одной из волн – проходящей и дифрагированной. Пучки могут быть разнесены внутри в широком в поперечном сечении резонаторе, в котором обеспечена объемная распределенная обратная связь через динамическую дифракцию. Моделирование дает существенные изменения в характере динамического решения по сравнению с однопучковым ОЛСЭ, значительное снижение порогов генерации. Использование дополнительного пучка в системе является методом динамического управления хаосом ОЛСЭ.

- Baryshevsky V. G. Parametric beam instability of relativistic charged particles in a crystal / V. G. Baryshevsky, I. D. Feranchuk // Phys. Let. A. – 1984. – Vol.102. – P. 141.
- [2] Baryshevsky V. G. Spontaneous and induced radiation by electrons/positrons in natural and photonic crystals. Volume free electron lasers (VFELs): From microwave and optical to X-ray range/V.G.Baryshevsky// Nucl.Instr.Meth.Phys.Res. - 2015. - Vol. B355. - P.17.
- [3] Сытова С. Н. Нелинейная динамика излучения сильноточных пучков заряженных частиц в пространственно-периодических структурах / С. Н. Сытова // Журнал БГУ. Физика. 2021, №1. С. 62.
- [4] Sytova, S. Simulation Techniques for Vacuum Electronic Devices / S. Sytova // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2022. Vol. 25, No 2. P. 168.
- [5] Батраков К. Г. Моделирование лазеров на свободных электронах / К. Г. Батраков, С. Н. Сытова // ЖВМ и МФ. 2005. Т. 45. С. 690.
- [6] Сытова С. Н. Модели объемных лазеров на свободных электронах / С. Н. Сытова // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2012. – Т. 20, № 6. – С. 124.
- [7] Sytova S. Nonlinear dynamics of radiation in multiple beam vacuum electronic devices / S. Sytova // Nonlin. Phen. Compl. Syst. – 2022. – Vol. 25, No 4. – P. 359.
- [8] Baryshevsky, V.G. Experimental study of volume free electron laser using a "grid" photonic crystal with variable period /V.G.Baryshevsky [et al.]// Proc. FEL 2007. P.496.
- [9] Sytova, S. Volume Free Electron Laser (VFEL) as a Dynamical System / S. Sytova // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2007. Vol. 10, No 3. –P. 297.
- [10] Барышевский В. Г. Радиационные процессы, радиационная неустойчивость и хаос в излучении, образованном релятивистскими пучками, движущимися в трехмерных (двумерных) пространственно-периодических структурах (естественных и фотонных кристаллах) / В. Г. Барышевский, С. Н. Сытова // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2013. – Т. 21, № 6. – С.25.

УДК 539.1

В.В. Тихомиров¹, В.В. Гавриловец, А.С. Лобко, Н.С. Сочивко

ПРОТЯЖЕНЫЕ КАСКАДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ КАК ИНСТРУМЕНТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь <u>vvtikh@mail.ru</u>¹

Взаимодействие быстрых частиц с кристаллами исследуется с 50-х годов. В 80-е годы нами было предсказано [1], что сильное влияние кристаллический решётки на процессы излучения и образования пар сохраняется при сколь угодно высоких энергиях, приобретая магнитотормозной характер, то есть становятся подобными аналогичным процессам в однородном поле. При этом напряжённость эффективного кристаллического поля достигает 10^{10} – 10^{11} А/м, на порядки превышая напряжённости стационарных лабораторных полей и гарантируя безальтернативность ряда применений кристаллов в физике высоких энергий даже в отдалённом будущем.

Проявление магнитотормозного механизма излучения и образования пар сопровождается возрастанием интенсивности излучения и вероятности образования пар на порядок в кристаллах тяжелых элементов (W, PbWO₄) и на два – в кристаллах лёгких (кремний, алмаз), достигающего насыщения, соответственно, при энергиях в сотни и тысячи ГэВ и углах падения на кристаллические оси в диапазонах 1 и 0,1 мрад. Следствием этого возрастания, сопровождающегося также ярким проявлением поляризационных и спиновых эффектов [1], является многократное ускорение развития электрон-фотонных ливней, продемонстрированное нами в эксперименте [2]. Подобное ускоренное развитие ливней широко проявляется в кристаллических сцинтилляторах, используемых в электромагнитных калориметрах и орбитальных гамма-телескопах. Помимо влияния на их функционирование, например, на измерение массы бозона Хиггса детектором CMS или энергий гамма-квантов телескопом Fermi, оно открывает возможности разработки нового типа подобных детектирующих установок. Так ускорение развития ливней в 10-100 раз позволяет создать тонкие (толщиной ~ 1 см) кристаллические поглотители, избирательно регистрирующие гамма-излучение точечных источников, и, за счет наращивания площади, дающие возможность продвинуться в глубь терраэлектронвольтного диапазона энергий гамма-квантов, а также измерять их поляризацию [1].

Задача исследования и моделирования электромагнитных ливней в кристаллах была поставлена в конце 80-х. В процессе её решения совместно с докторами В. Гуиди, Л. Бандиерой, А. Маццолари, А.И. Сытовым и др. из университета Феррары нами был предложен, проведен в CERN [2], SLAC, DESY, университете Майнца и интерпретирован ряд экспериментов в тонких кристаллах, позволивших разработать методы последовательного описания рассеяния, излучения и рождения пар. Сложность моделирования ливней в протяженных кристаллах, толщина которых может превышать 20 радиационных длин, состоит в лавинообразном росте количества е[±], γ и отклонений их импульсов от направления кристаллической оси. Поскольку уже описание

единичных событий излучения и образования пар опирается на сложные расчеты [3], моделирование всей их совокупности в протяжённом ливне потребовало бы то же время, вследствие ускорения некогерентного чрезмерных усилий. В многократного рассеяния при падении энергии на 2-3 порядка, частицы ливня отклоняются от оси на столько, что влияние кристаллической решётки значительно ослабевает на большей части его длины. Вследствие этого процессы излучения и ОП всё точнее описываются теорией Бете-Гайтлера, весьма эффективно реализованной в программном инструменте GEANT4, что ставит задачу сочетания методов моделирования усиления процессов излучения и образования пар в кристаллах [3] при высоких энергиях и малых углах отклонения от оси с алгоритмами GEANT4 для быстрого разыгрывания многих тысяч бете-гайтлеровских событий при низких энергиях и больших отклонениях, которые после некоторой коррекции и были внедрёны в разрабатываемые нами программы [3].



Спектральная зависимость коэффициента усиления излучения электронов энергии 10 ГэВ в поле оси <111> миллиметрового кристалла вольфрама.

Актуально также применение магнитотормозного излучения электронов в поле кристаллических осей в источниках позитропроектируемых электрон-позитронных HOB коллайдеров. Сложность описания здесь связана со значительной кратностью процесса излучения, а также регулярным выходом области его формирования за пределы полей отдельных атомных цепочек. Последний делает незаменимым применение метода [3] для описания насыщения эффектов когерентного усиления при уменьшении частоты излучения, наступающего при энергии электронов 10 ГэВ в области 200-300 МэВ см. Рис.

Работа поддержана грантом Ф22МЦ-006.

- [1] Барышевский В.Г. Радиационные процессы магнитотормозного типа в кристаллах и сопровождающие их поляризационные явления / В.Г. Барышевский, В.В. Тихомиров // УФН. 1989. Т. 159. С. 529.
- [2] Bandiera L. Strong reduction of the effective radiation length in an axially oriented scintillator crystal // L. Bandiera, V.V. Tikhomirov, .. V. Haurylavets, A. Sytov // Phys. Rev. Lett. - 2018. - V. 121. - P. 021603.
- [3] Guidi V. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals / V. Guidi, L. Bandiera, V.V. Tikhomirov // Phys.Rev.A. – 2012. – Vol. 86. – P. 042903.

УДК 535.14

I. D. Feranchuk, Nguyen Quang San

SUPERRADIANT PARAMETRIC X-RAY EMISSION

Belarusian State University, Nezavisimosti Ave., 4, 220030 Minsk, Belarus feranchuk@bsu.by,nguensanbsu@gmail.com

Parametric X-ray radiation (PXR) is a well-known mechanism of radiation from charged particles propagating in a periodic medium [1]. Its qualitative properties are the emission of quasi-monochromatic X-rays beams under the large angle to the electron velocity and the possibility to continuously tune the frequency of the radiation by simply rotating the crystal. As was firstly demonstrated in the work [2], when the electron density in the bunch reaches a critical value the parametric beam instability can arise in analogy with the self amplified spontaneous emission (SASE) in the undulator of an XFEL. This process leads to a spatial modulation of an electron beam and the generation of a coherent X-ray radiation under the scale of the crystal length, which is much smaller than the typical XFEL undulator lengths. However, under the currently experimentally accessible electron-beams densities the length under which the parametric instability can be achieved is substantially larger than the X-ray absorption length in the crystal. Therefore, when an electron beam initially does not contain any modulation it is almost impossible to realize the SASE mechanism inside a crystal.

Before discussing the superradiant parametric X-ray emission (SPXE), let us briefly revise how the undulator is used in the XFEL case [3]. On the one hand due to the SASE mechanism the electron bunch, which density was initially uniformly distributed, is transformed into a sequence of micro-bunches that leads to the spatial modulation of the electron density with the period d_0 which is directly defined by the period of the undulator. Later when the bunch propagates inside the undulator the coherent radiation is formed (superradiant emission [3]) with the frequency $\omega_0 = 2 \pi / d_0$ (h = c = 1) and with the intensity proportional to the square of the number of electrons in the bunch. The coherent radiation is propagated in a small cone along the electron velocity and the coincidence (resonance) between the modulation frequency of the bunch and the frequency of the emitted photons happens automatically as the beam modulation and the emission frequency are determined by the same undulator radiation mechanism.

Now let us consider the SPXE case when we suppose that an electron beam becomes modulated in density inside the undulator and in the end enters the crystalline target, where the PXR is generated with the frequency ω dependent on the crystal structure and the angle between the crystallographic planes and the electron velocity. As was recently demonstrated in the work [4] the highest intensity of PXR is reached when the electrons propagate in the grazing geometry, i.e., in a thin layer inside the crystal parallel to the crystal-vacuum interface and the X-ray photons are emitted under the large angle to the electron velocity (PXR-EAD). The angle can be chosen in such a way that the resonant condition $\omega = \omega_0$ is fulfilled. As a result, in addition to the main XFEL pulse a generation of SPXE will happen with the intensity also proportional to the square of the number of electrons in the bunch. According to [1] the spectral density of PXR photons emitted by a single electron can be larger than the corresponding density of the undulator radiation. Consequently, the number of SPXE photons can exceed the corresponding number of the XFEL ones. Besides, the SPXE photon pulse is directed under the large angle to the electron velocity, which enlarge the applicability of the XFEL by the creation of the additional exiting channels of X-rays. In our work we describe a generation mechanism of SPXE and theoretically study characteristics of this new type of the coherent X-ray radiation.

- [1[Baryshevsky V.G. Parametric X-Ray Radiation in Crystals: Theory, Experiment and Applications /V. G. Baryshevsky, I. D. Feranchuk, and A. P. Ulyanenkov//(Springer Tracts In Modern Physics, Springer, 2006.
- [2] Baryshevsky V.G. Parametric beam instability of relativistic charged particles in a crystal./ V. Baryshevsky and I. Feranchuk.// Physics Letters—1984—V. A 102—P.141.
- [3] Gover A. Superradiant and stimulated-superradiant emission of bunched electron beams/ A. Gover, R. Ianconescu, A. Friedman, C. Emma, N. Sudar, P. Musumeci, and C. Pellegrini// Rev. Mod. Phys.—2019 ---V.91—P. 035003.
- [4] Skoromnik O.D. Radical increase of the parametric x-ray intensity under condition of extremely asymmetric diffraction.// O. D. Skoromnik, V. G. Baryshevsky, A. P. Ulyanenkov and I. D. Feranchuk.// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B
- : Beam Interactions with Materials and Atoms -2017-V.412-86

УДК 53

Н.Д. Шайковская

ЗАДАЧА О РАССЕЯНИИ В ПРОСТРАНСТВЕ ГАУССА В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь n.shaikovskaya@dragon.bas-net.by

Пространство Гаусса реализуется на трехмерной гиперповерхности, заданной уравнением

$$u = A e^{-\alpha(x^2 + y^2 + z^2)},$$
(1)

вложенной в четырехмерное евклидовое пространство с метрикой $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 + du^2$. Здесь параметры *A* и α имеют размерности длины и обратного квадрата длины соответственно. В сферических координатах $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$, $u = Ae^{-\alpha r^2}$, метрика на рассматриваемой гиперповерхности имеет вид $ds^2 = f(r)dr^2 + r^2d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2$, где $f(r) = 1 + 4\alpha^2 A^2 r^2 e^{-2\alpha r^2}$.

При больших значениях *r* пространство становится практически евклидовым. В работе [1] была проанализирована скалярная кривизна данного пространства и показано, что уравнение Шредингера, описывающее свободное движение частицы в данном пространстве, допускает разделение переменных, а уравнение для радиальной части волновой функции может быть представлено в виде

$$z''(x) + I(x)z(x) = 0,$$
 (2)

причем радиальная волновая функция $R(x) = \beta(x)z(x)$, где $\beta(x) = \frac{1}{x}(1+4Bx^2e^{-2x^2})^{1/4}$,

$$I(x) = \left(1 + 4Bx^2 e^{-2x^2}\right) \left(K^2 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right) - \frac{2B}{\left(1 + 4Bx^2 e^{-2x^2}\right)^2} \left[e^{-2x^2} \left(-3 + 14x^2 - 8x^4\right) + e^{-4x^2} \left(8Bx^4 \left(x^2 + 2\right) - 2Bx^2\right)\right]$$

а также введены обозначения $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $K^2 = \frac{k^2}{\alpha}$, $B = \alpha A^2$ и новая переменная $x = \sqrt{\alpha}r$.

Рассмотрим задачу о рассеянии частицы в пространстве Гаусса. При этом мы не накладываем никакого дополнительного потенциала, а считаем, что искривление пространства вблизи начала координат само играет роль рассеивающего центра. При $x \to \infty$ исходное уравнение Шредингера представляет собой уравнение для свободной частицы в плоском пространстве и имеет решение в виде плоской волны $e^{iKx\cos\theta}$. Согласно общей нерелятивистской теории упругого рассеяния [2], решение исходного уравнения (2) при $x \to \infty$ должно иметь вид суммы плоской волны и рассеянной волны

$$\psi \underset{x \to \infty}{\approx} e^{iKx\cos\theta} + \frac{f(\theta)\sqrt{\alpha}}{x} e^{iKx}.$$
 (3)

Будем предполагать, что рассеяние изотропно по углу φ и разложим амплитуду рассеяния $f(\theta)$ и плоскую волну по полиномам Лежандра

$$\psi \underset{x \to \infty}{\approx} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \left[\frac{f_l \sqrt{\alpha}}{x} e^{iKx} + \frac{i^l}{Kx} \sin\left(Kx - \frac{\pi l}{2}\right) \right]$$
(4)

С другой стороны, общее решение исходного уравнения представляется в виде $\psi = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(x)(2l+1)P_l(\cos\theta)$. Если решение уравнения (2) на бесконечности имеет асимптотическое поведение вида

$$R_{l}(x) \underset{x \to \infty}{\approx} \frac{g}{x} \sin\left(Kx - \frac{\pi l}{2} + \delta_{l}\right),$$
(5)

то из (4) и (5) следует связь между сдвигами фаз \mathcal{S}_l и парциальными амплитудами рассеяния $f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1)$, которые позволяют найти также парциальные сечения $\sigma_l = 4\pi (2l+1) |f_l|^2$. Таким образом, задача о рассеянии сводится к тому, чтобы найти асимптотическое решение исходного уравнения (2) при $x \to \infty$ и представить его в виде (5), тем самым определяя сдвиги δ_l , и, как следствие, получая f_l и σ_l .

Будем рассматривать квазиклассическое приближение, в котором основную роль играют большие квантовые числа *l* [2]. В этом случае можно уравнение (2) заменить на приближенное уравнение

$$z''(x) + h^2 Q(x,h) z(x) = 0,$$
(6)

где
$$Q(x,h) = \frac{K^2}{h^2} f(x) \left(1 - \frac{x_0^2}{x^2} \right), \quad x_0 = \sqrt{l(l+1)} / K$$
 - точка поворота (где $Q = 0$), $h = 1/\hbar - 1/\hbar$

большой параметр. Построив ВКБ решения данного уравнения, следуя методу, изложенному в [2] и [3], и определив асимптотическое поведение решения в области $x > x_0$, в результате получим следующее приближенное выражение

$$R_{x>x_0}(x) \underset{x \to \infty}{\approx} \frac{g}{x} \sin\left(u_1 + \frac{\pi}{4}\right),\tag{7}$$

где g - постоянная, и $u_1(x) \underset{x \to \infty}{\approx} K \left(x - \frac{3x_0}{2} + \frac{1}{2} x_0 e^{-2x_0^2} + \frac{\sqrt{2\pi}}{8} (2x_0^2 - 1) \left(\text{Erf}(\sqrt{2}x_0) - 1 \right) \right)$, тем самым

определяя сдвиги фаз в квазиклассическом приближении

$$\delta_{l} \approx \frac{\pi}{4} (2l+1) + \frac{1}{2} \sqrt{l(l+1)} \left(e^{-2l(l+1)/K^{2}} - 3 \right) + \frac{\sqrt{2\pi}}{8} \left(2 \frac{l(l+1)}{K} - K \right) \left(\operatorname{Erf}\left(\frac{\sqrt{2l(l+1)}}{K} \right) - 1 \right).$$
(8)

Список литературы

- 1. Shaikovskaya, N. D. Free motion of a quantum particle in the Gaussian space/ N. D. Shaikovskaya// Nonlinear Dynamics and Applications. 2022. Vol. 28 p. 391-399.
- Ландау, Л. Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. - М.: изд. физ-мат. лит., 1963 - 702 с.
- Хединг, Дж. Введение в метод фазовых интегралов (метод ВКБ) / Дж. Хединг, М., 1965. - 237 с.
- 4. Соколов, А. А. Квантовая механика/ А. А.Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов, М.: Просвещение, 1965. 528 с.

УДК 537.8, 531.5

А. О. Шаплов¹

ДВИЖЕНИЕ СИСТЕМЫ ТЕЛ ВО ВНЕШНИХ ГРАВИТАЦИОННОМ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЯХ

¹ Институт прикладной физики НАН Беларуси, ул. Академическая, 16, 220072 Минск, Беларусь yoichi@list.ru

Рассмотрим систему заряженных тел внешних гравитационных BO И электромагнитных полях в системе сопутствующего наблюдателя с использованием вращающихся координат Ферми [1]. Обозначим ограничения рассматриваемых систем: 1) размеры рассматриваемой системы достаточно малы, чтобы изменения внешних полей в её пределах считать малыми и иметь возможность представить их в виде ряда; 2) воздействие внешних полей достаточно мало, чтобы в рамках системы считать их как возмущение, но при этом достаточно велико, чтобы они проявлялись. Также считаем воздействие гравитационного и электромагнитного полей примерно равными друг другу; 3) скорость относительного движения объектов системы гораздо меньше скорости света, а взаимодействие объектов системы считается в рамках постньютоновского приближения. При этом сами объекты считаем точечными частицами, движущимися в полях остальных объектов и внешних полей.

Можно показать, что движение пробной частицы во внешних гравитационном и электромагнитном поле во вращающихся координатах Ферми вблизи опорной мировой линии можно описать уравнением Лагранжа с лагранжианом

$$\frac{d}{d\tau}\frac{L}{\partial V_A^{(\alpha)}} - \frac{\partial L}{\partial X_A^{(\alpha)}} = 0, \qquad L = -m_A c \sqrt{-g_{(i)(j)} V_A^{(i)} V_A^{(j)} + \frac{e_A}{c} A_{(\alpha)} V_A^{(\alpha)}}, \tag{1}$$

где $V_A^{(i)} \equiv \{V_A^{(\alpha)}, c\}, V_A^{(\alpha)} \equiv \frac{dX_A^{(\alpha)}}{d\tau}$, греческие буквы пробегают значения от 1 до 3, латинские – от 1 до 4, индекс *A* обозначает принадлежность к *A*-му объекту системы, $g_{(i)(j)}$ и $A_{(\alpha)}$ имеют поправки, соответствующие вкладам других тел системы. Лагранжианы каждого из объектов системы (1) разложим в ряд по малому параметру ~ $V_A^{(\alpha)}/c$ вплоть до 3-го порядка, а лагранжиан всей системы восстанавливается как сумма всех неповторяющихся членов лагранжианов каждого из объектов системы. Далее мы переходим к координатам центра масс:

$$X^{(\alpha)} \equiv \frac{\sum m_A X_A^{(\alpha)}}{\sum m_A}, \qquad x_A^{(\alpha)} \equiv X_A^{(\alpha)} - X^{(\alpha)} \quad \left(\sum m_A x_A^{(\alpha)} = 0\right), \tag{2}$$

в результате чего из уравнений Лагранжа можно получить уравнения движения центра масс и уравнения движения каждого отдельного объекта в системе центра масс. Система

сопутствующего наблюдателя имеет смысл, когда система не удаляется от опорной мировой линии, поэтому можно «закрепить» опорную мировую линию за мировой линией центра масс системы, и тогда считаем $X^{(\alpha)} = V^{(\alpha)} = dV^{(\alpha)}/d\tau = 0$, в результате чего уравнение движения центра масс принимает вид уравнения для 4-ускорения опорной мировой линии, а уравнения движения объектов в системе центра масс немного упрощаются.

Получающиеся в результате уравнения достаточно громоздки, поэтому мы не будем их выписывать здесь в явном виде, общий же их вид представляет собой

$$m\frac{DU^{(\alpha)}}{D\tau} + mW_0^{(\alpha)} + mW_1^{(\alpha)} + mW_2^{(\alpha)} = 0,$$
(3)

$$n_A \frac{\delta \check{v}_A^{(\alpha)}}{\delta \tau} + m_A w_1^{(\alpha)} + m_A w_2^{(\alpha)} = 0, \qquad (4)$$

где $\check{v}_{A}^{(\alpha)} \equiv \frac{\delta x_{A}^{(\alpha)}}{\delta \tau} = \frac{d x_{A}^{(\alpha)}}{d \tau} + \varepsilon^{(\alpha)}_{(\theta)(\mu)} \omega^{(\theta)} x_{A}^{(\mu)}, \\ \frac{\delta \check{v}_{A}^{(\alpha)}}{\delta \tau} \equiv \frac{d \check{v}_{A}^{(\alpha)}}{d \tau} + \varepsilon^{(\alpha)}_{(\theta)(\mu)} \omega^{(\theta)} \check{v}_{A}^{(\alpha)},$ скорость

вращения тетрады определяется как $\omega^{(\phi)} \equiv \frac{1}{2} \varepsilon^{(\alpha)(\beta)(\gamma)} \frac{Dh_{(\beta)}^{\ i}}{D\tau} h_{(\gamma)}^{\ j} g_{ij}$, функции $W_p^{(\alpha)}$ и $w_p^{(\alpha)}$ зависят от полевых характеристик (тензора кривизны, тензора электромагнитного поля и их ковариантных производных) и характеристик самой системы (распределения массы и заряда, т.е. аналоги дипольного и квадрупольного моментов, а также их производные; также зависимость взаимодействия объектов системы между собой).

Хотя уравнения (3) и (4) получены для системы взаимодействующих, но свободно двигающихся объектов, их можно также с некоторыми ограничениями расценивать как уравнения движения крупных неточечных объектов (т.е. рассматривая крупные объекты как систему точечных с переходом от дискретного распределения массы и заряда системы к непрерывному), в результате чего уравнение (3) описывает движение такого тела с учётом его формы, размера, скорости вращения и движения материи и заряда внутри него, а уравнение (4) расценивается как микроскопическое уравнение движения каждой части данного тела с учётом приливных сил внешних полей. Также можно перейти от рассмотрения одной целостной системы к набору подсистем, а потом эти подсистемы расценивать как крупные целостные объекты. Таким образом, можно описывать движение систем объектов с учётом их структурных свойств.

Численные оценки показывают довольно незначительное влияние формы и размера тел на траекторию движения, такая же ситуация и для траектории движения центра масс системы из двух и более тел (например, двойная звезда в поле сверхмассивной чёрной дыры). В свою очередь кинетические характеристики самого тела (вроде оси вращения) и положения тел в системе из двух и более объектов весьма значительно зависят от внешних полей.

 [1] Ni Wei-Tou, Zimmermann M. Inertial and gravitational effects in the proper reference frame of an accelerated, rotating observer / We-Tou Ni, Mark Zimmermann // PhysRev D. – 1978, 15 Mar. – Vol. 17, No 6. – p 1473.

А. В. Бурый, А. В. Ивашкевич

50-КОМПОНЕНТНАЯ ТЕОРИЯ ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 2, ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ, МАССИВНЫЙ И БЕЗМАССОВЫЙ СЛУЧАИ

Центр «Фундаментальные взаимодействия и астрофизика» Институт физики им. Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси Республика Беларусь, 220072, г. Минск, пр-т Независимости 68-2 ivashkevich.alina@yandex.by, anton.buryy.97@mail.ru

Известна 50-компонентная формулировка теории частицы со спином 2 и аномальным магнитным моментом, инвариантная относительно группы Лоренца и основанная на использовании симметричного тензора второго ранга и тензора третьего ранга, симметричному по двум индексам. Свойства симметрии этих новых переменных такие же как у метрического тензора и символов Кристоффеля в общей теории относительности. После исключения тензора 3-го ранга выведена система уравнений 2-го порядка для симметричного тензора 2-го ранга. Ищутся решения этой системы из 10 уравнений в виде плоских волн. В массивном случае найдены в явном виде 5 независимых решений. Отдельно исследован безмассовый случай. Построены 6 независимых решений. Найдены 4 комбинации этих 6-ти решений, которые могут быть отождествлены с калибровочными согласно подходу Паули – Фирца. Выделены два решения, которые не содержат калибровочных компонент.

Ключевые слова: частица со спином 2, аномальный магнитный момент, плоские волны, безмассовый случай, устранение калибровочных компонент.

Теория массивного и безмассового полей со спином 2, начиная с работ В. Паули и М. Фирца [1, 2], всегда присутствовала в литературе. Большая часть работ выполнена в рамках формализма уравнений второго порядка Паули – Фирца. Первое систематическое исследование теории частицы со спином 2 в рамках теории релятивистских волновых уравнений первого порядка и общего формализма Гельфанда – Яглома [3] выполнено Ф.И. Федоровым [4]. Частица со спином 2 описывается 30-компонентной волновой функцией. Позднее это описание было заново переоткрыто в работе Т. Редже [5]. Описания массивной и безмассовой частиц существенно различаются. В частности, в безмассовом случае существует специфическая калибровочная симметрия, которая обобщает калибровочную симметрию в электродинамике Максвелла, она была установлена еще Паули и Фирцем [1, 2]. Ф.И. Федоровым с соавторами была инициирована еще одна – 50-компонентная теория частицы со спином [6]. Исходное уравнение базируется на наборе переменных: скаляре, двух векторах, симметричном тензоре второго ранга, тензоре третьего ранга, антисимметричном по одной паре индексов. В работе [6] было показано, что 50-компонентное волновое уравнение для заряженной частицы со спином 2 во внешнем электромагнитном поле может быть сведено к виду 30-компонентного уравнения, но с дополнительным членом взаимодействия, интерпретируемым как аномальный магнитный момент. В работе [7] было выполнено преобразование исходного 50-компонентного уравнения к новым переменным: симметричному тензору второго ранга и тензору третьего ранга, симметричному по двум индексам. Свойства симметрии этих новых переменных такие же как у метрического тензора и символов Кристоффеля в общей теории относительности. Можно надеяться в дальнейшем получить эту линейную систему уравнений в новых переменных как линейное приближение уравнений общей теории относительности.

В настоящей работе после исключения тензора 3-го ранга получена система уравнений 2-го порядка для симметричного тензора 2-го ранга. Ищутся решения в виде плоских волн. В массивном случае найдены 5 независимых решений. Отдельно исследован безмассовый случай, построены 6 независимых решений. Найдены 4 комбинации этих 6-ти решений, которые могут быть отождествлены с калибровочными согласно подходу Паули – Фирца. Выделены два физических решения, которые не содержат калибровочных компонент; они ортогональны кабровочным решениям.

Список литературы

- [1].Pauli, W. Über relativistische Feldleichungen von Teilchen mit beliebigem Spin im elektromagnetishen Feld / W. Pauli, M. Fierz// Helv. Phys. Acta. – 1939. – Bd. 12. – S. 297–300.
- [2].Fierz, M. On relativistic wave equations for particles of arbitrary spin in an electromagnetic field / M. Fierz, W. Pauli // Proc. Roy. Soc. London. A. – 1939. – Vol. 173. – P. 211–232.
- [3]. Гельфанд, И.М. Общие релятивистские инвариантные уравнения и бесконечномерные представления группы Лоренца / И.М. Гельфанд, А.М. Яглом // ЖЭТФ. 1948. Т. 18. Вып. 8. С. 703–733.
- [4]. Федоров, Ф. И. К теории частицы со спином 2 / Ф. И. Федоров // Уч. зап. БГУ. Сер. физ.-мат. 1951. Вып. 12. С. 156–173.
- [5].Regge, T. On properties of the particle with spin 2 / T. Regge // Nuovo Cimento. 1957. Vol. 5. – № 2. – P. 325–326.
- [6].Богуш, А.А. Об описании аномального магнитного момента массивной частицы со спином 2 в теории релятивистских волновых уравнений / А. А. Богуш, В. В. Кисель // Изв. Вузов. Физика. – 1988. – №3. – С. 11–16.
- [7].Kisel, V. V. On the form of the 50-component theory for a spin 2 particle in the basis of tensors of second ant third ranks / V. V. Kisel, A. V. Bury, A. V. Ivashkevich, V. M. Red'kov // Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus. – 2023.

УДК 535.3

В. Н. Белый¹, Н. С. Казак², Н. А. Хило¹

ФОРМИРОВАНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВИХРЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В ЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ КРИСТАЛЛАХ

¹Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072, Минск, Беларусь <u>v.belyi@dragon.bas-net.by</u>

²ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», пр. Независимости, 68-1, 220072, Минск, Беларусь <u>oelt@oelt.basnet.by</u>

Рассмотрены особенности формирования и распространения вихревых квазибездифракционных световых пучков в изотропных средах [1-3].

Исследованы линейные и нелинейные процессы переноса оптических сингулярностей от анизотропных кристаллов на волновой фронт бесселевых световых пучков (БСП). Исследована генерация вихрей высокого порядка при распространении БСП вдоль оптических осей кристаллов. В частности, рассматривается нелинейное удвоение частоты вихрей Бесселя в условиях синхронизма нового типа (полного конического синхронизма) [4,5]. Исследованы особенности удвоения частоты бесселевых вихрей в условиях полного конического синхронизма для одноосных кристаллов гексагональной и тригональной сингоний. Экспериментально реализован новый тип удвоения частоты бесселевых вихрей в одноосных кристаллах[5].

Показана возможность трансформации TH - TE мод, содержащих вихри, за счет применения гиротропных кристаллов. Установлено, что при определенной толщине гиротропного кристалла и выборе угла конуса, падающее TH поляризованное поле с внедренным вихрем может полностью трансформироваться в TE поляризованное поле, содержащее вихрь. Предложен и реализован высокоэффективный метод генерации радиально и азимутально поляризованных пучков Бесселя с использованием двухосных кристаллов. Переключение между радиальной и азимутальной поляризацией выходного пучка осуществлялось соответствующим переключением между двумя ортогональными линейными поляризациями входного пучка. Радиально и азимутально поляризованные пучки Бесселя были экспериментально получены с использованием кристалла KTP и преломляющего аксикона.

Показано, что одноосные и двуосные кристаллы трансформируют одновременно поляризационное состояние (спиновый угловой момент) и пространственную структуру (орбитальный угловой момент) бесселевых пучков, изменяя порядок дислокации фазового фронта [6]. В одноосном кристалле обмен спиновым моментом с веществом в точности компенсируется обменом орбитальным моментом, так что пластина из одноосного кристалла не испытывает крутящего момента. Установлено, что динамика спин-орбитальной связи в двухосном кристалле существенно отличается. В этом случае отсутствует компенсация спина, а орбитальный момент обменивается с двухосным кристаллом и появляется крутящий момент, действующий на пластинку. Разработаны оптические схемы устройств для кодирования классической информации

в состояния бесселева вихревого пучка, характеризуемые различными значениями орбитального углового момента.

Исследованы особенности генерации и трансформации вихревых БСП при акустооптическом (АО) взаимодействии в одноосных кристаллах [7]. Предсказан новый акустооптический эффект генерации фазовых дислокаций волнового фронта при распространении невихревого пучка вдоль оптических осей кристаллов. Физическая причина этого эффекта заключается в переносе сингулярности акустооптических свойств кристаллов вблизи оптических осей на волновой фронт дифрагированного оптического поля. Показано, что данный эффект возникает из-за азимутальной зависимости эффективной акустооптической постоянной. Дано математическое описание АО взаимодействия вихрей Бесселя, предполагающее выполнение двух типов синхронизма. При этом помимо обычного продольного синхронизма, реализуемого при равенстве фазовых скоростей прошедшей и дифрагированной волн, для вихревых БСП необходимо осуществлять также так называемый поперечный синхронизм. Изучены особенности спин-орбитального взаимодействия в процессе АО преобразования[8]. Показано, что для такого взаимодействия происходит передача орбитального момента из акустического поля в поле бесселева пучка без изменения состояния поляризации фотона. АО процесс можно использовать как метод генерации вихрей Бесселя, позволяющий управлять состоянием поляризации выходного оптического поля во времени. Также высокий порог лучевой стойкости кристаллов позволяет использовать их для АО генерации мощных оптических вихревых полей.

[1] Belyi, V. Bessel-like beams with z-dependent cone angles / V. Belyi, A. Forbes, N. Kazak, N. Khilo, P. Ropot // Optics Express. – 2010. – Vol. 18, iss. 3. – P. 1966–1973.

[2] Ismail, Y. Shape invariant higher-order Bessel-like beams carrying orbital angular momentum / Y. Ismail, N. Khilo, V. Belyi, A. Forbes // J. of Optics. – 2012. – Vol. 14, iss. 8. – P. 085703.

[3] Khilo, N. A. Bessel-like light beams formed by the two-component scheme consisting of axicon and spherical lens / N. A. Khilo, P. I. Ropot, P. K. Piatrou, V. N. Belyi // Optics Communications. – 2021. – Vol. 483. – Art. № 126666.

[4] Belyi, V. N. Frequency conversion of Bessel light beams in nonlinear crystals / V. N. Belyi, N. S. Kasak, N. A. Khilo // Quantum Electronics. – 2000. – Vol. 30, iss. 9. – P. 753–766.

[5] Belyi, V. N. Propagation of high-order circularly polarized Bessel beams and vortex generation in uniaxial crystals / V. N. Belyi, N. A. Khilo, N. S. Kazak, A. A. Ryzhevich, A. Forbes // Optical Eng. – 2011. – Vol. 50, iss. 5. – P. 059001.

[6] Belyi, V. N. Spin-to-orbital angular momentum conversion for Bessel beams propagating along the optical axes of homogeneous uniaxial and biaxial crystals / V. N. Belyi, N. A. Khilo, S. N. Kurilkina, N. S. Kazak // J. of Optics. – 2013. – Vol. 15, iss. 4. – P. 044018.

[7] Belyi, V. N. Peculiarities of Acoustooptic Transformation of Bessel Light Beams in Gyrotropic Crystals / V. N. Belyi, N. S. Kazak, P. A. Khilo, E. S. Petrova, N. A. Khilo // Universal J. of Phys. and Application. – 2015 – Vol. 9, iss. 5. – P. 226–230.

[8] Khilo, N. A. Low-frequency acousto-optic backscattering of Bessel light beams / N. A. Khilo, V. N. Belyi, P. A. Khilo, N. S. Kazak // Optics Communications. – 2018. – Vol. 415. – P. 6–12.

УДК 543.423

Е.С. Воропай¹, К.Ф.Ермалицкая¹, Д.С.Тарасов², М.П.Самцов², К.А. Шевченко², А.А. Кирсанов¹

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОБРАЗЦОВ ДВУХИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ АТОМНО-ЭМИССИОННЫМ СПЕКТРОМЕТРОМ С АХРОМАТИЧЕСКОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>voropay@bsu.by, ermalitskaia@gmail.com</u>

² НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь

Лазерная атомно-эмиссионная спектроскопия — один из наиболее быстро развивающихся и широко используемых методов элементного качественного и количественного анализа объектов в последние два десятилетия. Несмотря на большое количество научных работ по лазерной атомно-эмиссионной спектроскопии, значительная доля исследований проводится не с применением готовых спектрометров, а на основе собранных из отдельных узлов установок на базе научноисследовательских лабораторий и научно-практических центров. Данные установки отвечают требованиям, которые предъявляются к спектрометрам, однако существенно ограничены для использования в учебных целях и для проведения большого объема измерительных работ разной направленности. На кафедре лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ и в лаборатории спектроскопии НИИ прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ разработан и изготовлен лазерный атомно-эмиссионный многоканальный спектрометр (ЛАЭМС) для научноучебных целей [1]. При разработке ЛАЭМС использованы принципиальные и схемные решения, призванные приблизить его к современным потребностям в такой аппаратуре в повседневной практике.

Оптическая схема спектрометра представлена на рис. 1. Ее разработка осуществлялась с учетом требований аберрационно-оптического и техникотехнологического характера. В качестве источника возбуждения спектрометр оснащен двумя неодимовыми лазерами с накачкой полупроводниковыми матрицами лазерных диодов (разработка Института физики НАН Беларуси). Использование накач ки полупроводниковыми матрицами лазерных диодов вместо накачки импульсными лампами позволяет существенно увеличить ресурс системы и стабильность выходных характеристик. Двухимпульсный лазер обеспечивает генерацию сдвоенных лазерных импульсов длительностью ≤15 нс с λ = 1064 нм с варьируемым в пределах 1—100 мкс интервалом с энергиями до 100 мДж при частотах следования пар импульсов <10 Гц. Для регистрации спектров плазмы используются спектрометры с регистрацией на ПЗСлинейке: 18 — на основе полихроматора SDH-1 (ЗАО "СОЛАР Лазерные системы", диапазон 190-800 нм, разрешение 0.1 нм при ширине одновременно регистрируемого спектрального интервала 150 нм), 19 — спектрометр оригинальной конструкции. На базе ЛАЭМС разработаны методики качественного и количественного микроанализа артефактов и старинных монет, зарегистрированы эмиссионные спектры подлинных и фальшивых старинных монет, варварских имитаций римских имперских денариев, найденных на территории Беларуси и хранящихся в собрании нумизматического кабинета БГУ, в частных коллекциях; плакированных золотом римских монет, а также фрагментов ювелирных украшений, относящихся к I тыс. до н.э., найденных на территории современной Беларуси [2].



Рис. 1. Оптическая схема ЛАЭМС

. Предложен метод оценки толщины молекулярных соединений на поверхности металлических последующего исключения соответствующих изделий для спектральных данных из результатов анализа. Установлено, что при лазерной абляции образцов чистого металла при фиксированных параметрах излучения относительная интенсивность спектральных линий при абляции современного образца может значительно (до 30 %) превышать интенсивность старого образца, который некоторое время находился под землей. длительное время Таким образом, количественный анализ с использованием градуировочных кривых, построенных на основе современных стандартных образцов, приведет к неверным результатам. При этом переход от одноимпульсной к двухимпульсной лазерной абляции, приводящий к многократному увеличению относительной интенсивности спектральных линий, очень важен, так как позволяет значительно повысить чувствительность анализа и снизить ошибка.

- [1] Воропай Е.С. Лазерный атомно-эмиссионный спектрометр с ахроматической оптической системой / Е.С. Воропай [и др.] // ЖПС. 2021. Т. 88, № 3. С. 485-492.
- [2] Ermalitskaia K.F. Elemental analysis of obsolete brittle metal samples using a two-pulse laser spectrometer / K.F Ermalitskaia, P.A. Ivanova, Y.I. Matyush // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. – 2023. – № 1. – С. 78–84.

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук¹, Л. Л. Гладков², Д. В. Кленицкий¹

РОЛЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ КОНФОРМАЦИИ В ФОРМИРОВАНИИ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК N-ЗАМЕЩЕННЫХ ПОРФИРИНОВ

¹ Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь

<u>m.kruk@belstu.by</u>

² Белорусская государственная академия связи, ул. Ф. Скорины, 8/2, 220114 Минск, Беларусь Ilglad@tut.by

Характерной чертой тетрапиррольных соединений является наличие развитой сопряженной электронной системы, которая обеспечивает коммуникацию π-электронов по всему макрогетероциклу. Представления о формировании сопряженной лэлектронной системы в макрогетероцикле и ее свойствах претерпели существенную эволюцию за последние 50 лет. Изначально предполагали, что планарность макроцикла порфина и его простейших производных является ключевой характеристикой, которая обеспечивает формирование контура л-электронного сопряжения, и, следовательно, определяет ароматичность молекулы. Однако развитие методов рентгеноструктурного анализа и квантовой химии позволили установить, что существует огромное количество тетрапиррольных соединений с молекулярной конформацией макроцикла с существенными отклонениями от планарности. При этом неплоские конформеры являются конформационно лабильными, что привело к формированию научной концепции конформационной подвижности макроцикла [1-2], и пересмотру ранних представлений о жестком планарном макроцикле. В настоящее время установлено, что макрогетероциклические соединения со значительными отклонениями от планарного строения могут быть ароматическими, причем в формировании контура π-сопряжения принимают участие все скелетные атомы макроцикла, вклады которых могут существенно варьироваться в зависимости от молекулярной структуры [3].

В связи с этим, вызывают значительный интерес *N*-замещенные тетрапиррольные молекулы, у которых один из пиррольных протонов замещен алкильной либо арильной *N*-замещенные группой. Первоначально тетрапиррольные молекулы были синтезированы с целью изучения влияния структурных модификаций на свойства биологически важных эндогенных порфиринов, однако впоследствии оказалось, что они являются природными продуктами. *N*-замещенные тетрапиррольные молекулы представляют собой вредные побочные продукты метаболизма лекарств в печени и реакции гемоглобина в крови. Структурные изменения макроцикла при такой структурной модификации локализованы и заключаются в повороте N-замещенного пиррольного кольца по отношению к средней плоскости макроцикла, который происходит из-за того, что размеры группы-заместителя не позволяют ей расположиться в ядре плоского макроцикла [4]. Однако, поворот N-замещенного пиррольного кольца как целого не компенсирует все стерические затруднения, возникающие в ядре макроцикла. Термодинамически выгодной оказывается частичная

их компенсация за счет нарушения планарности пиррольного цикла: во-первых, пиррольное кольцо обнаруживает «излом» относительно линии, соединяющей C_a и C_a ' атомы; во-вторых, связи N–C_a, N–C_a' и N–C_{зам} не лежат в одной плоскости, что означает увеличение степени гибридизации атома азота пиррольного кольца, которая приобретает частичный sp³ характер [5]. В нашей недавней работе показано, что в Nзамещенных производных порфина за счет пирамидализации атома азота ухудшается π -сопряжение по внутреннему фрагменту C_a–N–C_a' N-замещенного пиррольного кольца и одновременно усиливается сопряжение через его внешний фрагмент C_a–C_b– C_b–C_a' [5], причем величина индекса ароматичности I_{HOMA} для соответствующих контуров сопряжения линейно зависит от степени гибридизации λ^2 пиррольного атома азота. N-замещение является сильным возмущающим фактором для электронных спектров поглощения: батохромный сдвиг H(N-CH₃)OЭП по отношению к H₂OЭП составляет 580 см⁻¹. Поэтому представляло значительный интерес установить механизмы формирования батохромного сдвига полос в электронных спектрах поглощения N-замещенных производных порфиринов.

В результате исследования установлено, что при замещении протона в пиррольном фрагменте макроцикла алкильными либо галоидно-алкильными группами формируется неплоский конформер, причем отклонение замещенного пиррольного плоскости макроцикла сопровождается кольца от средней значительной пирамидализацией атома азота достигающей значения $\lambda^2 = 2.729$ в случае замещения CCl₃ группой. В результате анализа взаимосвязи положения длинноволнового электронного перехода и молекулярной конформации исследованных молекул сделан вывод о том, что батохромный сдвиг обусловлен в первую очередь пирамидализацией атома азота, что приводит к расширению контура π-сопряжения: положение максимума линейно зависит от степени гибридизации λ^2 пиррольного атома азота. В то же время наклон замещенного пиррольного кольца по отношению к средней плоскости макроцикла практически не зависит от природы N-заместителя и обусловливает не более четверти от наблюдаемого батохромного сдвига. Предполагается, что ароматичность тетрапиррольного макроцикла можно направленно изменить путем управления гибридизацией скелетных атомов углерода или гетероатомов в пятичленных циклах.

- Röder B. Correlation of photophysical parameters with macrocycle distortion in porphyrins with graded degree of saddle distortion / B. Röder, M. Büchner, I. Rückmann, M. O. Senge // Photochem. Photobiol. Sci. – 2010. – Vol. 9. – P. 1152–1158.
- [2] Senge M. O. Conformational control of cofactors in nature the influence of proteininduced macrocycle distortion on the biological function of tetrapyrroles / M. O. Senge, S. A. MacGovan, J. O'Brien // Chem. Commun. – 2015. – Vol. 51. – P. 17031–17063.
- [3] Fliegl H. Aromatic Pathways of Porphins, Chlorins, and Bacteriochlorins / H. Fliegl, D. Sundholm // J. Org. Chem. 2012. Vol. 77. P. 3408–3414.
- [4] Lavallee D. K. The Chemistry and Biochemistry of N-Substituted Porphyrins. New-York: VCH Publishers. 1987. 313 p.
- [5] Крук Н. Н. Молекулярная конформация и ароматичность N-замещенных производных порфина. / Н. Н. Крук, Л. Л. Гладков, Д. В. Кленицкий, А. Б. Крылов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информ. 2023. Т. 266. С. 34 41.
ЛАЗЕРНЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ БЕССЕЛЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ С СУБВОЛНОВЫМ ДИАМЕТРОМ ОСЕВОГО МАКСИМУМА ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ

С.Н. Курилкина. Н.А. Хило, П.И. Ропот, А.М. Варанецкий

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси пр.Независимости 68-2, Минск 220072

К настоящему времени преобразователи гауссовых пучков в бесселевы хорошо разработаны. При этом, как правило, используются аксиконы [1], кольцевые диафрагмы [2] и пространственные модуляторы света [3]. Однако эти методы, в основном, ограничиваются формированием параксиальных бесселевых световых пучков (БСП) с малым углом конусности. В последнее время возрастает потребность в БСП с большой числовой апертурой, что связано, в первую очередь, с проблемой формирования и исследования трехмерных наноструктур в различных (в том числе, полупроводниковых) материалах. Решению данной задачи и посвящена настоящая работа.

Нами предложен и реализован излучатель БСП с большой числовой апертурой для создания трехмерных наноструктур в полупроводниковых материалах. Его отличительной особенностью является использование конической оптики.

Оптическая схема излучателя работает следующим образом (рисунок 1). Лазерный пучок расширяется коллиматором, фокусируется линзой с небольшой числовой апертурой (фокусное расстояние линзы выбирается равным длине оптического пути световых лучей на участке «линза – полупроводниковая пластина», вследствие чегосветовой пучок на поверхности пластины будет иметь минимальный диаметр и, следовательно, максимальную интенсивность) и с помощью двух рефрактивных аксиконов преобразуется в трубчатое поле, которое далее с помощью отражательного аксикона трансформируется в конический расходящийся пучок, преобразуемый в сходящийся цилиндрическим зеркалом с отражающей внутренней поверхностью. На входной грани полупроводниковой (кремниевой) пластины этот сходящийся конический пучок трансформируется в бесселев с субволновым диаметром осевого максимума, определяющим пространственное разрешение нелинейной литографии.

Для снижения отражательных потерь предложено перед полупроводниковой пластиной размещать усеченный конус из того же материала (рисунок 2), на боковую поверхность которого парциальные волны сходящегося конического пучка падают нормально, что обусловливает существенное уменьшение коэффициента отражения для любой поляризации падающего пучка. При этом, в отличие от предыдущего случая (рисунок 1), бесселев пучок с интенсивным центральным максимумом формируется на задней поверхности полупроводниковой пластины. Показано, что использование дополнительного элемента повозляет увеличить числовую апертуру излучателя в несколько раз (в случае кремния - в 3.48). Параметры схем, приведенных на рисунках 1,2, оптимизированы для достижения максимального значения осевой интенсивности.



Рисунок 1 - Оптическая схема излучателя бесселева пучка с большой числовой апертурой на основе конической оптики



Рисунок 2 - Оптическая схема формирователя бесселева пучка с высокой числовой апертурой и малыми потерями на отражение

Предложенный излучатель бесселевых световых пучков предаставляет интерес для формирования трехмерных наноструктур в полупроводниковых (и, в частности, кремниевых) пластинах.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Wang Y., Yan S., Friberg A. T., Kuebel D., Visser T. D. Electromagnetic diffraction theory of refractive axicon lenses// J. Opt. Soc. Am. - 2017. - V. A 34. - P. 1201-1211.

2. McGloin D., Dholakia K. Bessel beams: Diffraction in a new light// Contemporary Physics. - 2005. - V. 46:1. - P.15-28.

3. Dudley A., Vasilyeu R., Belyi V., Khilo N., Ropot P., Forbes A. Controlling the evolution of nondiffracting speckle by complex amplitude modulation// Optics Communications. -2012. - V. 285, Issue 1. - P. 5-12. УДК 535.015

В. Ю. Курстак, С. С. Ануфрик

НАВЕДЕННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ АКТИВИРОВАННОГО КРАСИТЕЛЕМ КОМПОЗИТА ПРИ ПИКОСЕКУНДНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь <u>vkurstak@tut.by</u>, <u>anufrick@grsu.by</u>

Выполнены экспериментальные исследования нелинейно-оптических свойств образца нанопористого стекла с полимером (НПСП), активированного красителем, при импульсном пикосекундном возбуждении излучением второй гармоники Nd³⁺: YAG лазера (длительность импульса – 70 пс, энергия импульса до 15 мДж).

Исследования проводились методом Z-сканирования, позволяющим определить, как наведенное поглощение, так и величину нелинейной рефракции исследуемого образца [1].

При возбуждении образца излучением с длиной волны 532 нм оптическая плотность в режиме слабого сигнала составляло 0,13. Данная длина волны смещена в область больших длин волн относительно максимума поглощения красителя в видимой области спектра ($\lambda_{max} = 427$ нм).

Спектр флуоресценции композита по уровню 0,5 расположен в диапазоне 432 – 449 нм, что соответствует более коротким длинам волн по отношению к накачке. Однофотонная флуоресценция в данном случае наблюдаться не может.

В результате выполненных исследований была измерена зависимость пропускания образца T(z) при изменении интенсивности лазерного излучения, путём сканирования фокусирующей линзой вдоль направления падающего на образец излучения в режиме с широкой диафрагмой (рисунок 1). Все полученные данные усреднялись по пяти измерениям.



Рисунок 1. Зависимость величины пропускания композита НПСП от расстояния до линзы при средней энергии импульсов излучения 0,1 и 0,14 мДж (режим широкой диафрагмы)

Полученная зависимость величины пропускания T(z) от z-координаты фокусирующей линзы позволяет определить помимо соответствующих значений пропускания ещё величину максимального контраста R, а также критическую

интенсивность I_{cr}. Данные величины лежат в основе определения соответствующих сечений наведенного поглощения σ_{S1}. В основу расчёта указанных величин положена пятиуровневая энергетическая схема [2].

Величина затемнения $D = T_0/T_S = 12.68$ и, следовательно, контраст $R = \ln(T_0/T_S) = 2.54$. Таким образом, величина сечения σ_{S1} может быть найдена исходя из соотношения $\sigma_{S1} = R \cdot \sigma_{S0}$. Сечение поглощения σ_{S0} находят пользуясь выражением: $\sigma_{S0} = -\ln(T_0)/Nd$, где N – концентрация молекул красителя в образце, а d – толщина образца. Измеренная величина пропускания в режиме малого сигнала T_0 составляла 0,52. При концентрации молекул красителя $N = 5 \cdot 10^{17}$ см⁻³ и величине d = 3 мм сечение поглощения из основного состояния $\sigma_{S0} = 4,36 \cdot 10^{-18}$ см², величина сечения σ_{S1} составила 1,11 $\cdot 10^{-17}$ см².

Графики приведенных на рисунке 2 зависимостей T(z) расстояния от образца до линзы, несимметричны относительно фокуса, что указывает на наличие нелинейной зависимости показателя преломления от интенсивности излучения. Указанная нелинейность была измерена методом Z-сканирования в режиме узкой диафрагмы, диаметром 6 мм.



Рисунок 2. Зависимость величины пропускания композита НПСП от расстояния до линзы при средней энергии импульсов излучения 0,1 и 0,14 мДж. Режим узкой диафрагмы.

Измеренная зависимость пропускания T(z) в режиме узкой диафрагмы позволила определить изменение пропускания ΔT . Зная величину апертуры S было найдено соответствующее изменение фазы $\Delta \Phi$, по которому определено изменение показателя преломления Δn композита НПСП. Величина изменения показателя преломления Δn составила $1,0^{-10^{-4}}$. Найденный нелинейный показатель преломления n_2 для исследуемого образца композита составил $1,75^{-11}$ (см²/МВт).

[1] Колдунов, М. Ф. Показатели качества наведенного поглощения оптического излучения в органических соединениях / М. Ф. Колдунов, Л. М. Колдунов // Прикладная физика, – 2015. №5, – С. 5-11.

[2] Ануфрик, С. С. Зависимость эффективности генерации лазера на красителях от длины волны микросекундной накачки / С. С. Ануфрик, В. Ю. Курстак, В. В. Тарковский // Веснік ГрДУ імя Янкі Купалы. Сер. 2, Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальная тэхніка і кіраванне. – 2020. – Т. 10, № 1. – С. 110-119.

УДК 53

Н. В. Лахмицкий, В. Н. Чижевский, С.Я. Килин

ПЕРЕДАЧА ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОГО ИМПУЛЬСНОГО СТОХАСТИЧЕСКОГО НЕЙРОНА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь nikita7828@gmail.com

В последние годы значительны интерес был направлен на разработку и искусственных импульсных нейронов, исследование обладающих высоким быстродействием, низким энергопотреблением, возможностью масштабирования и параллельностью функционирования [1]. Это необходимо для разработки искусственных импульсных нейронных сетей (ИНС) третьего поколения, которые наиболее близко имитируют работу биологических нейронных сетей. ИНС находят применение для задач распознавания образов, задач классификации, улучшения качества изображений. Недавно был предложен искусственный импульсный нейрон (ИИН), на основе оптоэлектронной пары «вертикально-излучающий лазер (ВИЛ) однофотонный лавинный фотодиод» хорошо имитирующий основные свойства биологического нейрона [2]. Характерной особенностью предложенного ИИН является наличие детерминированного и стохастического режимов работы. Последний особенно важен для реализации стохастических вычислений и распознавания изображений.

В данной работе на основе использования ИИН в стохастическом режиме работы в сочетании с программно-реализованной ИНС из параллельно соединенных нейронов, продемонстрирована передача изображений через ИНС практически без искажений. Метод основан на кодировании градаций интенсивности в изображении в вероятность срабатывания детектора одиночных фотонов.

Схематическое изображение экспериментальной реализации представлено на рисунке 1. В работе использовался детектор одиночных фотонов фирмы idQuantique ID100-SMF20 на основе лавинного фотодиода (ЛФД) с частотой темновых отсчётов 4 Гц и мертвым временем 45 нс. Источником лазерных импульсов длительностью 5 нс



Рисунок 1 – Схема эксперимента.

и частотой следования 2 МГц являлся ВИЛ генерирующий на длине волны 850 нм. Эффективность срабатывания детектора на этой длине волны 0,03. Для генерации сигнала и его регистрации использовался осциллограф со встроенным генератором HS5 (TiePie) с частотой выборки 200 МГц и длиной записи 64 млн. выборок. Регулировка

интенсивности лазерных импульсов осуществлялась с помощью переменного прецизионного аттенюатора (ПА) с диапазоном ослабления 1-30 дБ

Принцип передачи изображений состоит в следующем. Восьмибитовое изображение в градациях интенсивности (серого) преобразуется в последовательность лазерных импульсов, где интенсивность каждого импульса пропорциональна интенсивности пиксела в изображении. Последовательность импульсов детектируется однофотонным ЛФД с вероятностным откликом. Зависимости вероятности срабатывания P(U) однофотонного ЛФД, представленные на рисунке 2(a) от амплитуды импульса накачки лазера при различных уровнях начального ослабления, являются ключевыми для передачи изображений. Выбором ослабления можно варьировать зависимости, а соответственно, и динамический диапазон кодирования изображений. Выходная бинарная последовательность импульсов преобразуется в бинарное изображение. Проводя подобную процедуру К раз и усредняя по К на выходе получаем переданное изображение практически без искажений (рисунок 1). Качество переданного через ИНС изображения оценивалось среднеквадратичной ошибкой (MSE) (рисунки 2(б) и 2(в)).



Рисунок 2 – (а) Вероятность срабатывания нейрона *P*(U), (б) среднеквадратичное отклонение переданного изображения от входящего *MSE* в зависимости от амплитуды лазерных импульсов, (в) *MSE* в зависимости от числа нейронов в сети для различных ослаблений.

Из рисунка 2(6) видно, что среднеквадратичная ошибка *MSE* для определенных значений начального ослабления может достигать очень малой величины, что свидетельствует о высоком качестве предаваемых изображений. При этом увеличение числа нейронов в сети приводит к уменьшению *MSE* также для определенных уровней ослабления (рисунок 2(B)).

Таким образом, в работе продемонстрировано, что при помощи одного искусственного импульсного нейрона с вероятностным откликом можно смоделировать работу однослойной нейронной сети с произвольным числом нейронов для эффективной передачи изображений. Предложенный подход может найти применение при разработке ИНС, предназначенных для задач распознавания образов.

- Zhu, J. A comprehensive review on emerging artificial neuromorphic devices / J. Zhu, T. Zhang, Y. Yang, R. Huang // Appl. Phys. Rev. 2020. -V.7. -P. 011312.
- [2] Chizhevsky, V.N. Artificial spiking neuron based on a single-photon avalanche diode and a microcavity laser. / V. N. Chizhevsky, V. A. Kulchitsky, S. Ya. Kilin. // Appl. Phys. Lett. - 2021. – V. 119. – P. 041107-5.

УДК 535.3+539.2+666.192

Г. Е. Малашкевич¹, В. В. Ковгар¹, Н. В. Варапай¹, Т. А. Павич¹, Г. П. Шевченко², Ю. В. Бокшиц²

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ЕГ-СОДЕРЖАЩИХ КВАРЦЕВЫХ СТЕКОЛ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРЯМЫМ И ГИБРИДНЫМ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

¹Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>g.malashkevich@ifanbel.bas-net.by</u>

²НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, ул. Ленинградская, 14, 220080 Минск, Беларусь

Ег-содержащие стёкла уже более 40 лет продолжают оставаться вне конкуренции на рынке активных материалов для усилителей в оптоволоконных линиях связи. Вместе с тем постоянно растущие требования к ширине полосы усиления стимулируют поиск возможностей уширения полосы люминесценции таких стекол. В настоящей работе рассмотрены некоторые результаты решения данной задачи путём использования различных прекурсоров оптических центров Er³⁺ в кварцевых стёклах, полученных из раствора прямым переходом «золь-гель-стекло» и плавлением активированной гелькрупки (гибридный золь-гель метод).

В первом случае синтез опытных образцов осуществлялся известным методом [1] с активацией как на стадии золя, так и путём импрегнирования ксерогелей растворами соединений эрбия. В качестве последних использовадись Er(PTFA)₃DAK, где PTFA – пивалоилтрифторацетон, DAK – диаза-18-краун-6 (образец №1), ErCl₃ (№2), ErCl₃+AlCl₃ (№3), ErCl₃+CeCl₃ (№4 и №4*). Спекание активированных ксерогелей проводилось на воздухе (№4 и №4*) и в вакууме (№1–№3) при $T \approx 1250$ °C.

Во втором случае синтез осуществлялся путём плавления в вакууме при $T \approx 1750$ °C фторированной коммерческой гель-крупки, импрегнированной растворами ErCl₃ (№5), ErCl₃+AlCl₃+Na₂SiO₃ (№6), ErCl₃+AlCl₃+Na₂SiO₃ с последующей кристаллизацией в течение четырёх (№7) и десяти (№8) часов при $T \approx 1400$ °C. Все исходные реактивы соответствовали квалификации не хуже ч.д.а.

Спектры поглощения исследовались с помощью спектрофотометра «Сагу-500», а спектры люминесценции – спектрофлуориметра СДЛ-2. Последние исправлялись с учётом спектральной чувствительности системы регистрации и выражались виде зависимости числа квантов на единичный интервал длин волн $dN(\lambda)/d\lambda$ от длины волны. Квантовый выход люминесценции (η) определялся относительным методом при использовании в качестве эталона паспортизированного стекла ЛГС-Э со значением $\eta = 89\%$.

На рис. 1 изображены спектры инфракрасной люминесценции исследованных стекол и указаны (на вставках) значения эффективной полуширины $\Delta\lambda$ полосы люминесценции ${}^{4}I_{13/2} \rightarrow {}^{4}I_{15/2}$ ионов Er^{3+} , из которых видно, что в зависимости от природы используемых прекурсоров и методики синтеза реализовано варьирование $\Delta\lambda$ в пределах 16,4–52,1 нм. Это можно связать с образованием сложных центров, включающих в первую катионную оболочку Er^{3+} ионы дополнительно вводимых

металлов (Al, Ce, Na). Здесь обращает на себя внимание радикальное различие спектров образцов 4 и 4*. Подобное «спектроскопическое поведение» Ce–Ln-содержащих стекол впервые было описано в [2] и объясняется самоформированием наночастиц CeO₂:Er, в которых возбуждение люминесценции ионов Er³⁺ осуществляется фотовосстановленными ионами [Ce⁴⁺]⁻ в условиях сверхобменного взаимодействия [3].



Длина волны (нм)

Рис. 1. Спектры люминесценции кварцевых стекол, полученных прямым переходом золь-гель-стекло (*a*) и гибридным золь-гель методом (*б*). Кривые 1–3 и 5–8 получены при возбуждении ксеноновой лампой через светофильтр СЗС22, кривые 4 и 4* при $\lambda_{возб} = 520$ и 350 нм соответственно.

Спектры поглощения этих стекол также демонстрируют существенные различия для разных образцов в форме и удельной интенсивности практически всех полос ионов Er^{3+} и особенно ${}^{4}I_{15/2} \rightarrow {}^{4}I_{13/2}$ и ${}^{4}I_{15/2} \rightarrow {}^{4}I_{11/2}$, подтверждая формирование сложных оптических центров. Заметим, что квантовый выход люминесценции исследованных стекол уменьшается от 95% до 4% с увеличением концентрации примесных OH⁻-групп, определённой по известной методике [1], в диапазоне 0,01–2,0 масс %.

Таким образом, используя различные прекурсоры оптических центров Er^{3+} и варьируя методику синтеза полученных из раствора кварцевых стекол, активированных этими ионами, можно существенно увеличить ширину полосы их люминесценции. Это позволит повысить число спектральных каналов для передачи информации в оптоволоконных линий связи с усилителями на основе Er-содержащего стекла.

Работа частично поддержана БРФФИ (грант №Ф23В-011).

- Malashkevich, G. E. Optical centers of cerium in silica gel-glasses obtained by the sol-gel process / G. E. Malashkevich, E. N. Poddenezhny, I. M. Melnichenko, A. A. Boiko // J. Non-Cryst. Solids. – 1995. – V. 188. – P. 107.
- [2] Малашкевич Г. Е. Спектрально-люминесцентные свойства Sm- и Ce–Smсодержащих кварцевых гель-стекол / Г. Е. Малашкевич, Е. Н. Подденежный, И. М. Мельниченко, А. В. Семченко // ФТТ. – 1998. – Т. 40. – С. 458.
- [3] Малашкевич Г. Е. Нанокристаллитная природа высокосимметричных Ce⁴⁺-Eu³⁺центров в кварцевых гель-стеклах / Г. Е. Малашкевич, В. Н. Сигаев, Г. И. Семкова, Б. Шампаньон // ФТТ. – 2004. –Т. 46. – С. 534.

УДК 528.8

А.В. Малинка, А.П. Чайковский, И.А. Алексеев, В.А. Базылевич, В.П. Дик, Е.А. Илькевич, А.И. Калевич, И.Л. Кацев, М.М. Король, В.А. Пещеренков, А.С. Прихач

ИССЛЕДОВАНИЯ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ И СНЕЖНОГО ПОКРОВА АНТАРКТИДЫ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОГО ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.malinka@ifanbel.bas-net.by

Исследования белорусских ученых в Антарктиде начались в 2006 году, когда белорусская научная группа приступила к измерению содержания озона в атмосфере в составе 52-й Российской антарктической экспедиции. В 2008 г. белорусскими учеными, в сотрудничестве с учеными Лилльского университета, была создана станция радиометрического зондирования *Vechernaya_Hill* (67.66°S, 46.16°E) в районе горы Вечерняя [1], которая вошла в состав глобальной радиометрической сети AERONET [2]. В 2011 г. в программу наблюдений на Белорусской научной станции, помимо солнечно-радиометрических наблюдений, были включены измерения высотной зависимости оптических параметров атмосферы с помощью лидара. Также был изготовлен спектральный альбедомер для измерения спектров отражения земной поверхности, работоспособность которого была успешно испытана в Антарктиде [3]. В 2023 г. на станции «Гора Вечерняя» была оборудована лидарная лаборатория, и началась программа регулярных лидарных измерений параметров атмосферного аэрозоля в тропосфере и нижней стратосфере.

методике лидарно-радиометрического зондирования (ЛРЗ) В аэрозолей используется синергетический подход к организации измерений наземными и спутниковыми лидарами и солнечными спектрометрическими системами. Результатом комплексного эксперимента является полный набор параметров оптической модели необходимых описания процесса переноса излучения аэрозоля, для стратифицированном по высоте аэрозольном слое [4-5]. В настоящее время методика ЛРЗ успешно применяется для исследования дальнего переноса дымов пожаров и пыли из аридных районов в Землю Эндерби [6] и является частью регулярных наблюдений в белорусских антарктических экспедициях.

Важная роль в формировании системы мониторинга атмосферы и подстилающей поверхности Антарктиды отводится системам космических наблюдений. Алгоритм восстановления характеристик снежной поверхности по спутниковым измерениям разработан в Институте физики [7–8] и реализован в виде программного кода ASAR. Алгоритм не использует какую-либо конкретную модель снега или априорную информацию о форме снежных зёрен. Он использует только спектральную информацию, полученную спутниковым радиометром, и основан на асимптотической зависимости двунаправленной отражательной способности полубесконечного слоя снега от размера частиц [7–8]. ASAR позволяет по спутниковым измерениям яркости снежного покрова восстановить степень покрытия территории снегом и эффективный

размер снежных зёрен, а также среднее спектральное альбедо, — важнейшие параметры, определяющие радиационный баланс полярных регионов. Эти данные необходимы для изучения процессов метаморфизма в снежно-ледяном покрове Антарктиды. В реализации кода ASAR, используемого в настоящее время, входными являются данные спектрорадиометра MODIS [9], но также была разработана версия, обрабатывающая данные более современного радиометра OLCI [10]. С помощью кода ASAR были обработаны спутниковые данные MODIS за последние два десятилетия и исследованы тренды характеристик снежного покрова в районе горы Вечерней. Установлены незначительные тренды уменьшения эффективного размера снежных зёрен в летний период, что может свидетельствовать о том, что район Восточной Антарктиды вблизи горы Вечерняя, видимо, выпадает из общей картины увеличения глобальных температур в сторону потепления.

- [1] Оптические исследования атмосферы и подстилающей поверхности в Антарктике / А.П. Чайковский [и др.] // Беларусь в Антарктике: к 10-летию начала регулярных научных и экспедиционных исследований; под ред. акад. В.Ф. Логинова / Минск : Беларуская навука, 2016. — С. 50–101.
- [2] AERONET [Electronic resource] : The Aerosol Robotic Network. Mode of access: <u>http://aeronet.gsfc.nasa.gov/.</u> Date of access: 19/03/2023.
- [3] Наземные и спутниковые исследования атмосферы и земной поверхности в Антарктике / А.П. Чайковский [и др.] // Научные исследования Беларуси в Антарктике ; под ред. акад. В.Ф. Логинова / Минск : Беларуская навука, 2021. Гл. 4. С. 36–54.
- [4] Lidar-Radiometer Inversion Code (LIRIC) for the retrieval of vertical aerosol properties from combined lidar/radiometer data: development and distribution in EARLINET / A.P. Chaikovsky [et al.] // Atmos. Meas. Tech. — 2016. — Vol. 9. — P. 1–25. — DOI:10.5194/amt-9-1-2016.
- [5] Lidar&radiometer inversion code (LIRIC) for synergetic processing of EARLINET, AERONET and CALIPSO lidar data / A.P. Chaikovsky [et al.] // EPJ Web Conf. — 2018.
 — Vol. 176. — 08007. — DOI:10.1051/epjconf/201817610007.
- [6] Ground-Based and Satellite Optical Investigation of the Atmosphere and Surface of Antarctica / A.V. Malinka [et al.] // EPJ Web Conf. — 2018. — Vol. 176. — 10006. — DOI:10.1051/epjconf/201817610006.
- [7] New algorithm to retrieve the effective snow grain size and pollution amount from satellite data / E.P. Zege [et al.] // Annals of Glaciology. — 2008. — Vol. 49. — P. 139– 144. — DOI: 10.3189/172756408787815004.
- [8] Algorithm for retrieval of the effective snow grain size and pollution amount from satellite measurements / E.P. Zege [et al.] // Rem. Sens. of Env. — 2011. — V. 115, No. 10. — P. 2674–2685. — DOI: 10.1016/J.RSE.2011.06.001.
- [9] MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) [Electronic resource]. Mode of access: <u>https://modis.gsfc.nasa.gov/</u>. — Date of access: 19/03/2023.
- [10] Sentinel-3 [Electronic resource]. Mode of access: <u>https://earth.esa.int/web/guest/missions/esa-future-missions/sentinel-3</u> — Date of access: 19/03/2023.

УДК 502.3-027.21

Н. С. Метельская, А. П. Чайковский, А. И. Бриль, В. А. Пещеренков

ОПТИМАЛЬНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ И МОДЕЛИРОВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>n.miatselskaya@dragon.bas-net.by</u>

Для оценки состояния атмосферы используются наблюдения и моделирование. Локальные и дистанционные наблюдения осуществляются с помощью разнообразных инструментов. Однако измерения ограничены и неравномерно распределены в пространстве и времени. В то же время для оценки состояния атмосферы необходимо возможно более полное покрытие целевого региона. Такое покрытие обеспечивают модели, позволяющие рассчитывать искомые характеристики во всех ячейках некоторой координатной пространственно-временной сетки. Однако модели несовершенны; результаты модельных расчётов могут иметь значительную неопределённость. Получить единую картину состояния атмосферы, в которой данные наблюдений и моделирования учитываются в соответствии с их точностью, позволяет ассимиляция данных. В основе ассимиляции данных лежит объединение информации из различных источников для получения оптимальной оценки.

Математическим основанием ассимиляции данных является теория оценивания и контроля [1]. В общем виде линейная несмещённая схема ассимиляции данных записывается следующим образом:

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^b + \mathbf{K}[\mathbf{y} - \mathbf{H}(\mathbf{x}^b)],$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1},$$

где $\hat{\mathbf{x}}$ – вектор оценки состояния системы; \mathbf{x}^b – вектор предварительных значений состояния системы (например, результатов модельных расчётов); \mathbf{K} – матрица весовых коэффициентов; \mathbf{y} – вектор наблюдений; \mathbf{H} – оператор наблюдений, обеспечивающий связь наблюдений с состоянием системы; \mathbf{B} – ковариационная матрица погрешностей предварительных значений; \mathbf{R} – ковариационная матрица погрешностей наблюдений. Весовые коэффициенты определяются из требования минимизации среднеквадратичной погрешности оценки.

Методы ассимиляции данных разделяют на три основные группы: оптимальная интерполяция (ОИ) [2], калмановская фильтрация [3] и вариационные методы [4]. В ОИ весовые коэффициенты не определяются заново на каждом временном шаге, а характеристики рассматриваемого выражаются через статистические поля. Калмановская фильтрация рекуррентным алгоритмом, котором является В ковариационная матрица погрешностей предварительного поля меняется на каждом временном шаге в зависимости от оценки, полученной на предыдущем временном шаге. Вариационные методы основываются на минимизации расстояния между истинным значением и значениями наблюдений. Калмановская фильтрация и вариационные методы обладают более высокой точностью по сравнению с ОИ, но требуют больших затрат машинного времени.

Нами разработаны два усовершенствования метода ОИ, позволяющие уменьшить погрешность оценки атмосферных параметров. В классическом методе ОИ при весовых коэффициентов используются только пространственные определении ковариации погрешностей рассматриваемых параметров атмосферы. Нами предложено учитывать также временные ковариации. Предложенный подход использован нами для оценивания аэрозольной оптической толщины с использованием расчётов по химикотранспортной модели GEOS-Chem [5, 6] и данных наблюдений международной радиометрической сети AERONET [7, 8], обладающих высокой точностью, но ограниченных пространстве времени. Показано, В И что использование пространственно-временной оптимальной интерполяции позволяет в среднем на 30 % уменьшить погрешность оценки по сравнению с модельными расчётами в тех точках, где отсутствуют наблюдения.

Второй подход, который может применяться наряду с первым, состоит в одновременном использовании различных предварительных Наименее полей. ресурсозатратным является использование двух предварительных полей: первое представляет собой результаты модельных расчётов, второе – среднестатистические значения рассматриваемых параметров, полученные на основе обработки данных наблюдений. Результирующая оценка представляет собой линейную комбинацию оценок, полученных с использованием каждого из предварительных полей по отдельности, с весовыми коэффициентами, зависящими от среднеквадратичных полей. погрешностей этих Очевидно, ЧТО среднеквадратичная погрешность результирующей оценки меньше, чем среднеквадратичные погрешности оценок, полученных с использованием среднестатистических значений и модельных значений в качестве предварительных полей, взятых по отдельности. Валидация предложенного метода будет проведена в будущем.

- [1] Ghil, M. Data assimilation in meteorology and oceanography / M. Ghil, P. Malanotte-Rizzoli // Adv. Geophys. – 1991. – Vol. 33. – P. 141–266.
- [2] Гандин, Л.С. Объективный анализ метеорологических полей / Л.С. Гандин. Ленинград: Гидрометеорологическое издательство, 1963. 288 с.
- [3] Kalman, R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems / R.E. Kalman // Trans. ASME. – 1960. – Vol. 82D. – P. 35–45.
- [4] Sasaki, Y. An objective analysis based on the variational method / Y. Sasaki // J. Meteor. Soc. Japan. – 1958. – Vol. 36. – P. 77–88.
- [5] Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology: Model description and evaluation / I. Bey [et al.] // J. Geophys. Res. – 2001. – Vol. 106. – P. 23073–23096.
- [6] GEOS-Chem Model [Electronic resource]. Mode of access: http://acmg.seas.harvard.edu.
- [7] AERONET A federated instrument network and data archive for aerosol characterization / B.N. Holben [et al.] // Remote Sens. Environ. – 1998. – Vol. 66. – P. 1– 16.
- [8] AERONET Aerosol Robotic Network [Electronic resource]. Mode of access: http://aeronet.gsfc.nasa.gov.

УДК 535.36

А.А. Мискевич*, В.А. Лойко, Н.А. Лойко

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ «МОНОСЛОЙ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В ПОГЛОЩАЮЩЕЙ СРЕДЕ»: РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОГЛОЩЁННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ И СРЕДОЙ

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь * miskevic@ifanbel.bas-net.by

В работах [1-4] нами предложен метод описания оптических свойств монослоя сферических частиц (светопоглощающих или непоглощающих) в *непоглощающей* среде. В данной работе метод развит на случай описания рассеивающих и поглощающих свойств системы «монослой сферических частиц в *поглощающей* среде» при падении под произвольным углом плоской волны с произвольной поляризацией (Рис. 1). Он учитывает многократное рассеяние волн, основан на использовании квазикристаллического приближения, приближения среднего поля и мультипольного разложения полей и функции Грина по векторным сферическим волновым функциям.



Рис. 1. Монослой сферических частиц в поглощающей среде (матрице) и геометрия освещения и регистрации рассеянного света, (а) – вид под углом к слою, (b) – вид вдоль плоскости монослоя. m_h и m_p – комплексные показатели преломления матрицы и частиц, \mathbf{R}_j – радиус-вектор центра *j*-й частицы относительно начала координат O, находящегося в центре произвольно выбранной частицы, $\hat{\mathbf{r}}_0$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}_0$, $\hat{\boldsymbol{\varphi}}_0$ и $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, $\hat{\boldsymbol{\varphi}}$ – единичные векторы, определяемые направлениями волновых векторов падающей, $k_h \hat{\mathbf{r}}_0$, и рассеянной, $k_h \hat{\mathbf{r}}$, волн, θ_0 и θ – полярные углы волнового вектора падающей и рассеянной волн, \mathbf{r} – радиус-вектор точки наблюдения, T_c и R_c – коэффициенты когерентного пропускания и отражения выделенного слоя среды толщины L, содержащего монослой частиц с диаметром D. I_{inc} – интенсивность некогерентно рассеянного излучения.

Получены формулы для описания углового распределения рассеянного излучения $I_{inc}^{rd}(\hat{\mathbf{r}}) = I_{inc,0}^{rd}(\hat{\mathbf{r}})e^{-2xq\beta_h(1/\mu_0+1/|\mu|)}$, коэффициентов когерентного пропускания $T_c = T_{c,0} e^{-4xq\beta_h/\mu_0}$ и отражения $R_c = R_{c,0}e^{-4xq\beta_h/\mu_0}$, некогерентного рассеяния $F_{inc} = \int d\varphi \int I_{inc}^{rd}(\hat{\mathbf{r}}) \sin \theta d\theta$, поглощения $A=1-T_c-R_c-F_{inc}$ слоя среды толщины L (Рис. 1), содержащего монослой, где

$$I_{inc,0}^{rd}(\mathbf{r}) = \frac{16\pi\eta S_2 SE_0^2}{x^2(1+\beta_h^2)r^2} \left\{ \left| \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} \alpha_{ml} \begin{bmatrix} i\varepsilon_{\varphi} \sin(m\varphi)a_{ml}(\mu) \\ +\varepsilon_{\theta} \cos(m\varphi)b_{ml}^+(\mu) \end{bmatrix} \right|^2 + \left| \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} \alpha_{ml} \begin{bmatrix} i\varepsilon_{\theta} \sin(m\varphi)c_{ml}(\mu) \\ +\varepsilon_{\varphi} \cos(m\varphi)d_{ml}^+(\mu) \end{bmatrix} \right|^2 \right\}, \quad (1)$$

$$\Gamma_{c,0} = \left| \varepsilon_{\theta} \left\{ 1 - \frac{8\pi\eta}{x^{2}(1+i\beta_{h})^{2}\mu_{0}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} \alpha_{ml} \left[m\pi_{l}^{(m)}(\mu_{0})d_{mlM}^{(o)} + \tau_{l}^{(m)}(\mu_{0})d_{mlE}^{(e)} \right] \right\}^{2},$$

$$+ \left| \varepsilon_{\varphi} \left\{ 1 - \frac{8\pi\eta}{x^{2}(1+i\beta_{h})^{2}\mu_{0}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} \alpha_{ml} \left[m\pi_{l}^{(m)}(\mu_{0})d_{mlE}^{(o)} + \tau_{l}^{(m)}(\mu_{0})d_{mlM}^{(e)} \right] \right\}^{2},$$
(2)

$$R_{c,0} = \left| \frac{\varepsilon_{\theta} 8\pi \eta}{x^{2} (1+i\beta_{h})^{2} \mu_{0}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} (-1)^{l-m} \alpha_{ml} \left[m \pi_{l}^{(m)}(\mu_{0}) d_{mlM}^{(o)} - \tau_{l}^{(m)}(\mu_{0}) d_{mlE}^{(e)} \right]^{2}; \qquad (3)$$
$$+ \left| \frac{\varepsilon_{\varphi} 8\pi \eta}{x^{2} (1+i\beta_{h})^{2} \mu_{0}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} (-1)^{l-m} \alpha_{ml} \left[m \pi_{l}^{(m)}(\mu_{0}) d_{mlE}^{(o)} - \tau_{l}^{(m)}(\mu_{0}) d_{mlM}^{(e)} \right]^{2}; \qquad (3)$$

а также коэффициента поглощения частиц А_р монослоя

$$A_{p} = -\frac{2\eta n_{h} e^{-2x\beta_{h}q/\cos\theta_{0}}}{x^{2}\cos\theta_{0}} \operatorname{Re}\left[\frac{i}{m_{p}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{l} \frac{l(l+1)(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \left\{ \begin{bmatrix} \left|a_{mlM}^{(e)}\right|^{2}(1+\delta_{0m}) + \left|a_{mlM}^{(o)}\right|^{2}(1-\delta_{0m})\right] \widetilde{\psi}_{l}^{*} \widetilde{\psi}_{l}^{*} \end{bmatrix} \right]$$
(4)

и среды $A_h=A-A_p$, в которой они расположены. В (1)-(4) q=L/D, $\mu=\cos\theta$, $\mu_0=\cos\theta_0$, $\beta_h=\kappa_h/n_h$, η – фактор заполнения монослоя, $x=\pi Dn_h/\lambda$ – параметр дифракции частицы, λ и ε_{θ} , ε_{φ} – длина и компоненты вектора поляризации падающей волны, $r=|\mathbf{r}|$, S₂ и S – структурный фактор и площадь монослоя, "видимая" приёмником, $\pi_l^{(m)}$, $\tau_l^{(m)}$ – угловые функции, ψ_l , $\tilde{\psi}_l$ – функции Риккати-Бесселя, коэффициенты $a_{ml}(\mu)$, $c_{ml}(\mu)$, $b_{ml}^+(\mu)$, $d_{mlM(E)}^+$ находятся через коэффициенты $d_{mlM(E)}^{(e,o)}$ [5], входящие в (2), (3).

Приведены данные расчета распределения поглощённого излучения между монослоем частиц и средой. Результаты работы могут быть использованы для разработки и оптимизации устройств на основе монослоёв частиц: химических фотореакторов, солнечных элементов, светодиодов и т.д.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проект Ф23КИ-020).

- N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Incoherent component of light scattered by a monolayer of spherical particles: analysis of angular distribution and absorption of light, JOSA A 35, 108–118 (2018).
- [2] N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Scattering and Absorption of Light by a Monolayer of Spherical Particles under Oblique Illumination, JETP 131, 227-243 (2020).
- [3] N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Polarization of light scattered by a twodimensional array of dielectric spherical particles, JOSA B 38(9), C22-C32 (2021).
- [4] N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, "Absorption of diffuse light by 2D arrays of spherical particles," J. Quant. Spectr. Rad. Transf. 289, 108291-1-9 (2022).
- [5] N. A. Loiko, A. A. Miskevich, V. A. Loiko, Optical characteristics of a monolayer of identical spherical particles in an absorbing host medium, JOSA A 40, 682-691 (2023).

УДК 535.14

А. Б. Михалычев, К. И. Жевно, С. В. Власенко, Д. С. Могилевцев

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ РАЗРЕШЕНИЯ ФЛУКТУАЦИОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.mikhalychev@ifanbel.bas-net.by

Разрешение оптических микроскопов ограничено дифракцией света [1], препятствующей анализу деталей, существенно меньших длины волны. В то же время применение именно оптических технологий обладает рядом преимуществ при изучении биологических объектов: относительной простотой измерения, высокой скоростью накопления данных и пренебрежимо малым разрушающим воздействием при не слишком высоких интенсивностях излучения. Был предложен ряд сверхразрешающих методик, позволяющих преодолеть классический предел разрешения и обеспечить наблюдение микрообъектов размером до десятков нанометров в видимом свете. Сверхразрешение может достигаться за счет выборочного возбуждения или подавления флюоресцирующих (STED-микроскопия маркеров [2] микроскопия И структурированного излучения [3]), последовательной локализации отдельных излучателей благодаря их раздельному наблюдению (STORM [4], PALM [5] и DNA-PAINT-микроскопия [6]), а также квантовых корреляций фотонов [7]. Важную роль играют методы, использующие особенности временной статистики излучателей (антигруппировку излучаемых фотонов [8] стохастические И флуктуации интенсивности излучения [9]) и основанные на постобработке регистрируемых изображений. Последняя группа подходов комплементарна по отношению к другим методам повышения разрешения: постобработка сигнала обеспечивает дополнительное повышение разрешения по сравнению с его величиной для данной измерительной установки без постобработки данных.

Идея сверхразрешающей оптической флуктуационной микроскпии (СОФМ, англ. SOFI) состоит в построении кумулянтных изображений на основе детектируемой последовательности кадров: расчета автокумулянтов отдельных пикселей матричного детектора и перекрестных кумулянтов для групп пикселей на основе получаемых временных рядов для интенсивности излучения. Благодаря математическим свойствам кумулянтов и независимости флуктуаций флюоресцентных маркеров изображение в СОФМ определяется вкладами отдельных излучателей и обладает более высокой резкостью и пространственным разрешением, чем традиционно детектируемое распределение интенсивности. Логика первых работ [9] в области СОФМ указывала на возможность неограниченного прироста разрешения при увеличении порядка рассчитываемых кумулянтов. Позже на основе упрощенных моделей было показано [10,11], что достижимый прирост разрешения ограничен неизбежными статистическими шумами; существует оптимальный порядок, максимизирующий информативность кумулянтных изображений; а совместный анализ кумулянтных изображений нескольких порядков может давать дополнительные преимущества.

Поскольку оптимальная (наиболее информативная) комбинация кумулянтных изображений нетривиальным образом зависит от геометрии исследуемого образца, необходим быстрый и эффективный метод ее нахождения. В представленной работе данная задача решена без использования дополнительных допущений, применявшихся в работах [10,11]. На первом этапе исследования разработан метод расчета матрицы информации Фишера для кумулянтых изображений в реалистичной модели СОФМ. Оптимальной считается комбинация кумулянтных изображений, максимизирующая суммарную информацию о положениях излучателей. Затем была построена искусственная нейронная сеть (5-слойный перцептрон), принимающая на вход излучения распределение интенсивности И предсказывающая оптимальную комбинацию кумулянтов. Обучение сети на данных, рассчитанных на основе информации Фишера, обеспечило выбор наиболее информативной комбинации в 68% случаев с отклонением информации выбранного решения не более, чем на 25%, от оптимального в остальных случаях. Предложенный тандемный подход на основе информации Фишера и машинного обучения способен обеспечить высокие точность и скорость принятия решений при анализе быстрых процессов в живых клетках.

- [1] Abbe, E. Beiträge zur Theorie des Mikroskops und der mikroskopischen Wahrnehmung / E. Abbe // Archiv für mikroskopische Anatomie. 1873. Jg. 9, Nr. 1. S. 413.
- [2] Hell, S. W. Breaking the diffraction resolution limit by stimulated emission: stimulatedemission-depletion fluorescence microscopy / S. W. Hell, J. Wichmann // Optics Letters. -1994. - Vol. 191. - P. 780.
- [3] Superresolution via structured illumination quantum correlation microscopy / A. Classen, J. von Zanthier, M. O. Scully, [et al.], // Optica. 2017. Vol. 4. P. 580.
- [4] Hess, S. T. Ultra-high resolution imaging by fluorescence photoactivation localization microscopy / S. T. Hess, T. P. K. Girirajan, M. D. Mason // Biophysical Journal. – 2006. – Vol. 91. – P. 4258.
- [5] Rust, M. J. Sub-diffraction-limit imaging by stochastic optical reconstruction microscopy (STORM) / M. J. Rust., M. Bates, X. Zhuang // Nature Methods. – 2006. – Vol. 3. – P. 793.
- [6] Super-resolution microscopy with DNA-PAINT / J. Schnitzbauer, M. T. Strauss, T. Schlichthaerle, F. Schueder, [et al.] // Nature Protocols. 2017. Vol. 12. P. 1198.
- [7] Sub-Rayleigh-diffraction-bound quantum imaging / V. Giovannetti, S. Lloyd, L. Maccone, [et al.] // Physical Review A. - 2009. - Vol. 79, no. 1. - P. 013827.
- [8] Superresolution microscopy with quantum emitters / O. Schwartz, J. M. Levitt, R. Tenne, [et al.] // Nano Letters. - 2013. - Vol. 13, no. 12. - P. 5832.
- [9] Fast, background-free, 3D super-resolution optical fluctuation imaging (SOFI) / T. Dertinger, R. Colyer, G. Iyer, [et al.] // PNAS. 2009. Vol. 106, no. 52. P. 22287.
- [10] Optimal correlation order in superresolution optical fluctuation microscopy / S. Vlasenko, A. B. Mikhalychev, I. L. Karuseichyk, D. A. Lyakhov, D. L. Michels, D. Mogilevtsev // Physical Review A. 2020. Vol. 102. P. 063507.
- [11] Kurdziałek, S. Super-resolution optical fluctuation imaging fundamental estimation theory perspective / S. Kurdziałek., R. Demkowicz-Dobrzański //Journal of Optics. – 2021. – Vol. 23, no. 7. – P. 075701.

УДК 535.3; 535:530.182

Д. В. Новицкий

ВИРТУАЛЬНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И УСИЛЕНИЕ В РЕЗОНАНСНЫХ СРЕДАХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь d.novitsky@ifanbel.bas-net.by

Виртуальное поглощение и усиление – это явления, имитирующие реальное поглощение и усиление света средой при использовании излучения с экспоненциально изменяющейся во времени огибающей. Для объяснения этих явлений удобно использовать представление о нулях и полюсах матрицы рассеяния [1], которые можно ассоциировать с ситуациями полного поглощения и лазерной генерации излучения соответственно. В общем случае эти ситуации наблюдать затруднительно, поскольку нули и полюса возникают на комплексных частотах. Концепция виртуального поглощения, впервые представленная в работе [2], подразумевает, что характерное время экспоненциального роста огибающей подбирается равным обратному значению мнимой части частоты нуля матрицы рассеяния, позволяя имитировать полное поглощение излучения. В действительности излучение не поглощается, а запасается в среде и высвобождается при прекращении экспоненциального роста огибающей. При виртуальном усилении, напротив, излучение экспоненциально затухает, что позволяет задействовать полюс матрицы рассеяния и наблюдать возрастание интенсивности света вдоль направления его распространения [3].

В настоящей работе концепция виртуального поглощения и усиления обобщается на случай резонансных двухуровневых сред. Взаимодействие излучения с такими средами описывается уравнениями Максвелла–Блоха, дающими самосогласованную картину изменения электромагнитного поля и переменных среды (населённостей уровней и микроскопической поляризации). Численное решение этих уравнений для экспоненциально растущей и затухающей огибающих позволяет сделать вывод о возможности наблюдения и особенностях виртуального поглощения и усиления в резонансных средах.

Для излучения с экспоненциально нарастающей огибающей исследована динамика виртуального поглощения в резонансно поглощающей среде. Показано, что при виртуальном поглощении происходит слабое возбуждение среды. Рассчитаны профили интенсивности излучения, выходящего из среды после резкого выключения падающего сигнала и проведено сравнение со случаями, отклоняющимися от условия нуля рассеяния (рисунок 1(a)). При этом в спектрах вышедшего из среды излучения наблюдается характерный провал на резонансной частоте, обусловленный поглощением света (рисунок 1(б)). Виртуальное поглощение сохраняется и в резонансной усиливающей среде, при этом основная часть энергии, накачанной в среду, испускается в виде отдельного импульса, длительность и момент испускания которого зависят от параметров исходного сигнала.

Для экспоненциально быстро выключаемого излучения динамика взаимодействия со слоем резонансно поглощающей среды в силу ее нелинейности сильно зависит от интенсивности излучения [4]. В случае низкоинтенсивного излучения наблюдается характерная картина виртуального усиления, выраженность которого зависит от времени затухания поля. Время затухания должно быть много короче обратного значения мнимой части частоты полюса и времени релаксации поляризации.



Рисунок 1 – Профили интенсивности (а) и соответствующие спектры (б) излучения, прошедшего через слой резонансной среды, при различных значениях времени экспоненциального роста огибающей т. Нулю матрицы рассеяния соответствует случай т=1/70 пс.

В случае излучения высокой интенсивности виртуальное усиление отсутствует, если выключение поля происходит после достижения средой насыщенного состояния, но может наблюдаться в нестационарном режиме с эффективностью, зависящей от момента выключения [4]. При этом существенно зависят от интенсивности и спектры излучения, проходящего через среду. При виртуальном усилении и при взаимодействии с усиливающей средой наблюдается существенное сужение спектра, которое не имеет места в режиме насыщения.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант №Ф22ТУРЦ-001).

- Krasnok A. Anomalies in light scattering / A. Krasnok, D. Baranov, H. Li, M.-A. Miri, F. Monticone, A. Alú // Adv. Opt. Photon. 2019. V. 11. P. 892.
- [2] Baranov D. G. Coherent virtual absorption based on complex zero excitation for ideal light capturing / D. G. Baranov, A. Krasnok, A. Alú // Optica. 2017. V. 4. P. 1457.
- [3] Li H. Tunable virtual gain in resonantly absorbing media / H. Li, A. Mekawy, A. Krasnok, A. Alú // Phys. Rev. Lett. – 2020. – V. 124. – P. 193901.
- [4] Novitsky D. V. Tunable virtual gain in resonantly absorbing media / D. V. Novitsky // Phys. Rev. A. – 2023. – V. 107. – P. 013516.

УДК 535.3; 535.375.5:621.375.8; 535:530.182:621.372.632 В. А. Орлович¹, А. И. Водчиц¹, И. А. Ходасевич¹, А. Ю. Пятышев², А. В. Скрабатун², А. А. Русак¹

ПИКОСЕКУНДНЫЙ ВКР-ЛАЗЕР НА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СМЕСИ LiOH И Sr(NO₃)₂

¹ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>v.orlovich@dragon.bas-net.by</u> ²Физический институт им. П.Н. Лебедева, Ленинский пр., 53, Москва, Россия <u>jb_valensia@mail.ru</u>

Шумовые лазеры (лазеры на разупорядоченных средах) в последние годы привлекают значительное внимание исследователей, что обусловлено возможностями их применения в микроэлектронике, медицинской диагностике и других сферах [1]. К настоящему времени генерация в таких лазерах реализована в различных неорганических И органических материалах. Традиционно шумовые лазеры генерируют спектрально широкополосное излучение, что ограничивает ИХ практическое применение. Этого недостатка лишены шумовые лазеры, основанные на эффекте вынужденного комбинационного рассеяние (ВКР) (ВКР-лазеры), в которых в зависимости от выбранных сред ширина спектра излучения может составлять 1-10 см⁻¹, а генерация может возникать одновременно на нескольких стоксовых и антистоксовых линиях [2].

В настоящей работе мы исследовали процесс ВКР в твердой бинарной поликристаллической смеси LiOH и Sr(NO₃)₂. Выбор составляющих бинарной смеси был обусловлен тем, что для LiOH в спектре спонтанного КР проявляется дыхательная мода с аномально большим частотным сдвигом ~ 3664 см^{-1} , а в Sr(NO₃)₂, напротив, имеется высокоинтенсивная мода, обусловленная полносимметричными внутренними колебаниями группы NO₃ с частотой вблизи 1057 см⁻¹ [3]. В результате создаются условия для получения на такой смеси генерации на нескольких линиях в достаточно широком спектральном диапазоне. Размеры частиц в смеси составляли 5-10 мкм. Смесь содержала 50 % LiOH и 50 % Sr(NO₃)₂ по объему.

Для возбуждения ВКР использовалось излучение второй гармоники (532 нм) пикосекундного (60 пс) Nd:YAG лазера. Измерялись спектры ВКР указанной смеси со спектральным разрешением приблизительно 1 нм. Оценивалась также интегральная мощность преобразованного посредством ВКР излучения. Подробно методика измерений описана в нашей работе [2].

На рисунке приведен спектр ВКР смеси при возбуждении фокусированным излучением с диаметром фокального пятна 50 мкм на поверхности смеси при энергии 11.3 мДж (интенсивность излучения 9×10¹² Вт/см²). Порог возбуждения ВКР в смеси достигался при энергии импульсов 0.3 мДж. Вблизи порога генерируются только две стоксовые линии на колебании 1095 и 3680 см⁻¹. При максимальной энергии импульсов 11.3 мДж в спектре излучения ВКР проявляются четыре линии в длинноволновой (по отношению к длине волны возбуждающего излучения) области спектра,

соответствующие первой стоксовой компоненте на дыхательной моде LiOH со сдвигом 3670 см⁻¹ и трем стоксовым компонентам (1064, 2129, 3183 см⁻¹), относящимся к колебанию группы NO₃ нитрата стронция. В коротковолновой области спектра генерируются первые антистоксовые компоненты со сдвигами 3665 и 1060 см⁻¹, соответствующие указанным выше полносимметричным модам LiOH и Sr(NO₃)₂. Кроме того, в спектре в длинноволновой области присутствуют две слабые линии со сдвигами 2432 см⁻¹ (611 нм) и 3919 см⁻¹ (672 нм), относящиеся к энергетическим



переходам в атомах лития.

Рисунок 1. Спектр ВКР смеси LiOH и $Sr(NO_3)_2$.

Таким образом, при возбуждении ВКР в поликристаллической смеси LiOH и Sr(NO₃)₂ пикосекундным излучением с длиной волны 532 нм генерируются шесть спектральных компонент, расположенных в диапазоне 446 – 662 нм. По оценкам, интенсивности в линиях преобразованного излучения могут более чем на порядок превышать интенсивности, возникающие вследствие спонтанного КР. Следовательно, исследованная поликристаллическая смесь может быть использована для создания многочастотных пикосекундных источников излучения ультрафиолетового-видимого диапазонов спектра.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку работы Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований РФФИ (проект №Ф21РМ-021).

- [1] Cao H. Lasing in random media. / H. Cao // Waves Random Media. 2003. V. 13. P. R1-R39.
- [2] Pyatyshev A. Yu. Picosecond Raman random lasing in the spectral range of 360-630 nm using powders of potassium, sodium and strontium nitrates. / A. Yu. Pyatyshev, A. V. Skrabatun, A. I. Vodchits, A. V. Larkina, I. A. Khodasevich, V. A. Orlovich // Laser Phys. Lett. - 2023. - V. 20. - 025401 (5pp).
- [3] Каминский А. А. Нитраты Sr(NO₃)₂ и CsNO₃ (II) новые χ⁽³⁾ и χ⁽²⁾ нелинейноактивные кристаллы: многокомпонентное вынужденное комбинационное рассеяние и генерация второй гармоники. / А. А. Каминский, Й. Хуллигер, Г. Эйхлер, Ю. Финдайзен, Ф. Эттер // ДАН. – 1990. – Т. 364, № 6. – С. 761-765.

УДК 535.5

А. И. Конойко, В. М. Кравченко, А.С. Кузьмицкая

СПЕКТРАЛЬНОЕ УПЛОТНЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ В ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОМ КАНАЛЕ НА БАЗЕ РЕЗОНАТОРОВ ФАБРИ-ПЕРО

ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>mickevichhanna@gmail.com</u>

Введение. В данной работе описан метод высокоэффективной амплитудной модуляции излучения на базе параллельных каналов модуляции, каждый из которых состоит из последовательности из N резонаторов Фабри-Перо. Данный метод позволяет преодолеть ограничение, накладываемое параметрами канала управления, и получить модуляцию оптического излучения существенно повышающую информационную плотность оптических сигналов по сравнению с другими модуляторами при той же частоте управляющего электрического поля.

Материалы и методы. Данный метод основан на спектральном уплотнении выходного сигнала путем модуляции в параллельных каналах светового излучения, соответствующего разным неперекрывающимся участкам спектра с их последующим суммированием. Каждый канал модуляции образован последовательностью из N резонаторов Фабри-Перо, причём один из резонаторов задает диапазон спектра модулируемого каналом сигнала, а остальные реализуют основной процесс модуляции, что позволяет за счет нелинейности светомодуляционной характеристики существенно излучения получаемых оптических сигналов. уменьшить спектр Получение необходимого спектрального диапазона излучения в каждом канале модуляции можно реализовать как за счет использования индивидуальных источников излучения (рисунок 1а), так и за счет спектрального распараллеливания входного излучения путём использования в последующих каналах модуляции излучения, отражённого из предыдущего канала (рисунок 1б).



Рисунок 1 – Оптические схемы модулятора с параллельными каналами при использовании а – индивидуальных источников излучения; б –излучения отражённого от предыдущих резонаторов

В каждом канале модуляции оптическая база всех резонаторов Δ_i , где *i* – номер канала модуляции; должна быть одинаковой и увеличена на некоторую величину $\delta\Delta$ относительно оптической базы резонаторов предыдущего канала таким образом, чтобы их спектры пропускания не перекрывались (рисунок 2), где показаны спектральные характеристики коэффициентов пропускания одиночных резонаторов Фабри-Перо в разных каналах модуляции $T_i(\lambda)$ при отсутствии управляющего воздействия. Это может быть достигнуто как за счет изменения геометрической базы резонаторов, так и за счет управляемого изменения показателя преломления вследствие приложения к их управляющим электродам постоянного электрического напряжения.



Рисунок 2 – Спектральные характеристики коэффициентов пропускания одиночных резонаторов Фабри-Перо в разных каналах модуляции $T_i(\lambda)$ при отсутствии управляющего воздействия

Расчеты показали (рисунок 2), что ширина спектра излучения одиночного сигнала на выходе последовательности из 2-х резонаторов Фабри-Перо по уровню 2% фона позволяет сформировать 4 параллельных канала модуляции, что позволяет в 4 раза увеличить информационную плотность выходных оптических сигналов.

Результаты и выводы. Согласно расчётам, спектральный диапазон излучения на выходе последовательности из двух резонаторов Фабри-Перо по уровню фона 2 % позволяет сформировать четыре автономных параллельных каналов модуляции, что позволяет в 4 раза увеличить информационную плотность выходного сигнала.

В итоге была осуществлена разработка и исследование систем электрооптических модуляторов для высокоскоростных линий оптической связи на базе управляемых резонаторов Фабри-Перо, которые позволяют существенно уменьшить величину управляющих напряжений и повысить частоту модулируемых оптических сигналов при одновременном повышении стабильности их амплитудно-фазовых характеристик.

- [1] Пилипович, В.А. Метод стабилизации светомодуляционных характеристик электрооптического модулятора Фабри-Перо для широкополосного излучения / В.А. Пилипович [и др.] // Проблемы физики, математики и техники. – 2014 – №4. – С. 30-35.
- [2] Конойко, А.И. Амплитудная электрооптическая модуляция излучения последовательностями резонаторов Фабри-Перо / А.И. Конойко [и др.] // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук. 2020. Т. 56, № 2. С. 217–223

УДК 535.3, 534.1

И. А. Тимощенко, О. Г. Романов

АКУСТО-ФОТОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СВЕРХБЫСТРОЙ МОДУЛЯЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь timoshchenkoia@bsu.by, romanov@bsu.by

Распространение акустических волн может приводить к изменению определенных характеристик оптических устройств, что позволяет манипулировать распространением света в них. В данной работе исследуется следующая акустооптическая система (рис. 1).



Рис. 1. Принципиальная схема акустооптической системы.

На алмазной подложке расположен одномерный фотонный кристалл, состоящий из чередующихся слоев SiO₂/TiO₂. С другой стороны алмаза сформирован слой графита, обладающего высоким коэффициентом поглощения. При облучении графита пикосекундным лазерным импульсом в нем происходит быстрое тепловыделение, приводящее к формированию импульса давления, который, распространяясь в структуре, приводит к изменению толщин слоев фотонного кристалла. Последнее является причиной изменения коэффициента отражения $R(\omega)$ со временем, и на границах запрещенной зоны, где $dR(\omega)/d\omega$ велико, указанное изменение может быть весьма значительным. Таким образом можно провести частотную модуляцию пробного пучка, падающего на фотонный кристалл.

Формирование и распространение акустического импульса моделировалось на основе уравнений движения сплошной среды с использованием подхода Лагранжа [1]:

$$\rho \frac{\partial x}{\partial a} = \rho_0, \qquad \rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial P}{\partial a}, \qquad \frac{\partial x}{\partial t} = u_t$$

где x и a – переменные Эйлера и Лагранжа, u – скорость, P – давление, ρ и ρ_0 – текущая и начальная плотность. В качестве уравнения состояния использовалось уравнение Ми – Грюнайзена:

$$P = \rho_0 u_0^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \Gamma \rho C_V (T - T_0),$$

а закон сохранения энергии был приведен к виду уравнения теплопроводности:

$$\rho C_V \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial a^2} + Q(a,t) + \Gamma C_V (T - T_0) \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Здесь u_0 – скорость звука, Γ – коэффициент Грюнайзена, T – температура среды, k – коэффициент теплопроводности, C_v – удельная теплоемкость при постоянном объеме, Q(a,t) – объемная мощность тепловых источников. Данная система уравнений решалась численно методом конечных разностей. Вычисление коэффициента отражения от многослойной структуры проводилось при помощи ковариантного подхода, описанного, например, в работе [2].

Например, если акустический импульс возбуждается в 25 нм слое графита, расположенным на 475 нм алмазной подложке, лазерным импульсом длительностью 10 пс, то коэффициент отражения одномерного фотонного кристалла, состоящего из 30 повторяющихся слоев SiO₂/TiO₂ толщиной 153 нм и 179 нм соответственно ведет себя так, как показано на рис. 2.



Рис. 2. Спектральная (а) и временная (б) зависимость относительного изменения коэффициента отражения пробного пучка.

Спектральная зависимость $\Delta R / R$ взята в момент времени 548 пс, а временная соответствует длине волны 839 нм. Видно, что $\Delta R / R$ может достигать значений в несколько десятых для длин волн, соответствующих краям запрещенной зоны, а временная зависимость характеризуется частотой 20 ГГц, что соответствует времени распространения акустического сигнала в области графит/алмаз, а частота 1 ГГц определяется скоростью прохождения акустического импульса в фотонном кристалле.

Таким образом, в работе исследуются закономерности преобразования спектров отражения одномерных фотонных структур в зависимости от характеристик возбуждаемых акустических импульсов.

Исследования выполнены в рамках ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.17. «Моделирование и разработка методов интегрирования графеноподобных материалов в фотонные и оптоэлектронные наноструктуры для управления оптическим излучением».

- [1] Romanov, O. Numerical simulation of photoacoustic effect in one-dimensional carbon nanostructures. / O. Romanov, I. Timoshchenko // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2022. – Vol. 25, No. 4. – P. 341.
- [2] Borzdov G. N. Frequency domain wave-splitting techniques for plane stratified bianisotropic media. / G. N. Borzdov // J. Math. Phys. – 1997. – Vol. 38, No. 12. – P. 6328.

УДК 535.34

А. Л. Толстик

ДИНАМИЧЕСКАЯ ГОЛОГРАФИЯ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь tolstik@bsu.by

Работы в области голографии в нашей республике были инициированы Б.И.Степановым в середине 60-х годов, когда в Институте физики АН БССР была создана научная группа по оптической голографии, которую возглавил А.С.Рубанов. Первые шаги были сделаны за счет переноса идей и методов традиционной (статической) голографии на процессы динамической записи и обработки световых полей в нелинейных средах. Основное внимание было обращено на подбор фоточувствительных сред. В 1970 году были выполнены первые работы по записи голограмм в растворах красителей, что привело к открытию нового физического явления – обращения волнового фронта (фазового сопряжения) световых волн при четырехволновом взаимодействии [1]. В последующем были развиты физические основы динамической голографии, установлена ее тесная связь с нелинейной оптикой и разработаны новые методы использования динамических голограмм для управления пространственной структурой световых пучков, оптической обработки и записи информации.

В представленном докладе проанализирована история возникновения и развития динамической голографии, выявлены новые направления практического использования результатов в науке и технике. Рассмотрение проведено как с позиции классической голографии, так и с использованием нелинейно-оптического подхода на основе схем многоволнового взаимодействия, реализуемого в условиях проявления нелинейностей третьего, пятого и более высоких порядков. Показана взаимосвязь брэгговской дифракции на отдельных компонентах динамической решетки с нелинейной оптической восприимчивостью соответствующего порядка [2].

Новое направление в области динамической голографии возникло при использовании для записи голограмм сингулярных световых пучков (оптических Проведенные теоретические И экспериментальные вихрей). исследования многоволновых взаимодействий в резонансных средах с участием сингулярных пучков продемонстрировали возможности использования сингулярных голограмм в системах управления пространственной и фазовой структурой лазерного излучения. При этом возможна реализация мультиплицирования топологического заряда при использовании различных порядков дифракции, а также частотного преобразования изображений, что перспективно для визуализации 3D изображений и пучков со сложной топологической структурой. Не менее перспективно использование таких пучков для кодирования информации при рассмотрении поляризации и топологического заряда светового пучка в качестве информационных параметров [3].

Дополнительные возможности открывает поляризационная запись динамических голограмм, при которой опорная и сигнальная волны поляризованы ортогонально. В

этом случае суммарная интенсивность остается постоянной, но имеет место пространственная модуляция поляризации света в соответствии с разностью фаз записывающих голограмму волн. Показана возможность записи поляризационных голограмм как за счет эффекта светоиндуцированной анизотропии поглощения, так и за счет зависимости интенсивности насыщения поглощения раствора красителя от поляризации лазерного излучения. Выявленные закономерности представляют интерес для реализации схем динамического фазово-поляризационного преобразования лазерных импульсов.

Особое внимание в настоящее время уделяется практическому использованию динамических голограмм для управления лазерными пучками и преобразования волнового фронта световых пучков в реальном времени, адаптивной интерферометрии и диагностики сред методом динамических решеток. Метод динамических решеток имеет важные особенности, использование которых дает ряд преимуществ по сравнению с другими оптическими методами диагностики. Показана возможность выделения различных механизмов нелинейности за счет изменения длины волны лазерного излучения и периода динамических решеток, а также измерения светоиндуцированного показателя нелинейной преломления И оптической восприимчивости. Продемонстрированы методики измерения параметров объемных и тонкопленочных полупроводников и активированных кристаллов (термооптический коэффициент, коэффициент температуропроводности, время жизни носителей заряда, время жизни возбужденного состояния и др.). При этом для люминесцирующих сред решается проблема вторичного поглощения спонтанно испущенных фотонов. Анализ теплового и термоупругого механизмов изменения показателя преломления позволяет выбрать атермальные направления, обеспечивающие компенсацию наведенной анизотропии в активированных кристаллах.

В заключение следует отметить, что за 50 лет своего развития динамическая голография прошла путь от первых экспериментов по записи динамических голограмм в растворах красителей к созданию устройств управления лазерными пучками и преобразования 3 D изображений в реальном времени. Широкое практическое использование получили методы бесконтактной диагностики светочувствительных сред на основе анализа процессов записи и релаксации динамических решеток (методы пространственно модуляционной спектроскопии), которые позволили измерить нелинейно-оптические, термооптические и кинетические параметры материалов, используемые в современной фотонике.

- [1] Степанов Б. И. О регистрации плоских и объемных динамических голограмм в просветляющихся веществах / Б.И. Степанов, Е.В. Ивакин, А.С. Рубанов // ДАН СССР 1971. Т. 196. –С. 567.
- [2] Rubanov A. S. Nonlinear formation of dynamic holograms and multiwave mixing in resonant media / A. S. Rubanov, A. L. Tolstik, S. M. Karpuk, O. Ormachea // Optics Communications – 2000. – Vol. 181. – P. 183.
- [3] Tolstik A. L. Singular dynamic holography // Russian Physics Journal. 2016. V. 58. – P. 1431.

УДК 533.9...1

Ф.М. Трухачев^{1,2,3}, Н.В. Герасименко¹, М.М. Васильев^{2,3}, О.Ф. Петров^{2,3}

Перенос вещества как фундаментальное свойство ионно-звуковых солитонов

¹Белорусско-Российский университет, проспект Мира, 43, 212000, Могилев, Республика Беларусь.

<u>ftru@mail.ru</u>

²Объединенный институт высоких температур РАН, 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2

mailto:gerasimenko_nikita@hotmail.com

³Московский физико-технический институт, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9. mixxy@mail.ru

Считается, что волны переносят энергию и импульс, но не переносят вещество. Недавние теоретические исследования свойств нелинейных волн показали, что они могут переносить вещество на конечное расстояние в выбранном направлении. В частности, в работах [1]-[6] было показано, что солитоны акустического типа в плазме могут переносить заряженные частицы на расстояния до нескольких радиусов Дебая (λ_D) в определенном направлении. Например, ионно-звуковые солитоны сжатия переносят ионы только в направлении своего движения, в то время как, солитоны разряжения переносят ионы в противоположном направлении. Дистанция переноса растет с ростом амплитуды солитона от нуля до десяти λ_D . В работах [5], [6] была исследована функция распределения ионов фоновой плазмы, возмущенная ионнозвуковым солитоном. Как оказалось, в области занятой солитонами функция распределения приобретала форму сходную с функцией распределения плазмы содержащей ионный пучок. Общий вид возмущенной функции распределения по скоростям для ионной компоненты показан на рисунке 1.



Рис. 1. Форма возмущенной ионной функции распределения по скоростям $f(v_i)$ (схематично). Невозмущенная функция $f(v_i)$ показана на вставке к рисунку.

После прохождения солитонов функция распределения приобретала начальную равновесную форму. Анализ полученных результатов (в частности, интегрирование функции распределения) показал, что солитоны индуцируют односторонний перенос ионной компоненты при любой амплитуде (даже при сколь угодно малой). Более того, для волн малой амплитуды удалось получить аналитическую формулу для описания возмущенной функции распределения и формально доказать, что перенос вещества является неотъемлемым свойством солитонов. Стоит отметить, что солитоны малой амплитуды хорошо описываются известным КдВ уравнением. Важно отметить, что при малых амплитудах волновых процессов они, как правило, линеаризуются, однако это не касается солитонов. В результате проведенного анализа показано, что линейная ионно-звуковая волна и ионно-звуковой солитон при одинаковой амплитуде отличаются, в том числе, наличием свойства переносить вещество, характерным для солитона. Как упоминалось выше, линейные волны переносят только энергию и импульс.

Полученные результаты имеют фундаментальное значение, кроме того они могут использоваться при интерпретации экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 19-12-00354.

- [1] Trukhachev F.M., Tomov A.V. Soliton-induced electric currents in plasma / F.M. Trukhachev, A.V. Tomov // Cosmic Res. 2016. V. 54. P. 351.
- [2] Trukhachev F.M., Tomov A.V., Mogilevsky M.M., Chugunin D.V. Electric Currents Induced in Plasma by Ion-Acoustic Solitons: Allowance for Trapped Electrons / F.M. Trukhachev, A.V. Tomov, M.M. Mogilevsky, D.V. Chugunin// Tech. Phys. Lett. – 2018. – V. 44. – P. 494.
- [3] Trukhachev F.M., Vasiliev M.M., Petrov O.F. Soliton Currents (Review) / F.M. Trukhachev, M.M. Vasiliev, O.F. Petrov // High. Temp. 2020. V. 58. P. 520.
- [4] Dubinov A.E., Lebedeva X.I. / A. E. Dubinov, X. I. Lebedeva Ambiplasma separation into matter and antimatter by a train of baryon-acoustic solitons in the problem of the baryon asymmetry of the Universe // Chaos, Solitons & Fractals. – 2021. – V. 152. – P. 111391.
- [5] Trukhachev F.M., Vasiliev M.M., Petrov O.F. Influence of Ion–Acoustic Solitons on Distribution Functions of Background Plasma / F.M. Trukhachev, M.M. Vasiliev, O.F. Petrov // Plasma Phys. Rep. – 2022. – V. 48 (10). – P. 1116.
- [6] Trukhachev F.M., Gerasimenko N.V., Vasiliev M.M., Petrov O.F. Unidirectional transport of ions and perturbation of plasma distribution functions by ion-acoustic solitons: Numerical simulation and analytical solution / F.M. Trukhachev, N.V. Gerasimenko, M.M. Vasiliev, O.F. Petrov // Physics of Plasmas. – 2023. – V.30. – P. 022113.

УДК 535.015, 535-15

Д. В. Ушаков¹, А. А. Афоненко¹, В.И. Гавриленко², Р.А. Хабибуллин³

Прогресс GaAs/AlGaAs квантово-каскадных лазеров терагерцового диапазона

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь, <u>ushakovdv@bsu.by</u>

²Институт физики микроструктур РАН, ул. Академическая, д. 7, 607680 Нижний Новгород, Россия

³Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники РАН, Нагорный пр., 7/5, 117105 Москва, Россия

Терагерцовый (ТГц, ν ~ 0.1–10 ТГц, λ ~ 300–30 мкм) диапазон частот остается недостаточно развитым в значительной степени из-за отсутствия лазерных источников излучения. На ТГц частотах многие молекулы и твердые тела имеют резонансные спектральные характеристики, что делает технологию ТГц диапазона важной как для науки, так и для коммерческих приложений, связанных со спектроскопией и потенциально визуализацией. Некоторые важные приложения включают дистанционное зондирование атмосферы Земли, астрономические исследования физики образования планет, звезд и галактик. Квантово-каскадные лазеры (ККЛ) [1-6], возможно, являются единственными твердотельными источниками ТГц излучения, которые могут обеспечивать средние уровни оптической мощности. ККЛ ТГЦ диапазона стали свидетелями быстрого развития с момента их первой демонстрации в 2002 году с диапазоном частот от 1.2 до 5.4 ТГц [1-6]. Рабочие температуры ТГц ККЛ непрерывно улучшались от 50 К до 250 К за счет оптимизации как активной области и числа квантовых ям (КЯ), так и за счет уменьшения потерь в двойном оптическом На рисунке 1 а суммированы достигнутые рабочие температуры волноводе. терагерцовых ККЛ с различными дизайнами. В 2012 г. [4] в структуре на основе GaAs/AlGaAs с 3-я КЯ в одном каскаде достигнута рабочая температура ~ 200 К в импульсном режиме. В 2019 г. [5] за счет усовершенствования методов моделирования ТГЦ ККЛ разработан ТГЦ ККЛ на 2-х КЯ, работающих при термоэлектрическом охлаждении при 210.5 [5]. Уже через год [6] за счет улучшения технологии роста, увеличения молевого состава барьерных слоев и оптимизации утечек из КЯ продемонстрирована рекордная генерация в области 250 К на частоте 3.94 ТГц.



(*a*) Прогресс достигнутых рабочих температур ККЛ ТГц диапазона для структур с фононным резонансом в импульсном (треугольники) и непрерывном (перевернутые треугольники) режимах, а также (*б*, *в*) диаграммы зоны проводимости и квадраты модулей волновых функций электронов для оптимизированных ТГц ККЛ

В работе на основе решения уравнения Шредингера с учетом дефазировки квантовых состояний, а также системы замкнутых балансных уравнений [7–9], проведено исследование зонных дизайнов ТГц ККЛ с активной областью на основе GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Предложены два новых дизайна лазерных переходов для увеличения выходной мощности и рабочей температуры ТГц ККЛ. Для увеличения выходной мощности предложен дизайн с двухфотонной схемой лазерных переходов и рабочей частотой около 3.8 ТГц (Рис. 1 δ), что обуславливает приблизительно в 2 раза более медленное падение нелинейного коэффициента усиления с ростом плотности фотонов. Для увеличения рабочих температур предлагается использовать слабо локализованные электронные состояния с волновыми функциями, простирающимися на два и более периода структуры (Рис. 1 ϵ). Показано, что в таких структурах сильно увеличивается матричный элемент дипольных переходов, а нижний лазерный уровень имеет больший энергетических зазор с инжектором, менее заселен и более температурно стабилен по сравнению с традиционными дизайнами. При этом расчетное значение максимальной рабочей температуры С50 К на частоте 4.2 ТГц.

- [1] Kohler, R. Terahertz semiconductor-heterostructure laser/ R. Kohler, A. Tredicucci, F. Beltram et al. //Nature. 2002. Vol. 417. P. 156–159.
- [2] Williams, B. S. Operation of terahertz quantum-cascade lasers at 164 K in pulsed mode and at 117 K in continuous-wave mode / B. S. Williams, S. Kumar, Q. Hu, and J. L. Reno // Opt. Express. – 2005. – V. 13, No. 9. – P. 3331–3339.
- [3] Kumar, S. 186 K operation of terahertz quantum-cascade lasers based on a diagonal design/ S. Kumar, Q. Hu, and J. L. Reno // Appl. Phys. Lett. – 2009. – Vol. 94. – P. 131105(1–3).
- [4] Fathololoumi, S. Terahertz quantum cascade lasers operating up to 200 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling / S. Fathololoumi, E. Dupont , C. W. I. Chan et al. // Optics Express. – 2012. – Vol. 20. – P. 3866–3876.
- [5] Bosco, M. Thermoelectrically cooled THz quantum cascade laser operating up to 210 K / L. Bosco, M. Franckie, G. Scalari et al. // Appl. Phys. Lett. – 2019. – Vol. 115, No. 1. – P. 010601(1–5).
- [6] Khalatpour, A. High-power portable terahertz laser systems/ A. Khalatpour, A.K. Paulsen, C. Deimert et al. // Nature Photon. 2021. Vol. 15. P. 16–20.
- [7] Ушаков, Д.В. Моделирование квантово-каскадных лазеров терагерцового диапазона частот методом балансных уравнений на основе базиса волновых функций со сниженными дипольными моментами туннельно-связанных состояний / Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, А.А. Дубинов и др. // Квантовая электроника. – 2019. – Т. 49, № 10. – С. 913 –918.
- [8] Ushakov, D. HgCdTe-based quantum cascade lasers operating in the GaAs phonon Reststrahlen band predicted by the balance equation method / D. Ushakov, A. Afonenko, R. Khabibullin, D. Ponomarev, V. Aleshkin, S. Morozov, and A. Dubinov // Opt. Express. – 2020. – V. 28, No. 17. – P. 25371 – 25382.
- [9] Ушаков, Д.В. Новые дизайны лазерных переходов в ТГц квантово-каскадных лазерах/ Д.В. Ушаков, А.А. Афоненко, Д.С. Пономарев и др.//Известия высших учебных заведений. Радиофизика. 2022. Т. 65, \No 5 6. С. 505 515.

УДК 530.182.1

О. Х. Хасанов¹, О. М. Федотова¹, А. С. Берестовский², Т. В. Смирнова², Г. А Русецкий¹

СОЛИТОНЫ В НАНОКОМПОЗИТАХ С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

¹ Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедения, ул. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь

<u>olkhas@mail.ru</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь smirnova@iseu.by

Полупроводниковые квантовые точки (КТ) благодаря уникальным нелинейно оптическим свойствам находят применение в оптоэлектронике, фотовольтаике, биологии и т.д. Кроме того, нанокомпозиты с полупроводниковыми квантовыми точками имеют большой потенциал для применения в нанофотонике, в частности, для параметрического преобразования частоты лазерного излучения.

В настоящей работе исследовались солитонные режимы распространения фемтосекундных лазерных импульсов В нанокомпозитах, содержащих полупроводниковые квантовые точки с постоянным дипольным моментом. Как показано в работе [1], постоянный дипольный момент (ПДМ) в квантовых точках А₂В₆ может достигать гигантских значений (порядка 10² – 10³ D). Предполагается, что несущая частота импульса света резонансная переходу между нижними экситонными состояниями. Моделирование распространения импульса проводится на основе самосогласованной системы уравнений Блоха-Максвелла, с учетом одно- и двухквантовых переходов между экситонными уровнями, штарковского смещения уровней, дисперсии групповой скорости, квадратичной и кубической оптической нелинейностей матрицы. Исследованы условия захвата солитонов в зависимости от локального поля и величины ПДМ. Показано, что задача может быть сведена к нахождению солитонных решений в рамках моделей ϕ^6 и ϕ^8 .

Численно установлено, что площадь полученных солитонов отличается от 2π , огибающая не совпадает с формой солитона самоиндуцированной прозрачности. Найденные солитоны являются фазово модулированными. Фаза таких импульсов нелинейно зависит от их интенсивности. Выявлены новые формы солитонов, среди них «платикон» (Рис.1), а также «солитон на пьедестале» (Рис.2). Обсуждаются прикладные аспекты полученных солитонных решений для возможных приложений, включая генерацию гармоник, в том числе параметрическую генерацию терагерцового излучения.



Рис.1. Солитон огибающей в форме платикона, полученный в рамках модели ϕ^6



 Warburton R. J. Giant permanent dipole moments of excitons in semiconductor nanostructures. / R. J. Warburton, D. Haft, C. Schäflein, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schoenfeld and P. M. Petroff // Phys. Rev. B.- 2002.- V. 65.- P. 2282. УДК 543.42.061, 543.42.062, 543.421/.424, 543.423 М. А. Ходасевич¹, Д. А. Королько¹, М. В. Бельков¹, К. Ю. Кацалап¹, П. С. Колодочка^{1,2}, П. А. Куликовская^{1,2}

КАЧЕСТВЕННЫЙ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

¹ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>m.khodasevich@dragon.bas-net.by</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Для повышения качества спектральных исследований в настоящее время часто применяются методы анализа многопараметрических данных, называемые также хемометрикой. Они базируются на формальной логике и используются для оптимального планирования эксперимента и получения максимального количества релевантной информации из экспериментальных данных. Многопараметрический спектральный анализ применяется как для количественной характеризации исследуемых образцов, так и для качественной - классификации или распознавания образов, которая, в свою очередь, подразделяется на обучение «с учителем» и «без учителя». Наиболее распространенным алгоритмом распознавания образов «без учителя» является метод главных компонент (PCA) [1], который основывается на предположении, что рассматриваемые явления зависят от дисперсии и ковариации данных. РСА преобразует исходное пространство спектральных переменных в маломерное пространство главных компонент, являющихся линейной комбинацией спектральных переменных и описывающих дисперсию данных в убывающем порядке. Для качественного анализа в пространстве главных компонент обычно применяются методы кластерного анализа. На примере иерархического кластерного анализа [2], являющегося видом обучения «без учителя», можно показать решение задачи классификации растительного сырья для производства рафинированного сахара по спектрам оптической плотности 25 % водных растворов 102 образцов сахара из 7 стран (Беларусь, Италия, Пакистан, Польша, Португалия, Румыния, Сербия). Целью этой работы являлась замена стандартного дорогостоящего и трудоемкого метода релаксометрии ядерного магнитного резонанса на сравнительно дешевый и простой многопараметрический спектральный анализ. Достигнутая точность классификации составляет 94 %. Типичным примером обучения «с учителем» является построение дерева принятия решений [3], с помощью которого была проведена классификация 82 полимеров шести видов по спектрам оптической плотности в диапазоне длин волн 1500-3100 нм с точностью 87 %. Эта задача связана с до сих пор не решенной проблемой вторичной переработки пластиков, требующей проведения их предварительной сортировки.

Количественные многопараметрические модели в спектральном анализе часто основываются на применении PCA или метода частичных наименьших квадратов (PLS) [4]. На основе данных лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (LIBS) низкого разрешения была проведена калибровка концентраций C, Mn, Si, Cr, Ni и Cu в эталонных образцах низколегированных сталей [5]. Применение метода PLS с выбором спектральных переменных оригинальным поиском комбинации движущихся окон при предварительной нормировке спектров на длине волны эмиссионной линии Fe II 252,0609 нм и коррекции базовой линии адаптивным методом наименьших квадратов со штрафом и итеративным пересчётом весов позволило построить калибровочные модели со следующими характеристиками: для C (в диапазоне концентраций до 0,7 %) величины среднеквадратичного и остаточного отклонения в проверочной выборке составили соответственно 0,04 % и 5, Mn (до 1,9 %) – 0,02 % и 25, Si (до 0,9 %) – 0,01 % и 13, Cr (до 1 %) – 0,01 % и 22, Ni (до 0,7 %) – 0,007 % и 23, Cu (до 0,5 %) – 0,006 % и 23. Модели являются количественными (остаточное отклонение > 3) для всех шести рассматриваемых элементов, несмотря на нестабильность перекрывающихся эмиссионных линий железа с линиями исследуемых примесей и добавок, и флуктуации интенсивности линий и непрерывного излучения, вызванные нестационарностью лазерно-искровой плазмы. В таких условиях наиболее ярко проявляются преимущества многопараметрического спектрального анализа над однопараметрическим, который не позволяет разработать калибровочные модели высокого качества с помощью методов классической спектроскопии с низким разрешением в компактных устройствах.



Рисунок 1 – Лучшая (слева, Mn) и худшая (справа, C) калибровки концентрации элементов в низколегированных сталях с помощью применения метода PLS к лазерноискровым эмиссионным спектрам в диапазоне 190-490 нм с разрешением 0,4 нм

- Esbensen K.H., Geladi P. Principal Component Analysis: Concept, Geometrical Interpretation, Mathematical Background, Algorithms, History, Practice // Comprehensive Chemometrics / ed.: S. Brown, R.Tauler, B. Walczak. – Elsevier, 2009. – P. 211–226.
- [2] Liao T.W. Clustering of time series data a survey // Pattern Recognition. –2005. Vol. 38. P. 1857–1874.
- [3] Brown S.D., Myles A.J. Decision Tree Modeling Comprehensive Chemometrics (Second Edition) / ed.: S. Brown, R. Tauler, B. Walczak. Elsevier, 2020. P. 625–659.
- [4] Geladi P., Kowalski B. Partial Least-Squares Regression: A Tutorial // Analytica Chimica Acta. – 1986. – Vol. 186. – P. 1–17.
- [5] Бельков М.В., Борисевич Д.А., Кацалап К.Ю., Ходасевич М.А. Многопараметрическая калибровка концентраций С, Мп, Si, Cr, Ni и Cu в низколегированных сталях методами лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии по необработанным спектрам с низким разрешением // ЖПС. – 2021. – Т. 88. – С. 737–742.

УДК 53

В. Н. Чижевский

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ШУМОВ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СИГНАЛОВ НА ЧАСТОТЕ БИЕНИЙ В БИСТАБИЛЬНОМ ЛАЗЕРЕ С БИГАРМОНИЧЕСКИМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь vnc@dragon.bas-net.by

Разработка методов детектирования слабых сигналов является актуальной задачей во многих областях физики и техники. В этом контексте, бистабильные системы могут использоваться в качестве детекторов слабых низкочастотных (НЧ) благодаря явлению вибрационного резонанса (ВР) [1,2], в котором отклик бистабильной или пороговой системы на действие подпорогового периодического возбуждения может быть значительно усилен дополнительным высокочастотным (ВЧ) периодическим сигналом.

В данной работе приведены результаты экспериментального и теоретического исследования влияния шума на отклик бистабильного вертикально-излучающего лазера (ВИЛ) на частотах биений при возбуждении двумя гармоническими сигналами с частотами f_1 и $f_2 = kf_1 + \delta$, где k = 1,2, ..., $\delta < f_1$, δ – частота отстройки от кратного числа f_1 , и шумом с нормальным распределением и нулевым средним. Подобный подход детектирования можно рассматривать как вибрационный резонанс на частоте биений. В этой работе основное внимание уделяется сравнению устойчивости детектирования с глабых подпороговых сигналов к действию шума на частоте биений δ , по отношению к классическому детектированию на частоте исследуемого сигнала f_1 , т.е. в рамках ВР.

Исследования проводились на экспериментальной установке, использованной ранее в [3]. Использовался бистабильный ВИЛ с пороговым током накачки j_{th} ≈5.6 мА, генерирующий в области 850 нм. С помощью полуволновой пластинки и призмы Глана. коллимированный пучок лазерного излучения разделялся на лве поляризационные компоненты, временное поведение, на одной из которых, регистрировалось быстродействующим фотодиодом и USB-осциллографом с частотой дискретизации 100 МГц и входной полосой пропускания 50 МГц. Два синусоидальных периодических сигнала от генераторов с различными частотами и амплитудами добавлялись в постоянный ток накачки *i*dc. Постоянный ток и амплитуды обоих периодических сигналов управлялись программно с компьютера.

В работе приведены экспериментальные результаты для случая k = 2, когда входной подпороговый сигнал действует на частоте f_1 , а управляющий сигнал - на частоте f_2 . В этом случае амплитуда сигнала A_2 является управляющим параметром. На рисунке 1 представлены результаты действия шума на отклик бистабильного ВИЛ на частоте биений δ (рисунок 1(a)) и частоте исследуемого сигнала f_1 (рисунок 1(б)). Отклик лазера определялся как амплитуда пика на частотах δ и f_1 в спектрах Фурье временных последовательностей. Действие шума приводит к уменьшению амплитуды отклика на спектральных компонентах δ и f_1 , уширению их зависимостей от амплитуды управляющего сигнала A_2 и смещению оптимального значения амплитуды A_2 в сторону меньших значений. Количественное сравнение действия шума на спектральные компоненты представлено на рисунке 2(a), где показаны максимальные значения



Рисунок 1 Отклик бистабильного ВИЛ на частотах (а) δ , (б) f1 для различных значений интенсивности добавленного шума σ^2 . Управляющий сигнал на частоте f_2 .

откликов ВИЛ (R_{δ}^{\max} и R_1^{\max}) от величины интенсивности добавленного шума σ^2 , нормированные на амплитуду отклика R_{δ} при $\sigma^2 = 0$. В определенном диапазоне интенсивности шума $R_{\delta}^{\max} > R_1^{\max}$, что может быть использовано для более эффективного детектирования подпороговых сигналов в бистабильных системах. При этом оптимальные значения амплитуды управляющего сигнала ($A^{opt}_{2,\delta}$ и $A^{opt}_{2;1}$), соответствующие максимальным значениям откликов немного различаются.



 $A_1 - 0.05$ мВ, $J_1 - 10$ кГ ц, $J_2 - 21$ кГ ц Рисунок 18 – (а) Максимальные значения амплитуды отклика ВИЛ на частотах $\delta(R_{\delta})$ и $f_1(R_1)$;

(б) оптимальные значения амплитуды управляющего сигнала А₂.

Таким образом исследование влияния шума на отклик ВИЛ показало, что в определенном диапазоне интенсивности шума метод детектирования на частоте биений может быть более эффективным по сравнению с традиционным методом ВР. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с численными результатами, полученными в рамках модели бистабильного передемпфированного осциллятора.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (договор № Ф22КИ-020).

- [1] Landa, P. S. Vibrational resonance / P. S. Landa, P. V. E. McClintock // J. Phys. A: Math. Gen. - 2000. - Vol. 33, no. 45. - Pp. L433–L438.
- [2] Chizhevsky, V.N. Experimental evidence of "vibrational resonance" in an optical system / V. N. Chizhevsky [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 220602.
- [3] Chizhevsky, V. N. Noise-induced suppression of nonlinear distortions in a bistable system with biharmonic excitation in vibrational resonance / V. N. Chizhevsky // Phys. Rev. E. – 2015. - Vol. 92. - P. 032902.
УДК 535:135; 621.378.325

В. М. Катаркевич, Т. Ш. Эфендиев

ВЛИЯНИЕ ПОРЯДКА БРЭГГОВСКОГО ОТРАЖЕНИЯ НА ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РОС-ЛАЗЕРА НА КРАСИТЕЛЯХ СО СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЙ РЕШЕТКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПРИ СУБНАНОСЕКУНДНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>katarkevich@dragon.bas-net.by</u>

Лазеры на красителях со светоиндуцированной (динамической) распределенной обратной связью (РОС) являются простыми, удобными и эффективными источниками узкополосного когерентного перестраиваемого по спектру излучения как наносекундной, так и субнаносекундной и пикосекундной длительности. Возбуждение активной среды таких РОС-лазеров, как правило, осуществляется с помощью двух интерферирующих пучков излучения с S-поляризацией (S – S накачка). При таких условиях имеет место пространственно-периодическая модуляция интенсивности поля накачки по длине активной среды, приводящая к формированию в ней амплитуднофазовой пространственной решетки. Наряду с этим генерация излучения на основе динамической РОС может быть получена и при однородной по длине активной среды интенсивности поля накачки, если обеспечено пространственно-периодическое изменение состояния его поляризации [1]. Последнее может быть достигнуто при возбуждении раствора красителя двумя сходящимися пучками излучения с ортогональной поляризацией (S – P накачка). При таких условиях, вследствие анизотропии поглощения и испускания света молекулами красителей, в активной среде РОС-лазера формируется динамическая решетка дихроизма усиления (поляризационная решетка).

Как известно, длина волны генерации РОС-лазера определяется выражением:

$$\lambda_{\epsilon} = 2dn_p/m,$$

где d – период пространственной решетки, n_p – показатель преломления раствора красителя, а m – порядок брэгговской дифракции, оказывающий существенное влияние на характеристики генерации. Как правило, в РОС-лазерах на красителях с динамической амплитудно-фазовой решеткой генерация осуществляется в первом порядке брэгговского отражения (m = 1). Это связано с тем, что именно при таких условиях пороговая энергия возбуждения РОС-лазера минимальна, а КПД генерации и диапазон перестройки максимальны. В полной мере сказанное относится и к РОСлазерам на красителях с динамической решеткой поляризации. Следует отметить, что во всех опубликованных работах, посвященных исследованию таких РОС-лазеров, включая изучение влияния порядка брэгговского отражения на их генерационные характеристики, в качестве источников возбуждения использовались наносекундные лазеры [1–3]. В отличие от всех известных работ нами впервые была получена и исследована генерация в РОС-лазере на красителях со светоиндуцированной решеткой поляризации, работающем в 1-м порядке брэгговского отражения, при его возбуждении излучением субнаносекундного твердотельного Nd:LSB микролазера с диодной накачкой [4, 5]. При таких условиях РОС-лазер демонстрировал характеристики, во многом сходные с характеристиками РОС-лазера на красителях традиционного типа (*S* – *S* накачка) [6]. Целью данной работы было исследование влияния порядка брэгговского отражения на генерационные характеристики такого РОС-лазера.

В настоящем докладе приведены результаты сравнительного экспериментального характеристик РОС-лазера исследования генерационных на красителях co светоиндуцированной решеткой поляризации, работающего в 1-м (m = 1) и 2-м (m = 2) порядках брэгговского отражения, при его возбуждении излучением второй гармоники $(\lambda_{H} = 532 \text{ нм})$ субнаносекундного $(\tau_{0.5} \approx 0.5 \text{ нc})$ твердотельного Nd:LSB микролазера с диодной накачкой STA 01SH-500 (Standa Ltd., Литва). Активной средой РОС-лазера служили этанольные растворы родамина 6Ж с концентрацией $C \approx 0.2$ ммоль/л. Длина зоны возбуждения раствора красителя составляла $L_{POC} = 7 - 10$ мм при высоте *h* ~ 0,1 мм. Измерения проводились на экспериментальной установке, аналогичной используемой в работах [4, 5]. Энергия (мощность) возбуждения РОС-лазера не превышала значения Е_н ~ 35 мкДж (Р_н ~ 70 кВт). При таких условиях диапазон перестройки длины волны генерации составил 546 – 584 нм и 551 – 570 нм для 1-го и 2го порядков, соответственно. Для указанных выше случаев в области максимума контура усиления красителя соответствующие значения пороговой энергии возбуждения (КПД генерации РОС-лазера) были равны $E_{\mu,nop} \sim 3.2$ мкДж ($\eta_{max} \sim 38$ %) и $E_{\mu,nop} \sim 11$ мкДж ($\eta_{max} \sim 7$ %) при ширине линии излучения $\Delta \lambda_{0.5} < 0,1$ нм. В то время как при работе РОС-лазера в 1-м порядке его излучение было практически деполяризованным (при $E_{H,max}$ степень поляризации P = 0, 1 - 0, 3), переход во 2-й порядок приводил к генерации излучения, поляризованного вертикально с Р ~ 1.

- Lo D. Distributed feedback laser action by polarization modulation / D. Lo, C. Ye, J. Wang // Appl. Phys. B. – 2003. – Vol. 76, No. 6. – P. 649–653.
- [2] Ye C. Polarization and threshold energy variation of distributed feedback lasing of oxazine dye in zirconia waveguides and in solutions / C Ye [et al.] // Appl. Phys. B. – 2004. – V. 78, № 2. – P. 189–194.
- [3] Chen F. Polarization characteristics of a near infrared distributed feedback dye laser operated at the first, second and third orders of Bragg condition / F. Chen // Opt. Communs. – 2013. – V. 294 – P. 260–266.
- [4] Катаркевич В. М. Субнаносекундный лазер красителях на co светоиндуцированной распределенной обратной связью на основе пространственной решетки дихроизма усиления / В. М. Катаркевич, А. Н. Рубинов, Т. Ш. Эфендиев // Сборник научных трудов IV Конгресса физиков Беларуси (24-26 апреля 2013 г., Минск, Беларусь). - Минск, 2013. - С. 84-85.
- [5] Novitsky D. V. Dynamics of DFB dye lasing by polarization modulation: simulations and experiment / D. V. Novitsky, V. M. Katarkevich, T. Sh. Efendiev // Laser Phys. Lett. - 2016. - V. 13, № 2. - P. 025002 (8 pp).
- [6] Efendiev T. Sh. Picosecond distributed feedback dye laser excited with diode-pumped solid-state micro laser / T. Sh. Efendiev [et al.] // Azerb. J. of Physics. Fizika. – 2011. – V. 17, №. 2. – P. 7–10.

УДК 53.343

Р.А. Дынич, А.Н. Понявина

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И БЛИЖНЕПОЛЕВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАССЕЯНИЯ ГИБРИДНЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.ponyavina@dragon.bas-net.by

Управление оптическими свойствами наноструктур, в состав которых входят металлсодержащие плазмонные наночастицы, имеет значительные перспективы применения в нанофотонике, фотовольтаике, сенсорике. Важную роль в формировании оптического отклика гибридных наноструктур, содержащих плазмонные и полупроводниковые компоненты, играют ближнеполевые плазмон-электронные / экситонные (ПЭ) взаимодействия. В зависимости от морфологических характеристик нанокомпозита, влияющих на степень спектрального перекрытия полос поверхностного плазмонного резонанса поглощения металлических наночастиц (ППРП) и полос поглощения неметаллической компоненты, могут реализовываться режимы слабой и сильной ПЭ связи.

В настоящей работе с применением расширенной теория Ми проведено моделирование спектральных и ближнеполевых характеристик рассеяния гибридных металлсодержащих наночастиц со структурой ядро-оболочка, помещенных в диэлектрические и органические полупроводниковые матрицы. Как и в [1], при численных расчетах факторов эффективности ослебления и рассеяния света нами использовались следующие выражения:

$$Q_{\text{ext}} = \frac{4\kappa_m^2}{n_m \left[1 + e^{\beta}(\beta - 1)\right]} \operatorname{Re}\left\{\frac{1}{\kappa_m - in_m} \sum_{n=1}^{\infty} \left[(2n+1)\left(\psi_n^*\psi_n' - \psi_n\psi_n'^* + b_n\psi_n'^*\xi_n + b_n^*\psi_n\xi_n'^* - a_n\psi_n^*\xi_n' - a_n^*\psi_n'\xi_n^*\right)\right]\right\}$$
$$Q_{\text{NF}} = \frac{\left(4\pi\kappa_m R_s\right)^2}{\lambda_0^2 \left[1 + e^{\beta}(\beta - 1)\right]} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{\left|a_n\right|^2 \left[(n+1)\left|h_{n-1}\right|^2 + n\left|h_{n+1}\right|^2\right] + (2n+1)\left|b_n\right|^2 \left|h_n\right|^2\right\},$$

где λ_0 – длина волны падающего излучения, a_n , b_n – коэффициенты Ми, R_{NP} – радиус частицы, n_m и κ_m – действительная часть комплексного показателя преломления матрицы, соответственно, $\beta = 4\pi R_{NP}\kappa_m/\lambda_0$, ψ_n , ξ_n , ψ_n' , ξ_n' – функции Риккати–Бесселя и их производные, h_n – сферическая функция Ганкеля первого рода порядка n.

На рисунке 1 показаны результаты моделирования спектральной зависимости факторов эффективности ослабления и рассеяния в ближней зоне для двухслойных частиц с серебряной оболочкой, размещенных во фталоцианине меди. Управление спектральным положением полосы ППРП и, за счет этого, режимом ПЭ связи, осуществлялось при сохранении постоянным общего размера гибридной наночастицы (r₂) путем изменения размеров диэлектрического ядра (r₁) и толщины плазмонной оболочки. Режим слабого взаимодействия плазмонной и органической компоненты реализуется, когда полосы поглощения СиРс и полоса ППРП серебряной нанооболочки

спектрально разделены и/или перекрытие спектров незначительно. Такое разделение полос достигается при малых объемных долях диэлектрического (полупроводникового) ядра в двухслойной наночастице. Как видно из рисунка 1 а (кривая 1), в режиме слабой связи в спектре ослабления двухслойной наночастицы с серебряной оболочкой наблюдается интенсивная полоса ППРП в области 450 нм и некоторое увеличение Q_{ext} в области полос поглощения CuPc (330, 640 нм и 730 нм).

Когда частота плазмонного резонанса металлической нанооболочки с полупроводниковым ядром совпадает с частотой поглощения света в спектре поглощения матрицы (фталоцианина меди), в гибридной наноструктуре реализуется режим сильной связи. Это приводит к радикальному изменению спектральной зависимости факторов эффективности ослабления, поглощения и рассеяния двухслойной наночастицы с серебряной оболочкой (кривая 2 на рисунке 1а).



Рисунок 1. – Спектральная зависимость фактора эффективности ослабления (а) и рассеяния в ближней зоне (б) для двухслойных частиц с серебряной оболочкой, размещенных во фталоцианине меди. Показатель преломления материала ядра n_{core}=2.5, r₂ = 10 нм, r₁ = 2 нм (кривая 1) и 7 нм (кривая 2)

Влияние на ближнеполевые характеристики перехода от режима слабой ПЭ связи к режиму сильной ПЭ связи показано на рисунке 16. Как видно из рисунка, в режиме слабой связи наблюдается одна интенсивная полоса $Q_{\rm NF}$ в области 450 нм (кривая 1). В максимуме этой полосы $Q_{\rm NF}$ = 2570. В режиме сильного взаимодействия наблюдаются две полосы $Q_{\rm NF}$ в области 550 нм и 780 нм (кривая 2). Значения $Q_{\rm NF}$ в максимумах этих полос, однако, почти на порядок меньше: $Q_{\rm NF}$ = 600 для 550 нм и $Q_{\rm NF}$ = 100 для 780 нм.

Таким образом, уникальная особенность двухслойных наночастиц с металлической нанооболочкой, которая состоит в возможности «подстраивать» спектральное положение полосы ППРП под полосы выбранных неметаллических компонент за счет варьирования размеров ядра и толщины плазмонной оболочки, может быть использована для контроля и перестройки режима ПЭ связи в гибридных наноструктурах.

[1] Дынич Р.А. Усиление локального поля вблизи сферических наночастиц в поглощающей среде / Р.А. Дынич, А.Н. Понявина, В.В. Филиппов // Журн. прикл. спектр. – 2009. – Т. 76. – С. 746.

УДК 535:621.373.826

S. T. Pashayan¹, V. A. Anishchik², S. V. Zlotski², A. V. Butsen^{3, 4}

SYNTHESIS AND COMPARATIVE STUDY OF NANOSCALE THIN-FILM STRUCTURES BY VACUUM PULSED LASER DEPOSITION AND LASER ABLATION IN LIQUIDS

¹The Institute for Physical Research, NAS of Armenia, 0203, Ashtarak-2, Armenia <u>stpashayan@gmail.com</u>

²Belarusian State University, Nezalezhnasti Ave. 4, 220030, Minsk, Belarus <u>anishchik@bsu.by</u>

³Belarusian State Technological University, Sverdlov str., 13a, Minsk, 220006, Belarus
⁴B. I. Stepanov Institute of Physics, NAS of Belarus, Nezalezhnasti Ave., 68, 220072, Minsk, Belarus

The low-cost, non-toxic nature and abundance of the copper oxide makes it a suitable option for the various applications. The production of copper oxides-based nanoscale structures is of both fundamental and practical interest for their use in fabrication of solar cells, sensors, photodetectors and other optoelectronic devices as well as for biomedical applications [1, 4]. An important task is to find efficient methods for the controlled synthesis of nanostructures. One of the promising methods for obtaining NPs and thin films nanostructures without the use of chemical reagents is pulsed laser ablation (PLA) of bulk targets in liquid or gas/vacuum. Some of the advantages of such techniques are that the energy source is well confined at the surface of the target, and by that it contributes to the efficiency, the flexibility and the control of the processes [2, 3].

In the present study, properties of copper oxides nanostructures prepared by vacuum pulsed laser deposition (VPLD) and laser ablation in liquid (LAL) are discussed. The morphology, structure and optical properties of the prepared samples were analysed by the XRD, EDX, SEM techniques, UV-Vis absorption and Raman spectroscopy (RS). Laser sputtering experiments in both methods were carried out by focusing the radiation of a Nd:YAG laser operating at 1064 nm on a surface of the prepared target. A pressed target was formed from the ceramic copper oxide powder (99.9%) followed by annealing in muffle furnace in a temperature range 900–1100 °C.

The parameters of Nd:YAG laser radiation for the VPLD experiment were: pulse duration 30 ns, pulse energy 0.35 J, intensity in the target irradiation zone 10^7-10^9 W/cm², pulse repetition rate 1 Hz. Laser-sputtering setting, consisting from laser and vacuum chamber was used. Maximum residual presser in vacuum chamber was $2x10^{-6}$ mm Hg.



Figure 1. Absorption spectra and SEM image of thin-film nanostructures prepared by VPLD before (a) and after (b) annealing; 1,2 – on glass substrate, 3- on sapphire substrate.

Thin-film nanostructures on glass and sapphire substrates at room temperature and $T_{grown} = 400$ °C were obtained. As-deposited films of a thickness of 70 nm were annealed at different temperatures in the range of 500-700 °C. The nature of the absorption spectra relationship A(λ) regardless of the growth temperature at both T_{room} and at T=400 °C is the same for all films (Fig. 1).

The parameters of laser radiation for the LAL experiment were: 80 mJ/pulse energy, repetition rate 10 Hz, pulse duration 8 ns. The radiation of the Nd:YAG laser (LOTIS TII, LS2134D), operating in a double-pulse mode at 1064 nm was focused on a surface of metallic copper and CuO targets placed in the cell filled with a liquid (water or isopropyl alcohol). Quasi spherical nanoparticles (NPs) with similar morphology were obtained by laser ablation (LA) of the CuO target in both solutions.

As can be seen from the absorption spectra, the presence of copper plasmon resonance peak at 600 nm indicates that after laser ablation of CuO target in i-PrOH metallic copper NPs are formed opposite to the LA in water where the particles composition most probably corresponds to the CuO target composition (Fig. 2). This result was also confirmed by X-ray microanalysis.



Figure 2. Absorption spectra, TEM and SEM images of the samples prepared by LAL.

Using two different methods copper oxide NPs and thin-film nanostructures were synthesized on glass and sapphire substrates at different growth conditions. SEM images confirmed the production of tightly packed structures with an average grain size 50 nm (LAL) and up to 150 nm (VPLD). According to EDX, the composition of the obtained films is close to the composition of copper oxide CuO, which is in a good agreement with XRD and Raman measurements. The results obtained showed that the control of stoichiometry, as well as stability, size and crystallinity of the formed samples has been achieved by a proper selection of the experimental parameters such as a composition of a liquid used (LAL) or annealing and growth temperature (VPLD), laser fluence, interpulse delay and ablation exposition.

The authors are grateful to G. R. Badalyan and O.V. Korolik for help in the SEM and Raman measurements.

- [1] J. Meyer, S. Hamwi, M. Kröger, et al. / Transition metal oxides for organic electronics: energetics, device physics and applications. //Adv. Mater. -2012. V. 24. P. 5408.
- [2] Morintale E., Constantinescu C., Dinescu M. / Thin films development by pulsed laserassisted deposition..// Physics: AUC. – 2010. – V. 20 (1). – P. 43-56.
- [3] Zeng H., Du X.W., Singh S.C., Kulinich S.A., Yang S., He J., Cai W./Nanomaterials via laser ablation/irradiation in liquid: A review.//Adv. Funct.Mat.2012.– V.22.–P.1333.
- [4] A Chen, H Long, X. Li, et al. /Controlled growth and characteristics of single-phase Cu2O and CuO films by pulsed laser deposition.//Vacuum. 2009. –V. 83. P. 927.

УДК 533.9

А. Н. Чумаков¹, В. В. Лычковский¹, И. С. Никончук¹, В. Э. Анискевич¹, Д. С Милованович², Б. М. Райчич², Б. Д. Станков³

СТРУКТУРИРОВАНИЕ И АЗОТИРОВАНИЕ CrVN ПОКРЫТИЙ НА СТАЛИ И КРЕМНИИ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ В ВОЗДУХЕ

¹Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь. E-mail: <u>a.chumakovi@dragon.bas-net.by</u> ²Institute of General and Physical Chemistry, 11158 Belgrade, Serbia. ³Institute of Physics, University of Belgrade, 11080 Belgrade, Serbia. <u>bstankov@ipb.ac.rs</u>

Введение. Износостойкость функциональных материалов можно повысить путем нанесения защитных покрытий из нитридов переходных металлов, благодаря их высокой твердости и трибологическим характеристикам. Особо перспективным является CrVN покрытие благодаря высокой твердости и химической инертности нитрида хрома и низкого коэффициента трения нитрида ванадия [1]. Настоящая работа посвящена выявлению режимов лазерной модификации структуры и состава CrVN покрытий на стали и кремнии в воздухе под действием парных наносекундных импульсов лазерного излучения (ЛИ) с длинами волн $\lambda = 355$ и 532 нм.

Техника эксперимента. Лазерное облучение в воздухе исследуемых образцов CrVN покрытий на стали и кремнии осуществлялось серией парных наносекундных импульсов лазерного излучения (ЛИ) с длинами волн 355 и 532 нм, следующих с регулируемым временным интервалом Δτ между ними и управляемым порядком их следования [2]. Образцы покрытий, облученные импульсами ЛИ в воздухе в различных режимах, исследовались методами оптической и электронной микроскопии, включая методы энегодисперсионной (ЭДС) спектрометрии.

Результаты и обсуждение. Результаты ЭДС спектрометрии лазерномодифицированных CrVN покрытий на стальных образцах в пятнах облучения и в ореолах (рисунок 1) показали, что оптимальную лазерную модификацию CrVN покрытий на стали следует искать при плотностях мощности ЛИ вблизи 50 MBt/cm² и 18 MBt/cm² для длин волн излучения 355 и 532 нм соответственно, когда разрушение покрытий в пятнах облучения еще незначительно.



Рис. 1 – Содержание железа в лазерномодифицированном CrVN покрытии на стали в пятнах лазерного облучения с длиной волны 355 нм (1) и 532 нм (2), а также в их ореолах (3) и (4) соответственно.

На микрофотографиях лазерно-модифицированных CrVN покрытий на стальной подложке под действием лазерных пучков с длинами волн 355 и 532 нм и плотностью мощности излучения ~18 MBt/cm² хорошо видна измененная структура поверхности в пятнах облучения и цветные зоны ореола с измененным составом покрытий (рис. 2).



Рис. 2 – Оптические и СЭМ снимки CrVN покрытий на стальной подложке после облучения частично перекрывающимися лазерными пучками с длинами волн 355 и 532 нм с интенсивностью $q_{355} = 17,3$ МВт/см² и $q_{532} = 18,6$ МВт/см². Интервал между импульсами $\Delta \tau = -12$ мкс (a, d), -1,4 мкс $(\delta, e), +1,4$ мкс $(e, \mathcal{R}), +12$ мкс (e, 3) (отрицательное значение интервала соответствует опережающему воздействию лазерных импульсов с $\lambda = 355$ нм)

Методом ЭДС спектрометрии выявлена зависимость относительной концентрации ряда компонентов модифицированного покрытия в пятнах облучения и отдельных областях ореола от параметров облучения (рис. 3).



Рис. 3 – Содержание O (a), N (δ) и C (*b*) модифицированном в CrVN покрытии на стали ПО ЭДС результатам спектроскопии в области перекрытия (1) пятен (бихроматическое облучения воздействие $q_{355} = 17,3$ MBT/см² и $q_{532} = 18,6$ MBT/см²), в ближней области ореола (2), коричневой средней синей области (3)и дальней коричневой области ореола (4)

Заключение. Структурная модификация образцов CrVN покрытий в воздухе без значимого удаления покрытий со стальных и кремниевых подложек обеспечивается при бихроматическом импульсном лазерном облучении с длинами волн 355 и 532 нм при плотности мощности излучения от 18 до 50 MBt/cm². Максимальное азотирование CrVN покрытий на стали в пятне лазерного облучения и ореоле достигается при опережающем воздействии на 1,4 – 8 мкс импульсов излучения 355 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ Ф22СРБГ-003.

- [1] L. Aissani et al. Structural Mechanical and Tribological Behavior of Reactive Sputtered Cr-N and Cr-V-N Films // Diffusion Foundations, 2018, vol. 18, pp. 27–34.
- [2] А.Н. Чумаков, В.В. Лычковский, И.С. Никончук, А.С. Мацукович. Абляция кремния в воздухе моно- и бихроматическими импульсами лазерного излучения с длинами волн 355 и 532 nm // Журн. техн. физики. 2022. Т. 92, №1. С. 36.

UDC 53

B. D. Stankov¹, B. M. Rajcic², B. M. Gakovic³, V.V. Luchkouski⁴, A. N.Chumakov⁴, D. M. Milovanovic²

LASER IRRADIATION EFFECTS ON CrVN HARD COATINGS' SURFACE MORPHOLOGY

¹ Institute of Physics, University of Belgrade, P.O. Box 68, 11080 Belgrade, Serbia biljanas@ipb.ac.rs

² Institute of General and Physical Chemistry, P.O. Box 45, 11158 Belgrade, Serbia brajcic@iofh.bg.ac.rs, dmilovanovic@iofh.bg.ac.rs

³ VINCA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia bgakovic@vin.bg.ac.rs

⁴ B.I. Stepanov Institute of Physics National Academy of Sciences of Belarus, Independence Ave., 68-2, 220072, Minsk, Belarus <u>a.chumakov@dragon.bas-net.by</u>

The presented research is a part of the systematic study of the Chrome Vanadium Nitride (CrVN) protective coatings' properties following the laser action, and the resulting surface effects. CrVN coatings are commonly used in various industries due to their corrosion resistance, thermal stability, hardness and wear resistance.

Single and paired pulse laser systems in visible and ultraviolet wavelength spectrum are used for CrVN modifications. The influence of various experimental parameters, such as: nanosecond pulse duration; wavelengths of 532 nm, 355 nm and 266 nm value; pulse energy varying from threshold, below ~ 0.5 mJ, to 50 mJ, and number of accumulated pulses, from single and paired, up to 50 pulses, is investigated in order to establish the controlled modification of the coating surface.

Characterization of laser-modified surfaces includes examination of surface morphology (roughness, ablation depth, periodic structures) and chemical composition of the surface. The influence on microhardness values was examine on samples that were laser patterned in air and nitrogen controlled conditions. Some of the results from SEM microphotographs and profilometry analysis are given in Figure 1.



Figure 1. SEM microphotographs, 2D profiles and 3D maps of CrVN hard coatings after the laser irradiation. Different experimental parameters are given in SEM microphotographs

Laser patterning is recognized as the significant materials engineering tool since it can enable obtaining new, functional properties of protective coatings and thus significantly affect the quality and durability of these materials [1].

[1] Rajčić B, Petronić S., Čolić K., Stević Z., Petrović A,, Mišković Ž, Milovanović D., Metals 2021 T. 11 (5) S. 750

УДК 621.373.826:533

П. В. Шпак¹, А. Н. Чумаков¹, Л. В. Баран², В. В. Малютина-Бронская³, Н. А. Босак¹, В. С. Дробуш¹, А. С. Кузьмицкая³

МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ, ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ОКСИДА ЦИРКОНИЯ ZrO₂, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

 ¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь. n.bosak@ifanbel.bas-net.by
² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь. baran@bsu.by
³ГНПО "Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника", пр. Независимости 68,

³⁷ НПО "Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника", пр. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь, malyutina@oelt.basnet.by

Диоксид циркония (ZrO₂) интересен как материал, обладающий полезными оптическими, электрическими, термическими, прочностными и другими свойствами. Тонкие плени ZrO₂ получают различными методами [1]. Для наноструктурированных пленок ZrO₂ дефектами, определяющими оптические и электрические свойства, как правило, являются поверхностные состояния, обусловленные нескомпенсированными химическими связями атомов металлов (Zr³⁺-ионы) и кислородные вакансии в различном зарядовом состоянии. В работе представлены результаты исследования свойств тонких пленок ZrO₂, осажденных на кварцевую и кремниевую подложки при многоимпульсном высокочастотном лазерном воздействии [2].

Экспериментальная установка. Пленки ZrO_2 осаждались методом высокочастотного лазерного распыления керамических мишеней в вакууме (p = 2,2 Па). Экспериментальная лазерная установка ($\lambda = 1.06$ мкм) с регулируемой частотой повторения лазерных импульсов от 5 до 50 кГц содержала: источник лазерного излучения, оптическую систему транспортировки лазерного излучения к распыляемой мишени, вакуумную камеру и измерительно-диагностический модуль. Частота повторения лазерных импульсов изменялась за счет варьирования уровня накачки лазера и оптической плотности затвора из радиационно облученного кристаллического фторида лития LiF с F2-центрами окраски; длительность лазерных импульсов на полувысоте составляла $\tau \sim 85$ нс. Осаждение макроскопически однородных тонких пленок достигалось при плотности мощности лазерного излучения $q = 79 \text{ MBt/cm}^2$ и частоте повторения импульсов *f* ~ 10–12 кГц. Морфология поверхности образцов исследовалась с помощью сканирующего зондового микроскопа Solver P47-Pro (HT-МДТ, Россия) в полуконтактном режиме. Пропускание оптического излучения тонкими пленками в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне спектра измерялось на спектрофотометре Carry 500 Scan. Спектры пропускания в средней инфракрасной области регистрировались с помощью ИК-Фурье-спектрометра NEXUS (Thermo Nicolet) в диапазоне 400-4000 см⁻¹. Измерение вольт-амперных характеристик (BAX) структур ZrO₂/Si проводилось с помощью автоматизированного комплекса при воздействии лазерного излучения с длинами волн от 405 нм до 1064 нм. Измерение вольт-фарадных (ВФХ) характеристик проводилось на измерителе иммитанса Е7-20 при комнатной температуре с частотой сигнала 100 кГц, 500кГц и 1000 кГц.

Экспериментальные результаты и их анализ. Методом атомно-силовой микроскопии установлена нанокристаллическая структура тонких пленок оксида циркония на кварцевой подложке (рис. 1): средняя высота рельефа поверхности пленок составляет 354 нм при среднеквадратичной шероховатости 83 нм. На поверхности пленок наблюдается незначительное количество крупных образований высотой до 800 нм (рис. 1, δ , δ).



Рис. 1. Морфология поверхности (a, δ) и профиль сечения рельефа (δ) лазерноосажденной пленки ZrO₂ на кварцевой подложке.

Пропускание лазерно-осажденной пленки оксида циркония ZrO₂ на кремниевой подложке в ближней ИК-области спектра от $\lambda = 1221$ нм до $\lambda = 2985$ нм превышает пропускание исходной подложки и достигает T = 62 % на длине волны $\lambda = 1908$ нм (рис. 2, *a*). На рисунке 2, *б* и 2, *в* показаны ВАХ и ВФХ структуры ZrO₂ на кремниевой подложке. Электрические свойства исследуемой структуры, в том числе фототок при отрицательных напряжениях в широком спектральном диапазоне, определяются наличием дискретных поверхностных состояний с широким энергетическим спектром. Максимальная фоточувствительность структуры ZrO₂/Si, составляющая 2,3 мА/Вт, наблюдается в УФ области спектра (405 нм) с характерной шириной запрещенной зоны $E_g = 5 - 5,8$ эВ [3].



Рис. 2. Спектры пропускания лазерно-осажденной пленки оксида циркония ZrO₂ в видимой и ближней – ИК-области (*a*). Вольт-амперная (*b*) и вольт-фарадная (*b*) характеристики тонкой пленки оксида циркония ZrO₂ на кремниевой подложке.

[1] Cao G. Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications (London: Imperial College Press, 2004).

[2] Минько Л.Я., Чумаков А.Н., Босак Н.А. // Квантовая электроника. – 1990. – Т.17, №11. – С. 1480–1484.

[3] Zhao S. Optical properties and structural characterization of bias sputtered ZrO_2 films // Journal of Alloys and Compounds. – 2008. – Vol. 453, I. 1/2. – P. 453–457.

УДК 535.37

А. А. Горбачев, О. Н. Третинников

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ НАНОКЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА, ВЫРАЩЕННЫХ В ПОВЕРХНОСТНО-ПРИВИТОМ КАРБОКСИЛЬНОМ ПОЛИМЕРЕ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.gorbachev@dragon.bas-net.by

Наночастицы (НЧ) благородных металлов при размерах менее 1-2 нм теряют плазмонные свойства и приобретают свойства молекул, включая яркую стабильную флуоресценцию [1]. Такие НЧ принято называть нанокластерами (НК). В последние годы они привлекли пристальное внимание в качестве функциональных компонентов оптоэлектронных устройств, фотовольтаических и фотоэлектрохимических систем [2]. Эти применения требуют иммобилизации НК на или в твердотельных носителях. Известные способы получения таких флуоресцентных нанокомпозитов с использованием полимеров заключаются в синтезе ΗК стабилизированных органическими лигандами в растворе, смешении последнего с раствором полимера, поливом и сушкой смеси на подложке. Однако несовместимость лигандов с полимерами приводит к агрегации НК в нанокомпозите и, как следствие, падению оптической эффективности из-за рассеяния и перепоглощения света. Эти проблемы можно минимизировать инкорпорацией флуоресцентных НК серебра в полимерную матрицу путем их синтеза в самой полимерной матрице, представляющей собой слой карбоксильного полимера химически привитого к поверхности подложки [3].

Данная работа посвящена исследованию получения и флуоресцентных свойств нанокомпозитов на основе НК серебра, синтезируемых в слое поверхностно-привитой полиакриловой кислоты (ПАК) по мокрому и сухому методу синтеза. Синтез по мокрому способу разработан ранее [3] и заключается в погружении пленки полиолефина (ПП, ПЭ) с привитым на ее поверхность слоем ПАК в водный раствор AgNO₃ для импрегнирования привитого слоя ионами Ag⁺, УФ облучении (λ =365 нм) пленки в этом растворе, извлечении пленки и сушке на воздухе в темноте. Возможность синтеза по сухому методу установлена нами недавно. Он отличается от мокрого синтеза тем, что после импрегнирования привитого слоя ионами Ag⁺ в растворе AgNO₃ пленку извлекают из раствора, сушат, а затем облучают.

На рис. 1(а) показаны спектры флуоресценции НК серебра (λ_{ex} =485 nm), образующихся в слое привитой ПАК при разных длительностях синтеза мокрым методом. Синтез в течение 1–8 мин дает спектры, состоящие из широкой полосы с максимумом при 725–750 нм и полосы, обнаруживающей себя в виде плеча около 690–630 нм, интенсивности которых равномерно растут с временем синтеза. Присутствие в спектре нескольких полос объясняется наличием популяций НК, различающихся размером, при этом, чем больше кластеры, тем больше длина волны испускания [1]. Это означает, что увеличение времени синтеза НК в рассматриваемом интервале приводит к росту их количества, при этом распределение НК по размерам не

122

изменяется. Дальнейшее увеличение времени синтеза приводит к быстрому ослаблению флуоресценции при одновременно нарастающем красном смещении ее максимума, исчезновению коротковолнового плеча и, в конце концов, полному исчезновению испускания. Это говорит о непрерывном росте размеров НК, приводящем в итоге к их перерастанию в не флуоресцирующие плазмонные НЧ. На рис. 1(б) показаны спектры флуоресценции НК серебра, образующихся в слое привитой ПАК при разных длительностях синтеза мокрым методом. Видно, что максимум испускания в этом случае лежит при 600 нм, т. е. на месте плеча в спектрах НК, получаемых мокрым синтезом. В свою очередь, полоса при 725–750 нм, которая доминирует в спектрах НК, получаемых мокрым синтезом, теперь проявляется всего лишь в виде плеча на фоне полосы при 600 нм. Более того, с ростом времени синтеза интенсивность флуоресценции сначала быстро растет, а затем выходит на насыщение, не обнаруживая тенденции к последующему снижению.





Эти данные показывают, что при сухом синтезе образуются в основном более мелкие НК, а при мокром – более крупные. Причиной является разная подвижность реагентов. Мокрый синтез происходит в слое ПАК, набухшем в воде, что дает достаточную подвижность не только для ионов Ag^+ и атомов Ag^0 , но и для первичных (малых) НК, способствуя их слиянию в НК бо́льших размеров и, далее, в плазмонные НЧ. В сухом слое ПАК подвижность Ag^+ и Ag^0 достаточна для коалесценции в первичные НК, а подвижность НК ограничена. Это препятствует слиянию первичных НК в НК большего размера, и НК растут в основном за счет присоединения атомов Ag^0 .

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект № Ф21-031).

- [1] Chakraborty I. Atomically precise clusters of noble metals: emerging link between atoms and nanoparticles. / I. Chakraborty, T. Pradeep // Chem. Rev. 2017. V. 117. P. 8208.
- [2] Abbas M.A. / Thiolated gold nanoclusters for light energy conversion. / M.A. Abbas, P.V. Kamat, J.H. Bang // ACS Energy Let. 2018. V. 3. P. 840.
- [3] Tretinnikov O.N. Synthesis of fluorescent silver nanoclusters immobilized on a plastic substrate using a surface-grafted polymer matrix-template / O.N. Tretinnikov, A.A. Gorbachev, P.P. Pershukevich // J. Appl. Spectrosc. – 2016, – V. 83. – P. 864.

УДК: 535.373 + 539.2 +541.14 Э.И. Зенькевич¹, К. фон Борцисковски²

НАНОАНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ: ИНТЕРФЕЙСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ, РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ, ПРИМЕНЕНИЯ

¹Белорусский национальный технический университет, 220013 Минск, пр. Независимости 65, Беларусь zenkev@tut.by ³Институт физики, Технический университет Хемнитца, D-09107 Хемнитц, Рейхенхайнер штр. 70, Германия borczyskowski@physik.tu-chemnitz.de

Разработка принципов самосборки и исследование спектрально/энергетических свойств наноансамблей на основе полупроводниковых квантовых точек (КТ) и функциональных органических молекул различной природы представляют интерес как с научной точки зрения, так для создания функциональных устройств и элементов, перспективных в нанотехнологиях и нанобиомедицине. При этом основная проблема в разработке эффективных наноматериалов этого типа связана с отсутствием детальной информации о свойствах поверхности КТ, специфике ее взаимодействий с органическими молекулами, а также влиянии этих взаимодействий на структуру энергетических уровней и процессы экситонной релаксации.



докладе рассматриваются результаты исследований, выполненных для индивидуальных КТ, а также для наноансамблей, полученных за счет направленной самосборки (интеркаляция, экстра-лигандирование электростатические И взаимодействия) полупроводниковых КТ двух типов (CdSe/ZnS, AgInS/ZnS/GSH) и органических хромофоров (порфирины, перилен-бисимиды и др.). молекул Спектральные свойства и кинетика релаксационных процессов при 77-300К были исследованы методами стационарной и пикосекундной кинетической спектроскопии наноансамблей в растворах различной полярности, а также методами спектроскопии одиночных КТ и одиночных наноансамблей, полученных методом «spin coating» на подложках Si/SiO2 или в вязких субмикронных растворах TEHOS). С использованием теоретических подходов (методы квантовой химии, редуцированная матрица плотности, решение уравнения Шредингера для сферических КТ, модель индуктивного резонанса и др.) обоснованы пути и механизмы релаксации экситонного возбуждения КТ в

наноансамблях. Установлено, что интерфейсные явления, определяющие статическое и динамическое взаимодействие молекул красителей и КТ, а также морфологию поверхности наноансамблей, играют принципиальную роль в реализации различных механизмов тушения фотолюминесценции (ФЛ) КТ. Проведен количественный анализ процессов тушения ФЛ КТ с использованием современных теоретических моделей.

Обосновано, что понижение температуры сопровождается конформационной перестройкой поверхностного слоя стабилизатора (триоктилфосфин оксид или амин) в индивидуальных КТ CdSe/ZnS, которая усиливается в наноансамблях. Присоединение молекул красителей (порфиринов и перилен-бисимидов) на поверхность КТ приводит к формированию новых поверхностных состояний КТ, определяющих дополнительные эффективные каналы безызлучательной релаксации экситонного возбуждения. Свойства и релаксация поверхностных состояний КТ определяются комбинацией нескольких факторов: физико-химическими свойствами растворителя, электронной природой лиганда, топографией лиганда на поверхности КТ, а также температурой.

На основании сопоставления экспериментальных данных по тушению ФЛ КТ CdSe/ZnS молекулами порфиринов в наноансамблях и результатов квантовомеханических расчетов впервые количественно обосновано, что тушение ФЛ КТ (85-90%) связано с туннелированием электрона (электроно-дырочной пары, т.е. экситона) сквозь барьер ZnS на поверхность КТ в условиях квантового ограничения.

Методами спектроскопии одиночных нанообъектов впервые обнаружены эффекты синхронного мерцания интенсивностей свечения КТ CdSe/ZnS и молекулы периленбисимида, входящих в одиночный наноансамбль, количественно указывающие на реализацию безызлучательного переноса энергии КТ→краситель.

На основании экспериментальных данных и квантово-химических расчетов (метод MM+) впервые в мире разработана согласующаяся с реальными размерами 3D модель квантовой точки AIS/ZnS, стабилизированной глютатионом GSH. В рамках этой модели последовательность представлена детальная физико-химическая процессов, происходящих на поверхности КТ при взаимодействии с присоединенной молекулой порфирина, сопровождающаяся быстрым формированием Zn-комплекса порфирина и его хемосорбцией на SH поверхность КТ. На основании спектрально-кинетических люминесцентных данных и результатов теоретического анализа впервые количественно обосновано, что в наноансамблях на основе КТ AgInS/ZnS/GSH и молекул порфиринов дезактивация экситонного возбуждения квантовых точек определяется двумя конкурирующими процессами (реализующимися в пикосекундном диапазоне времен): индуктивно-резонансным переносом энергии КТ-порфирин и туннелированием электрона на поверхность КТ в условиях квантового ограничения.

Впервые количественно обоснованы механизм (индуктивно-резонансный перенос энергии КТ—порфирин), и эффективность генерации синглетного кислорода наноансамблями КТ-порфирин. Совокупность полученных результатов является основой для направленного поиска и оптимизации нового типа фотосенсибилизаторов синглетного кислорода для использования в фотодинамической терапии рака.

Финансовая поддержка: ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций 2021-2025 г.г., Беларусь), Грант Президента Республики Беларусь в науке на 2020 г. и Visiting Scholar Program (ТУ Хемнитца, Германия, 2020-2021 г.г.).

УДК 535.37

А. В. Богданова¹, Ю. В. Осика¹, Я. А. Недбальская², М. И. Демиденко¹, М. Б. Шундалов³, Т. А. Кулагова¹

СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА СТРУКТУРНЫХ И СПЕКТРАЛЬНО-ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ БОР-НИТРИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

¹ НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь <u>tatyana.kulagova@gmail.com</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

³ Университет Салерно, ул. Иоанна Павла II, 132, 84084 Фишано, Италия

Бор-нитридные квантовые точки (БНКТ) – двумерные наноматериалы с графеноподобной структурой, образованной насыщенными шестичленными циклами с атомами бора и азота в вершинах. БНКТ обладают уникальными фотофизическими свойствами, биосовместимостимы, что предопределяет их перспективное применение в биомедицине для тераностики различных заболеваний, биовизуализации и таргетной доставки лекарств. Помимо этого, БНКТ являются источником изотопов ¹⁰В, что позволяет рассматривать их как новые борсодержащие препараты для эффективной бор-нейтронозахватной терапии [1].

Биомедицинское применение БНКТ формирует особые требования к структуре и свойствам наночастиц. Одним из вариантов синтеза БНКТ является гидротермический метод. В зависимости от условий синтеза и прекурсоров бора и азота в структуру могут допироваться гетероатомы, может осуществляться функционализация поверхности наночастиц, что будет значительно влиять на спектрально-люминесцентные свойства БНКТ. Разработка воспроизводимых методов синтеза однородных по размеру, водорастворимых, фотостабильных БНКТ с высокой интенсивностью флуоресценции является актуальной задачей.

В данном исследовании был осуществлен синтез БНКТ гидротермическим методом в реакторе с тефлоновым покрытием при 200°С в течение 12 часов. Были использованы борная кислота, в качестве прекурсора атомов бора, и мочевина (^МБНКТ) и тиомочевина (^ТБНКТ), в качестве прекурсоров атомов азота. Соотношение реагентов было взято 1:2, соответственно [2]. Синтез осуществлялся в системе растворителей: дистиллированная вода/этанол/аммиак. После синтеза раствор выдерживался при 4°С в течение 24 часов для формирования и последующего отделения осалка. предположительно состоящего из смеси боратов аммония. Структурный анализ синтезированных БНКТ был проведен с использованием ИК-спектроскопии. Фотофизические свойства БНКТ были исследованы путем анализа спектров поглощения и флуоресценции.

Спектр ИК ^МБНКТ и ^ТБНКТ имеют типичные полосы поглощения группы В-N в областях: 1337–1300, 1420–1410 и 1630 см⁻¹. Наличие широко пика поглощения в области 3400–3000 см⁻¹ свидетельствуют о наличии групп О-H и N-H. Также были зарегистрированы интенсивные пики на длинах волн 920–910 и 1090–1020 см⁻¹, что соответствует колебаниям групп N-B-O и B-O-H [3]. Структурное различие

синтезированных БНКТ проявилось в наличии у ^ТБНКТ узкого интенсивного пика на длине волны 2056 см⁻¹, который отвечает за колебание N=C=S, и низкоинтенсивного пика в области 2600–2550 см⁻¹, соответствующий колебаниям S-H.

Для характеристики спектрально-флуоресцентных свойств, были приготовлены стабильные водные суспензии БНКТ концентрацией 10 мг/мл. Спектры поглощения полученных образцов были измерены в диапазоне 200–700 нм. Установлено, что максимум поглощения ^МБНКТ составляет 265 нм, ^ТБНКТ имеет два максимума в спектре поглощения: 270 и 350 нм. Для ^МБНКТ выявлено, что при возбуждении на длине волны 375 нм наблюдается интенсивная флуоресценция с максимумом при 420 нм. При исследовании ^ТБНКТ удалось зарегистрировать слабую флуоресценцию, примерно в 10 раз ниже, чем у ^МБНКТ, при возбуждении на длинах волн 300 и 330 нм.

Полученные результаты показали, что варьирование прекурсора азота при гидротермическом синтезе БНКТ влияет на структурные и спектральнофлуоресцентные характеристики наночастиц. Наличие атомов серы в структуре БНКТ ухудшает их фотофизические свойства.

[1] Zhang X. Hexagonal boron nitride quantum dots: Properties, preparation and applications. / X. Zhang [et al.] // Mater. Today Chem. – 2021. – Vol. 20. –P. 100425.

[2] Liu B. One-step synthesis of boron nitride quantum dots: simple chemistry meets delicate nanotechnology. / B. Liu [et al.] // Chem. Eur. J. – 2016. – Vol. 22, №52. – P. 18899–18907.

[3] Luigi S. From 2-D to 0-D boron nitride materials, the next challenge. / S. Luigi, R. Junkai, I. Plinio // Materials. – 2019. – Vol. 12, №23. – P. 3905.

УДК 538.9; 537.6/.8; 544.2; 535; 621.37; 621.38

Е. В. Луценко

РАЗВИТИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ІІІ-НИТРИДНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь e.lutsenko@ifanbel.bas-net.by

Развитие эпитаксиальных технологий тонких пленок III-нитридов (GaN, AlN, InN) привело к впечатляющему экономическому эффекту. К настоящему времени практически все освещение осуществляется с помощью «белых» светодиодов, содержащих «синий» [1] светодиодный кристалл и желтый люминофор для получения белого цвета. Именно «за изобретение эффективных синих светодиодов, которые позволили создать яркие и энергосберегающие источники белого света» т.е. фактически за то, какое влияние это оказало на общество, и были удостоены в 2014 году Нобелевской премии трое японских ученых И. Акасаки, Х. Амано и Ш. Накамура.

Однако «революция», произошедшая в освещении, не единственное достижение эпитаксиальных технологий III-нитридов. В настоящее время происходит вторая «революция» (рис.1.а) в источниках электропитания (первая была обусловлена применением транзисторов). Увеличение быстродействия GaN транзисторов более чем в 100 раз (по сравнению с кремниевыми транзисторами) позволяет в разы уменьшить массу и габариты источников питания и контролеров электродвигателей за счет уменьшения электрических потерь, массы и габаритов индуктивностей и емкостей. В настоящее время плотности мощности вторичных источников электропитания уже достигают величин более 300 Вт/см³ (5130 W/in³) [3]



Рис.1 – Плотность мощности источников электропитания [2] а) (1977-1987 первая, 2017-2027 вторая революция в силовой электронике), установка молекулярно-пучковой эпитаксии нитридных гетероструктур ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси б)

Именно задачами разработки молекулярно-пучковой эпитаксии (рис. 1.б) транзисторных гетероструктур на основе GaN в настоящее время занимается ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси. Он совместно с ОАО «ИНТЕГРАЛ» - управляющая компания холдинга "ИНТЕГРАЛ" и ОАО "МИНСКИЙ НИИ РАДИОМАТЕРИАЛОВ" разрабатывает новое поколение силовых транзисторов и

мощных СВЧ транзисторов на основе GaN. На этом пути Институтом физики достигнуты впечатляющие результаты: созданы AlGaN/GaN гетероструктуры слоевым сопротивлением двумерного газа 220 Ом/кв., что почти в 2 раза меньше, чем в коммерческих образцах гетероструктур (рис. 2.а); разработана эпитаксия контактных слоев n⁺⁺-типа GaN:Si с концентрацией электронов до 5,5·10²⁰ см⁻³ и удельным сопротивлением ~2·10⁻⁴ Ом·см, что является лучшим в мире результатом для МПЭ (рис. 2.б). Этого удалось добиться благодаря оптимизации условий роста из структурных, электрических и фотолюминесцентных измерений. В частности, показано, что понижение температуры роста GaN:Si приводит к уменьшению самокомпенсации примесных доноров Si собственными дефектами и увеличению максимально достижимых концентраций электронов с уменьшением удельной проводимости.



Рис.2 – Подвижность двумерного электронного газа транзисторных гетероструктур AlGaN/GaN в зависимости от концентрации a), удельная проводимость эпитаксиальных слоев n⁺⁺-типа GaN:Si в зависимости от концентрации электронов

Однако III-нитриды — это еще и изменение ширины запрещенной зоны в системе AlN-GaN-InN от 6,2 до 0,7 эВ, то есть гетероструктуры на твердых растворах перекрывают весь видимый, ультрафиолетовый и ближний инфракрасный диапазон спектра. Большие усилия в мире сейчас прикладываются к ультрафиолетовым фотоприемникам светодиодам и лазерам. ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси также начал работы в этой области совместно с ОАО «ИНТЕГРАЛ», ведутся работы и по созданию сверхярких источников излучения совместно с ЦСОТ НАН Беларуси.

Обсуждаются пути развития и перспективы III-нитридной силовой и СВЧ электроники, УФ оптоэлектроники, лазеров, фотоники и акустооптики, возможности сопряжения их с традиционной кремниевой микроэлектроникой.

- [1] https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2014/summary/
- [2] S. Oliver. Fast-Forward to the GaN Data Center // Power electronics news. January 5, 2021. <u>https://www.powerelectronicsnews.com/fast-forward-to-the-gan-data-center/</u>
- [3] A. Lidow. Efficient Power Conversion // Data Center Dynamics news. March 21, 2022. <u>https://www.datacenterdynamics.com/en/opinions/gan-technology-drives-power-density-in-data-centers/</u>

УДК 543.42

А.В. Мазаник¹, Е.А. Стрельцов², А.И. Кулак³

РАМАНОВСКАЯ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

¹ Белорусский государственный университет, физический факультет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>mazanikalexander@gmail.com</u>

 ² Белорусский государственный университет, химический факультет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>streltea@bsu.by</u>
³ Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова 9/1, 220072 Минск, Беларусь

kulak@igic.bas-net.by

В настоящее время наблюдается значительный интерес к фоточувствительным гетероструктурам, в которых солнечное излучение поглощается в полупроводниковых наночастицах, сформированных на поверхности широкозонных оксидов. Ранее нами было показано, что свойства ансамблей наночастиц CdS, получаемых в таких структурах методом ионного наслаивания, сильно зависят от природы широкозонного оксида-подложки (ZnO, TiO₂, In₂O₃) [1]. Способ получения широкозонного оксида (например, TiO₂) также существенно влияет на свойства формируемых наночастиц CdS. Сравнение рамановских спектров, представленных на рисунке 1, показывает, что использование в качестве подложки пленки TiO₂, сформированной осаждением из коллоидного раствора, приводит к заметно большей ширине однофононной (LO) линии CdS и относительной интенсивности полосы, соответствующей поверхностным (SO) фононам, по сравнению с пленкой TiO₂, полученной электрохимическим осаждением. Это позволяет анализировать влияние роли рекомбинационных процессов фотозарядов на интерфейсах между наночастицами в пленках на их фотоэлектрохимические свойства.



Рисунок 1 – Рамановские спектры наночастиц CdS, на поверхности пленок TiO₂, сформированных катодным восстановлением (а) пероксосульфата титана (+4) и из коллоидного раствора (б). Сплошные линии – аппроксимация кривыми Лоренца. Возбуждение светом с λ=473 нм (25 мкВт).

Анализ межзонной излучательной рекомбинации дает возможность судить о скорости безызлучательных рекомбинационных процессов в полупроводниковом материале и, соответственно, о его дефектности. Так, резкое увеличение интенсивности экситонной полосы в спектрах фотолюминесценции электрохимически осажденных пленок Cu₂O позволило утверждать, что нежелательные для приложений солнечной энергетики безызлучательные процессы в данном материале могут быть эффективно подавлены путем добавления в электролиты осаждения пленок солей Eu³⁺ [2], либо путем замены лигандов меди (II) – лактат-анионов на тартрат-анионы [3].

Основной проблемой солнечных элементов (СЭ) на основе гибридных органонеорганических перовскитов (ГОНП) остается их недостаточная фотостабильность. Анализ фотоиндуцированных процессов, протекающих в таких СЭ, затруднен их инкапсуляцией (например, в стеклянные матрицы), делающей неприменимым широкий круг традиционных аналитических методов (электронная и зондовая микроскопия, дифрактометрия, фотоэлектронная микроскопия и т.д.). В работах [4, 5] методами рамановской и фотолюминесцентной спектроскопии было показано, что световое воздействие на СЭ на основе ГОНП не сопровождается изменением их фазового состава, а доминирующим фактором, вызывающим фотоиндуцированное ухудшение рабочих параметров, является формирование центров безызлучательной рекомбинации «перовскит / дырочно-транспортный слой». Фотоиндуцированное на границе ухудшение рабочих параметров возрастает в присутствии тыльного Аи контакта и, напротив, замедляется при использовании поглощающих перовскитных слоев со сложными составами катионной и анионной подрешеток.

А.В.М. и Е.А.С. выражают благодарность ГПНИ Республики Беларусь «Фотоника и электроника для инноваций» за финансовую поддержку.

- [1] Influence of wide band gap oxide substrates on the photoelectrochemical properties and structural disorder of CdS nanoparticles grown by the successive ionic layer adsorption and reaction (SILAR) method / M.V. Malashchonak, A.V. Mazanik, O.V. Korolik, E.A. Streltsov, A.I. Kulak // Beilstein J. Nanotechnol. – 2015. – Vol. 6. – P. 2252.
- [2] Eu modified Cu₂O thin films: significant enhancement in efficiency of photoelectrochemical processes through suppression of charge carrier recombination / S. Shyamal, P. Hajra, H. Mandal, A. Bera, D. Sariket, A.K. Satpati, M.V. Malashchonak, A.V. Mazanik, O.V. Korolik, A.I. Kulak, E.V. Skorb, Ajun Maity, E.A. Streltsov, C. Bhattacharya // Chem. Eng. J. – 2018. – Vol. 335. – P. 676.
- [3] Strong room temperature exciton photoluminescence in electrochemically deposited Cu₂O films / A.V. Mazanik, A.I. Kulak, E.A. Bondarenko, O.V. Korolik, N.S. Mahon, E.A. Streltsov // J. Lumin. 2022. Vol. 251. P. 119227.
- [4] Dynamics of photo-induced degradation of perovskite photovoltaics: from reversible to irreversible processes / Mark Khenkin, Anoop K.M., Iris Visoly-Fisher, Sofiya Kolusheva, Yulia Galagan, Francesco Di Giacomo, Olivera Vukovic, Bhushan Patil, Golnaz Sherafatipour, Vida Turkovic, Horst-Guenter Rubahn, Morten Madsen, Alexander V. Mazanik, Eugene A. Katz // ACS Appl. Energy Mater. – 2018. – Vol. 1. – P. 799.
- [5] Photoluminescence kinetics for monitoring photoinduced processes in perovskite solar cells / N.S. Mahon, O.V. Korolik, M.V. Khenkin, G.E. Arnaoutakis, Y. Galagan, V. Soriūtė, D. Litvinas, P. Ščajev, E.A. Katz, A.V. Mazanik // Sol. Energy. – 2020. – Vol. 195. – P. 114.

УДК 621.315.592

А. В. Мазаник¹, И. А. Свито¹, В. К. Ксеневич¹, Е. А. Стрельцов², А. И. Кулак³

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ВИСМУТА: ЭКОЛОГИЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И СЕНСОРИКИ

 ¹ Белорусский государственный университет, физический факультет, np. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>mazanikalexander@gmail.com</u>
² Белорусский государственный университет, химический факультет, np. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>streltea@bsu.by</u>
³ Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова 9/1, 220072 Минск, Беларусь <u>kulak@igic.bas-net.by</u>

Наблюдаемый в настоящее время повышенный интерес к полупроводниковым соединениям висмута (ванадату BiVO₄, оксоиодиду BiOI, оксобромиду BiOBr, оксосульфиду Bi₁₀O₆S₉, тиоиодиду BiSI) обусловлен нетоксичностью и доступностью входящих в них элементов. Эти материалы могут быть получены простыми и недорогими методами химического или электрохимического осаждения, которые представляют альтернативу существенно более затратным вакуумным методам [1].

Исследование оптических свойств моноклинного ванадата висмута BiVO4 актуально В связи с его высокой активностью в фотокаталитических и фотоэлектрохимических процессах (в том числе и фотоэлектролиза воды). Важным преимуществом моноклинного BiVO4 перед классическими фотокаталитическими оксидами (TiO₂, ZnO, WO₃) является его меньшая ширина запрещенной зоны E_g, что делает возможным протекание фотоиндуцированных процессов при воздействии не только УФ, но и видимого света. Вместе с тем, известные из литературы данные о величине Eg весьма противоречивы. Нами было выполнено определение Eg и установление типа электронных переходов методом спектроскопии квантовой эффективности фототока (Y), генерируемого в системе «полупроводник-электролит» [2]. Такая возможность связана с тем, что вблизи края фундаментального поглощения величина У пропорциональна коэффициенту поглощения света. Преимущество данного подхода обусловлено отсутствием влияния на регистрируемые спектры механизмов поглощения, не связанных с генерацией электронно-дырочных пар. Было показано, что в ванадате висмута сосуществуют прямые ($E_{gd} = 2,63 \text{ эB}$) и непрямые ($E_{gi} = 2,44 \text{ эB}$) межзонные электронные переходы.

В работах [3, 4] были исследованы структура, оптические, фотоэлектрохимические и фотокаталитические свойства BiOI и BiOBr. Данные полупроводниковые соединения характеризуется слоистым строением и осаждаются в виде пластинчатых кристаллов толщиной несколько десятков нанометров. Это делает их перспективными для фотокаталитических и сенсорных приложений. Было экспериментально показано [4], что изменение условий осаждения позволяет эффективно управлять укладкой кристаллитов, что, в свою очередь, сильно влияет на свойства полупроводниковых слоев.

В работах [5, 6] описан новый полупроводниковый материал – оксосульфид висмута Bi₁₀O₆S₉, характеризующийся шириной запрещенной зоны около 1,4 эВ, проводимостью *п*-типа и нанопластинчатым строением. Показано, что данный материал проявляет высокую фотопроводимость при катодной поляризации полупроводниковых электродов в водных электролитах (квантовая эффективность может достигать тысяч процентов). Однако малые значения времени жизни (десятки пикосекунд) и коэффициента диффузии носителей заряда (не более 10⁻² см²/с) создание твердотельных фотовольтаических и фоторезистивных ограничивают $Bi_{10}O_6S_9$. большое структур на основе С другой стороны, соотношение «поверхность / объем» делает оксосульфид висмута перспективным для сенсорных применений. В частности, нами установлено, что при увеличении относительной влажности от 5 до 85 % происходит быстрое увеличение проводимости пленок более чем на три порядка величины с ее последующим незначительным уменьшением. Наблюдаемый эффект объясняется появлением ионной проводимости по поверхности нанопластинчатых кристаллов и акцептированием свободных электронов ИЗ полупроводника кислородом, растворенным в воде. Аналогичное поведение характерно и для пленок тиоиодида висмута, который также может быть получен методом химического осаждения и формирует кристаллиты игольчатой формы [7].

А.В.М., И.А.С. и Е.А.С. выражают благодарность ГПНИ Республики Беларусь «Фотоника и электроника для инноваций» за финансовую поддержку.

- Colloidal nanophotonics: the emerging technology platform / S. Gaponenko, H.V. Demir, C. Seassal, U. Woggon // Opt. Express. – 2016. – Vol. 24. – P. A430.
- [2] Monoclinic bismuth vanadate band gap determination by photoelectrochemical spectroscopy / M.V. Malashchonak, E.A. Streltsov, D.A. Kuliomin, A.I. Kulak, A.V. Mazanik // Mater. Chem. Phys. – 2017. – Vol. 201. – P. 189.
- [3] Photocurrent switching effect on platelet-like BiOI electrodes: influence of redox system, light wavelength and thermal treatment / M.E. Kazyrevich, M.V. Malashchonak, A.V. Mazanik, E.A. Streltsov, A.I. Kulak, C. Bhattacharya // Electrochim. Acta. – 2016. – Vol. 190. – P. 612.
- [4] Crystal stacking: a route to control photoelectrochemical behavior of BiOBr films / M.E. Kazyrevich, E.A.Streltsov, M.V. Malashchonak, A.V. Mazanik, A.I. Kulak, P. Ščajev, V. Grivickas // Electrochim. Acta. – 2018. – Vol. 290. – P. 63.
- [5] Giant incident photon-to-current conversion with photoconductivity gain on nanostructured bismuth oxysulfide photoelectrodes under visible-light illumination / E.A. Bondarenko, E.A. Streltsov, M.V. Malashchonak, A.V. Mazanik, A.I. Kulak, E.V. Skorb // Adv. Mater. – 2017. – Vol. 29 (40). – P. 1702387.
- [6] Bismuth oxysulfide film electrodes with giant incident photon-to-current conversion efficiency: dynamics of properties with deposition time / E.A. Bondarenko, E.A. Streltsov, A.V. Mazanik, A.I. Kulak, V. Grivickas, P. Ščajev, E.V. Skorb // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2018. - Vol. 20. - P. 20340.
- [7] Synthesis and photoelectrochemical properties of bismuth thioiodide / M.E. Kazyrevich, D.Y. Ivashenka, E.A. Bondarenko, E.A. Streltsov, A.I. Kulak // Proc. National Academy of Sciences of Belarus. Chemical series. – 2018. – Vol. 54 (4). – P. 413 (in Russian).

УДК 548.571; 539.143.43; 535.343.2

А. П. Низовцев^{1,2}, А. Л. Пушкарчук^{2,3}, С. А. Кутень⁴, В. П. Стефанов¹, D. Lyakhov⁵, D.L. Michels⁵, А. С. Гусев², Н.И. Каргин², С.Я. Килин¹

КВАНТОВАЯ ПАМЯТЬ НА ДИМЕРАХ ¹³С-¹³С В АЛМАЗЕ С NV-ЦЕНТРАМИ: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

apniz@dragon.bas-net.by, sergei kilin@yahoo.com

² Национа́льный иссле́довательский я́дерный университет «МИФИ́», Каширское ш., 31, 11540 Москва, Россия

apniz@dragon.bas-net.by, alexp51@bk.ru, NIKargin@mephi.ru

³ Институт физико-органической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Беларусь

alexp51@bk.ru

⁴ Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская 11,220030, Минск, Беларусь <u>semen_kuten@list.ru</u>

⁵ King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia

dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa, dominik.michels@kaust.edu.sa

Индивидуальные гибридные электронно-ядерные спиновые системы в твердых телах являются перспективными платформами для реализации квантовых технологий второго поколения [1], в частности – квантовой магнитометрии и квантовой сенсорики. Признанным лидером здесь являются отрицательно заряженные центры окраски «азот-вакансия» (NV) в алмазе, связанные сверхтонким взаимодействием (СТВ) с ядерными спинами ¹³С, В частности, магнитометр на основе одиночного NV-центра может обеспечить пространственное разрешение нанометрового масштаба и исключительную чувствительность, позволяющую обнаруживать одиночные ядерные спины ¹³С в алмазе, которые из-за их больших времен когерентности широко используются в современных квантовых технологиях в качестве квантовой памяти. Кроме того, магнитометр на основе NV центров позволяет различать одиночные ядерные спины молекул, расположенных на поверхности алмаза [2], что открывает новую интересную область исследований односпинового ядерного магнитного резонанса (ЯМР) для изучения важных вопросов, от определения молекулярной структуры неорганических/биологических соединений до визуализации и терапии в медицине.

Помимо одиночных спинов ¹³С, недавно для использования в качестве квантовой памяти было предложено [3] использовать димеры ¹³С-¹³С в алмазе, поскольку при переводе в синглетное состояние такие спиновые системы обладают очень большими временами когерентности. Экспериментально такие индивидуальные димеры наблюдались ранее [4] в алмазе с NV-центрами. Совсем недавно они были подробно изучены в работе [5], где одиночный NV-центр был использован не только для обнаружения наличия и выяснения характеристик шести различных димеров ¹³С-¹³С в окружении этого NV-центра, но и для инициализации, контроля и считывания этих димеров.

Здесь мы представляем результаты теоретического анализа произвольной многоспиновой системы NV-¹³C-¹³C, а также прогнозного моделирования ряда типичных систем NV-¹³C-¹³C в алмазе с NV-центрами. Для этого были построены спин-гамильтонианы изучаемых систем с использованием в них расчетных данных о пространственном расположении ядерных спинов димеров ¹³С-¹³С относительно NV центра, их СТВ с NV центром и взаимодействий между собой, полученных нами ранее в работах [6, 7] методами квантовой химии. Следует отметить, что при этом нами впервые учтено непрямое, через электроны связей С-С, взаимодействие ядерных спинов димера (т.н. J-coupling). Отметим при этом, что современная ЯМР-спектроскопия на основе NV центров обеспечивает спектральное разрешение ~ мГц, более чем достаточное для наблюдения эффектов, связанных с непрямым взаимодействием ядерных спинов. Построенные гамильтонианы диагонализовались численно для определения характеристик (уровней энергии и вероятностей переходов) исследуемых спиновых систем. Используя полученные расчетные данные, предсказаны оптимальные параметры микроволновых и радиочастотных импульсов для создания димера в синглетном состоянии. Кроме того, нами получены простые приближенные аналитические выражения для характеристик произвольной многоспиновой системы NV-¹³C-¹³C. Полученные результаты важны для широкого круга разрабатываемых квантовых технологий.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 21-42-04416, и, в части приближенного аналитического анализа - Белорусской государственной программы научных исследований "Конвергенция-2025". Simulation of J-coupling were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

[2] Glenn D.R. High-resolution magnetic resonance spectroscopy using a solid-state spin sensor. / Glenn D.R., Bucher D.B., Lee J., Lukin M. D., Park H., Walsworth R. L. // Nature. – 2018. – Vol. 555. – P. 351.

[3] Chen Q. Steady-state preparation of long-lived nuclear spin singlet pairs at room temperature / Chen Q., Schwarz I., Plenio M. B. // Phys. Rev. B. -2017. – Vol. – P. 224105.

[4] Shi F. Sensing and atomic-scale structure analysis of single nuclear-spin clusters in diamond / Shi F., Kong X., Wang P., Kong F., Zhao N., Liu R.-B., Du J. // Nat. Phys. – 2014. – Vol. – P. 21.

[5] Abobeih M.H. One-second coherence for a single electron spin coupled to a multiqubit nuclear-spin environment /Abobeih M.H., Cramer J., Bakker M.A., Kalb N., Markham M., Twitchen D.J., Taminiau T.H.// Nat. Communs. – 2018. - Vol. 9. – P. 2552.

[6] Nizovtsev A. P. Non-flipping ¹³C spins near an NV center in diamond: hyperfine and spatial characteristics by density functional theory simulation of the C_{510} [NV] H_{252} cluster / Nizovtsev, A.P., Kilin, S.Y., Pushkarchuk, A.L., Pushkarchuk, V.A., Kuten, S.A., Zhikol, O.A., Schmitt, S., Unden, T., Jelezko, F. // New Journal of Physics. – 2018. – Vol. 20. – P. 023022.

[7] Nizovtsev A. Simulation of indirect ¹³C-¹³C J-coupling tensors in diamond clusters hosting the NV center. / Nizovtsev A., Pushkarchuk A., Kuten S., Michels D., Lyakhov D., Kargin N., Kilin S. // Mater. Proc. 2022, 9, 4.

^[1] Awschalom D. D. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins ./ Awschalom D. D., Hanson R., Wrachtrup J., Zhou B. B. // Nature Photonics. - 2018. - Vol. 516. – P. 516.

УДК 537.213; 530.12

Н. А. Поклонский Релятивистский электрический потенциал в полевом транзисторе

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь poklonski@bsu.by

В докладе предложена схема измерения релятивистского электрического потенциала вблизи проводников со стационарным током. Преобразования Лоренца являются неотъемлемой частью специальной теории относительности, основанной на двух постулатах (см., например, [1]): 1) законы физики одинаковы во всех инерциальных системах отсчета, 2) скорость света в вакууме c = 299792458 m/s одинакова во всех инерциальных системах отсчета и не зависит от скорости движения источника света.

В работе [2] отмечено, что в однородном проводнике из нормального (несверхпроводящего) металла со стационарным дрейфовым током возникает объемный электрический заряд из-за ухода части электронов проводимости (движущихся в металле с дрейфовой скоростью v_d) в глубь металла под действием магнитного поля, созданного этим же током. В приповерхностной области металла остается положительный заряд нескомпенсированных электронами ионных остовов. Такое перераспределение электронов по поперечному сечению проводника электричества — суть пинч-эффекта [3]. Но как измерить пропорциональную $(v_d/c)^2$ плотность объемного заряда в металле?

По расчетам [4, 5] прямолинейный одномерный проводник электричества с возбужденным в нем стационарным током порождает, наряду со стационарным магнитным полем, стационарное электрическое поле вблизи проводника. Электрический потенциал Лиенара-Вихерта (см., например, [6]), создаваемый элементом тока, интегрируется по квазиодномерному проводнику (тонкой проволоке) конечной длины. В каждой точке проволоки задается баллистическая скорость v_b бесстолкновительного движения электронов между электродами (от катода к аноду) и их концентрация *n*. Проволока предполагается локально и в целом электрически нейтральной. Это соответствует отсутствию инжекции в проволоку из контактов (электродов) избыточных электронов и/или дырок под действием разности электрических потенциалов между анодом и катодом от внешнего источника тока. Величина релятивистского электрического потенциала $\phi_{\rm rel} \propto (v_{\rm b}/c)^2$. Пусть в прямой квазиодномерной проволоке из кристаллического полупроводника в виде сплошного цилиндра длиной *L* и площадью поперечного сечения S возбужден стационарный ток силой I. Согласно [4, 5], создаваемый проволокой $(L = 15 \,\mu\text{m}, S = 30 \,\mu\text{m}^2, n = 1.10^{15} \,\text{cm}^{-3})$ с омическими контактами (электродами) и током I = 0.3 mA, на расстоянии $d = 5 \,\mu\text{m}$ от центра проволоки в перпендикулярном току направлении, релятивистский электрический потенциал $\phi_{rel} \approx -1.1 \ \mu V$.

Из полученной в [4, 5] формулы для φ_{rel} следует, что релятивистский потенциал не зависит от направления вектора плотности тока, и при прочих равных условиях величина $|\varphi_{rel}|$ тем больше, чем меньшей концентрацией подвижных (делокализованных) электронов обеспечивается поддержание в проволоке заданной силы тока. Дрейфовая скорость электронов в электродах (неограниченных резервуарах электронов) много меньше, чем баллистическая скорость электронов в проволоке. Поэтому при переходе электронов из катода в проволоку происходит их ускорение, а при переходе из проволоки в анод — торможение (проявление эффекта Бернулли для несжимаемой «электронной жидкости» в изотермических условиях [7]). Согласно [8], области с ускорением и торможением электронов дают в центре проволоки одинаковые по величине и противоположные по знаку вклады в потенциал ϕ_{rel} , так что регистрацию потенциала ϕ_{rel} необходимо проводить порознь для двух направлений стационарного тока.

Итак, релятивистские эффекты, основанные на преобразованиях Лоренца, могут быть зарегистрированы не только оптическими методами [9, 10], но и электрическими измерениями релятивистского потенциала φ_{rel} на затворе полевого транзистора с изначально открытым квазиодномерным каналом баллистической стационарной электропроводности между истоком и стоком. (Схемы включения полевых транзисторов в электрическую цепь см., например, в [11].)

Работа поддержана Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (грант № Ф23РНФ-049).

- [1] Бессонов, Е.Г. Об одном пути к преобразованиям Лоренца / Е.Г. Бессонов // УФН. - 2016. - Т. 186, № 5. - С. 537-541.
- [2] Мартинсон, М.Л. О плотности заряда внутри проводника с током / М.Л. Мартинсон, А.В. Недоспасов // УФН. – 1993. – Т. 163, № 1. – С. 91–92.
- [3] Kushwaha, M.S. The quantum pinch effect in semiconducting quantum wires: A bird'seye view / M.S. Kushwaha // Mod. Phys. Lett. B. – 2016. – Vol. 30, № 4. – P. 1630002.
- [4] Митянок, В.В. Релятивистское электростатическое поле проводника с постоянным током / В.В. Митянок, Н.А. Поклонский // ЖТФ. – 1993. – Т. 63, № 1. – С. 189–191.
- [5] Relativistic electric potential near a resting straight carbon nanotube of a finite-length with stationary current / N.A. Poklonski [et al.] // Journal of the Belarusian State University. Physics. – 2021. – № 1. – P. 20–25.
- [6] Griffiths, D.J. Introduction to electrodynamics / D.J. Griffiths. Cambridge: Cambridge University Press, 2017. – xviii+600 p.
- [7] Лифшиц, Т.М. Экспериментальное наблюдение конфигурационных ЭДС / Т.М. Лифшиц, О.Ю. Полянский, В.В. Романцев // Письма в ЖЭТФ. – 1973. – Т. 18, № 7. – С. 421–424.
- [8] Поклонский, Н.А. Релятивистский электрический потенциал одномерных проводников со стационарным током / Н.А. Поклонский // Спиновые и магнитные явления в конденсированных средах: тез. докл. молодежной конф. по физике полупроводников «Зимняя школа 2023», С.-Петербург (г. Зеленогорск), 2–6 марта 2023 г. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. – С. 31–34.
- [9] Hils, D. Improved Kennedy-Thorndike experiment to test special relativity / D. Hils, J.L. Hall. – Phys. Rev. Lett. – 1990. – Vol. 64, № 15. – P. 1697–1700.
- [10] Эксперименты по прямой демонстрации независимости скорости света от скорости движения источника (демонстрация справедливости второго постулата специальной теории относительности Эйнштейна) / Е.Б. Александров [и др.] // УФН. – 2011. – Т. 181, № 12. – С. 1345–1351.
- [11] Ng, K.K. Complete guide to semiconductor devices / K.K. Ng. New York: Wiley-IEEE Press, 2002. – xxiv+740 p.

УДК 538.9

А.И. Серокурова, С.А. Шарко, Н.Н. Новицкий, А.И. Стогний

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК МЕТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ Ве, Ni и Au B УСЛОВИЯХ МНОГОКРАТНОГО ПОВТОРЕНИЯ ЦИКЛОВ ИОННО-ЛУЧЕВОГО РАСПЫЛЕНИЯ – ОСАЖДЕНИЯ

Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, 220072, Минск, ул. П. Бровки, 19, Беларусь aleksa.serokurova@yandex.by

Получение металлов в наноразмерном состоянии [1-2] и исследование их свойств имеет решающее значение для современной науки и техники и поэтому является одним из приоритетных направлений развития материаловедения в ближайшее время. Сплошные пленки металлов толщиной в единицы – десятки нанометров на различных по природе подложках, в том числе диэлектрических, представляют собой значительный научный и практический интерес.

В работе получены тонкие пленки бериллия, золота и никеля толщиной в несколько десятков нанометров на кремниевых и кварцевых подложках методом ионно-лучевого распыления-осаждения с многократным чередованием операции осаждения наноразмерного слоя металла и его частичного распыления. Полученные пленки имеют лучшие морфологические, электрические и оптические характеристики, чем плёнки, полученные в результате непосредственного однократного осаждения.

Получение плёнок металлов осуществлялось методом ионно-лучевого распыления – осаждения. Осаждение слоя бериллия и золота на предварительно подготовленную подложку производилось распылением мишени соответствующего металла ионами аргона с энергией 1,3 кэВ и плотностью тока ионного пучка 0,1-0,25 мА/см² при давлении остаточной атмосферы не выше 0,2 Па. Геометрия установки, в частности малое расстояние между мишенью и подложкой, по сравнению с длиной свободного пробега атомов в условиях рабочего вакуума, позволяли все распыляемые атомы направлять на подложку. При многократном применении операции осаждения – распыления нанесение слоя металла проводилось в тех же условиях в течение 60 с, а распыление осуществлялось ионами аргона тех же энергий в течение 30 с.

Среднеквадратическая шероховатость поверхности тонкого слоя металла на кремнии, а также средний размер гранул уменьшаются при переходе к многократному воздействию пучком распылённых атомов на растущую плёнку (рис. 1). Пучок распылённых атомов высокоэнергетической составляющей разбивает кластеры металла на начальной стадии их формирования. Это свидетельствует о подавлении трёхмерного зародышеобразования при повторном осаждении и переходе к двумерному механизму формирования наноразмерного слоя металла с преобладанием латеральной диффузии (вдоль плоскости плёнки) над вертикальной.

На поперечном сечении в области интерфейса плёнка /подложка не наблюдается никаких отслоений, а сам интерфейс представляет собой сплошную и ровную поверхность раздела, что свидетельствует об отсутствии химического взаимодействия и посторонних фаз на границе раздела. Это является доказательством возникновения хорошей адгезии слоя металла к подложке.



Рисунок 1. РЭМ изображение поверхности плёнок бериллия, золота, никеля при однократном осаждении на исходную поверхность кремния (a), (d) и (g), при однократном повторном осаждении (b), (e) и (h), при десятикратном осаждении на активированную поверхность кремния (c), (f) и (i).

Электрические измерения показывают уменьшение поверхностного сопротивления для плёнок, полученных после десятикратного осаждения. Также уменьшается разброс значений сопротивления плёнок, что свидетельствует об улучшении их термостабильности.

В данной работе продемонстрирован новый подход к формированию сплошных однородных наноразмерных плёнок металла с преимущественно латеральным ростом за счёт стимулирования зарождающегося слоя собственным потоком адатомов высоких энергий.

Исследование выполнено за счет гранта БФФИ № Т22М-001 Список литературы:

- [1] Stupakiewicz, A.; Pashkevich, M.; Maziewski, A; et al Appl. Phys. Lett. 2012, 101, 262406-4.
- [2] Pashkevich, M.; Stupakiewicz, A.; Kirilyuk, et al. Tunable magnetic properties in ultrathin Co/garnet heterostructures. J. Appl. Phys. 2012, 111, 023913-5.

АУДК 535.37

Д. С. Филимоненко, В. М. Ясинский, А. П. Низовцев, С. Я. Килин

МАГНИТОМЕТРИЯ НА ОСНОВЕ РЕГИСТРАЦИИ ПРОЦЕССОВ КРОСС-РЕЛАКСАЦИИ МЕЖДУ РАЗЛИЧНЫМ ОБРАЗОМ ОРИЕНТИРОВАНЫМИ ГРУППАМИ NV-ЦЕНТРОВ В СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>d.filimonenko@dragon.bas-net.by</u>

Уникальные фотофизические свойства NV-центров В алмазе делают их перспективной платформой для создания устройств квантовой сенсорики, криптографии и информатики [1]. Среди наиболее перспективных областей применения NV-центров можно выделить создание на их основе высокочувствительных квантовых магнитометров. В настоящее время основной схемой реализации магнитных измерений с использованием NV-центров является метод оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР). Однако необходимость подвода СВЧ-излучения к образцу алмаза усложняет и удорожает схему измерения, а также сужает возможности использования ОДМР. Серьезные трудности для ОДМРмагнитометрии представляет также обеспечение измерений в слабых магнитных полях. В данной работе представлен полностью оптический (без использования СВЧ) способ магнитометрии, основанный на использовании кросс-релаксационного взаимодействия между различным образом ориентированными группами NV-центров в алмазе, которое приводит к появлению характерного резонанса в магнитном спектре ансамбля NVцентров в области нулевого магнитного поля (РНП) [2-3].

Для регистрации РНП использовалась модуляционная методика измерения на базе синхронного усилителя (СУ) [2-3]. Производилась запись сигнала модуляции интенсивности люминесценции ансамбля NV-центров на частоте слабого модулирующего магнитного поля B_{mod} (1,5 кГц) при плавном изменении магнитного поля развертки, т.е. выходной сигнал СУ (X) был пропорционален производной от интенсивности люминесценции образца как функции магнитного поля.

На рис. 1 приведены экспериментальные зависимости выходного сигнала СУ от величины магнитного поля развертки, полученные для различных образцов алмаза: двух образцов, синтезированных методом НРНТ, в виде объемного монокристалла (HPHT1) и алмазного порошка (HPHT2) с содержанием NV-центров 6-7 ppm, а также двух образцов, полученных методом CVD, с содержанием NV-центров 1,5 (CVD1) и 4 ppm (CVD2). На всех зависимостях присутствует узкий резонанс в нулевом магнитном поле, ширина которого варьируется в пределах от 6 (CVD1) до 14 Гс (HPHT2).

На рисунке 2 представлены семейства зависимостей $X(B_1)$, полученные для образца НРНТ1 при разной ориентации и величине дополнительного магнитного поля B_2 , направленного аксиально (рисунок 2,а) и ортогонально (рисунок 2,б) магнитному полю развертки B_1 . Сравнение зависимостей показывает, что параллельная ориентация полей B_2 и B_1 приводит к сдвигу положения РНП, пропорциональному величине B_2 . Для взаимно ортогональных направлений B_1 и B_2 эволюция зависимости $X(B_1)$ носит

более сложный характер. В слабом магнитном поле B_2 (<10 Гс) положение кривой РНП не изменяется, при этом ее контур уширяется, а амплитуда несколько уменьшается. Дальнейший рост магнитного поля приводит к возникновению двух дополнительных резонансов, которые постепенно раздвигаются полем B_2 .

Таким образом, периодическое прохождение магнитного резонанса позволяет определять приложенное поле B_2 по изменению положения и формы кривой РНП.



В.=25 Гс В.=30 Ге -6 50 -50 100 -100 0 -150 -100 -50 50 100 150 B₁, rayce В,, Гс

Рис.2 РНП при наложении дополнительного поля В2

- [1] Schirhagl, R. Nitrogen-vacancy centers in diamond: Nanoscale sensors for physics and biology / R. Schirhagl, K. Chang, M. Degen // Annu. Rev. Phys. Chem. 2014.— Vol. 65.— P. 83–105.
- [2] Filimonenko, D. S. Weak magnetic field effects on the photoluminescence of an ensemble of NV centers in diamond: experiment and modelling / D. S. Filimonenko et al // Semiconductors — 2020. — Vol. 54. — P. 1730–1733.
- [3] Филимоненко, Д. С. Проявления в ИК-люминесценции процессов кросс-релаксации NV-центров в слабых магнитных полях / Д. С. Филимоненко и др. // ЖПС — 2021. — Т. 88, № 6. — С. 858–871.

Х, отн.ед

УДК 620.91

В.В. Филиппов, В.А. Лабунов, И.А. Кашко, Д.В. Грапов, А.К. Тучковский

ПАССИВАЦЦИЯ ГРАНИЦЫ ПЕРОВСКИТА И ТРАНСПОРТНЫМ СЛОЕМ ОКСИДА НИКЕЛЯ ГРАФИТОМ И КАРБИДОМ БОРА

БГУИР, Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь <u>filippov@bsuir.by</u>

Для повышения эффективности и стабильности фотоэлектрических ячеек на основе металлорганических перовскитов все шире применяются модифицирование границы перовскита с транспортными слоями (инженерия границ). С этой целью используются мономолекулярные слои ряда органических веществ. В практическом отношении представляют интерес неорганические материалы. В работе представлены результаты пассивации границы метиламмония иодида свинца и оксида никеля (NiO_x) – зарядово-транспортного слоя *p*-типа проводимости, с помощью углеродных материалов – тонких слоев графита и карбида бора (C4B).

Инвертированные фотовольтаические ячейки для исследований имели структуру: стекло/ITO (200нм)/NiO_x (35-40нм)/ углеродный материал/перовскит(1.5 мкм)/TiO₂(30нм)/Ti(10нм)/A1 (50мкм). Для уменьшения сопротивления слоя NiO_x, сформированным высокочастотным магнетронным распылением, он допировался ионами Al^{3+} (Звес%) по разработанной нами процедуре. Графит и C₄B толщиной до 10 нм методом вакуумного электронно-лучевого испарения наносились на поверхность NiO_x, граничащую с перовскитом. Она подвергалась очистке бомбардировкой ионами аргона, которые также разрывали поверхностные связи, которые позже сшивались с напыляемым материалом, что значительно улучшало их адгезию к поверхности. Затем нанесенные пленки отжигались в вакууме при 420°С в течении 1 ч. Гидрофобные поверхности углеродных материалов обрабатывались раствором йодистого азота в диэтиловом эфире. Такая обработка позволила получить поверхностные нанометровые слои с хорошими гидрофильными свойствами и хорошей адгезией. Толщина слоев оценивалась эллипсометрически.

Измеренные ВАХ ячеек при освещении на имитаторе солнечного света (солнечный спектр AM 1,5) мощностью 50 мВт/см² показаны на рис.1. Во всех испытанных ячейках напряжение холостого хода находилось в интервале 600-650 мВ, что до 6.5% превышало напряжение холостого хода ячейки без пассивации границы. Плотность тока короткого замыкания для ячеек с пассивацией графитом и C4B лежала в диапазоне 14–19 мА/см², что на 10–40% превышало ее значение для ячеек без пассивирующих слоев. Наилучшие параметры показали ячейки с пассивацией поверхности NiO_x карбидом бора и графитом; они более детально исследовались далее.

Для оценки качества пассивации границы NiO_x – перовскит была использована спектроскопия электрохимического импеданса (в диапазоне частот 0.1Гц–100кГц) и





фотолюминесценция (ФЛ). В табл. 1 приведены электрические характеристики ячеек при моделировании импеданса элементами постоянной фазы (СРЕ) в условиях отсутствия освещения. При этом для ячейки с пассивацией границы NiO_x – перовскит карбидом бора импедансная диаграмма состояла из двух полуэллипсов, а эквивалентная электрическая схема включала два элемента СРЕ с рекомбинационными сопротивлениями R_{rec1} и R_{rec2} и показателями *n*.

,		, , , ,		1	5 11
Ячейка	<i>Rs</i> , Ом	R_{recl} , Ом	<i>R_{rec2}</i> , Ом	n_1	n_2
исходная	195,52	5896,7	-	0,62992	-
графит	52,279	1287,2	-	0,73899	-
C ₄ B	51,226	344,43	654,95	0,71648	0,92618

Таблица 1. Параметры элементов СРЕ (рекомбинационное сопротивление R_{rec} и

экспоненциальный показатель n) и последовательное сопротивление R_s исследованных ячеек

Как видно из таблицы рекомбинационное сопротивление ячеек с пассивацией границы значительно уменьшилось. При этом возросли их емкостные свойства, о чем говорят высокие значения *n*.

Эффективная пассивация границы хорошо проявляется в уменьшении интенсивности ФЛ. Интенсивность свечения упала по сравнению с непассивированной границей раздела почти в 4 раза, при пассивации графитом и в 3 раза – при пассивации С4В. Это говорит о значительном усилении дрейфа заряда из перовскита на электрод. Известно, что эффективность ячеек на основе NiO_x ограничивается как раз медленной экстракцией дырок из-за плохой границы раздела перовскит – NiO_x. С улучшением пассивации границы спектр ФЛ смещается в длинноволновую область спектра (до 30 нм при пассивации С4В), что является следствием уменьшения ширины запрещенной зоны перовскита, частично вызванной его структурной перестройкой вблизи границы с NiO_x.

УДК 535.015

О. Х. Хасанов¹, О. М. Федотова¹, Г. А Русецкий¹, А. В. Пашкевич², К. В. Писцова³, Я. Д. Горбач³, Д. К. Жарков⁴, В. Г. Никифоров⁴

АПКОНВЕРСИОННОЕ ФОТОННОЕ ЭХО В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ДИОКСИДА ТИТАНА

¹ Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедения, ул. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь

<u>olkhas@mail.ru</u>

²НИИ ядерных проблем, ул. Бобруйская, 11, 220030, Минск, Беларусь ³Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь ⁴ФИЦ КНЦ РАН, ул. Лобачевского, 2/31, Казань, 420111, Татарстан, Российская Федерация

В настоящее время активно развиваются методы оптогенетики, позволяющие контролировать биологические функции клеток, группы клеток, тканей или органов с высоким временным и пространственным разрешением с использованием оптических систем и технологий генной инженерии. Первоначально эта область развивалась в связи с необходимостью точного контроля нейронов и расшифровки нейронных цепей и добилась больших успехов в нейробиологии [1]. Суть оптогенетики в том, что только нужные нейроны или нервные ткани начинают реагировать на свет за счет генетической модификации. С помощью современных оптических технологий свет, изменяющий поведение нервных клеток, может быть безболезненно и точно доставлен к мишени в естественных условиях. Хотя для этого существуют разные подходы, существует острая необходимость в разработке неинвазивных методов доставки видимого излучения к светочувствительным рецепторам. В то же время живые ткани, прозрачные для ближнего ИК-излучения, поглощают видимый свет. Поэтому очевидным решением этой проблемы может быть использование наночастиц, обеспечивающих ап-конверсию ближнего ИК-излучения в видимый свет. Такие быть биосовместимыми высокоэффективными наночастицы должны И для спектрального преобразования света.

Среди большого разнообразия наноматериалов, перспективных для биомедицинского применения, нанокристаллы, легированные ионами редкоземельных элементов, в частности, YVO₄:Yb³⁺, Er³⁺, привлекают внимание ученых благодаря уникальным свойствам поглощать излучение в ИК области спектра и излучать свет в видимом диапазоне. Указанные наночастицы обладают хорошей термической, оптической и химической стабильностью, а также низкими безызлучательными потерями. Квантовый выход апконверсионной люминесценции в таких кристаллах может быть достаточно большим благодаря наличию метастабильных состояний и большому сечению поглощения в ионах донора и «лестничная» структура ионов акцептора [2]. Более того, упомянутые нанокристалллы являются биосовместимыми.

В настоящей работе рассматривается процесс возбуждения сигналов фотонного эхо в ансамбле квантовых точек (КТ) диоксида титана. Отличительной особенностью указанных квантовых точек, подобно другим полупроводниковым соединениям A₂B₆, является наличие большого постоянного дипольного момента (ПДМ), порядка сотен Дебай. Рассматривается схема возбуждения сигналов фотонного эха на экситонных переходах двумя неколлинеарными ИК импульсами света. Показано, что взаимодействие КТ с лазерным импульсом при наличии ПДМ эквивалентно взаимодействию с многочастотным полем, индуцирующим одно- и двухквантовые переходы между рабочими уровнями. Наведенная поляризации помимо резонансной компоненты содержит кратные гармоники. Проведен расчет сигналов первичного фотонного эхо двумя фемтосекундными импульсами света с волновыми векторами $\vec{k_1}$ и $\vec{k_1}$, соответственно, с учетом временной задержки между ними. Как показано, в направлении $2\vec{k}_2 - \vec{k}_1$ будет излучаться сигнал первичного фотонного эхо на резонансной частоте. Одновременно сигнал на резонансной частоте параметрически будет возбуждать сигналы на кратных частотах: в направлении $3\vec{k}_2 - \vec{k}_1$ на двойной частоте, а в направлении $4\vec{k}_2 - \vec{k}_1$ - на тройной (см. рис. 1). Причем, амплитуда эхоотклика на удвоенной частоте будет пропорциональна ПДМ, а на тройной - квадрату



Рисунок 1. Направления сигналов фотонного эхо на резонансной, двойной и тройной частотах

его величины. Таким образом, с учетом нетоксичности КТ диоксида титана сигналы фотонного эхо на кратных частотах, возбуждаемые ИК лазерными импульсами, могут найти применение для оптического контроля над клетками с использованием опсинов. Как показывает анализ, в режиме четырехволнового смешения с временной задержкой можно увеличить интенсивность указанных апконверсионных откликов.

[1] Deisseroth K. Controlling the brain with light/ Deisseroth K.//Sci. Am.-2010- V. 303-P. 48 -55.

[2] Шмелев А.Г. Синтез и апробация наночастиц YVO4:Yb³⁺, Er³⁺ на виноградных улитках для задач биовизуализации/ А.Г. Шмелев, В.Г. Никифоров, Д.К. Жарков, В.В. Андрианов and др.// Изв. РАН, сер. физ.- 2020.- V. 84.- С. 1696 – 1701.
УДК 537.633.9:539.216.2: 621.793.18

С.А. Шарко¹, А.И. Серокурова¹, Н.Н. Новицкий¹, Н.Н. Поддубная², В.А. Кецко³, А.И. Стогний¹

ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА ИНТЕРФЕЙСЕ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК/СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК

¹ГО "НПЦ НАН Беларуси по материаловедению", ул. П. Бровки, 19, 220072, Минск, Беларусь

sharko@physics.by

² Институт технической акустики Национальной академии наук Беларуси, просп. Генерала Людникова, 13, 210023, Витебск, Беларусь ³ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова, Ленинский просп., 31, 119991, Москва, Россия

Магнитоэлектрический (МЭ) эффект [1] представляет большой научно-технический интерес и заключается в поляризации образца во внешнем магнитном поле, либо в его намагничивании во внешнем электрическом поле. МЭ эффект может найти разнообразные применения в энергонезависимых преобразователях магнитных и электрических величин, например, в датчиках магнитных полей [2].

Существующие методы формирования слоистых структур, основанные на механическом соединении ферромагнитных (ФМ) и сегнетоэлектрических (СЭ) слоев [1], не удовлетворяют требованиям термостабильности и воспроизводимости их МЭ характеристик при повышенных температурах. Непосредственное же нанесение слоя ФМ металла на СЭ подложку методом ионно-лучевого распыления – осаждения [3] после предварительной ионно-лучевой планаризации её поверхности делает возможным формирование термостабильного плоскопараллельного интерфейса ферромагнетик /сегнетоэлектрик и получение слоистых структур с МЭ эффектом при комнатной температуре.

Методом ионно-лучевого распыления – осаждения получены композиционные слоистые структуры в виде слоёв кобальта, никеля и пермендюра толщиной 2 мкм на планаризованных подложках сегнетоэлектрической керамики на основе цирконата титаната свинца состава PbZr_{0.45}Ti_{0.55}O₃ толщиной 400 мкм. Данные структуры обладают низкочастотным магнитоэлектрическим эффектом при комнатной температуре (рис. 1). Наибольшая величина МЭ эффекта в максимуме на частоте переменного магнитного поля 1 кГц наблюдается в структурах с кобальтом, а наименьшая – в структурах с пермендюром, наиболее стрикционным из всех трёх, приведённых в работе, ферромагнитных материалов. Показано, что в формировании магнитоэлектрических свойств относительные деформации, обусловленные рассогласованием кристаллических решёток на интерфейсе плёнка/подложка, играют более значимую роль, по сравнению с деформациями ферромагнитного слоя, связанными с магнитострикцией, а также с деформациями сегнетоэлектрической подложки, возникающими при пьезоэлектрическом эффекте. Это свидетельствует пользу интерфейсного В магнитоэлектрического эффекта в полученных структурах. Данные структуры характеризуются повышенной термостабильностью в диапазоне температур от -25 до +120°С, воспроизводимостью магнитоэлектрических характеристик и пригодны для использования в качестве сенсорных элементов магнитоэлектрических датчиков постоянных и переменных магнитных полей, не требующих дежурного питания и работающих в диапазоне частот бытовых электросетей.



Рисунок 1. МЭ свойства гетероструктур Со (2 мкм) / РZТ (400 мкм) (*a*), Ni (2 мкм) / РZТ (400 мкм) (*b*) и Pdr (2 мкм) / РZТ (400 мкм) (*c*) во внешнем магнитном поле. Pdr – пермендюр.

Метод ионно-лучевого распыления – осаждения позволяет полностью отказаться от клеевого соединения в пользу перехода к массовому производству МЭ устройств средствами микроэлектроники. Это в перспективе расширит границы применимости низкочастотного ΜЭ эффекта при комнатных температурах на другие сегнетоэлектрические пьезоэлектрические материалы, И например. на полупроводниковые бинарные соединения АЗВ5 и А2В6, а также на оксидные соединения на основе монокристаллического ниобата лития с последующей их интеграцией в устройства формирования-обработки сигнала на единой подложке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (Т23РНФ-010), Российского научного фонда (№23-43-10004) и резервного фонда Президента Республики Беларусь (грант 2023 года).

- Nan C.-W. Multiferroic magnetoelectric composites: Historical perspective, status, and future directions. / C.-W. Nan, M. I. Bichurin, S. Dong, D. Viehland, G. Srinivasan // J. Appl. Phys. – 2008 – V. 103. – P. 031101.
- [2] Wang Y. / Y. Wang, J. Li and D. Viehland. Magnetoelectrics for magnetic sensor applications: status, challenges and perspectives. // Mater. Today 2014 V. 17. P. 269.
- [3] Stognij A.I. / A.I. Stognij, S.A. Sharko, A.I. Serokurova, S.V. Trukhanov, A.V. Trukhanov, L.V. Panina, V.A. Ketsko, V.P. Dyakonov, H. Szymczak, D.A. Vinnik, S.A. Gudkova, N.N. Poddubnaya, C. Singh, Y. Yang. Preparation and investigation of the magnetoelectric properties in layered cermet structures. // Ceram. Int. – 2019 – V. 45, - P. 13030.

УДК 674.055:621.934

В. В. Чаевский¹, М. А. Андреев²

СТРУКТУРА И СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Cr-НАНОАЛМАЗЫ/ Hf – Zr – ZrN

¹ Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь <u>chayeuski@belstu.by</u> ² ОХП «Институт сварки и защитных покрытий» НАН Беларуси, ул. Платонова, 12Б, 220005 Минск, Беларусь andreyev.mikhail@gmail.com

В настоящее время достигнут существенный прогресс в улучшении характеристик инструментальных материалов путем нанесения модифицирующих покрытий с применением различных технологий их осаждения, среди которых одной из основных тенденций является развитие гибридных (комбинированных) технологий [1]. Целью данной работы было сформировать на поверхности лезвий стальных (сплава HHS 18% W) ножей дереворежущего инструмента комбинированные гальвано-ионно-плазменные хром - наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия и исследовать их структуру и элементный состав.

Для формирования комбинированных Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытий на поверхность ножей предварительно напылялись Hf – Zr – ZrN пленки, после чего осаждались Cr-ДНА слои. Перед осаждением Hf – Zr – ZrN покрытия проводилась ионная очистка содержащей Zr и Hf мишени ЦГ20 потоком ионов аргона. Затем методом ионнолучевого распыления напылялась пленка Hf на поверхность лезвия ножа. После чего методом конденсации с ионно-плазменной бомбардировкой (КИБ) осаждалось ZrN покрытие. В результате формировалось слоистое Hf – Zr – ZrN покрытие на поверхностях лезвий ножей фрезерного инструмента. Сг-ДНА композиционные электрохимические покрытия осаждались на поверхность ZrN покрытий в гальваностатическом режиме электролиза при средней катодной плотности тока 50 А/дм² из классического электролита хромирования при содержании CrO₃ - 250 г/л, H₂SO₄ - 2,2-2,5 г/л с добавлением ДНА марки «УДА-ВК» 2,5-5,1 г/л. С целью улучшения адгезии Cr-ДНА слоя с ZrN покрытием поверхность ZrN покрытия дополнительно осаждались химическим на И электрохимическим методами промежуточные слои никеля и меди, соответственно.

Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) образцов и рентгеноспектральный микроанализ сформированных покрытий исследовались с помощью электронных микроскопов MIRA 3 (TESCAN) и Hitachi S-4800.

Комбинированные Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия имеют слоистую структуру, состоящую из ионно-плазменных нижнего Zr-Hf и среднего ZrN слоев и верхнего гальванического Cr-ДНА слоя (рис. 1а). ZrN слой не перемешивается с Cr-ДНА и Zr-Hf слоями. Поверхность верхнего Cr-ДНА слоя Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия (рис. 1) имеет характерную структуру в виде глобулярных образований, сформированных, как доказано в работах [2, 3] фосфидом никеля (Ni₃P) и кластерами наноалмазов. СЭМ-снимок поперечного излома образца с Cr-ДНА/ZrN покрытием (рис. 2) показывает наличие слоев различной микроструктуры и толщины. Толщина верхнего Cr-ДНА слоя

составляет 304 нм, промежуточного слоя меди и никеля – 939 нм, нижнего ZrN слоя – 2,50 мкм. Промежуточный слой не перемешивается с верхним слоем и нижним слоем.



Рис. 1. СЭМ-снимки лезвия ножа с Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытием: (a) режущей кромки и (б) выделенной зоны В скола на острие лезвия



Рис. 2. Микроструктура Cr-ДНА/ ZrN покрытия на твердосплавной (WC - Co) основе

- Chayeuski V. Structural and mechanical properties of the ZrC/Ni-nanodiamond coating synthesized by the PVD and electroplating processes for the cutting knifes / V. Chayeuski, V. Zhylinski, O. Cernashejus, N. Visniakov, G. Mikalauskas // JMEP. – 2019. – Vol. 28, no. 3. – P. 1278–1285.
- [2] Tseluikin V. N. On the structure and properties of composite electrochemical coatings. A review / V. N. Tseluikin // Prot. Met. Phys. Chem. Surf. – 2016. – Vol. 52, no. 2. – P. 254–266.
- [3] Чаевский В. В. Влияние параметров электрохимического осаждения на структуру и фазовый состав покрытия сплавом Ni-P / В. В. Чаевский, В. В. Жилинский, О. Чернашеюс // Труды БГТУ. – 2016. – № 6. – С. 106–109.

УДК 539.2+531.4:621.3

Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов

ФУЛЛЕРЕНЫ, КАК КОМПОНЕНТЫ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Институт тепло- и массообмена имени А.В.Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072 Минск, Беларусь eshpilevsky@rambler.ru

В последнее десятилетие в научной литературе уделяется много внимания проблеме создания фуллеренсодержащих материалов на основе различных матриц: металлов, полимеров, керамик [1-3]. Целью практически всех исследований является соединение уникальных свойств фуллерена C_n с полезными свойствами широко используемых веществ и материалов. В настоящей работе исследован широкий спектр веществ и материалов, содержащих молекулы C_{60} : фуллериты, экзо- и эндофуллериды, фуллеренсодержащие растворы, композиты на основе различных матриц.

Фуллерены, фуллериты и фуллериды. Фуллерены и фуллериты получались на установке, разработанной нами совместно с КБТМ ОМО в 1998 году. Результаты исследований получению, изучению свойств И использованию наших по фуллеренсодержащих веществ и материалов отражены в более, чем в 200 публикациях. Получение химических соединений фуллеренов с внешним расположением атомов элементов осуществляется по обычной схеме химических реакций: чужеродных сближение до необходимого расстояния и обеспечение необходимого температурного режима, позволяющего не только занять, но и не уйти с определенного геометрического и энергетического положения. Так, [2] установлено образование химических соединений (Cu_6C_{60} , Sn_xC_{60}).

Представляют большой интерес эндоэдральные фуллериды. Для образования эндофуллеридов чужеродным атомам необходимо преодолеть более высокий энергетический барьер и проникнуть внутрь каркаса фуллереновой молекулы. Это может быть достигнуто двумя способами: 1) создание таких условий, когда уже в процессе синтеза фуллеренов некоторая доля молекул оказывается заполненной атомами или молекулами вещества, присутствующего в зоне синтеза; 2) внедрение атомов или молекул внутрь углеродного каркаса уже готовых молекул фуллерена.

Фуллеренсодержащие растворы В качестве растворителей использовались бензол и толуол как для экстракции фуллеренов из фуллеренсодержащей сажи, так и для получения растворов фуллеренов, фуллеритов С₆₀ и С₇₀, фуллеридов ферроцена, никелецена и кобальтоцена, а также фуллеренсодержащего полистерола и модификации поверхностей керамических покрытий. Фуллериды металлоценов оказались перспективными для применения в медицине и агрохимии.

Фуллеренсодержащие композиты. Во всех исследованных системах металлфуллерен С₆₀ наблюдается снижение коэффициентов трения и некоторое возрастание удельного электрического сопротивления. Для многих применений важно сочетание низкого коэффициента трения с достаточно низким удельным электрическим сопротивлением [4].

Для выявления подходящих композиционных материалов вакуумной технологией были приготовлены 12 вариантов композиционных материалов с различными

долевыми составами компонентов систем Ti - C₆₀, Cu – C₆₀, Sn-C₆₀, Al - C₆₀, Ni - C₆₀ и их смесей. Оптимизация составов композиционных материалов проходила по двум критериям: a) композиционный материал должен иметь наиболее высокую электрическую проводимость, б) высокую проводимость сочетать с низким коэффициентом трения. Из рассмотренных вариантов лучшие электрические и трибологические характеристики показал состав Fe + 1,0 мас.% C₆₀, который имеет удельное электросопротивление $60 \cdot 10^{-4}$ Ом·м и коэффициент сухого трения равный 0,22. В таблице приведены концентрационные и температурные интервалы и пределы значений некоторых характеристик металлфуллереновых пленок, исследованных нами систем.

Система	Составы	R□, Ом/□	$\rho \cdot 10^{-3}$,	Коэф.	Температур
	n_{Me}/n_{C60}		Ом.см	трения, μ	Т, К
Ti-C ₆₀	2-200	3,5 - 260	200-3,0	0,32	293-593
Fe-C ₆₀	10-100	9,0-210	180-2,0	0,22	293-593
Cu-C ₆₀	2-150	3,0-220	150-1,5	0,37	293-493
Sn-C ₆₀	2-150	5,0 360	200-3,0	0,25	293-493
Ag-C ₆₀	0,01	5,5	$5,4 \cdot 10^5$	0,28	293-493
Al-C ₆₀	0,01	6,2	$6,0.10^{5}$	0,24	293-493

Характеристики металлфуллереновых пленок некоторых составов

Увеличение доли фуллеритовых наночастиц в металл-фуллереновой структуре для переменного тока влечет за собой увеличение значений как емкостной, так и резистивной составляющих полного электрического сопротивления. Установлено, что введение углеродных фуллеренов в вещества и материалы даже в небольших долях (до 1 - 2 мас.%) существенно (в некоторых случаях в разы) изменяют их физические и физико-химические свойства.

Применение фуллеренсодержащих материалов. Анализ собственных результатов и литературных данных позволяет заключить, что фуллерены, химические соединения и комплексы фуллеренов с другими атомами и молекулами являются перспективными компонентами для формирования покрытий, оптоэлектронных систем и элементов, которые обладают уникальными свойствами. Приведены примеры апробации покрытий на конкретных изделиях: детали механизма загрузки-выгрузки кремниевых пластин, диск для резки кремниевых пластин с Ni- C₆₀ покрытием. кардиостимулятора с покрытием $Ti-C_{60}$, дюралевый электрод пуансон фуллеренсодержащим оксидокерамическим покрытием для прессовки пластмассовых изделий.

[1] Шпилевский Э.М. Композиционные материалы на основе металлов и фуллеренов //Актуальные проблемы прочности. Монография в 2т. Витебск: ВГТУ, 2018. Т. 2 --.С 428-454.

[2] Shpilevsky E. M., Zhdanok S. A., Schur D. V. Containing carbon nanoparticles materials in hydrogen energy. Hydrogen Systems – II. Dordrecht: Springer Science, 2011. – P. 23–39.

[3] Tuvshintur P., Shpilevsky E. M., Filatov S. A. (et/al.) Optical property of contained fullerene polymers// Solid State Phenomena. 2021.Vol.323, №8. –P. 42–47.

[4] Shpilevsky E.M, Tuvshintur P., Davaasabuu Zh.,.Filatov S.A, Shilagardi G. Metalfullerenon materials for electronics. Nanoscience and Technology.2019, №4. P.303-309. УДК: 004.89; 004.94; 612.13

М.В. Войтикова

НЕЛИНЕЙНЫЙ И ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИГНАЛОВ АРТЕРИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь.

m.voitikova@dragon.bas-net.by

Целью исследования было изучение прогностической ценности параметров временных рядов артериального давления (АД), полученных на основе нелинейного анализа, теории хаоса и фрактальных процессов, а также при линейно-регрессионном моделировании АД с применением диагностической номограммы.

Введение. Нами была предложена к клиническому применению диагностическая номограмма на основе линейного регрессионного моделирования АД, определяющая нормальные (гармонические) и патологические (диастолические) фенотипы, которые сопровождаются сердечно-сосудистыми осложнениями. Однако, при регрессионном моделировании не учитываются нелинейные или стохастические свойства кардиосигнала. АД определяется сердечным выбросом и сосудистым сопротивлением, и поддерживается с помощью нервных и гормональных механизмов обратной связи и барорефлекса. Эти компоненты нелинейно взаимодействуют друг с другом с различными временными задержками, что является причиной сложности сигналов АД. Считается, что стохастические и нелинейные хаотические модели могут математически объяснить паттерны сигналов АД, для создания новых методов диагностики и получения специальных знаний о гемодинамике при разных патологических состояниях: для дифференциации больных с риском неблагоприятного исхода после инфаркта, определения степени хронической сердечной недостаточности, осложнений сахарного диабета, нарушений автономной регуляции работы сердца и др.

Результаты. Методы нелинейной динамики применялись к сигналам АД, прошедшими тест на нелинейность, это здоровые пациенты (H2 и D2-фенотип - нормотензивный гармонический и диастолический фенотип на диагностической номограмме) и гипертензивные (D3-фенотип) или гипотензивные пациенты (D1-фенотип). Проводился отбор параметра временной задержки, реконструкция фазового пространства, измерение корреляционной размерности CorDim, максимального показателя Ляпунова Lmax, выборочной энтропия SamEn и др. Хотя общепринятого определения сложности не существует, эти параметры использовались нами как меры динамической сложности сигнала АД.

В работе мы показали, что при определенных сердечно-сосудистые заболеваниях или состояниях (пожилой возраст, травма) уменьшается нелинейность кардиосистемы, которая выражается в цифровых значениях CorDim, SamEn и др. инвариантах, другими словами, нелинейные показатели являются индикаторами ухудшения прогноза заболевания и качества жизни. Так, наибольшие цифры CorDim мы определили у здоровых пациентов с H2фенотипом и наблюдали некоторое снижение цифр для здоровых пациентов с D2-фенотипом (диастолический нормотензивный). Наименьшие значения этих параметров были характерны для пациентов реанимационного отделения с патологией различной степени тяжести с D1фенотипом (при условии возможности определения нелинейных инвариантов). В последнем случае кардиосистема пациентов становится более линейной (стохастической), что было связано с уменьшением адаптации к изменениям внешней среды и риском развития аритмий и смертельных фибрилляций.

Сигналы АД пациентов с трансплантацией сердца и др. тяжелыми поражениями сердечно-сосудистой системы всегда демонстрировали стохастические свойства, которые целесообразно описывать в терминах фрактального моделирования, поскольку результаты нелинейного анализа или сложны для интерпретации, или неверны. Фрактальный анализ сигналов направлен на поиск масштабно-инвариантных самоподобных признаков (корреляции, памяти) в разных временных масштабах. В нашем исследовании мы применили к сигналам АД больных с диастолическими фенотипами (D1, D3) флуктуационный анализ без тренда (DFA, Detrended Fluctuation Analysis), определяющий короткие (10-50 кардиоциклов) и дальние (50-200 кардиоциклов) корреляционные свойства временного ряда АД. Этим методом были определены значительные долгосрочные корреляции, которые количественно определяются индексом α2, т.е. DFA является важным прогностическим показателем при оценке сердечно-сосудистых рисков больных реанимационного отделения.

Заключение. В отличие от существующих традиционных методов мониторинга и анализа АД, методы нелинейной динамики и фрактального анализа потенциально могут обнаруживать и отслеживать состояние гемодинамики с течением времени и во время развития болезни, а также до клинического проявления болезни. Включение показателей АД, полученных в приложении этих методов в современные системы измерений, анализа и раннего предупреждения, приведет к появлению новых диагностических маркеров, способных предсказать ухудшение состояния пациента на раннем этапе и выделить больных, которые подвергаются наибольшему риску смертности.

УДК 543.55:577.113.5

Е. В. Васьковцев, Г. В. Грушевская, В. П. Егорова, Н. Г. Крылова, И. В. Липневич

ВЛИЯНИЕ ОДНОНУКЛЕОТИДНЫХ ЗАМЕН НА ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ-КЛУБОК В ДНК-КОНЬЮГАТАХ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

grushevskaja@bsu.by

В настоящее время актуально развитие наносенсорики точечных соматических мутаций типа однонуклеотидных замен в геноме больных раком, поскольку тип мутации опухоли определяет выбор стратегии лечения, исключающей развитие резистивности к противопухолевым препаратам [1]. Мутационный статус онкогена белка KRAS в геноме опухоли колоректального рака определяет переход опухоли в метастазирующее состояние. Сложность секвенирования этого гена обусловлена одновременным присутствием в ДНК-образце как нормального аллеля так-называемого дикого типа (wild-type), так и мутантного аллеля. Кроме того, процесс опухолевой эволюции характеризуется разнообразной мутантной историей с возникновением, в том числе, неизвестных точечных мутаций. Методом выявления неизвестных мутаций является денатурация двухспиральной ДНК, температура плавления которой чувствительна к её нуклеотидному составу [2]. Углеродные нанотрубки являются перспективным электроактивным материалом для разработки электрохимических трансдьюсеров сигнала гибридизации комплементарных электроактивных ДНК мишеней и зондов по изменению окислительно-восстановительных свойств пуриновых нуклеотидных оснований, таких как гуанин [3]. В этой работе используется емкостной ДНК-сенсор нефарадеевского типа на основе углеродных нанотрубок для проведения аллельной дискриминации однонуклеотидной замены в 12-ом кодоне экзона 2 гена KRAS. Эта точечная мутация является наиболее распространенной соматической мутацией KRAS-онкогена. Цель работы – разработать метод электрохимического детектирования однонуклеотидных замен по изменению электроактивности ДНК и изучить протекание перехода клубок – двойная ДНК спираль в коньюгатах с углеродными малостенными нанотрубками.

35-нуклеотидные последовательности KRAS-онкогена, используемые в качестве ДНК-мишени, образовывали гомодуплексы с 57 % содержанием гуанин-цитозиновых (G-C) пар. В качестве ДНК-зонда использовались коньюгаты малостенных углеродных нанотрубок с двухцепочечными нуклеотидными последовательностями. Более длинная 35-нуклеотидная последовательность образовывала гомодуплекс зонда с комплементарной ДНК-мишенью в реакции замещения (вытеснения) более короткой протекторной нуклеотидной последовательности ДНК-зонда. В протекторной цепи часть гуанинов заменена инозинами. Графики зависимости диэлектрических потерь от мощности электрохимического сигнала (диэлектрической проницаемости) ДНКсенсора (диэлектрические спектры) представлены на рис. 1. Диэлектрический спектр для ДНК-зонда характеризуется сопротивлением Варбурга вследствие возникновения массового переноса под воздействием приложенного электрического потенциала. Это

указывает на протекание окислительно-восстановительной реакции в ДНК-зонде на поверхности электрода. Электрохимическая активность связана с окислением и последующим восстановлением гуаниновых нуклеотидов. В гомодуплексе гуанины восстанавливаются.



Рис. 1. Диэлектрические спектры: «1» для ДНК-сенсора без ДНК-зонда, «2» для ДНК-сенсора, на поверхность которого нанесен коньюгат двусписпирального ДНК-зонд; «3» для ДНКсенсора после проведения реакции гибридизации на его поверхности. Спектральные полосы « S_i », i=1,2,3; относятся к изоляторному покрытию ДНК-сенсора; полосы «On» и «DNA» являются диэлектрическими спектрами ДНК-зонда и гомодуплекса, соответственно.

Переход спираль-клубок в ДНК является переходом 1-го рода, который протекает через метастабильной состояние, в котором фазы сосуществуют. Определены энергии Гибса *G* нуклеотидных пар и метастабильном и двухспиральном состоянии. Температуры перехода из двухспирального состояние в метастабильное состояние и из метастабильного состояния в клубкообразное экспериментально устанавливались по скачкообразным изменениям электрической емкости ДНК сенсора с изменением температуры.

Итак, в результате исследований обнаружено, что двойные цепочки ДНК, удерживаемые стекинговым взаимодействием *π*-электронов на поверхности углеродных нанотрубок в линейной конфигурации, вначале претерпевают переход в метастабильное состояние при температуре порядка 36°С. Переход коньюгатов 35нуклеотидных двухцепочечных гомодуплексов ДНК с малостенными углеродными нанотрубками происходит в полностью двухспиральное состояние при температуре плавления порядка 60°С.

- AlMusawi Sh. Understanding cell-cell communication and signaling in the colorectal cancer microenvironment. / Sh. AlMusawi, M. Ahmed, A. S. Nateri. // Clin. Transl. Med. - 2021. - T. 11. - C. e308.
- [2] Knez K. Emerging technologies for hybridization based single nucleotide polymorphism detection. / K. Knez et al. // Analyst. – 2014. – T. 139. – C. 353.
- [3] Rashida J. I. A. The strategies of DNA immobilization and hybridization detection mechanism in the construction of electrochemical DNA sensor. / J. I. A. Rashida, N. A. Yusof. // Sensing and Bio-Sensing Res. – 2017. – T. 16. – C. 19.

УДК 537.523/.527; 543.422

А.В. Казак¹, А.А. Кириллов¹, Л.В. Симончик¹, М.М. Кураица², Б.М. Обрадович², Г.Б. Сретенович²

БАКТЕРИЦИДНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ВОЗДУШНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ СТРУЙ: ОБРАЗОВАНИЕ И ДИАГНОСТИКА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

a.kirillov@dragon.bas-net.by

² Белградский университет, Белград, Сербия <u>obrat@ff.bg.ac.rs</u>

Плазменная медицина — одна из самых инновационных и развивающихся областей, объединяющая физику плазмы, биологию и клиническую медицину. Среди многообразия плазменных источников для биомедицинских приложений наибольшее распространение в последнее время получили "холодные" плазменные струи атмосферного давления благодаря их способности обеспечить пространственно не связанную и неограниченную электродами плазму с низкой газовой температурой. В работе проводится исследование холодных воздушных плазменных струй, генерируемых тлеющим разрядом постоянного тока (ТРАД) и диэлектрическим барьерным разрядом (ДБР) при атмосферном давлении.

Плазменные струи ТРАД формируются в двухэлектродной газоразрядной камере с межэлектродным зазором около 1 мм при расходе воздуха 5 л/мин от источника постоянного тока 30 мА. Воздух подается в газоразрядную камеру, проходит через область разряда и формирует плазменную струю через отверстие диаметром 1,5 мм на выходе из анода [1].

Разрядная камера ДБР, генерирующая плазменную струю, состоит из двух электродов [2]. Высоковольтный трубчатый электрод помещается в кварцевую трубку, выполняющую роль барьерного диэлектрика. Второй электрод заземлен и располагается у конца трубки. Через кварцевую трубку продувается воздух со скоростью 5 л/мин. Разряд создается с помощью лабораторного импульсного высоковольтного источника питания с повышающим трансформатором, дающим выходное напряжение до 4,5 кВ.

Основными бактерицидными компонентами являются биологически активные молекулы NO, NO₂, HNO₂ в струях ТРАД и O₃ в струях ДБР. Основное образование NO имеет место в неравновесной плазме ТРАД, где в плазмохимических реакциях с участием электронов происходит рождение N, O и OH. Эти процессы более эффективны, чем термическая диссоциация молекул азота, кислорода и воды. Помимо этого, недостаточно высокая температура в разряде приводит к очень низкой скорости реакции атомов кислорода с молекулами азота. Вследствие этого, производство NO не может быть корректно описано в рамках термического механизма Зельдовича и требует кинетического рассмотрения с учетом плазмохимических реакций.

Поскольку в активной зоне разряда обеспечиваются условия для термической диссоциации молекул NO₂ и HNO₂, рост их концентраций начинается с уменьшением

температуры вниз по потоку. Образование NO₂ в трехтельной хемилюминесцентной реакции с участием NO и O сопровождается интенсивным свечением струи в спектральном диапазоне 400–800 нм.

Отсутствие заметной концентрации озона в струе ТРАД объясняется тем, что вследствие низкой энергии разрыва связи O₃ начинает производиться в потоке при низкой температуре, то есть после NO и NO₂. Быстрая трехтельная реакция образования NO₂ "забирает" необходимые для получения O₃ атомы кислорода. Появляющиеся молекулы озона погибают при столкновении с уже имеющими сформировавшуюся концентрацию молекулами NO и NO₂. В отличие от ТРАД близкая к комнатной газовая температура в ДБР обеспечивает благоприятные условия для преобладающего образования O₃ уже в активной зоне разряда.

Одной из важнейших проблем плазменной медицины является корректное определение дозы, получаемой обрабатываемым биологическим объектом. Диагностика бактерицидных компонент плазменных струй осуществлялась одновременно методами абсорбционной УФ- и ИК-спектроскопии поглощения (рис.1),



Рис. 1. ИК (а) и УФ (б) спектры поглощения бактерицидных компонентов воздушных плазменных струй

что повышает надежность измерений и позволяет выявить их применимость. Мольные доли бактерицидных компонент определялись путем сравнения экспериментальных спектров поглощения и спектров, рассчитанных с использованием базы данных Hitran, программы Specair 3.0 и имеющихся в литературе УФ- сечений поглощения молекул NO₂, HNO₂ и O₃. Наблюдается хорошее соответствие мольных долей бактерицидных компонент, определенных методами абсорбционной УФ- и ИК- спектроскопии.

- [1] Кириллов А.А. Применение плазменной струи тлеющего разряда атмосферного давления на постоянном токе для инактивации *Staphylococcus aureus* / А.А. Кириллов, А.В. Павлова, Е.А. Сафронов, Л.В. Симончик, Н.В. Дудчик// Прикладная физика. 2013. № 5. С. 52—55.
- [2] Казак А.В. Бактерицидные компоненты в гелиевой и воздушной плазменных струях диэлектрического барьерного разряда / А. В. Казак, А. А. Кириллов, Л. В. Симончик, Е. Н. Вабищевич, М. М. Кураица, Б. М. Обрадович, Г. Б. Сретенович, А. И. Жабровская, О. А. Емельянова, Н. В. Дудчик // Журн. прикл. спектр. – 2021. – Т. 88. – С. 231–236.

УДК 577.3

Т. А. Кулагова

ТЕРАНОСТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь tatyana.kulagova@gmail.com

Тераностический агент должен обладать следующими характеристиками: накапливаться в поврежденных и/или опухолевых клетках, обладать свойствами, визуализировать локализацию, позволяющими его иметь модифицируемую поверхность для внедрения функциональных групп и конъюгации лекарственными препаратами, либо обладать специфическими свойствами, активация которых под действием ультразвука, электромагнитного излучения, температуры и др. приведет к гибели клеток. Благодаря своим размерам (~10 нм) и оптическим свойствам, графеновые квантовые точки (ГКТ) хорошо накапливаются в клетках и визуализируются по флуоресценции, могут осуществлять адресную доставку лекарственных препаратов, использоваться при фотодинамической и фототермической биоимплантатов терапии, при создании И скаффолдов [1]. ГКТ. функционализированные моносахаридами, применили для визуализации распределения углеводных рецепторов на клетках [2]. Например, ГКТ, содержащие в своей структуре атомы S и N, излучают на длинах волны 640-680 нм, использовались для визуализации in vitro [3], и in vivo [4].

Эффективность использования ГКТ для тераностики зависит от персистенции нанообъектов в крови и от их гемосовместимости. Введение наночастиц должно сопровождаться отсутствием гемолиза эритроцитов, агрегации тромбоцитов и активации фагоцитов крови. Необходимо также понимать механизмы транспорта наночастиц в крови – взаимодействие с белками плазмы. Цель данного исследования – изучение взаимодействия ГКТ с белками и клетками крови человека.

Эритроциты, тромбоциты, мононуклеары и нейтрофилы выделяли из периферической крови человека. «Тени» эритроцитов выделяли путем 2-х кратного помещения клеток в гипоосмотическую среду и центрифугирования. В работе использовали ГКТ производства Sigma (США) с λ_{ex} 485 нм; λ_{em} 530 нм, диаметром менее 5 нм, квантовый выход $\geq 17\%$.

Структурные и геометрические параметры клеток, а также накопление ГКТ (10-100 мкг/мл) эритроцитами, тромбоцитами и нейтрофилами изучали методом флуоресцентной микроскопии при возбуждении излучением с длиной волны 470 нм. В работе также использовали методы флуориметрии, спектрофотометрии, турбидиметрии.

Методом флуоресцентной микроскопии установлено, что в зависимости от времени инкубирования с клетками ГКТ накапливаются на поверхности и внутри эритроцитов, тромбоцитов, нейтрофилов. При этом наибольшее количество ГКТ накапливается в нейтрофилах.

При взаимодействии с ГКТ меняется форма эритроцитов, регистрируется формирование эхиноцитов. Однако клетки сохраняют свою целостность и

метгемоглобин не образуется. ГКТ также взаимодействуют с «тенями» эритроцитов, внедряются в структуру мембран, флуоресцируют и при этом увеличивается микровязкость мембран.

Установлено, что ГКТ не вызывают агрегацию тромбоцитов в обогащенной тромбоцитами плазме. Однако при удалении из супернатанта белковых компонент и при помещении тромбоцитов в солевой буферный раствор ГКТ индуцируют агрегацию клеток в отсутствии дополнительных агонистов. Степень агрегации зависит от концентрации ГКТ. При этом формируется большое количество сфероидных агрегатов, на поверхности которых расположены прокоагулянтные тромбоциты.

Инкубирование нейтрофилов и мононуклеаров с ГКТ в течение 30 мин приводило к активации клеток. Более выраженная активация нейтрофилов с последующей деструкцией клеток наблюдалась после воздействия на клетки ГКТ в течение 90 мин. проявлялось В модификации актинового Это цитоскелета И выделении миелопероксидазы во внеклеточную среду. Интенсивность флуоресценции ГКТ в нейтрофилах снижалась со временем инкубирования клеток с нанообъектами. Показана биодеградируемость (разрушение и/или нарушение структуры) ГКТ после взаимодействия с гипохлорит-ионами.

Следовательно, ГКТ не оказывают цитотоксического воздействия на клетки крови человека и могут транспортироваться ими в кровяном русле. Присутствие белков плазмы крови препятствует агрегации тромбоцитов за счет образования «биокороны» вокруг ГКТ. На основании проведенных исследований можно заключить, что ГКТ являются гемосовместимыми могут использоваться для контролируемой доставки лекарств, визуализации и мечения клеток.

Автор выражает благодарность БРФФИ за финансовую поддержку, грант M22MB-19.

[1] Perini G. Unravelling the potential of graphene quantum dots in biomedicine and neuroscience / G. Perini [et al.] // Int. J. Mol. Sci. – 2020. – Vol. 21, № 10. – P. 3712.

[2] Chen J. Sweet graphene quantum dots for imaging carbohydrate receptors in live cells / J. Chen [et al.] // Flat Chem. – 2017. – Vol. 5. – P. 25-32.

[3] Qu D. Three colors emission from S,N Co-doped graphene quantum dots for visible light H_2 production and bioimaging / D. Qu [et al.] // Adv. Opt. Mat. – 2015. – Vol. 3. – P. 360-367.

[4] Ge J. A graphene quantum dot photodynamic therapy agent with high singlet oxygen generation / J. Ge [et al.] // Nat. Commun. – 2014. – Vol. 5. – P. 4596.

УДК 543.422:547.963.4

С. В. Лепешкевич¹, И. В. Сазанович², М. В. Пархоц¹, С. Н. Гилевич³, Б. М. Джагаров¹

ЛАЗЕРНАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПРОЦЕССОВ ОКСИГЕНАЦИИ И КОНФОРМАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ГЕМОГЛОБИНА ЧЕЛОВЕКА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

s.lepeshkevich@ifanbel.bas-net.by

² Центральная лазерная лаборатория, Лаборатория Резерфорда–Эплтона, Дидкот, OX11 0QX, Великобритания

igor.sazanovich@stfc.ac.uk

³ Институт биоорганической химии НАН Беларуси, ул. Академика Купревича, 5, 220084 Минск, Беларусь gilevich@iboch.by

Гемоглобин человека (Hb) – аллостерический белок, обратимо связывающий и переносящий молекулярный кислород (O₂). Нь состоит из двух димеров образованных двумя неидентичными α и β субъединицами. Каждая субъединица гемоглобина содержит активный центр – гем *b* (Fe-протопорфирин IX), в котором ион железа связан с проксимальным гистидином F8 (рисунок). Двухвалентное гемовое железо обратимо связывает одну молекулу O₂ (рисунок). В отсутствии лиганда гемоглобин, содержащий двухвалентное гемовое железо, называют дезоксигемоглобином, в связанном с O₂ состоянии – оксигемоглобином. Гем *b* спрятан внутрь белковой матрицы так, что плотная упаковка окружающих участков полипептидной цепи защищает его от контакта с водой. Образование и разрыв химической связи гемовое железо – O₂ происходит в матрице белка и является триггером конформационных переходов. Нь связывает четыре молекулы O₂ кооперативно. По мере лигандирования тетрамера гемоглобина его четвертичная структура изменяется, а сродство к лиганду увеличивается.



Рисунок. Структура α-субъединицы Hb (PDB код 2DN1) в ленточном представлении; дистальный гистидин E7, проксимальный гистидин F8, молекула гема *b* с ионом железа в центре, молекула кислорода (O₂), координированная к иону железа, показаны скелетными моделями; гем *b* находится между спиралями *E* и *F*

Для описания физиологического процесса – транспорта O_2 – необходимо определить индивидуальные свойства α и β субъединиц в составе Hb, находящегося в различных конформационных формах. Эта проблема может быть решена путем детального исследования процесса связывания O_2 как из внутренних областей белка (геминальная рекомбинация), так и из внешней среды – растворителя (бимолекулярная рекомбинация) [1]. Для изучения реакции связывания O_2 и сопутствующих конформационных изменений в белке используется явление фотоиндуцированной диссоциации, когда с помощью лазерных импульсов в фиксированный момент времени разрывается связь железо – O_2 и далее, в области максимума дифференциального спектра поглощения дезокси-оксигемоглобина, регистрируются время-разрешенные спектры наведенного поглощения [2].

Цель настоящей работы – изучение фотоиндуцированного повторного связывания молекулы O_2 и сопутствующих конформационных изменений в α и β субъединицах в составе тетрамера Hb в лигандированной R-конформации. С этой целью были созданы окси-цианомет валентные гибриды гемоглобина, $\alpha_2(Fe^{2+}-O_2)\beta_2(Fe^{3+}-CN)$ и $\alpha_2(Fe^{3+}-CN)\beta_2(Fe^{2+}-O_2)$, в которых только один тип субъединиц (α или β) может связывать O_2 . Спектры наведенного поглощения измерены в области полосы Соре во временном диапазоне от 1 пикосекунды до 800 микросекунд после лазерного фотовозбуждения на установке УЛЬТРА, созданной в Центральной лазерной лаборатории, Лаборатория Резерфорда–Эплтона, Дидкот, Великобритания [3,4]. В качестве источника оптического возбуждения использовались импульсы длительностью 100 фс на длине волны 543 нм с энергией 1 мкДж.

На основании полученных результатов предложена кинетическая модель, учитывающая повторное связывание O_2 из внутренних областей белка, миграцию O_2 между внутрибелковыми сайтами, а также релаксацию третичной структуры белка. Установлена неэквивалентность α и β субъединиц тетрамера Hb в R-конформации как в связывании O_2 из внутренних областей белка, так и в сопутствующей конформационной релаксации указанных субъединиц. Обнаружено, что релаксация третичной структуры обеих субъединиц приводит к уменьшению констант скоростей геминальной рекомбинации O_2 с индивидуальными α и β субъединицами в составе гемоглобина, причем этот эффект более чем на порядок больше для β субъединиц по сравнению с α субъединицами. Наблюдаемые изменения обусловлены уменьшением внутренней реакционной способности гема, которая, в свою очередь, регулируется геометрией комплекса гемовое железо – проксимальный гистидин F8 (рисунок).

Полученные результаты вносят существенный вклад в понимание механизма связывания молекулы O₂ как нативным гемоглобином человека, так и искусственными переносчиками кислорода.

- [1] Lepeshkevich S.V., Gilevich S.N., Parkhats M.V., Dzhagarov B.M. Molecular oxygen migration through the xenon docking sites of human hemoglobin in the R-state // Biochim. Biophys. Acta. – 2016. – Vol. 1864. – P. 1110-1121.
- [2] Lepeshkevich S.V., Sazanovich I.V., Parkhats M.V. et al. Towards understanding nonequivalence of α and β subunits within human hemoglobin in conformational relaxation and molecular oxygen rebinding // Chem. Sci. – 2021. – Vol. 12. – P. 7033-7047.
- [3] Greetham G.M., Burgos P., Cao Q. et al. ULTRA: A Unique Instrument for Time-Resolved Spectroscopy // Appl. Spectrosc. 2010. Vol. 64. P. 1311-1319.
- [4] Greetham G.M., Sole D., Clark I.P. et al. Time-resolved multiple probe spectroscopy // Rev. Sci. Instrum. – 2012. – Vol. 83. – P. 103107-1–5.

УДК 537.523/527; 533.9.004.14 А.В. Казак¹, Л.В. Симончик¹, Н.В. Дудчик², О.А. Емельянова²

СТЕРИЛИЗАТОР НА ОСНОВЕ АЗОТНЫХ РЕАКТИВНЫХ ЧАСТИЦ ВОЗДУШНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь first.author@dragon.bas-net.by

² Республиканское унитарное предприятие «Научно-практический центр гигиены», ул. Академическая, 8, 220012 Минск, Беларусь lee616@ya.ru

Плазменная медицина является одной из самых инновационных и развивающихся областей, объединяющих физику плазмы, биологию и клиническую медицину [1]. Внутрибольничные инфекции представляют серьезную угрозу в силу значительного влияния на показатели смертности и тяжести состояния пациентов, а также ощутимых экономических затрат. Они обусловлены патогенными микроорганизмами, обладающими лекарственной устойчивостью, а также устойчивостью к дезинфицирующим средствам. Неравновесная низкотемпературная плазма, содержащая смесь реактивных агентов, таких как заряженные частицы и нейтральные кислород- и азотсодержащие химически активные частицы (O₃, OH, O, NO, H₂O₂ и др.), УФ-фотоны и т.д., является одной из эффективных альтернатив традиционным методам стерилизации и обеззараживания. Можно выделить два направления применения плазмы в медицине: обработка плазмой поверхностей, материалов, продуктов питания, технического оборудования для придания им требуемых медициной или гигиеной свойств и терапевтические эффекты на основе прямого взаимодействия плазмы с живой тканью.

Среди многообразия плазменных источников для инактивации наибольшее распространение в последнее время получили "холодные" плазменные струи атмосферного давления благодаря их способности обеспечить пространственно несвязанную и неограниченную электродами плазму с низкой газовой температурой, что особенно важно в биомедицинских приложениях.

Целью настоящей работы является создание на основе разработанного в Институте физики НАН Беларуси генератора воздушной плазменной струи макета

стерилизатора для плазменной инактивации эпидемически значимых микроорганизмов [2].

На Рис. 1 представлены стерилизационная камера с генератором плазменной струи. В экспериментах параметры генератора воздушной плазменной струи фиксировались при токе разряда – 30 мА и расходе воздуха около 2 л/мин.



Рис. 1. Фотография стерилизатора (слева) и генератора воздушной плазменной струи.

Концентрации активных молекул в плазменной струе, образующиеся при данных параметрах разряда, составили NO – 400 ppm, NO₂ – 350 ppm, HNO₂ – 90 ppm.

В качестве стерилизационной камеры использовалась камера коммерческого УФстерилизатора XDQ-504 (Рис. 1, слева) объемом около 8 л, время стерилизации многоразового инструмента в котором составляет до 45 минут. Воздушная струя генератора с помощью силиконовой трубки длиной около 1.5 м вводилась через штуцер в стерилизационную камеру. Чашки Петри помещались на дно выдвигаемой емкости.

В экспериментах использовались 3 вида микроорганизмов: *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, Candida albicans и Escherichia coli. Время воздействия на образцы составляло 15 и 20 минут. Результаты эксперимента приведены на Рис. 2. В первом



Рис. 2. Фотографии чашек Петри с микроорганизмами *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, *Candida albicans* и *Escherichia coli* до и после обработки в течение 15 и 20 минут.

столбце представлены фотографии колоний микроорганизмов до обработки. Второй столбец фотографий показывает число колоний выживших микроорганизмов после 15-минутного нахождения стерилизатора под воздействием азотных реактивных частиц. Видно, что в случае Candida albicans и Escherichia coli уже наблюдается практически полная гибель микроорганизмов. В тоже время для Staphylococcus aureus не все микроорганизмы гибнут за указанное время. Однако 30-минутное нахождение микроорганизмов в атмосфере азотных реактивных частиц приводит к гибели все микроорганизмов в чашках Петри (третий столбец фотографий на Рис. 2.

Выполненные другие исследования показали, что способ обработки образцов большой площади или сложной формы в замкнутом объеме обладает большей эффективностью по сравнению с обработкой непосредственно плазменной струей или ультрафиолетовым излучением, что открывает возможности создания стерилизаторов средств индивидуальной защиты на основе разрядов атмосферного давления в воздухе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ Ф22СРБГ-006.

- [1] Von Woedtke, T., Clinical Plasma Medicine: State and Perspectives of in Vivo Application of Cold Atmospheric Plasma / T. von Woedtke, H.-R. Metelmann, and K.-D. Weltmann // Contrib. Plasma Phys. -2014. -Vol. 54, -No. 2. -P. 104–117.
- [2] Kazak, A.V. Inactivation of Consortiums of Microorganisms by Air Plasma Jet at Atmospheric Pressure /A.V. Kazak, A.A. Kirillov, L.V. Simonchik, O.E. Nezhvinskaya, N.V. Dudchik // Plasma Medicine. -2017. -V. 7, No. 2. -P. 109-115.

УДК 530.182.1

О. Х. Хасанов¹, Г. А Русецкий¹, О. М. Федотова¹, К. В. Писцова²

СОЛИТОНЫ В БИОСУСПЕНЗИЯХ

¹ Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедения, ул. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь

<u>olkhas@mail.ru</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Поблемы глубокого проникновения лазерного излучения в биоткани, стабильного распространения излучения в суспензиях являются весьма важными, поскольку такие среды являются мутными и лазерное излучение в них испытывает многократное рассеяние. Решение указанных проблем позволит развить технологию визуализации органов и тканей, а также надежные неинвазивные методы диагностики. В настоящей работе исследуются солитонные режимы распространения лазерного излучения в суспензиях с микрочастицами.

Как известно, лазерное излучение действует на диэлектрические микрочастицы с градиентное силой, направленной вдоль градиента интенсивности поля и перемещающей частицы в область большей интенсивности. В результате частицы выстраиваются вдоль оси пучка, приводя в нелинейному изменению эффективного показателя преломления среды и, как следствие, к формированию эффективного волновода. Как показано в работе [1], при определенной входной мощности происходит самоканалирование лазерного пучка в суспензии цианобактерий. Динамическое равновесие достигается за счет достигнутого баланса сил светового давления и диффузии.

Нами теоретически проанализированы режимы распространения лазерных пучков в суспензии с эритроцитами на основе решения самосогласованной системы уравнений: модифицированного нелинейного уравнения Шредингера с учетом концентрационной нелинейности среды и возможной диссипации излучения за счет рассеяния и поглощения, а также уравнения конвекции-диффузии. В последнем уравнении учитывалось движение микрочастиц под действием результирующей силы: градиентной силы светового давления, связанной с поляризуемостью, и силой рассеяния вперед. Использовались численные методы решения, а также вариационный подход. В расчетах предполагалось, что поляризуемость частиц с учетом поглощения излучения может быть комплексной величиной. Показано, что оптическая нелинейность биосуспензии, обусловленная движением частиц в поле градиентных сил, действует подобно керровской нелинейности, приводя к самофокусировке излучения в среде. В установившемся режиме, когда влияние диффузии компенсируется действием градиентных сил, возможно солитонное распространение излучения в биосуспензии. Форма солитона определяется поляризуемостью частиц, коэффициентом диффузии, подвижностью и размером и частиц, их концентрацией в суспензии и эффективным показателем преломления среды. Анализируется возможность формирования диссипативных солитонов

 Bezryadina A. Nonlinear self-action of light through biological suspension/ A. Bezryadina, T. Hansson, T. Gautam, B. Wetzel, et al.// PRL.- 2017.- V. 119.-P. 058101. УДК 53

В.И. Архипенко

К 220 ГОДОВЩИНЕ КНИГИ В.В. ПЕТРОВА «ИЗВЕСТИЕ О ГАЛЬВАНИ-ВОЛЬТОВСКИХ ОПЫТАХ» (КАКОЙ РАЗРЯД ЗАЖЕГ В.В. ПЕТРОВ)

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>arkhip@imaph.bas-net.by</u>

Василий Владимирович Петров (8 [15] июля 1761, Обоянь, Белгородская провинция — 22 июля [3 августа] 1834, Санкт-Петербург) — русский физикэкспериментатор, электротехник-самоучка, академик Петербургской академии наук (с 1809 года, член-корреспондент с 1801 года). Через три года после публикации письма итальянского физика А. Вольта о построении первой гальванической батареи В.В. Петров издает научный труд: «Известие о гальвани-вольтовских опытах, которые производил профессор физики Василий Петров посредством огромной наипаче батареи, состоявшей иногда из 4200 медных и цинковых кружков, и находящейся при Санкт-Петербургской Медико-Хирургической Академии», напечатанной «в Санкт-Петербурге, в типографии Государственной Медицинской коллегии 1803 года». Э.д.с. созданной В.В. Петровым батарея составляла около 1600 В, а максимальная полезная мощность при токе короткого замыкания 0,15 А была 64 Вт. С этой батареей В.В. Петров произвёл ряд опытов с пропусканием электрического тока через различные тела, в том числе в воздухе и в воздухе при пониженном давлении, и открыл много новых неизвестных до того времени явлений. Описание этих явлений и представляет собой содержание книги Петрова [1], где была высказана гипотеза о том, что изменения структуры и свойств объектов, к которым прикладывалось напряжение от батареи, обусловлено «протеканием гальвани-вольтовой жидкости».

В.В. Петров описывает получение электрического разряда при атмосферном давлении следующим образом: «Если на стеклянную плитку будут положены два древесных угля и если потом металлическими изолированными направителями, сообщенными с полюсами огромной батареи, приближать оные один к другому на расстоянии от одной до трех линий (линия - старая русская мера длины, равная приблизительно 2,5 мм), то является между ними яркий белого цвета свет или пламя, от которого оные угли скорее или медленнее загораются, и от которого темный покой довольно ясно освещен быть может».

В Европе работы с вольтовыми батареями велись в направлении увеличения максимального тока. В 1808 г. английский ученый Г. Дэви построил батарею из 2000 вольтовых элементов, которые занимали большую площадь, что, можно предположить, связано с желанием получить не только напряжение в десятки Вольт, но и большой ток. Работу такого источника, соединенного с двумя угольными электродами, в воздухе и продемонстрировал Г. Дэви коллегам Лондонского королевского общества. Явление, которое сопровождалось ярким светом, привело всех в восторг, и получило название – Вольтова дуга. Открытие явления электрической дуги Г. Дэви подробно описал в 1812 г. в своей книге «Элементы философии химии», опубликованной в Лондоне. Необходимо отметить тот факт, что в то время это явление описывалось как

«гальванические опыты» и ни о какой дуге речи не могло быть.

Приоритет в открытии электрической дуги в России, считали, принадлежит В.В. Петрову. В 1953 г. в Московском энергетическом институте им. Молотова была предпринята попытка воспроизвести опыт по «светоносному явлению» Петрова [2]. Проведенные измерения вольтамперной характеристики разряда показали, что она падающая и при увеличении тока в два раза с 0,075 до 0,15 А напряжение уменьшилось в 1,6 раза. На основании этого был сделан вывод, что Петров наблюдал устойчивую дугу при небольших токах за счет применения высокого напряжения и создания «огромной батареи», что явилось необходимым условием для получения электрической дуги. Это позволило подтвердить приоритет В.В. Петрова в открытии явления электрической дуги. Исследователи поставили себе задачу доказать, что «светоносное явление» Петрова не что иное как электрическая дуга и, соответственно, доказали.

Интерес к «светоносным явлениям при атмосферном давлении» Петрова у автора данной работы связан с завершением цикла работ, которые были начаты в Институте физики НАН Беларуси академиком Л.И. Киселевским с сотрудниками с1970 по1992 г. [3] и продолжены сотрудниками лаборатории физики газового разряда. Были получены результаты, которые позволили доказать существования самостоятельного нормального тлеющего разряда при атмосферном давлении. [4].

При чтении работ В.В. Петрова и работ, посвященных научному творчеству В.В.Петрова, обнаруживаются несоответствия принципиального характера, которые приводят не только к неправильным выводам, но и уменьшают значимость сделанных В.В. Петровым открытий.

В данной работе был поставлен классический эксперимент В.В. Петрова по зажиганию разряда между древесными углями и показано, что при сведении углей до 1,5-2 мм от уголька соединенного с минусом источника (катод) к угольку соединенному с плюсом источника (анод) двигаются частицы аморфного углерода (сажа) и при встрече с анодом уголек загорается. Пробой происходит при напряжении около 600 В, что много меньше пробойного при атмосферном давлении (30 кВ), за счет появления в газовом промежутке между угольками термических электронов. Получаемая газоразрядная плазма существует при увеличении разрядного промежутка до 1 см и напряжении на нём не менее 300 В. Исследование параметров полученного разряда позволяет констатировать, что В.В. Петров, создав гальвани-вольтовую батарею с напряжением 1600 В, впервые зажег самостоятельный газовый разряд в воздухе при атмосферном давлении. Он открыл гениально простой способ получения четвертого состояния вещества – плазмы.

Автор считает своим долгом выразить благодарность за помощь в подготовке данной работы Л.В. Симончику и М.С. Усачёнку.

- [2]. Шнейберг Я.А. Василий Владимирович Петров 1761-1834гг. Наука 1985. С. 224.
- [3]. Киселевский Л.И. Радиальная структура прикатодной области высокоамперного тлеющего разряда / Л.И. Киселевский // ЖПС. 1972. Том 16, вып. 6. С. 969-972.
- [4]. Self-sustained dc atmospheric pressure normal glow discharge in helium: from microamps to amps / V.I. Arkhipenko [et al.] // Plasma Sources Sci. Technol. – 2009. – Vol. 18, № 4. – 045013 (17pp).

^{[1].} Петров В.В. Известие о гальвани-вольтовских опытах. С.-Пб. – 1803. – С. 209.

УДК 535:621.373.826

Н. В. Тарасенко, А. А. Невар, М. И. Неделько, В.Г. Корнев, Н. Н. Тарасенко

ПЛАЗМЕННО-ЛАЗЕРНЫЙ СИНТЕЗ КОМПОЗИТНЫХ НАНОСТРУКТУР В ЖИДКИХ СРЕДАХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>n.tarasenko@ifanbel.bas-net.by</u>

В последние годы плазменно-жидкостные системы привлекают все большее внимание в связи с их высоким потенциалом в области обработки материалов и нанотехнологий, аналитической химии, очистки воды, биомедицины, инактивации микроорганизмов, пищевых и сельскохозяйственных применений [1,2]. Целью настоящего доклада является обобщение широкого спектра применений систем плазмажидкость в производстве и обработке наноматериалов. Большинство из них основано на генерации разрядов в жидкости и при контакте с ней, а также на лазерноиндуцированной плазме в жидкости. В плазменно-жидкостных системах, плазма генерируется при атмосферном давлении, существует, как правило, в неравновесном состоянии, содержит различные высокореактивные частицы, что хорошо подходит для синтеза наноматериалов широкого диапазона составов, размеров и структур. Например, большой интерес вызывают плазменные нанотехнологии для создания композитных наноматериалов, таких как гибридные, сплавные и легированные наноструктуры. В настоящей работе обсуждается возможность использования ряда комбинированных лазерно-разрядных подходов для повышения эффективности формирования композитных наноматериалов [3]. В частности, для синтеза композитных наночастиц (НЧ) предложено использовать электрический разряд между двумя электродами из разных материалов; электроэрозионную обработку смесей двух и более коллоидных растворов или микропорошков под слоем жидкости; последовательные разряды с послеразрядной лазерной обработкой образовавшихся НЧ [1]. Сочетание этих неравновесных процессов показало себя как эффективный инструмент для синтеза сплавных и легированных НЧ, в том числе сплавов несмешивающихся в равновесных условиях элементов. Кроме метода погруженного в жидкость разряда, синтез композитных НЧ возможен и при использовании электрических разрядов в контакте с жидкостью. При этом данный тип разряда может быть применен для осаждения НЧ в процессе синтеза, а также для модификации поверхности НЧ, что важно для улучшения таких их свойств, как растворимость, биосовместимость и фотолюминесценция. При этом состав растворителя является решающим фактором, влияющим на состояние поверхности НЧ [4].

Другой способ возбуждения плазмы, который привлек к себе повышенное внимание как в контексте синтеза НЧ, так и в спектрохимическом анализе, связан с лазерной абляционной плазмой, генерируемой в жидкости. Используются различные подходы в зависимости от параметров конечного продукта, который необходимо получить [5, 6]. Лазерно-абляционная плазма, создаваемая при комбинации различных типов мишеней и жидкостей, позволяет управлять как химическими, так и

свойствами синтезируемых физическими наноматериалов, В том числе нанокомпозитов, особенно в режиме реактивной лазерной абляции. При этом для целенаправленного формирования наночастиц требуемого состава и структуры необходимо исследование влияния лазерных параметров, условий фокусировки и свойств жидкой фазы на основные структурно-морфологические свойства наночастиц. Однако из-за сложного пространственно-временного характера эволюции лазерноиндуцированной плазмы попытки получить описание лежащих в основе физикохимических процессов сталкиваются с проблемой временного и пространственного разрешения, а также с неравновесными условиями. Выявленные в настоящей работе взаимосвязи структуры наночастиц с экспериментальными параметрами позволили предложить ряд новых схем, синтеза наночастиц сплавов (Si-Sn, Ag-Cu) и соединений (SiC, ZnO, CuO), легированных (ZnO:Co, ZnO:Nd) нанокристаллов и гибридных ZnO/C структур. Кроме того, обнаружено влияние внешнего электрического поля на морфологию синтезируемых наноматериалов, что позволило предложить новый метод синтеза и сборки анизотропных нанокомпозитов ZnO/C при лазерной абляции в жидкости.

Приведенные примеры, иллюстрирующие возможности плазменно-лазерных нанотехнологий для синтеза композитных структур, получены в рамках выполнения задания Конвергенция 2.2.05 ГПНИ «Конвергенция-2025», а также проектов Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (гранты БРФФИ № Ф21РМ-105, № Ф22СРБГ-008 и № Ф23РНФ-156).

- 1. Rezaei F, Vanraes P, Nikiforov A, Morent R, De Geyter N. Applications of Plasma-Liquid Systems: A Review 2019 Materials 12 2751.
- 2. Zhou R, Zhou R, Wang P, Xian Y, Mai-Prochnow A, Lu X, Cullen P J, Ostrikov K, Bazaka K Plasma-activated water: generation, origin of reactive species and biological applications 2020 Journal of Physics D: Applied Physics 53, 303001.
- Tarasenka N, Nominé A, Nevar A, Nedelko M, Kabbara H, Bruyère S, Ghanbaja J, Noel C, Krasilin A, Zograf G, Milichko V, Kulachenkov N, Makarov S, Belmonte T, Tarasenko N Synergistic Effect of Plasma and Laser Processes in Liquid for Alloyed-Nanoparticle Synthesis. 2020 *Physical Review Applied* 13 014021.
- 4. Burakov V, Kiris V, Nedelko M, Tarasenka N, Nevar A, Tarasenko N Plasmas in and in contact with liquid for synthesis and surface engineering of carbon and silicon nanoparticles 2018 *Journal of Physics D: Applied Physics* **51** 484001
- 5. Zhang D, Li Z and Sugioka K Laser ablation in liquids for nanomaterial synthesis: diversities of targets and liquids 2021 *J. Phys. Photonics* **3** 042002
- Kanitz A, Kalus M R, Gurevich E L, Ostendorf A, Barcikowski S and Amans D Review on experimental and theoretical investigations of the early stage, femtoseconds to microseconds processes during laser ablation in liquid-phase for the synthesis of colloidal nanoparticles 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* 28, 103001.

УДК 536.2:532/533

Г. В. Грушевская, Г. Г. Крылов

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ГРАФЕНОЙ ПЛАЗМОНИКЕ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь grushevskaja@bsu.by

Сегодня актуальны разработки нанооптоэлектронных устройств, таких как генераторы фототока и графеновые антенны в терагерцовом диапазоне, а также детекторы одномолекулярных сигналов. Эти устройства функционируют на основе эффектов или плазмонного резонанса в графене [1]. Графен, плазмонных представляющий собой углеродный слой атомной толщины, является перспективным материалом для наноплазмоники из-за огромной плотности и высокой подвижности его безмассовых носителей заряда в состоянии так называемой дираковской жидкости. Последняя существует в долинах К и К' бриллюэновской зоны. Согласно современным представлениям о квазичастичных возбуждениях графеновой электронной плотности как безмассовых псевдодираковских фермионах (электронах и дырках) плазмонные моды невозможно возбудить в неполяризованном графене, что противоречит экспериментальным данным [1]. Феноменологические соотношения для дисперсии плазмонной энергии в графеновых антеннах предсказывают существование плазмонных мод только в допированном графене [2], когда состояние дираковской жидкости разрушается. Таким образом, развитие графеновой плазмоники затруднено вследствие отсутствия методов контролируемой настройки уровня Ферми в графене. В данной работе изучается влияние допирования со стороны подложки на возбуждение плазмонных квазирелятивистской графеновых мод в рамках модели псевдомайорановских двумерных фермионов – пар квазичастичных возбуждений с большим времени жизни из-за существования корреляций в движении графеновых электронов. Цель работы – изучить влияние поляризации графеновой зарядовой плотности на плазмонный резонанс в графене методом температурных функций Грина.

Плазмонные моды (плазменные колебания) возбуждаются электромагнитным импульсом. На частотах плазменных колебаний диэлектрическая проницаемость, которая определяется формулой

$$\epsilon(\omega, \vec{r}) = \operatorname{Re}\left(1 - 4\pi \frac{\sigma(\omega, \vec{r})}{\omega}\right) = 1 + \frac{4\pi}{\omega} \operatorname{Im} \sigma(\omega, \vec{r}),$$

становится равной нулю. Мнимая (Im $\sigma(\omega, \vec{r})$) и действительная (Re $\sigma(\omega, \vec{r})$) части комплексной проводимости, входящие в формулу и рассчитанные методом температурных функций Грина для псевдодираковской и псевдомайорановской графеновых моделей, ведут себя, как показано на рис. 1а. Из-за биполярности графена его поверхность Ферми исчезающе мала, и в долинах зоны Бриллюэна электроны и дырки аннигилируют друг друга. Как следствие отсутствия поляризации в псевдодираковской фермионной модели, Im $\sigma(\omega, \vec{r})$ принимает положительные значения во всем частотном диапазоне и при всех температурах, за исключением температур, близких к абсолютному нулю. Поэтому плазмонные моды не возбуждаются в псевдодираковской модели без допирования графеновой зарядовой плотности.



Рис. 1. Частотные зависимости действительной (зеленая и синяя линии) и мнимой (желтая и красная линии) частей проводимости в дальней ИК-области в относительных единицах e^2/\hbar для псевдомайорановских (зеленая и красная линии) и псевдодираковских (желтая и синяя линии) фермионов в графене. Расчет проводился при температуре 200 К и химическом потенциале, равном 33 К, с учетом (а) и в пренебрежении (b) майорановским массовым членом; *е* и \hbar – заряд электрона и планковская постоянная, деленная на 2π , соответственно.

В отличие от псевдодираковской фермионной модели графена, в долинах псевдомайорановских графеновых электронных энергетических зон размещается топологический дефект. Топологический дефект представляет собой кор вихря и является внутрищелевым состоянием, находящимся в середине энергетической щели. В псевдомайорановской фермионной модели графена существует частотный диапазон, где Im $\sigma(\omega, \vec{r})$, как показывает рис. 1а, принимает отрицательные значения, и, соответственно, в этой области существует плазмонный резонанс. В области плазмонного резонанса, Re $\sigma(\omega, \vec{r})$ возрастает, приводя к падению величины пропускания света графеном в согласии с экспериментом.

Поляризация графена описывалась, как размещение графенового листа в диэлектрической среде с диэлектрической проницаемостью $k, k \gg 1$. Тогда массовый майорановский член, входящий в гамильтониан псевдомайорановского фермиона, становится очень малым. Как результат, показанный на рис. 1b, плазмонный резонанс смещается из дальнего инфракрасного (ИК) диапазона в сторону ближнего ИК, что наблюдается в эксперименте.

Итак, псевдомайорановская модель графена предсказывает частотный диапазон плазмонного резонанса и позволяет настраивать и мониторить этот диапазон при изменении электростатического воздействия со стороны подложки.

- In Ch. Two-dimensional Dirac plasmon-polaritons in graphene, 3D topological insulator and hybrid systems. / Ch. In, U. J. Kim, H. Choi // Light: Sci. Appl. – 2022. – T. 11. – C. 313.
- [2] Tene T. Calibration of Fermi velocity to explore the plasmonic character of graphene nanoribbon arrays by a semi-analytical model. / T. Tene et al. // Nanomaterials. – 2022. – T. 12. – C. 2028.

УДК 533.9

В. В. Лычковский, А. Н. Чумаков

ОСОБЕННОСТИ АБЛЯЦИИ СТЕКЛА БК-110 И ОБРАЗОВАНИЯ ПЛАЗМЫ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПАРНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ 355 И 532 HM

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>v.luchkouski@dragon.bas-net.by</u>

Введение. Исследование лазерного воздействия на прозрачные материалы представляет значительный практический интерес [1]. Считается, что при воздействии обусловлено наносекундных лазерных импульсов разрушение в основном поглощающими неоднородностями, а при воздействии фемтосекундных многофотонной ионизацией [1, 2]. Результаты лазерного воздействия на материалы зависят также от длины волны излучения. Поэтому использование бихроматических пар лазерных импульсов позволяет влиять на лазерную абляцию материалов и образование приповерхностной плазмы [3, 4]. Настоящая работа посвящена выявлению особенностей лазерной абляции стекла в воздухе и образования плазмы под действием парных наносекундных импульсов излучения с длинами волн $\lambda = 355$ и 532 нм.

Техника эксперимента. Использована установка на основе двух Nd:YAG лазеров и системы синхронизации, обеспечивающей генерацию парных импульсов лазерного излучения (ЛИ) с $\lambda = 355$ и 532 нм и длительностью 18 и 15 нс соответственно, следующих с регулируемым временным интервалом ($\Delta \tau$) и управляемым порядком следования. Излучение с длиной перетяжки для обоих пучков ЛИ ~ 3 мм фокусировалось на поверхность стекла БК-110 (толщина 3 мм), состоящего на ~ 75% из SiO₂. Диаметр пятна для ЛИ $\lambda = 355$ и 532 нм составлял 300 и 260 мкм соответственно, интенсивности на поверхности образца q₃₅₅ = 0.85 ГВт/см² и q₅₃₂ = 1.31 ГВт/см². Спектры излучения приповерхностной плазмы с экспозицией \approx 7 мс регистрировались спектрометром SL-40-2 на основе ПЗС линейки TCD 1304 (Toshiba).

Результаты и обсуждение. Внешний вид поверхности стекла БК-110 после облучения серией из 10 пар бихроматических лазерных импульсов, следующих с интервалом от -40 до +40 мкс, представлен на рис. 1 (отрицательное значение интервала подразумевает опережающее следование импульса 355 нм).



Рис. 1. Изображения кратеров, сформированных бихроматическим ЛИ (λ = 355 и 532 нм) с разным интервалом $\Delta \tau$ и порядком следования импульсов: *a* – вид кратера для $\Delta \tau > 0$ мкс; *b* – $\Delta \tau$ = -1.4 мкс; *c* – $\Delta \tau$ = -20 мкс; *d* – $\Delta \tau$ = -40 мкс.

При опережающем воздействии импульсов ЛИ $\lambda = 355$ нм формировался откольный кратер со следами гладкого углубления вне кратера (рис. 1 b) и кольцом ореола (рис. 1 d). С ростом интервала между импульсами кратер расширялся, достигая

области гладкого углубления от второго импульса пары. При опережающем воздействии импульсов ЛИ $\lambda = 532$ нм вне зависимости от величины интервала между импульсами формировалось гладкое углубление (сдвоенное из-за дефектов в излучателе), аналогичное изображенному на рисунке 1 а. Вокруг пятна облучения формировался также кольцеобразный ореол (подобный наблюдаемому на рисунке 1 d).

В эмиссионных спектрах приповерхностной плазмы выявлена зависимость интенсивности спектральных линий Si I – Si III, N II от временного интервала и порядка следования импульсов бихроматического ЛИ (рис. 2).



Рис. 2 Зависимость интенсивности линий Si III 455,3; Si II 413,1; Si I 702,7 и N II 501,1 от временного интервала $\Delta \tau$ и порядка следования импульсов бихроматического ЛИ ($\lambda = 355$ и 532 нм) в эмиссионном спектре приповерхностной плазмы образца

При опережающем воздействии ЛИ 355 нм рост интенсивности спектральных линий Si II – Si III сопровождается локальными максимумами при временных интервалах импульсов $\Delta \tau = -35, -20, -1,4$ мкс. Для линии Si II выраженный максимум наблюдается при $\Delta \tau = -1,4$ мкс, а при $\Delta \tau = -35, -20$ мкс максимумы слабо выражены. Схожее поведение и у линии N II – пик при $\Delta \tau = -1,4$ мкс и квазилинейное падение интенсивности с ростом величины интервала. При опережающем воздействии ЛИ 532 нм наблюдается монотонное падение интенсивностей всех линий по мере увеличения интервала между импульсами.

Лазерная абляция стекла БК-110 в воздухе Заключение. И характер формирования приповерхностной плазмы под действием сдвоенных наносекундных импульсов излучения с длинами волн $\lambda = 355$ и 532 нм зависят от временного интервала порядка следования бихроматических лазерных импульсов. Опережающее И воздействие импульсов излучения $\lambda = 355$ нм приводит к хрупкому разрушению стекла и к ряду особенностей взаимодействия второго лазерного импульса пары с образующимся плазменным факелом, содержащим частицы конденсированной фазы. Наиболее эффективное возбуждение эрозионной плазмы мишени обеспечивается при опережающем воздействии импульсов λ = 355 нм с временным интервалом между импульсами $\Delta \tau = -1,4$ мкс, тогда как опережающее воздействие импульсов излучения λ = 532 нм приводит к более мягкой абляции мишени с формированием гладкого углубления на ее поверхности.

- [1] А. А. Маненков, А. М. Прохоров. // УФН. 1986. Т. 148 (1). С. 179.
- [2] М. Ф. Колдунов, А. А. Маненков, И. Л. Покотило. // Кв. электр. 1998. Т. 28 (3). С. 277.
- [3] А.Н. Чумаков, В.В. Лычковский. // Ж. прикл. спектроск. 2021. Т. 88 (6). С. 900.
- [4] А.Н. Чумаков, В.В. Лычковский, И.С. Никончук, А.С. Мацукович. // Журн. техн. физики. – 2022. – Т. 92, №1. – С. 36.

УДК 537.523/.527

А.А. Кириллов, Л.В. Симончик, Н.В. Томкович

НАРУШЕНИЕ СКАЙЛИНГОВЫХ ЗАКОНОВ В КАТОДНОЙ ОБЛАСТИ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь mikalaitomkavitch@yandex.by

В последние десятилетия существует устойчивая тенденция перехода к тлеющим разрядам атмосферного давления (ТРАД) поскольку при их использовании не требуется дорогостоящая вакуумная техника, а также повышение давления позволяет увеличивать вкладываемую в плазму энергию, что важно для ряда приложений. Главным структурным образованием тлеющего разряда является катодный слой, основной функцией которого является генерация заряженных частиц.

Параметры области катодного падения потенциала в случае слоя с однородной плотностью подчиняются скейлинговым законам, согласно которым толщина слоя обратно пропорциональна плотности, плотность тока прямо пропорциональна квадрату тока, а падение напряжение постоянно. Разряды атмосферного давления характеризуются большим объемным тепловыделением, приводящим к высоким градиентам температуры, а, следовательно, и плотности, в катодном слое. Это приводит к нарушению в катодной области скайлинговых законов, исследуемого в данной работе.

Тлеющий разряд зажигался в герметичной камере с кварцевыми окнами между стержневым закругленным вольфрамовым анодом и плоским медным катодом с принудительным охлаждением. В экспериментах использовался гелий, проток которого через разрядную камеру составлял ~ 1 л/мин.

Вид ТРАД при токе 1 А и межэлектродном зазоре 10 мм показан на рис. 1.



Рис. 1. Аксиальное распределение электрического поля для охлаждаемого (квадраты) и неохлаждаемого (треугольники) катодов. Кружки – продольный профиль на расстоянии 8 мм от оси

В случае охлаждаемого катода (рис. 1, а) тонкий отрицательного слой свечения имеет диаметр 6 мм. Напряженность электрического поля в катодной области постоянна в радиальном направлении и линейно падает в аксиальном 60 направлении ОТ кВ/см на поверхности до нуля катода на расстоянии 70 мкм от катода. При этом катодное падение

потенциала составляет около 210 В, что близко к классическому значению 177 В для пары медь-гелий для тлеющего разряда низкого давления.

В положительном столбе разряда с неохлаждаемым катодом (рис. 1, б) изменения менее резкие по сравнению со случаем охлаждаемого катода (рис. 1, *a*) и в основном наблюдаются вблизи катодной области. Площадь отрицательного свечения увеличилась почти на порядок. Напряженность электрического поля непостоянна вдоль поверхности катода и уменьшается на периферии разряда в 2-3 раза, что следует из сравнения продольного распределения на оси и на расстоянии от нее 8 мм. Толщина слоя катодного падения потенциала увеличилась примерно в 1,5 раза. Катодное падение потенциала составляет 100 В на периферии и 300 В на оси разряда, что значительно выше, чем в случае охлаждаемого катода.

Сравним параметры катодного слоя в диффузном и сильно

контрагированном ТРАД при токе 1 А, когда разница объемного тепловыделения в положительных столбах этих двух разрядов огромна. Электроды представляют собой два неохлаждаемых плоских медных диска толщиной 8 мм и диаметром



36 мм. Как видно, диффузный положительный столб можно получить при межэлектродном расстоянии менее 5 мм (рис. 2). При большем промежутке между электродами он контрагирует. Средняя плотность тока на катоде при



Средняя плотность тока на катоде при переходе от диффузного к контрагированному режиму разряда изменяется от ~0,3 A/см² до ~0,4 A/см².

На рис. З показаны профили линии Н_в по оси разряда на расстоянии 0.03 MM поверхности от катода. Определенная по этим контурам напряженность составляет 30 кВ/см для диффузного 40 кВ/см И для контрагированного разрядов И, соответственно, 45 кВ/см и 60 кВ/см на поверхности катода. Таким образом, диффузного переход ОТ К контрагированному разряду приводит к увеличению напряжения катодного падения.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф22ТЮБ-003).

УДК 53

М. С. Усачёнок¹, Л. В. Симончик¹, С. Е. Андреев², Н. Н. Богачёв²

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЕННОЙ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ВИБРАТОРНОЙ АНТЕННЫ, РЕАЛИЗОВАННОЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ПЛАЗМЫ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072, Минск, Беларусь ² Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 38, 119991, Москва, Россия <u>m.usachonak@dragon.bas-net.by</u>

Основная задача любой антенны - согласование приемника (передатчика) с окружающим пространством. Для успешного выполнения этой задачи антенна должна быть хорошо согласована с фидерным трактом, т.е. иметь малое отражение (малые значения параметра S11) в диапазоне частот излучаемых (принимаемых) волн. По конструкции антенны могут быть вибраторного, рамочного, зеркального, линзового, рупорного и других типов. Плазменные антенны можно условно разделить на два класса: первый - плазма является частью излучающего элемента антенны (вибраторные антенны) и второй – плазма служит для экранирования отражения радиоволн (например, антенна барабанного типа). Так же они могут быть разделены по способу возбуждения плазмы (ВЧ или СВЧ разряд, НЧ разряд, постоянный ток) и способу подачи информационного сигнала к газоразрядной плазме [1-3]. Отличительной чертой плазменных антенн является возможность электрической подстройки ее параметров [4]. Газоразрядная плазма может выступать в качестве эффективного управляющего элемента скоростных СВЧ устройств, работающих с большими уровнями СВЧ мощности [5]. В данной работе рассмотрена возможность реализации плазменной антенны с использованием тлеющего разряда при пониженном давлении в качестве центрального проводника вибратора.

Плазменный несимметричный вибратор представлял собой антенну, у которой излучающим телом является плазменный столб лампы ГШ-5, а коаксиальный резонатор, служащий для подвода СВЧ мощности к разряду, совмещен с экраном антенны (рисунок 1). Диаметр экрана - 10 см, диаметр центрального отверстия резонатора - 20 мм, расстояние от экрана до анода лампы ГШ-5 – 12,5 см, внутренний диаметр кварцевой трубки лампы ГШ-5 – 3 мм. Питание лампы ГШ-5 осуществлялось источником постоянного напряжения U = 0.600 В, балластное сопротивление варьировалось от 1 кОм до 15 кОм. Измерение S параметров выполнялось с помощью портативного векторного анализатора цепей N9918A (Keysight Technologies) в диапазоне частот 1 - 3 ГГц. Приемная измерительная рупорная антенна П6-20 располагалась на расстоянии 1 м от плазменной антенны.

При отсутствии разрядного тока параметр S11 имеет минимум на частоте $f_0 = \omega_0/2\pi = 1,8$ ГГц и составляет – 5 дБ. Критическая плотность электронов для этой частоты составляет $n_c = 4 \times 10^{10}$ см⁻³. С увеличением разрядного тока в лампе ГШ-5 от 0 до 200 мА средняя по объему плотность электронов достигает $n_e = 7 \times 10^{13}$ см⁻³, что соответствует электронной плазменной частоте $\omega_p = 471,9 \times 109$ с-1, а S11 на данной

частоте f_0 уменьшается до – 10 дБ. Зарегистрированная при этих условиях диаграмма направленности по углу места представлена на рисунке 1, *б*. Диаграмма нормирована





излучение антенны без разряда. Отсчет угла от плоскости экрана в сторону оси антенны. Максимум диаграммы направленности наблюдается под углом 60°, и ширина луча составила около 30°. Полученные данные хорошо согласуются с результатами моделирования радиочастотных свойств антенны, выполненного в среде программы COMSOL Multiphysics (рисунок 1, *в*) для заданных параметров плазменного столба. Моделирование показало, что наличие анодного провода вносит незначительные искажение в азимутальную диаграмму направленности (круговая диаграмма вырождается в эллиптическую), но не влияет на эффективность излучения.

Выполненное исследование плазменной вибраторной антенны с положительным столбом тлеющего разряда при пониженном давлении в качестве излучающего тела подтверждает теоретические выводы работы [4], которые предсказывают наличие у плазменной антенны эффективного возбуждения поверхностных электромагнитных волн, распространяющихся со скоростью близкой к скорости света, при условии $\omega_p \ge 60\omega_0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов БРФФИ № Т21РМ-120 и РФФИ № 20-58-04019 Бел_мол_а.

- [1] Bonde S., Ghiye V., Dhande A. A Study of plasma antenna parameters with different gases //2014 Fourth International Conference on Communication Systems and Network Technologies. – IEEE, 2014. – P. 16-19.
- [2] Zali H. M. et al. Study of monopole plasma antenna using fluorescent tube in wireless transmission experiments //2012 International Symposium on Telecommunication Technologies. – IEEE, 2012. – P. 52-55.
- [3] Kumar R., Bora D. Experimental study of parameters of a plasma antenna //Plasma Science and Technology. 2010. V. 12. №. 5. P. 592.
- [4] Богачев Н. Н. и др. Поверхностная волна и линейный режим работы плазменной антенны //Физика плазмы. 2015. Т. 41. №. 10. С. 860-866.
- [5] Babitski V.S. et al. One-dimensional electromagnetic band gap plasma structure formed by atmospheric pressure plasma inhomogeneities // Journal of Applied Physics. – 2017. – Vol. 122. № 8. – 083302.

УДК 620.3

Е. А. Невар¹, Н. А. Босак¹, М. И. Неделько¹, Н. Н. Тарасенко¹, Н. В. Тарасенко¹, G. Chen², L. Shi²

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ КРЕМНИЯ И КРЕМНИЕВО-УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ ДЛЯ АНОДОВ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.nevar@ifanbel.bas-net.by</u>

² Academy of Science and Technology Development, NanoScience and Technology Research Center, Shanghai University, No.99 Shangda Road, 200444, Shanghai, China

Одной из ключевых задач современных технологий является разработка эффективных методов генерации и хранения энергии. На фоне интенсивного развития альтернативной «зеленой» энергетики нового поколения, разработки в области совершенствования литий-ионных батарей представляются актуальными перспективными [1]. Основными требованиями, которым должны удовлетворять литийионные аккумуляторы, являются высокая удельная плотность энергии, длительный срок службы и высокая плотность мощности. Для достижения этих параметров важно усовершенствование материалов электродов [2]. Физические и химические свойства существующих анодных материалов литий-ионных батарей, чаще всего изготовленных на основе графита, не соответствуют требованиям крупномасштабных систем хранения энергии, поскольку характеризуются проблемами с безопасностью и ограничены теоретическими значениями удельной емкости (372 мА×ч/г).

Кремний считается подходящим альтернативным материалом электродов для литий-ионных аккумуляторов следующего поколения, заменяющим графит, благодаря ряду преимуществ, включая высокую теоретическую емкость 4200 мАч/г, подходящее разрядное напряжение (от ~ 0.2 до 0.3 В относительно Li/Li+), которое может адекватно сочетаться с материалами катода (коммерческие материалы LiCoO₂, LiFePO₄ и т.д.) и избежать проблем безопасности, вызванных ростом дендритов лития; доступность, широкая распространенность, небольшая стоимость и низкая токсичность материала [2]. Однако практическое применение кремниевых анодов затруднено из-за значительного объемного расширения кремния (~ 400%) [3] во время многократного литирования/делитирования, что в совокупности приводит к нестабильности работы полученных электродных материалов. Во время процесса зарядки и разрядки существенное объемное расширение/сжатие создает эффект напряжения, которое вызывает разрушение кремниевой микроструктуры, кристаллической фазы и границы раздела [4], что ведет к ухудшению технических характеристик аккумуляторов. Кроме того, большое объемное расширение приводит к таким проблемам, как растрескивание, разрыв и измельчение соответствующих анодов, разъединение материалов и токоприемников, нарушение сетей передачи электронов и потери Li+ и электролитов изза постоянного процесса образования-разрушения-преобразования слоя твердого электролита, что приводит к сокращению продолжительности цикла и низкой плотности энергии и мощности.

В данной работе использовано несколько подходов, основанных на структурировании поверхности кремния и формировании композитных кремнийуглеродных наноструктур.

Методы лазерной абляции твердотельных мишеней в жидкости И электроразрядный синтез в жидкости использовали для получения нульмерных и одномерных наночастиц Si/C. В частности, для формирования наночастиц сложного состава, композитных частиц и структур ядро-оболочка предложен одностадийный метод плазменного синтеза в органических жидкостях, а также ряд комбинированных процессов, таких как метод последовательной лазерной абляции Si и C мишеней, последовательных процессов разрядного синтеза с использованием Si и C электродов, а также электроразрядного синтеза с дополнительной лазерной обработкой наночастиц. Также композитный анодный материал Si/C синтезировали путем модификации смеси предварительно приготовленных коллоидов кремния и углерода при электрическом разряде в дистиллированной воде. Для модификации и осаждения частиц на предварительно структурированную кремниевую подложку использовали плазму тлеющего разряда при атмосферном давлении в контакте с жидким электродом. В процессе модификации композитные наноструктуры осаждали на предварительно структурированную кремниевую подложку.

Получение тонкопленочных, слоистых И пористых наноструктур Si/C осуществляли на экспериментальной установке на базе волоконного иттербиевого лазера (длина волны 1060 нм) с частотой повторения лазерных импульсов, регулируемой в диапазоне 20-100 кГц, для контроля которого использован гальваносканер с возможностью вертикального перемещения для контроля площади облучаемого пятна на поверхности. Данный метод предполагает использование мишеней, полученных лазерным напылением тонких слоев графита (десятки нм), на поверхности пластин кремния. Лазерная абляция таких структур под слоем жидкости позволяет получать плазменные формирования, содержащие элементы как подложки, так и тонкослойного покрытия, что в зависимости от условий лазерного воздействия (длина волны, частота, длительность и энергия импульсов), дает возможность либо формировать наночастицы Si/C с их дальнейшим осаждением на поверхности электродов, либо инициировать взаимодействие слоев между собой приводящее к изменению структуры и состава в результате лазерного структурирования.

Работа выполнена в рамках проекта Ф22КИТ-007.

- Dunn, B., Kamath, H., Tarascon, J.M.: Electrical energy storage for the grid: a battery of choices // Science. - 2011. – Vol. 334. – P. 928–935.
- [2] Yu, H.C., Ling, C., Bhattacharya, J., et al. Designing the next generation high capacity battery electrodes // Energy Environ. Sci. – 2014. – Vol. 7. – P. 1760.
- [3] Ko, M., Oh, P., Chae, S., et al. Considering critical factors of Li-rich cathode and Si anode materials for practical Li-ion cell applications // Small. 2015. Vol. 11. P. 4058–4073.
- [4] Verbrugge, M.W., Baker, D.R., Xiao, X., et al. Experimental and theoretical characterization of electrode materials that undergo large volume changes and application to the lithium-silicon system // J. Phys. Chem. C. – 2015. – Vol. 119. – P. 5341–5349.

УДК 535.41

А.В. Агашков

ДВУХЛУЧЕВАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ БЕЗ ПРОБЛЕМЫ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЗНАКА ФАЗОВОГО СДВИГА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.agashkov@ifanbel.bas-net.by</u>

Явление интерференции света нашло широкое применение для точного измерения различных физических величин. Интерференционная картина в двухлучевой интерферометрии описывается классическим выражением [1]:

$$I(x, y) = I_1(x, y) + I_2(x, y) + \sqrt{I_1(x, y)I_2(x, y)} |\gamma_{12}(\tau)| \cos \Delta \varphi(x, y),$$

где $I_1(x, y)$ и $I_2(x, y)$ интенсивности параллельно поляризованных, распространяющихся в одном направлении интерферирующих волн; (x, y) – координаты точки в плоскости наблюдения; $\gamma_{12}(\tau)$ – комплексная степень когерентности; τ – временной сдвиг; $\Delta \varphi(x, y)$ – фазовый сдвиг между волнами. Данное выражение анализируется в многочисленных монографиях и научных публикациях. Указывается, что на основании одиночной интерферограммы распределение фазы не может быть однозначно определено из распределения интенсивности вследствие свойств функции $\cos\Delta\varphi$: проблема 2π и проблема знака фазового сдвига.

Для решения проблемы знака фазового сдвига на основании одиночной интерферограммы в работе [2] было предложено использовать неравноплечие интерферометры, например, однопроходный – Маха-Цендера или двухпроходный – Майкельсона, освещаемые когерентным точечным источником (сферический волновой фронт) или когерентным линейным источником (цилиндрический волновой фронт). Эксперимент полностью подтвердил теоретическое рассмотрение. Однако, остался открытым вопрос о существовании проблемы знака фазового сдвига в двухлучевой интерферометрии. В работе [3] предложена методика расчета сдвига интерференционных полос при внесении локального фазового сдвига в одну из интерферирующих волн. Интерферирующие волны поляризованы в плоскости, перпендикулярной плоскости распространения (приближение скалярных волн). Результатом расчета являются выражения, определяющие направление и величину смещения интерференционных полос в зависимости от знака и величины локального фазового сдвига в одной из двух интерферирующих волн с плоским или сферическим фронтом. Сформулированы строгие правила смещения интерференционных полос в зависимости от знака фазового сдвига. Результаты эксперимента на интерферометре Маха-Цендера с различными комбинациями пучков со сферическими и плоскими волновыми фронтами полностью подтвердили теоретические расчёты. В работах [2, 3] в качестве объекта использовались стеклянные плоскопараллельные подложки. На часть поверхности одной подложки нанесён слой материала, характеризуемый обычными оптическими свойствами с геометрической толщиной 120 нм (ZrO₂). Вторая подложка была частично покрыта двухслойной плёнкой Ag(25 нм)/SiO₂(20 нм) с суммарной геометрической толщиной 45 нм. Подобная композиция относится к классу планарных метаматериалов со структурой изолятор-металл-изолятор и характеризуется отрицательным фазовым сдвигом при прохождении слоя световой волной.

Результаты выполненных теоретических и экспериментальных исследований показывают, что так называемая «проблема неопределенности знака» при внесении в одну из интерферирующих волн локального фазового сдвига может быть исключена. Теоретически сформулированы строгие правила смещения интерференционных полос в зависимости от знака локального фазового сдвига. Возможность определения знака локального фазового сдвига на основе одиночной интерферограммы значительно упрощает методику исследования слоёв метаматериалов субволновой толщины и позволяет сделать важные научные выводы. Так впервые экспериментально показано, что положительная оптическая длина пути обычного материала может быть компенсирована в воздухе слоем метаматериала с отрицательной оптической длиной пути, находящимся от него на расстоянии, значительно превышающем длину волны света. Особый интерес с практической точки зрения представляет правило смещения полос при интерференции двух плоских волн, которое формулируется следующим образом: при внесении в одну из двух интерферирующих плоских волн положительного фазового сдвига направление смещения полос противоположно направлению проекции её волнового вектора на плоскость наблюдения. При внесении отрицательного фазового сдвига направление смещения полос совпадает с направлением проекции волнового вектора на плоскость наблюдения. На Рис. 1 представлен фрагмент интерферограммы объекта в виде двух пластин, расположенных рядом, в одном из плеч интерферометра Маха-Цендера. Стрелка указывает направление проекции волнового вектора волны, прошедшей через объект, на плоскости наблюдения.



Рис. 1

- [1] Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф М.: Наука, 1973. 720 с.
- [2] Agashkov, A. Two-beam interferometry for characterizing subwavelength layers with a negative optical path length / A. Agashkov // Opt. Commun. – 2020. – V. 462. – P. 125306.
- [3] Агашков, А.В. Двухлучевая интерферометрия с определённостью знака фазового сдвига / А.В. Агашков // Оптический журнал. 2022. Т. 89, № 12. С. 3.

УДК 517.938

Praskowya D.Serowa, Ivan A. Kovalew and Dmitry W. Serow QUASICRISTALS, SNARKS AND FOUR COLOURS PROBLEM

State Institute of Economy Finance Law and Technology, 188300 Military Glory City Gatchina, Russia; dimusum@yandex.ru

Keywords: quasicrystal, tiling, Petersen snark, four colours problem, quasiperiodic map

This report essence has been dictated by the desire to pay attention to some geometric problems of the quasicrystals structure studying. Not so long ago [1, 2], the authors have been constructed the infinite five tiling quasicrystal dynamic model by the layers colouring of the action result on iterations of the following quasiperiodic map

$$\prod_{k \leq 5} \cos(\gamma(x \sin \varphi_k + y \cos \varphi_k) + \beta \Phi + \alpha) \mapsto \Phi, \quad \text{where} \quad \varphi_k = \frac{k\pi}{5} \text{ and } k = \overline{1, 5}$$

This map acting on iterations allows to colourize a plane with the colours gradation determining by the form of the map Φ values. It turns out to be that the colourings are forming the five fold symmetric tiling of the plane at the different values of parameters α and β . Parameter γ determinates only the phenomenon scale. At the same time, the colourings have been determined by the structure of a trivalent (cubic) graph due to five fold symmetry.

The edge colouring for trivalent graphs problem is well-known to be equivalent to the four colour problem for arbitrary plane graphs [3]. Regular cubic graphs can be coloured with three colours. However, there exist cubic graphs without bridges such that they can be coloured with only four colours. These graphs are said to be snarks.

The Petersen snark being the simplest known snark has 10 vertices and 15 edges (without bridges), and moreover for its chromatic number and chromatic index are equal 3 and 4, respectively. There exist only two invariant colouring for the Petersen snark

2:4:4:5 and 3:4:4:4

coming out from the colourings of the generalized Petersen snark



Fig. 1.
and getting following snark Petersen colourings



Fig.2: Two topological different Petersen graph colouring; a) 2:4:4:5 and b) 3:4:4:4

where symbols r, g, b, y are denoting four colours: red, green, blue and yellow respectively.

The coloured quasicristal models have been delivered in [1, 2]. It should be noted that all the examples are painted only in four colours, although initially the colour gradation is continuous.

The Petersen snark turns out to be a minor (or a primitive) when constructing other snarks. This means that there exist the quasicrystals two phase states.

REFERENCES

- Maygula N. V., Serowa P. D., Kovalew I. A., Serow D. W., Plane Quazicrystals and Four Colours Problem: Trivalent Graph Element Construction, Nonlinear Dynamics and Applications, 26, 346– 357 (2020).
- Makarova M. V., Kovalew I. A., Serow D. W. Structurally Stable Symmetric Tilings on the Plane, NPCS, 24, 156 – 165 (2021).
- Penrose, R. Applications of negative dimensional tensors. In Combinatorial Mathematics and its Applications, - J. A. Welsh, editor. Academic Press, New York, 1971.

УДК 539.1; 004.5; 004.6; 004.91

С. Н. Сытова¹, А. Р. Барткевич, К. А. Веренич, В. В. Гавриловец, А. П. Дунец, А. Н. Коваленко, Н. И. Поляк, А. Л. Холмецкий, С. В. Черепица

БЕЛОРУССКИЙ НАУЧНЫЙ АРХИВ НА ОСНОВЕ ПОРТАЛА ЯДЕРНЫХ ЗНАНИЙ BelNET

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, Минск, Беларусь ¹sytova@inp.bsu.by

В Беларуси создается научный архив в области ядерных знаний на основе научнообразовательного электронного портала ядерных знаний BelNET <u>https://belnet.bsu.by</u>. Работа ведется с начала 2022 года в рамках развития государственной системы научнотехнической информации Республики Беларусь на 2021-2025 годы. Цель работы – создание удобного инструмента для быстрой бесплатной свободной публикации в интернете в электронном архиве материалов (черновиков статей, препринтов, научных отчетов, технической информации и т.д.) в области ядерных знаний, в том числе – фундаментальных и прикладных исследований в области ядерной физики и смежных областей науки, атомной энергетики, ядерных технологий. Данная работа важна для развития системы управления ядерными знаниями Республике Беларусь [1], а также совершенствования портала BelNET.

Разработка в 2015 году специализированного портала ядерных знаний BelNET (Belarusian Nuclear Education and Training) явилось важным шагом в контексте создания единого информационного пространства в области ядерных знаний. В настоящее время портал BelNET является единственным крупным научно-техническим информационным ресурсом в области ядерных знаний в Республике Беларусь с более чем тремя тысячами записей во всех областях ядерных знаний, в науке и практике, оригинальными специализированными учебными курсами.

В 2022 г. на портале BelNET в разделе «Наука» был создан «Научный архив» https://belnet.bsu.by/elib/?i=185. Сейчас он содержит свыше 90 записей, из них – 70 авторефератов диссертаций, в том числе таких ведущих белорусских ученых в области ядерных знаний как В.Г.Барышевский, Э.А.Рудак и др. (см. Рис.1). Такие авторефераты важны и интересны. Они практически недоступны онлайн, поскольку защищались до 2014 года – момента создания на сайте ВАК Беларуси библиотеки авторефератов. В разделе также размещены некоторые интересные авторефераты российских ученых. Работа по наполнению «Банка авторефератов диссертаций» продолжается.

Для фломирования научного архива разработана его политика в области соблюдения авторских прав, определяющая основные принципы его функционирования. Приведем ее основные положения. Архив должен предоставить рукописей пользователям для загрузки подаваемых инструмент «кабинет пользователя» с ограничением доступа пользователя только к своим материалам. Материалы в формате pdf принимаются на русском, белорусском, английском языках. Они не проходят рецензирование, редактирование, набор и верстку текста перед публикацией в архиве. Система обеспечивает их базовую автоматическую проверку с помощью системы антиплагиат, а также на нарушение этических норм. Архив оставляет за собой право идентифицировать и удалять любые материалы, которые содержат плагиат, являются искусственными (псевдонаучными) или не соответствуют этическим стандартам исследований. Авторские права сохраняются в рамках лицензии Creative Commons CC BY-SA 4.0 Attribution-ShareAlike, предусматривающей возможность копирования, распространения и адаптирования материала в любых целях, включая коммерческие.



Рис.1. Банк авторефератов диссертаций на портале ядерных знаний BelNET

Перечислим основные крупные разделы создаваемого научного архива: ядерная физика, физика элементарных частиц, теория поля, физика высоких энергий, физика плазмы, лазерная физика, ядерная астрофизика, радиационное материаловедение, радиационная химия, химия высоких энергий, атомная энергетика, ядерная техника и приборостроение, радиофизика и электроника, применение ядерной физики и радиационных технологий в здравоохранении, охрана окружающей среды, экология, ядерная и радиационная безопасность.

При разработке архива, создаваемого на основе свободного программного обеспечения, используются семантические технологии [1].

Полностью научный архив заработает к 2025 году. В настоящее время авторы могут присылать свои материалы для размещения в архиве на email: <u>elab@inp.bsu.by</u> (см. <u>https://belnet.bsu.by/article/1453</u>).

Создатели архива надеются, что в будущем архивная онлайн-система перерастет в Белорусский электронный научный архив для свободной публикации материалов в области фундаментальных и прикладных исследований и разработок естественнонаучного и социально-гуманитарного профиля.

[1] Сытова С. Н. Система управления ядерными знаниями в Республике Беларусь / С. Н. Сытова // Журнал БГУ. Физика. – 2022, № 2. – С.87.

УДК 378.016:378.147.31:378.14.014

И. И. Ташлыкова - Бушкевич¹, А. Ю. Бобрик¹, Т. Б. Русецкая¹, И. А. Столяр²

БФО В БГУИР: ОПЫТ ИНТЕГРАЦИИ ПРОЕКТА «ЭВРИСТИКА В ФИЗИКЕ» В УЧЕБНЫЙ ПРОЦЕСС

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь iya.itb@bsuir.by ² Белгосуниверситет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Информатизация общества детерминирует круг интересов студентов цифрового поколения, влияя на их взаимодействие с реальным миром, и задает направления модернизации системы высшего образования [1]. С целью формирования практикоориентированной системы подготовки конкурентоспособных специалистов в университетах развиваются инновационные педагогические технологии, позволяющие сделать обучение интерактивным и персонифицированным. Особенно востребованы эффективные образовательные технологии на основе проблемно-эвристических методов обучения, обеспечивающие развитие у студентов за счет активного участия в учебной деятельности не только профессиональных, но и личностных, творческих качеств.

В данной работе представлен 5-летний опыт и результаты работы образовательного проекта «Эвристика в физике» («ЭвФ») (автор – И. И. Ташлыкова-Бушкевич), который реализуется в рамках первичной организации БФО в БГУИР с 2018 года и насчитывает 10 сезонов/семестров. Интеграция проблемно-эвристического и STEAM-подходов в рамках курса физики в авторской технологии организации лекционных занятий [2] повышает инициативность студентов, их самостоятельность при изучении разделов физики, обеспечивая формирование у них практических профессиональных компетенций, а также развитие навыков творческого подхода к решению широкого круга задач. Как следствие наблюдается рост успеваемости в экспериментальных потоках: за 5 лет в эксперименте приняли участие 2233 студента из 13 потоков.

Проект «ЭвФ» поделен на сезоны, каждый из них проводится в рамках отдельного учебного семестра. В начале семестра мотивированные студенты, которые хотят участвовать в проекте, проходят предварительный конкурсный отбор, на котором определяются со своей будущей ролью в «ЭвФ». Принятые в проект студенты-эвристы делятся на группы по интересам, каждая из которых ответственна за свой проектный сектор. Отдельные команды студентов – эвристы-авторы – вовлекаются в процесс создания собственного образовательного продукта в видеоформате, создавая творческую теоретическую или практическую работу по физике, в дальнейшем демонстрируемую преподавателем-лектором на лекционных занятиях. Очередной сезон проекта «ЭвФ» завершается конкурсом, на котором все студенты потока выбирают наиболее понравившуюся им работу.

Творческая деятельность и креативное решение учебных задач, возможность получить знания в области физики (hard-skills) и развить гибкие навыки (soft skills), включая навыки командной работы, делают проект «ЭвФ» масштабной образовательной

площадкой. Общее число студентов первого и второго курсов, изучавших физику с применением проблемно-эвристического и STEAM-подходов в рамках «ЭвФ», включая студентов-эвристов и студентов-зрителей, составило 2238 человек. Число участников проекта было 882 студента. Из них 632 эвриста-автора (71%) создали 168 образовательных видеороликов, набравших в YouTube более 94 тысяч просмотров.

На рис. 1 а отображено количество подписчиков в различных социальных сетях проекта. Популярность и доступность образовательного контента студентов-эвристов в медиапространстве свидетельствует об актуальности внедрения проблемно-эвристических методов обучения, их соответствии интересам современной молодежи. Результаты конкурсного онлайн-голосования (рис. 1 б), проводившегося в 9-м сезоне «ЭвФ», показали интерес студентов всех факультетов БГУИР и других университетов к создаваемым творческим работам по физике. Высокая заинтересованность студентов (рис. 1 в) стимулирует развитие форм контента проекта: студенты-эвристы создают и внедряют новые рубрики в социальных сетях.



Рисунок 1. Анализ показателей проекта «ЭвФ»: количество подписчиков в социальных сетях (а), результаты открытого конкурсного онлайн-голосования 9-го сезона (б), общее число студентов-эвристов за 10 сезонов с 2018 по 2022 гг. (в)

Таким образом, результаты апробации проекта «ЭвФ» свидетельствуют о том, что предложенная модель внедрения проблемно-эвристических методов в вузовский курс изучения физики отвечает потребностям современного поколения студентов. Выявлено, что эвристическая организация творческой деятельности студентов технических специальностей в образовательном процессе университета повышает эффективность традиционного линейного изучения материала за счет активизации мышления, стимулирования мотивации и раскрытия творческого потенциала студентов.

Авторы выражают благодарность председателю БФО Д.С.Могилевцеву за поддержку проекта «ЭвФ».

[1] Король А. Д. Цифровая трансформация образования и вызовы XXI века. / А. Д. Король, Ю. И. Воротницкий // Высшее образование в России. – 2022. – Т. 31. – № 6. – С. 48–61.

[2] Ташлыкова-Бушкевич И. И. Эвристические возможности в образовательном процессе: опыт проекта «Эвристика в физике» при обучении физике студентов технических специальностей / И. И. Ташлыкова-Бушкевич, А. В. Турло, А. В. Дедина, И. А. Столяр, П. А. Ничипорчик // Университетский педагогический журнал. – 2022. – № 1. – С. 32-42.

УДК 551.5; 004.94

О. Г. Романов, Г. Г. Крылов, А. С. Федотов, А. Н. Козловский, Л. Б. Елисеева, И. А. Тимофеева, С. А. Липский

УЧЕБНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь romanov@bsu.by

В последние десятилетия математическое (численное) моделирование стало исключительно важным методом исследования циркуляции атмосферы. Как раздел физики циркуляция атмосферы является наиболее сложным конкретным воплощением гидродинамики. При движениях атмосферы скорость движения, температура, давление и плотность газа являются взаимозависимыми величинами. Изучение многообразия атмосферных явлений ставит перед исследователями ряд взаимосвязанных проблем: требует глубокого понимания сути физических явлений, обуславливающих те или иные виды атмосферных явлений, привлечения эффективных численных методов решения уравнений газо- и гидродинамики, использования высокопроизводительных вычислительных комплексов.

В БГУ на ряде специальностей в рамках лекционных курсов по физике атмосферы осуществляется подготовка специалистов, способных разбираться в сложных задачах, рассмотренных выше. Однако недостаток практической подготовки, в том числе отсутствие возможности проведения модельных физических экспериментов с использованием методов компьютерного моделирования, в известной мере ограничивает возможности подготовки современных специалистов в области физики атмосферы и метеорологии. Также, подготовка специалистов по специальности 1-31 04 08 «Компьютерная физика» требует наполнения учебного процесса практическими задачами, в которых велик удельный вес вычислительных экспериментов с использованием современных вычислительных комплексов. Все это определило актуальность разработки виртуального (компьютерного) лабораторного практикума по исследованию атмосферных явлений на различных пространственно-временных масштабах, который будет использован для повышения качества фундаментального образования в области компьютерного моделирования физических процессов. Целью работы являлась разработка комплекса учебных для обучения студентов и ВУЗов Республики Беларусь, специализирующихся в области магистрантов компьютерного моделирования физиических процессов, метеорологии и климатологии.

Разработанная компьютерная программа [1] предназначена для использования в процессе ВУЗов подготовке vчебном при студентов старших курсов по специальностям, в учебный план которых входят общие и/или специальный курсы по атмосферы, метеорологии, численным физике методам, компьютерному моделированию физических процессов. Доступность исходного кода программы позволяет использовать ее в качестве шаблона приложений для самостоятельного выполнения лабораторных работ студентами. Программа может также использоваться

в качестве приложения, демонстрирующего типичные явления физики атмосферы, связанные с возникновением газодинамических и конвективных неустойчивостей течений в задачах с двумерной и трехмерной геометрией. Виртуальный лабораторный комплекс включает в себя следующие шесть лабораторных работ: «Моделирование радиационного баланса и тепловых режимов атмосферы», «Моделирование конвекции в неоднородно нагретом приземном слое», «Моделирование явлений переноса над неоднородностями рельефа», «Моделирование процессов переноса загрязнений в приземном слое», «Моделирование среднемасштабных атмосферных движений», «Моделирование крупномасштабных конвективных движений в атмосфере Земли».

Программа представляет собой статически собранное Win32 многооконное приложение AtmospherePhysics.exe, выполненное на языке C++ в среде быстрой разработки Embarcadero RAD Studio версии 10.2 Tokyo и использующее стороннюю библиотеку визуализации TeeChartPro фирмы Steema Software. Язык интерфейса – русский, локализация программы – русская. Вместе с программой пользователям поставляются шесть файлов помощи формата *.chm, отдельных для каждой лабораторной работы, и архив исходного кода программы для использования при выполнении виртуального практикума. Отдельные лабораторные работы вызываются как отдельные дочерние окна из меню главного окна, при этом активно только текущее окно, переключение в главное окно приложения невозможно без закрытия текущего окна. Интерфейс каждой лабораторной работы стандартный для операционной системы Windows XP и более высоких версий (рисунок 1).



Рисунок 1. – Интерфейс отдельной лабораторной работы

Работа выполнена в рамках подпрограммы «Научно-учебное оборудование» государственной научно-технической программы «Эталоны и научные приборы» Республики Беларусь.

[1] Свидетельство НЦИС РБ о регистрации компьютерной программы «Виртуальный лабораторный практикум: Моделирование атмосферных явлений и процессов переноса загрязнений» (№1135 от 08.01.2019. Романов О.Г. и др.).

УДК 378.048.2

Н. А. Никоненко, М. А. Шеламова, И. А. Кохановская

ДИНАМИКА ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ ВЫСШЕЙ КВАЛИФИКАЦИИ В ОБЛАСТИ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК В РЕСПУБЛИКЕ БЕЛАРУСЬ

Белорусский государственный медицинский университет пр. Дзержинского, 83, 220116, Минск, Беларусь

Стратегия научно-технологического развития Беларуси предполагает развитие и внедрение в производство цифровых информационно-коммуникационных и междисциплинарных технологий [1]. В связи с этим в современных условиях усиливается роль науки и образования.

Система высшего и научно-ориентированного образования призвана обеспечить формирование качественно нового кадрового потенциала, обладающего высокими профессиональными компетенциями и способного быстро осваивать новые перспективные направления технологического развития экономики.

Задачи по обеспечению высококвалифицированными кадрами инновационных и высокотехнологичных секторов экономики поставлены в рамках Государственной программы «Образование и молодежная политика» на 2021-2025 годы [2]. В связи с этим в системе научно-ориентированного образования особое внимание уделяется подготовке научных работников высшей квалификации по приоритетным специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных производств, относящихся к V и VI технологическим укладам экономики (далее-приоритетные специальности).

Информационное обеспечение системы научно-ориентированного образования в Республике Беларусь осуществляется посредством республиканской автоматизированной информационно-аналитической системы мониторинга подготовки научных работников высшей квалификации (НРВК) [3].

За пятилетний период 2017-2021 гг. некоторые численные показатели подготовки НРВК в системе аспирантуры по специальностям в области физико-математических наук снизились. Так, численность обучающихся в аспирантуре по физико-математическим специальностям сократилась на 39,3% и составила 173 чел. Численность приема в аспирантуру в области физико-математических наук в 2021 году уменьшилась на 43,4% и составила 43 чел. при сохранении численности выпуска на уровне 2017 года – 46 чел.

В результате за пятилетний период удельный вес аспирантов, проходящих подготовку по физико-математическим специальностям, в общей численности аспирантов в области естественных наук сократился на 11,8 п.п. и составил 29,9%. Вместе с тем доля обучающихся в аспирантуре по естественнонаучным специальностям в общей численности аспирантов по республике существенно не изменялась на протяжении пяти лет и составляла в среднем 12,8%.

Удельный вес проходящих подготовку по приоритетным специальностям в области физико-математических наук в системе аспирантуры составляет около 80% от

численности аспирантов, обучающихся по всем физико-математическим специальностям, в докторантуре – 90% от общей численности докторантов.

За пятилетний период 2017-2021 гг. основные показатели подготовки НРВК в системе докторантуры значительно возросли. Так, численность проходящих подготовку в докторантуре в области физико-математических наук в 2021 году увеличилась в 2,6 раза и составила 39 чел. В результате за пятилетний период удельный вес докторантов, обучающихся по физико-математическим специальностям, в общей численности докторантов в области естественных наук увеличился на 15,5 п.п. и составил 44,3%.

Численность приема в докторантуру по физико-математическим специальностям в 2021 году стабилизировалась на уровне 13 чел., выпуска – 11 чел.

Показатель эффективности подготовки НРВК «удельный вес выпуска с защитой диссертации в пределах установленного срока обучения» в системе аспирантуры в области физико-математических наук за период 2017-2021 гг. более, чем в 2 раза превысил значение данного показателя, достигнутого в 2021 году по всем отраслям науки – 6,3%.

В целом с 2017 по 2020 гг. защищено 125 кандидатских диссертаций по специальностям в области физико-математических наук.

Анализ динамики развития научно-ориентированного образования в Республике Беларусь свидетельствует о востребованности научных кадров высшей квалификации в области физико-математических наук. С целью обеспечения высококвалифицированными научными кадрами высокотехнологичных секторов экономики необходима реализация мероприятий, направленных на развития научных школ в области физики и вовлечению молодежи в научно-техническую и инновационную деятельность.

- [1] Указ Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г. № 156 «О приоритеных направленяих научной, научно-технической и инновационной деятельности на 2021 -2025 годы» Информационно-правовая база нормативных правовых актов Республики Беларусь «ЭТАЛОН» / [Электронный ресурс]. – Дата доступа: 17.03.2023.
- [2] Постановление Совета Министров Республики Беларусь от 29 января 2021 г. № 57 «О Государственной программе «Образование и молодежная политика» на 2021– 2025 годы» Информационно-правовая база нормативных правовых актов Республики Беларусь «ЭТАЛОН» / [Электронный ресурс]. – Дата доступа: 17.03.2023.
- [3] Сутурин А. К. Применение автоматизированной информационно-аналитической системы мониторинга подготовки научных работников высшей квалификации для анализа динамики развития послевузовского образования в Республике Беларусь / А. К. Сутурин, Н. А. Никоненко // Цифровая трансформация. – 2018. – № 2. – С. 54-59.

УДК 533.9.08; 621.039.66 В. А. Люшкевич¹, С. В. Гончарик¹, И. И. Филатова¹, М. Е. Маслинская²

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ СЕМЯН ЛЬНА МАСЛИЧНОГО

¹ Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>v.lyushkevich@ifanbel.bas-net.by</u> ² РУП «Институт льна» НАН Беларуси, ул. Центральная, 27, 211003 а/г Устье, Оршанский район, Витебская область, Беларусь

mme-83@tut.by

Методы предпосевной обработки семян с использованием «холодной» плазмы активно развиваются в последние годы благодаря их экологичности и эффективности для стимуляции роста и повышения защитных функций растений в период вегетации [1]. Для совершенствования конструкций плазменных реакторов, оптимизации режимов обработки требуется анализ биологической эффективности плазменного воздействия с учетом обратного влияния свойств семян на характеристики разряда и параметры плазмы. Работа посвящена исследованию электрических характеристик диэлектрического барьерного разряда (ДБР) в зависимости от степени упаковки разрядной камеры семенами, а также влияния плазменной обработки в течение 3 мин на полевую всхожесть, морфологические признаки и структуру урожайности льна масличного сорта Альянс, Визирь, Дар.



Рисунок 1 – Зависимость формы фигуры Лиссажу (а), напряжения зажигания (начала активной фазы разрядного цикла АБ) ДБР и вложенной за один цикл энергии (б) от степени заполнения (*V*_C/*V*_{PK}) разрядного промежутка семенами льна

Представленные фигуры Лиссажу (рис.1а) сформированы по 100 циклам разряда, а общее время регистрации составляет ~ 100 мс. Такой подход позволяет, при реализованном в установке ДБР импульсном режиме возбуждения в форме затухающих колебаний [2], получить статистически достоверную информацию о характеристиках разряда. С увеличением степени упаковки реактора (V_C/V_{PK} , где V_C – объем, занимаемый семенами, V_{PK} -объем разрядной камеры) вкладываемая в разряд энергия возрастает от 7,4 мДж ($V_C/V_{PK} - 10\%$) до 9,2 мДж ($V_C/V_{PK} - 50\%$), а напряжение зажигания разряда в положительный полупериод существенно снижается, при этом трансформация формы фигуры Лиссажу в миндалевидную свидетельствует о постепенном распространении поверхностного разряда от локальных зон с максимальной напряженностью электрического поля в точках контакта между отдельными зернами по всему объему наполнителя и поддержании его горения в более широком диапазоне напряжений.



Рисунок 2 – Влияние обработки семян льна масличного на полевую всхожесть и структуру урожайности

В результате полевых опытов выявлены существенные сортовые различия растений льна масличного, проявляющиеся в специфической реакции прорастающих семян определенного сорта в ответ на стрессовое воздействие физических факторов. В целом плазменная обработка семян способствует улучшению структуры урожая и повышению сохранности растений к уборке. Для всех сортов наблюдается увеличение высоты растений и количества семян (рис. 2).

Присутствие семян в разрядной камере способствует снижению напряжения зажигания разряда при одновременном увеличении вложенной энергии. Таким образом, выбор оптимальной степени упаковки разрядной камеры ДБР семенами может повысить биологический эффект их обработки за счет увеличения вложенной энергии и оптимизации локального распределения электрического поля, способствующего повышению эффективности плазмохимических реакций на поверхности образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант № Ф21МС-016).

[1] Panka, D. [et al]. Can Cold Plasma Be Used for Boosting Plant Growth and Plant Protection in Sustainable Plant Production? Agronomy 2022, 12, 841.

[2] V. Lyushkevich, I. Filatova, V. Parashchuk, S. Goncharik. Interaction of catalytic powder materials and plant seeds with dielectric barrier discharge plasma). The XIII Belarusian-Serbian symposium "Physics and diagnostics of laboratory and astrophysical plasmas" (PDP-13) (13 - 17 December 2021, Minsk, Belarus). – P. 104-107.

UDC 535:621.373.826

N. Tarasenka, V. Kornev, A. Nevar, M. Nedelko and N. Tarasenko

LASER ABLATION FABRICATION OF ZINC OXIDE/CARBON NANOSTRUCTURES FOR APPLICATION AS SUPERCAPACITOR ELECTRODES

B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus <u>natalie.tarasenka@dragon.bas-net.by</u>

Recently, nanocomposites having a developed surface have received a considerable attention due to their potential application in numerous fields, such as supercapacitors, sensors, catalysts for water splitting, etc. [1,2]. Namely, in the field of the development of novel energy sources such materials are of considerable attention since the performance of supercapacitors is determined by the composition and configuration of the electrode material. Here, we present a novel approach for the formation of non-spherical nanomaterials by laser ablation in the electric field applied to the target. The scheme of the developed setup is presented in Figure 1a. The peculiarity of the proposed approach is that Zn plate is acting as a target and an electrode at the same time that results in an additional tool for the nanomaterials morphology and structure tailoring. For ablation, the fundamental harmonic of the nanosecond Nd:YAG laser was used. The applied voltage could be set in the range 50-300 V. The Zn target was included in the electrical circuit as an electrode and could be chosen to be a cathode or anode. The second electrode was graphite rod or carbon cloth. The developed approach was tested towards the composite ZnO/C nanostructures formation that represent a promising material for supercapacitor applications as such a structure allows combining the properties of pseudocapacitance observed in transition metal oxides, such as ZnO, and accumulation of charge in carbon materials.

A series of studies has been performed to explore the structure, morphology and composition of as-synthesized nanocomposites. The results obtained allowed determination of the conditions for non-spherical nanostructures formation with the developed surface depending on the electrode polarity, applied voltage and composition of the liquid. In both cathode and anode cases the resulting nanostructures have a nonspherical morphology. However, in Zn-anode case, the preferred morphology is intercrossed nanodiscs 100-500 nm in diameter (Figure 1b) while in a case of Zn-cathode ablation the material forms lamellas that are combined into layered flower-like structures. In comparison, typically, laser ablation of a Zn target in distilled water without any external fields resulted in a production of near-spherical and/or elongated oval nanoparticles [3,4].

By variation of the liquid composition and laser ablation of Zn in the C NPs colloid it was possible to extend the possibilities of the developed approach for the formation of composite metal-carbon nanostructures with a sponge-like morphology (Figure 1c) that due to a large surface area have great prospects for use as a material for supercapacitor electrodes. Time-resolved imaging technique was applied to study plasma propagation evolution and lifetime that allow suggesting the mechanisms of nanostructures formation. The analysis of the plasma evolution allowed drawing the conclusion on much shorter plasma lifetime if the electric field is applied to a Zn target.



Figure 1. Laser ablation synthesis of ZnO/C nanocomposites in the electric field applied to the target: a – scheme of the experimental setup, b, c – SEM images of the nanostructures prepared by laser ablation of Zn anode in water and in C NPs colloid

To conclude, this work reports on the novel method based on laser ablation in liquid in the external electric field for preparation of composite ZnO/C nanostructures. Application of an electric field provided additional possibilities for tuning the particles morphology. In general, the method introduces new possibilities for the control of morphology and composition of nanostructures obtained by laser ablation in a liquid. Furthermore, the developed scheme enables simultaneous assembly of the forming nanostructures on the cathode, thus forming hierarchical structures for further applications as supercapacitor electrodes.

The work was partially financed by the National Academy of Sciences of Belarus under project Convergence 2.2.05 and by the Belarusian Foundation for Fundamental Researches under Grants No. F 22SRBG-008 and No F23RNF-156.

- 1. Wu D, Xie X, Zhang Y, Zhang D, Du W, Zhang X and Wang B MnO₂/Carbon composites for supercapacitor: synthesis and electrochemical performance 2020 *Front. Mater.* **7**, 1-15.
- 2. Najib S, Erdem E Current progress achieved in novel materials for supercapacitor electrodes: Mini Review 2019 *Nanoscale Adv.* **1**, 2817-2827.
- 3. Zhang D, Li Z and Sugioka K Laser ablation in liquids for nanomaterial synthesis: diversities of targets and liquids 2021 *J. Phys. Photonics* **3** 042002
- Kanitz A, Kalus M R, Gurevich E L, Ostendorf A, Barcikowski S and Amans D Review on experimental and theoretical investigations of the early stage, femtoseconds to microseconds processes during laser ablation in liquid-phase for the synthesis of colloidal nanoparticles 2019 *Plasma Sources Sci. Technol.* 28, 103001.

УДК 004.056

А. В. Сидоренко

ПЕРЕМЕЩЕНИЕ МОБИЛЬНОГО РОБОТА С ОГИБАНИЕМ ПРЕПЯТСТВИЙ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь sidorenkoA@yandex.by

Актуальной в настоящее время является проблема управления движением мобильного робота в некоторой среде при его известном месторасположении и перемещении к цели с заданными координатами [1, 2]. Существенным становится обеспечение безопасного движения робота без столкновения с препятствиями, встречающимися на его пути. Традиционно при решении подобных задач используются методы машинного обучения [2,3]. Среди алгоритмов машинного обучения чаще всего применяются методы Q-Learning, SARSA, а также методы обучения с подкреплением: глубокого Q-обучения и двойного Q- обучения. Использование указанных алгоритмов основано на принципах моделирования. Критерием оптимизации является определение количества эпизодов, необходимых для обучения.

Целью данной работы является разработка алгоритма для безопасного движения группы мобильных роботов при огибании препятствий и навигации в среде, моделируемой в пакете визуализации Gazebo.

При мультиагентном подходе в сфере искусственного интеллекта применяется алгоритм Q-обучения. На основе полученного от среды вознаграждения при использовании данного алгоритма агент формирует функцию полезности Q, что дает ему возможность случайным образом выбирать стратегию поведения с учетом опыта предыдущего взаимодействия со средой. При этом определяется оптимальная величина Q, что позволяет агенту выбрать следующее действие в зависимости от того, насколько оно полезно. Алгоритм управления SARSA является вариацией алгоритма Q- обучения. Он основан на методе временных различий и представляет собой набор пар: состояние –действие в некоторой среде с определением действия для каждого состояния агента в мультиагентной системе. При этом производится оценка функции значения Q (s, a) для всех пар состояние-действие (s, a) на каждом временном шаге с использованием правила обновления метода временных различий.

При реализации алгоритма глубокого Q- обучения происходит использование нейронных сетей в качестве аппроксиматора функции полезности, связывающей входы с выходами нейронной сети [3]. Обучение при этом заключается в поиске правильных коэффициентов или весов путем итеративной корректировки, когда пространство состояний или пространство действий слишком велико. Принцип действия Двойного глубокого обучения аналогичен глубокому обучению с той разницей, что текущее значение действия и выбор действия разделены. При этом с использованием разных опытов симметрично друг другу происходит обучение и получаются две отдельные функции значения ценности Q.

Программно реализованные алгоритмы обучения, примененные к разработанной нами модели управления системой мобильных роботов, позволили провести

вычислительный эксперимент. При проведении вычислительного эксперимента в качестве среды использовалась поверхность 17х17 клеток с препятствием в 12 клеток. В процессе эксперимента при перемещении робота достижение значения вознаграждения в численном выражении, равное "500", определялось как целевое. Обучение прекращалось, когда суммарное среднее значение вознаграждения за последние 30 эпизодов обучения достигало значения "450" [2].

B работе предложен алгоритм данной перемещения для модели роботизированной системы с огибанием препятствий, который характеризуется отсутствием элементов машинного обучения. Для реализации алгоритма использовался пакет для Matlab Reinforcement Learning Toolbox. В модели, описывающей движение Toolbox. робота, применялся пакет Mobile Robotics Simulation Реализация движение симуляционного пространства, в котором осуществлялось робота, обеспечивалось пакетом визуализации Gazebo 11.

Реализация алгоритма начинается с того, что задается прямая линия L, расположенная между начальной и целевой точками перемещения робота. Если в процессе движения встречается препятствие, робот огибает его, двигаясь вдоль препятствия до тех пор, пока не встанет на начальную линию L. При огибании препятствия робот движется по прямой вдоль препятствия до тех пор, пока не удалится от него на расстояние в 0,37 единиц координатной сетки. Если робот отдалился свыше данного расстояния, то он поворачивается на 90 градусов в том же направлении, что и раньше, и движется до тех пор, пока не станет на линию L. Став на линию L, он сбрасывает сторону, которой будет огибать препятствие, поворачивается в направлении к цели, и начинает движение вперед до тех пор, пока не встретит препятствие (либо достигнет цели). Далее алгоритм движения повторяется.

Результаты проведенного эксперимента показали, что при использовании в качестве препятствий цилиндрических элементов диаметром 0,8 и высотой 0,5 единиц координатной сетки и кубических элементов размером 0,8x0,8x0,8 единиц координатной сетки кубические препятствия роботом огибаются быстрее цилиндрических, что по при 5 препятствиях по времени не превышает 3 минут. Это свидетельствует о том, что полученные при моделировании временные параметры значительно лучше, чем при движении робота при применении алгоритмов машинного обучения.

[1] Назарова, А. В. Методы и алгоритмы мультиагентного управления робототехнической системой / *А. В. Назарова, Т. П. Рыжова //*Вестник МГТУ им. И. Э. Баумана. Сер. Приборостроение. – 2012. – Спец. выпуск 6: Робототехнические системы. – С. 93-105.

- [2] Сидоренко, А. В. Глубокое обучение с подкреплением для роботизированной системы /*А. В. Сидоренко //*VIII Белорусский Космический Конгресс. 2022. В двух томах. Т. 1. С. 206-209.
- [3] Gang V.A. New Frainwork for Multi-Agent Reinforcement Learning Centralized Training and Exploration Execution with Decentralized Execution via Policy Distillation//New Zealand/ 2019/ <u>https://arXiv.org</u>

УДК 535.241

В. А. Длугунович¹, А. В. Исаевич¹, И. В. Корсеко², Е. А. Круплевич¹, А. В. Механиков¹, С. В. Никоненко¹, О. Б. Тарасова²

НАЦИОНАЛЬНАЯ СИСТЕМА МЕТРОЛОГИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ В ОБЛАСТИ ФОТОНИКИ И ЛАЗЕРНОЙ ТЕХНИКИ

¹ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>v.dlugunovich@ifanbel.bas-net.by</u> ² Белорусский государственный институт метрологии, Старовиленский тракт, 93,

- Белорусскии госуоарственный институт метрологии, Старовиленский тракт, 95, 220053 Минск, Беларусь tarasova@belgim.by

В настоящее время фотоника одна из самых перспективных и быстро развивающихся областей науки и техники. По своему значению для технической инфраструктуры современного мира она сравнима только с энергетикой. Лазерная техника, оптоволоконные системы связи и передачи информации с основанными на них системами телекоммуникации, а также информационные технологии и нанофотоника составляют ядро Пятого и Шестого технологических укладов.

Республика Беларусь является одной из немногих стран с развитой оптикомеханической промышленностью. Однако после распада Советского Союза этот наукоемкий сектор экономики оказался без метрологического обеспечения, т.к. метрологические центры в области лазерной и оптоэлектронной техники остались за рубежом. Поэтому создание и развитие метрологического обеспечения изделий фотоники, лазерной и оптоэлектронной техники, прогнозирование их ресурса, повышение уровня точности и достоверности измерений параметров и характеристик оптического излучения является актуальной задачей. Метрологическое обеспечение измерений включает разработку и создание национальных эталонов единиц физических величин, установок высокой точности, технических нормативных правовых актов, методической документации, а также совершенствование методов измерений, направленных на минимизацию неопределенности и повышение точности измерений.

В качестве основы любых измерений, гарантирующей достоверность получения результатов, служат национальные эталоны единиц величин. Они являются национальным достоянием, неотъемлемым атрибутом государственности, по их метрологическим характеристикам определяют уровень научного и технического развития страны. В период с 2000 по 2022 гг. ИНСТИТУТОМ ФИЗИКИ НАН Беларуси совместно Белорусским государственным институтом метрологии (БелГИМ) было разработано и создано 9 национальных эталонов единиц величин, используемых в области фотоники и лазерной техники: эталон координат цвета и спектральных коэффициентов направленного пропускания и диффузного отражения в диапазоне длин волн от 0,2 до 2,5 мкм (НЭ РБ 3-00); эталон единицы силы света и освещенности (НЭ РБ 8-02); эталон единицы спектральной чувствительности приемников излучения (НЭ РБ 17-10); эталон единиц средней мощности, ослабления и длины волны оптического излучения для волоконнооптических систем связи и передачи информации (ВОСП) (НЭ РБ 25-15); эталон единицы светового потока источников непрерывного

излучения (НЭ РБ 28-16); эталон единиц белизны (НЭ РБ 35-18); эталон единиц спектральной энергетической спектральной плотности яркости, плотности энергетической освещенности и силы излучения в диапазоне длин волн от 0,2 до 3,0 мкм (НЭРБ 51-19); эталон единицы поляризационной модовой дисперсии в оптическом волокне (НЭ РБ 54-19) и эталон единиц средней мощности и энергии лазерного излучения (НЭ РБ 56-19). К этому списку следует добавить Национальный эталон единицы длины – метра в области аттестации источников излучений и средств измерений длин волн длиной 0,63 мкм (НЭ РБ 12-03), созданный в 2003 г. Институтом атомной и молекулярной физики НАН Беларуси. Проведенные международные сличения созданных эталонов подтвердили соответствие мировому уровню их основных метрологических характеристик. Это позволило разместить 11 строк (из 296 строк по всей национальной эталонной базе Республики Беларусь) в базе данных о калибровочных и измерительных возможностях на сайте Международного бюро мер и весов.

Для функционирования системы обеспечения единства измерений необходим регламентированный порядок воспроизведения и передачи размеров единиц соответствующих величин до уровня рабочих средств измерений (СИ). С этой целью в ИНСТИТУТЕ ФИЗИКИ НАН Беларуси разработано и создано 18 измерительных установок высокой точности и калибровочных комплексов для осуществления контроля энергетических, метрологического временных, пространственных, спектральных и поляризационных характеристик лазерного излучения, а также фотометрических, спектрорадиометрических и пространственных характеристик оптического излучения различных источников, включая светодиоды. В БелГИМ созданы 3 установки высокой точности для поверки люксметров, фотометров, УФ-радиометров и денситометров. Данные установки и комплексы используются для метрологического контроля СИ и испытаний изделий фотоники, лазерной и оптоэлектронной техники, выпускаемой и эксплуатируемой предприятиями и организациями как Республики Беларусь, так и в странах СНГ и дальнего зарубежья.

Одновременно с созданием эталонно-измерительного комплекса системы метрологического обеспечения лазерно-оптической отрасли страны были разработаны единые метрологические рекомендации к СИ, методикам измерений и калибровки СИ, порядку проведения работ по метрологическому контролю в области фотоники и лазерной техники. ИНСТИТУТОМ ФИЗИКИ НАН Беларуси и БелГИМ подготовлены и постановлениями Госстандарта утверждены и введены в действие более 100 государственных стандартов, гармонизованных с международными нормами, в области фотоники и лазерной техники, программ и методик метрологической аттестации, методик измерений, калибровки и поверки СИ. Это позволило аккредитовать в Национальной системе аккредитации Республики Беларусь БелГИМ и центр испытаний лазерной техники ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси на право осуществления метрологического контроля изделий фотоники и лазерной техники.

Создание системы метрологического обеспечения в области фотоники и лазерной техники позволяет осуществлять метрологический контроль более 4000 приборов в год для более чем 2000 организаций Республики Беларусь и зарубежных стран.

УДК 535.37:(547.979.733+667.211.43)

В. Ю. Плавский¹, А. Н. Собчук¹, А. И. Третьякова¹, А. В. Микулич¹, О. Н. Дудинова¹, Л. Г. Плавская¹, Р. К. Нагорный¹, А. Д. Свечко¹, Т. С. Ананич¹, Н. Д. Прокопенко¹, С. В. Якимчук¹, И. А. Леусенко¹, Н. В. Дудчик², О. А. Емельянова²

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СЕНСИБИЛИЗИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА НИТРОФУРАНОВЫХ СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ И ИХ ФОТОХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ

¹ Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>v.plavskii@ifanbel.bas-net.by</u> ²Республиканское унитарное предприятие «Научно-практический центр гигиены»,

Респуоликанское унитарное преоприятие «научно-практическии центр гигиены», ул. Академическая, 8, 220012, Минск, Беларусь <u>n_dudchik@mail.ru</u>

Одной из острейших проблем современной медицины стала устойчивость патогенной микрофлоры к действию антибактериальных и противогрибковых препаратов вследствие выработки микроорганизмами резистентности к ним. В качестве альтернативного, многообещающего метода лечения локализованных инфекций (в том числе обусловленных лекарственно-устойчивыми формами патогенов) рассматривается антимикробная фотодинамическая терапия (АФДТ). Однако широкому применению методов АФДТ препятствует отсутствие доступных фотосенсибилизаторов (ФС), разрешенных к применению в медицинской практике. При этом разработка технологии получения новых ФС и их медицинская сертификация – весьма длительная, затратная и сложная процедура. Это побудило нас провести оценку возможности использования в качестве ФС препаратов, разрешенных к применению в медицинской практике, но использующихся по другому назначению.

Задача настоящей работы – выяснение способности нитрофурановых препаратов фурацилина и фурасола, традиционно и широко использующихся в качестве антисептиков, выступать в качестве фотосенсибилизаторов; оценка чувствительности грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов, а также раковых клеток HeLa к фотодинамическому воздействию синего света при их сенсибилизации нитрофуранами, изучение сенсибилизирующих свойств и фотохимической устойчивости фурацилина и фурасола.

Исследования показали, что длинноволновые полосы поглощения исследуемых антисептиков расположены на границе длинноволновой УФ и видимой областей спектра. При этом фурасол характеризуется более длинноволновым расположением максимума спектра поглощения: $\lambda_{max} = 396$ нм (для фурацилина в водном растворе $\lambda_{max} = 374$ нм). Для фотовозбуждения указанных препаратов могут использоваться широко распространенные лазерные и светодиодные источники с длиной волны $\lambda = 405$ нм.

Характерной особенностью спектров флуоресценции фурацилина и фурасола является значительное стоксовое смещение относительно полосы поглощения, чрезвычайно низкий квантовый выход флуоресценции (ϕ_n), а также очень короткая длительность затухания флуоресценции (τ_n) при комнатной температуре. Так, для фурацилина в воде при комнатной температуре $\phi_n = 0,0002$, $\tau_n \approx 10$ ps, для фурасола ϕ_n

= 0,0008, $\tau_{\rm fl} \approx 10$ ps. Наиболее вероятная причина столь низких значений $\phi_{\rm fl}$ и $\tau_{\rm fl}$ – наличие альтернативных путей диссипации энергии возбужденного состояния, прежде всего таких как процессы конфигурационной *цис-транс*-фотоизомеризации молекул нитрофуранов по двойной –C=N– связи. В пользу такого вывода свидетельствует резкое увеличение интенсивности флуоресценции и времени ее затухания при снижении температуры растворов до 6°C и переходе к вязким средам, используя в качестве растворителей глицерин или тритон X-100.

Исследования показали, что как фурасол, так и фурацилин способны выступать в качестве Φ C. Об этом свидетельствует их способность генерировать $A\Phi$ K, включая синглетный кислород ${}^{1}O_{2}$ и перекись водорода. Показано, что добавление известного тушителя синглетного кислорода азида натрия блокирует фотоинактивацию раковых клеток HeLa, инициируемую светом в присутствии Φ C. Та же закономерность отмечается при изучении фотохимических процессов методом хемилюминесценции. Однако последующие исследования показали, что практически полное блокирование фотобиологических реакций азидом может быть обусловлено как тушением синглетного кислорода, так и ускорением фотолиза самого Φ C.

Установлено, что воздействие на бактериальные клетки в присутствии фурацилина или фурасола светом, соответствующим спектру поглощения указанных антисептиков, приводит к выраженному фотобиологическому эффекту. Это проявляется в потере способности микроорганизмов образовывать колонии: при совместном действии света и фурацилина наблюдается полное подавление способности к колониеобразованию *S. aureus, S. haemolyticus* и *C. albicans.* Следовательно, фурацилин совместно со светом, соответствующим его спектру поглощения, способен оказывать бактерицидное действие.

Характерно, что фурацилин и фурасол способны инициировать фотодинамическую инактивацию не только инактивацию грамположительных *S. aureus, S. haemolyticus* и дрожжеподобных грибов *C. albicans*, но и грамотрицательных *E. coli*. Причем фоточувствительность *E. coli* значительно более выражена к сенсибилизирующему действию фурасола, чем фурацилина, что может быть связано с особенностями взаимодействия указанных препаратов с мембранными структурами данных бактериальных клеток.

Совокупность полученных экспериментальных данных, а также анализ литературных источников позволяют заключить, ЧТО светоиндуцированный бактерицидный эффект синего света в присутствии фурацилина и фурасола является синергетическим и обусловлен следующими процессами: а) реакциями синглетного кислорода, генерируемого триплетно-возбужденными фотосенсибилизаторами; б) участием перекиси водорода в инактивации микроорганизмов; в) фотовысвобождением из структуры антисептиков NO[•] и его последующим взаимодействием с компонентами микробных клеток; г) цитотоксическим эффектом в отношении микроорганизмов фотопродуктов фурацилина И фурасола (включая продукты цис-трансфотоизомеризации); д) фотовозбуждением эндогенных ФС порфириновой и флавиновой природы, локализованных в микробных клетках.

Тушитель синглетного кислорода азид натрия вызывает ускоренную деструкцию исследуемых нитрофуранов, чему способствует образование их комплексов с NaN₃.

УДК 535.37:(547.979.733+667.211.43)

В. Ю. Плавский, Л. Г. Плавская, О. Н. Дудинова, А. И. Третьякова, А. В. Микулич, Р. К. Нагорный, А. Д. Свечко, А. Н. Собчук, Т. С. Ананич, С. В. Якимчук, И. А. Леусенко

ФОТОАКЦЕПТОРЫ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПОВЫШЕННУЮ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ РАКОВЫХ КЛЕТОК К ДЕЙСТВИЮ ИЗЛУЧЕНИЯ СИНЕЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.plavskii@ifanbel.bas-net.by

В настоящее время способность оптического излучения синей области спектра (длина волны 400-485 нм) низкой интенсивности (плотность мощности 1-100 мВт/см²) оказывать влияние в условиях in vitro на функциональные характеристики опухолевых клеток не вызывает сомнения. Однако фотофизические и фотохимические механизмы, а также акцепторы оптического излучения, определяющие специфичность действия излучения синей области спектра на раковые клетки, остаются невыясненными. Не известна также оптимальная длина волны излучения синей области, оказывающего наиболее выраженное противоопухолевое действие в условиях in vitro. Задача настоящей работы – сравнительные исследования эффективности действия излучения различных длин волн синей области спектра на раковые и нетрансформированные клетки, сравнение уровня концентраций эндогенных фотосенсибилизаторов и активных форм кислорода (АФК) В клетках указанных типов И выяснение механизма противоопухолевой активности синего света.

Выполненные исследования показали способность излучения светодиодных источников с длиной волны в максимуме спектра испускания при $\lambda_{max} = 405, 445$ и 465 нм, в диапазоне энергетических доз 1–15 Дж/см² оказывать влияние на метаболическую активность раковых (клетки эпителиоидной карциномы шейки матки HeLa) и нормальных нетрансформированных клеток (клетки почки зеленой африканской мартышки BGM). Выполненные сравнительные исследования с использованием полупроводниковых лазеров и светодиодов с длиной волны 405 и 445 нм выявили отсутствие принципиальных различий в биологическом действии монохроматического излучения лазерных источников и квазимонохроматического излучения светодиодов. Наиболее выраженное влияние на метаболическую активность клеток оказывает излучение с $\lambda_{max} = 405$ нм. Достоверно ниже фотобиологический эффект, инициируемый воздействием излучения с $\lambda_{max} = 445$ нм; наименее выраженное действие оказывает излучение с $\lambda_{max} = 465$ нм. Установлено, что в зависимости от интенсивности излучения и энергетической дозы свет синей области спектра может как стимулировать метаболическую активность клеток (что наблюдается в достаточно узком интервале энергетических доз), так и ингибировать ее. Причем ингибирующее действие растет с увеличением энергетической дозы светового воздействия. Соответствие дозовой зависимости закону Арндта-Шульца позволяет заключить, что влияние синего света на метаболическую активность клеток имеет регуляторную, а не деструктивную природу. Действительно, сравнительные исследования влияния света на метаболическую активность клеток и на их выживаемость (которая оценивалась методом проточной цитофлуориметрии) показали, что при низких энергетических дозах светового воздействия снижение метаболической активности клеток не объясняются их гибелью, а обусловлены изменением длительности отдельных фаз клеточного цикла. Однако при высоких энергетических дозах существенный вклад в снижение метаболической активности вносит гибель клеток, реализуемая по механизму некроза и апоптоза.

Главный вывод, который следует из выполненных исследований, состоит в том, что при одинаковой энергетической дозе ингибирующее действие синего света значительно более выражено в отношении опухолевых клеток, чем в отношении нормальных нетрансформированных. Установлено, что биологическое действие синего света обусловлено реакциями, инициируемыми АФК: добавление в питательную среду клеток перед их облучением тушителей АФК способно блокировать фотобиологический эффект. Впервые показано, что вклад различных видов АФК (синглетного кислорода, перекиси водорода и др.) в эффекты инактивации клеток зависит от времени после прекращения облучения, что связано с запуском в клетках волны массированной вторичной продукции АФК, и, прежде всего, перекиси водорода. Если сразу после прекращения воздействия, основным интермедиатом, определяющим протекание фотобиологических реакций в клетках, является синглетный кислород, то через сутки после прекращения облучения – перекись водорода.

С использованием методов стационарной и кинетической спектрофлуориметрии в спектрах флуоресценции суспензии живых клеток наряду с флавиновой составляющей впервые зарегистрированы порфириновые компоненты. Обнаружить порфириновые компоненты в спектре флуоресценции суспензии живых клеток удалось благодаря выбору длины волны, соответствующей максимуму полосы Соре тетрапирролов, Экстрагирование порфириновых локализованных в клетках. ИЗ клеток фотосенсибилизаторов с использованием в качестве экстрагентов ацетона или 3 М соляной кислоты позволили их идентифицировать [1] и заключить, что уровень порфириновых фотосенсибилизаторов примерно в 2.5 раза выше в опухолевых клетках, Более чем в нетрансформированных. высокая концентрация эндогенных фотосенсибилизаторов в раковых клетках и является причиной более высокой скорости их инактивации по сравнению с нормальными клетками. На основании сопоставления абсорбционных характеристик флавиновых и порфириновых сенсибилизаторов, а также данных хемилюминесцентного анализа и биологического действия излучения с λ = 405 и 445 нм сделан вывод, что определяющий вклад в наблюдаемые фотобиологические эффекты при воздействии излучения с $\lambda = 405$ нм вносят эндогенные порфирины, характеризующиеся наиболее интенсивным поглощением в данной области. Вклад флавинов более выражен при действии излучения с λ= 445 нм, соответствующего максимуму в их спектре поглощения и минимальному поглощению эндогенных порфиринов.

[1] Плавский, В.Ю. Эндогенные фотоакцепторы, сенсибилизирующие фотобиологические реакции в соматических клетках. / В.Ю. Плавский [и др.] // ЖПС. – 2023. – Т. 90, № 2. – С. 239–252.

S.A. Tikhomirov¹, A.P. Blokhin¹, V.A. Povedailo¹, A.S. Pilipovich¹, D.L. Yakovlev¹, P.H. Minh², P.V. Duong²

Förster resonance energy transfer between molecular rotors SYBR Green intercalated in DNA

 ¹ B.I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Science of Belarus, 68 Nezavisimosti Ave, Minsk 220072, Belarus, Nesalezhnasti Ave. 68, 220072. Minsk, Belarus
² Institute of Physics, Vietnam Academy of Science and Technology, Da Dinh, Hanoi, Vietnam

For DNA analysis, SYBR Green (SG) and PicoGreen (PG) molecules have recently begun to be used, which differ from known intercalators by a significant (up to 1000 times) increase in fluorescence intensity upon intercalation with double-stranded DNA (dsDNA). SG and PG molecules are molecular rotors in which charge donors and acceptors are connected by a bridge and can perform ultrafast rotation in low-viscosity media. The effect of a sharp increase in intensity is associated with their inhibition as a result of intercalation in DNA. It was recently shown [1], that they can be highly sensitive sensors in medicine when they are embedded in amyloid fibrils.

Quantum-chemical calculations of the equilibrium configuration of the SG molecule in the ground state, the energy of the excited electronic state S_1 , and the orientation of the dipole moment of the S_0 - S_1 transition were performed using the Gaussian 09 program using DFT and TD-DFT methods. The equilibrium configuration is optimized for the cationic form with +2 charge in vacuum and without a counterion with the B3LYP functional and the 6-311G (d, p) basis set of functions (Fig.1).



Fig. 1. Equilibrium structure calculated by the quantum-chemical method (a) and molecular orbitals HOMO (b) and LUMO (c)

A series of experiments was carried out to measure the dependence of the intensity and anisotropy of the fluorescence of SYBR Green molecules intercalated into dsDNA on the concentration of SG in DNA, as well as on temperature and viscosity of the medium. The intensity and anisotropy of the fluorescence of the intercalated SG molecules depends in a complex non-linear manner on the concentration of fluorophores, temperature and viscosity. It was found that an increase in the concentration of SG in solution, at a constant concentration of dsDNA, leads to a linear increase in the fluorescence intensity, followed by reaching a constant value. The constancy of the intensity with a further increase in concentration can be explained by the fact that excess dye molecules practically do not luminesce, since they remain in the buffer solution A disproportionate increase in the dye fluorescence intensity with increasing dye concentration also indicates the presence of processes of self-quenching of the fluorescence of intercalated SG.

Measurements of the fluorescence anisotropy of SG molecules as a function of the relative concentrations SG and dsDNA in solutions show its sharp decrease, which is associated with the Förster resonance energy transfer between the intercalated SG molecules (homo-FRET). There is also a decrease in the fluorescence anisotropy, which depends on the viscosity of the medium,

according to the overall rotational motion of the SG/dsDNA complex and the internal rotations of the donor and acceptor. A generalized model for calculating the orientation factor in the dipoledipole transfer of electronic excitation energy between a pair of fluorophores intercalated into molecular systems and rotational depolarization of fluorescence has been developed. The proposed model takes into account Förster energy transfer as well as the overall and internal molecular rotations. The model made it possible to universally explain the obtained experimental dependences for the fluorescence anisotropy during energy transfer in a pair of SG molecules intercalated in dsDNA We have studied homo-FRET in complexes of SG/dsDNA with 10 bp (ATACTGGCCT). For such short rigid DNA not more than two SG molecules could be intercalated into their structure, where very close distance between donor and acceptor in such a pair of fluorophores can be provided, leading to energy exchange. Figure 2 shows experimental dependences of fluorescence anisotropy on the ratio of temperature to viscosity in buffer solutions for various relative concentrations SG and dsDNA with 10 bases.



Fig.2. Dependences of the reciprocal value of fluorescence anisotropy 1/r on the ratio temperature to viscosity T/η for SG/dsDNA concentrations upwards (1:50; 1:21, 1:1; 2:1; 3:1; 4:1; 5:1). Fitting the experimental results over the entire range of relative concentrations and temperatures made it possible to estimate overall and internal rotational diffusion coefficients ratio and the rates of homo-FRET (w~1.2 10^{11} s).

We also have measured the concentration and viscosity dependences of fluorescence intensity and polarization for SG complexes with longer dsDNA (20 bp and 100 bp). Similar general trends are observed in the experimental dependences of intensity and polarization, as for shorter dsDNA. The only difference is that energy transfer occurs between a large number of pairs of donors and acceptors, which increases with the elongation of DNA molecules. Moreover, this fact has a stronger effect on the dependences for the fluorescence anisotropy. As a result, dependencies become smoother.

The estimates of concentration effects and the degree of influence of intramolecular nonradiative energy transfer on fluorescence anisotropy, performed in this work, can be useful for developing sensors for monitoring the structure of DNA molecules.

The present research was supported by two grants from the work was sponsored by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Project No. F22B-009) and Vietnam Academy of Science and Technology (Project No. QTBY01.06/22-23).

REFERENCES

[1] A.K. Mora, S. Nath, J. Phys. Chem. B. Vol. 123, 2019, pp. 8767-8776.

УДК:535.36

В.А. Ковтун – Кужель¹, Е.В. Дроботов¹

ВЛИЯНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ДИМЕРОВ НА ИХ БЛИЖНЕПОЛЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

¹УО «Гродненский государственный университет им. Я. Купалы», ул. Ожешко, 22, г. Гродно, Беларусь

Численные исследования картин распределения ближних полей (КРБП) для димеров необходимы для того, чтобы выявить предпосылки электродинамического взаимодействия в системах таких цилиндров. Ранее на основе формализма объемного интегрального уравнения (ФОИУ) проводилось изучение зависимости КРБП единичных цилиндров конечной длины от их размеров, длины волны падающего излучения, диэлектрических свойств окружающей их среды [1].

В настоящей работе с помощью (ФОИУ) для прямых систем (структуры, для которых показатель преломления цилиндров превышает показатель преломления окружающей среды) исследовано влияние на КРБП показателя преломления материала димеров. Под димерами понимаются структуры, состоящие из двух цилиндров. Диаметр исследуемых частиц равен 100нм, длина – 1500нм.

На рисунках 1 и 2 изображены распределения внутреннего поля в центральных сечениях димера, который расположен в поле плоской электромагнитной волны, распространяющейся вдоль оси OZ, имеющую амплитуду E₀=1 и поляризованную вдоль оси OY. Отображение распределения внутреннего поля получаются в плоскостях, определяемых сеткой разбиения, которая соответствует используемому числу разбиений. Поэтому обычно удается получить картину РВП не в точном геометрическом центре цилиндра, а лишь вблизи этого точного центра [2].

На рисунке 1 представлены ближнеполевые картины для димера с показателем преломления n=2.83, находящегося в воздухе.



Рисунок 1 - КРБП для димера с $n_4 = 2.83$ и $\lambda = 300$ нм

Как видно из данной иллюстрации, область усиления поля реализуется на входе излучения в систему цилиндров. Далее же интенсивность излучения падает при распространении его вдоль оси Z. Также можно отметить периодическую модуляцию внутреннего поля, наблюдаемую в плоскостях XOZ и YOZ. В плоскости XOY можно наблюдать незначительную однородность поля между двумя цилиндрами. Значение коэффициента усиления поля, рассчитанное для его интенсивности (k= $|E|^2/|E_0|^2$) достигает k_{max} =0.5.

При изменении показателя преломления, картины распределения ближних полей видоизменяются (рисунок 2). При рассмотрении КРБП для димера с $n_{\rm v}=1.73$ наблюдается немонотонное изменение интенисивности поля по всей длине цилиндров. Наибольшие значения поля сосредоточены на входе излучения в димер (плоскости XOZ и YOZ). В плоскости XOY, в отличие от рисунка 1, однородность поля между цилиндрами не наблюдается. Максимальное значение коэффициента $k=|E|^2/|E_0|^2$ определяется значением $k_{\rm max}=1$.



Рисунок 2 - КРБП для димера с $n_{y}=1.73$ и $\lambda=300$ нм

В данной работе провели сравнительное исследование картин распределения ближнего поля для системы цилиндров (димеров) с различными показателями преломления исследуемых частиц при длине волны падающего излучения 300нм. А именно, распределение внутреннего поля в димерах неоднородно; модуляция внутреннего поля в исследуемой структуре выражена тем более значительно, чем выше показатель преломления.

Литература:

[1] Ковтун – Кужель В.А. Локализация и рассеяние электромагнитного излучения в упорядоченных ансамблях конечных цилиндров / В.А. Ковтун – Кужель, Р.А. Дынич, А.Н. Понявина. Проблемы математики, физики и техники. – 2012. - №2(11). – С.27 – 33.

[2] Ковтун – Кужель В.А., Особенности распределения внутреннего поля для диэлектрических цилиндров конечной длины. / В.А. Ковтун-Кужель, Т.А. Ситкевич / Весн. Гродз. дзярж. ун-та. Сер. 2, Фізіка. – 2021. – Т. 11. – № 3. – С. 46-53.

УДК 621.384.3:621.391

Б. Ф. Кунцевич

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИГНАЛОВ АКТИВНО-ИМПУЛЬСНЫХ СИСТЕМ ВИДЕНИЯ ДЛЯ ДВУХ СПОСОБОВ НАБЛЮДЕНИЯ

ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», пр. Независимости, 68-1, 220072 Минск, Беларусь <u>bkun@ifanbel.bas-net.by</u>

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию и разработке активно-импульсных систем видения (АИСВ) для решения различных практических задач. Кратко принцип работы АИСВ можно сформулировать следующим образом. Область наблюдения освещается сравнительно короткими периодически повторяющимися лазерными импульсами длительностью $\Delta t_{\text{лаз}}$. В приемном блоке в качестве быстродействующего затвора и усилителя принимаемого светового сигнала обычно используется электронно-оптический преобразователь (ЭОП), который синхронно включается с лазерными импульсами на время $\Delta t_{\phi \Pi}$ (строб-импульс), сравнимое с $\Delta t_{лаз}$. Регулировка времени задержки $\Delta t_{зад}$ между началами импульсов подсветки и стробирования позволяет изменять расстояние задержки $S_{3ag} = c \Delta t_{3ag}/2 (c - t)$ скорость света), определяющее дистанцию до наблюдаемого слоя пространства, называемого зоной видимости (3В).

Обычно применяется два метода наблюдения. Первый метод используется для обнаружения и распознавания неподвижных относительно АИСВ объектов путем последовательно изменения (увеличения или уменьшения) времени задержки с некоторым «шагом» [1]. При втором методе устанавливается фиксированное значение $S_{3a,a}$ и рассматриваются объекты (неподвижные или передвигающиеся), находящиеся в зоне видимости [2]. Ранее основное внимание уделялось разработке методов построения так называемого трехмерного изображения для указанных способов наблюдения (СН). В настоящей работе приведены результаты исследования особенностей формирования пространственно-энергетического профиля (ПЭП) принимаемого сигнала в пределах ЗВ для указанных СН.

Для описания ПЭП принимаемого сигнала *E*₁ при первом способе наблюдения используется выражение [3]:

$$E_1 = E_0 S_{\rm ob}^{-2} \exp(-2\alpha S_{\rm ob}) \int L(t - 2S_{\rm ob}/c) G(t - \Delta t_{\rm 3a, I}) dt, \tag{1}$$

где S_{06} – расстояние до объекта, E_0 – константа, не зависящая от расстояния S; α – показатель ослабления лазерного излучения в атмосфере; t – время, L и G – функции, описывающие временные зависимости интенсивности излучения лазерной подсветки и чувствительности (коэффициента усиления) приемного блока (строб-импульса). При втором способе наблюдения в выражении (1) под знаком интеграла необходимо заменить значение S_{06} на S_{3ad} . Выражение $E_{np1} = S_{06}^{-2} \exp(-2\alpha S_{06})$ заменяется на $E_{np2} =$

 $S^{-2}\exp(-2\alpha S)$, которые будем называть пространственными множителями (здесь и далее индексы 1 и 2 указывают на первый и второй способы наблюдения). Результаты расчетов ПЭП приведены на рисунке для прямоугольной формы импульсов подсветки и

стробирования. При расчетах учитывается наличие энергии шумового порога E_{\min} [3]. Это предполагает, что сигналы E_{1} -и E_{2} не могут быть меньше E_{\min} .



Рисунок 1 – ПЭП для первого E_1 (1) и второго E_2 (2) способов наблюдения при S_{o6} = S_{3ad} = 40 м (обозначено вертикальными линиями); $\Delta t_{лa3}$ = 100 (*a*), 60 (*б*) и 140 нс (*в*); $\Delta t_{\phi n}$ = 100 (*a*), 140 (*б*) и 60 нс (*в*).

Из рисунка видно, что в зависимости от соотношения длительностей $\Delta t_{\text{лаз}}$ и $\Delta t_{\phi \Pi}$ ПЭП имеют разные форму и взаимное пространственное расположение. Максимумы сигналов для обоих СН либо одинаковы, либо различаются, а также могут располагаться на разных расстояниях.

Установлено, что при втором СН возможна реализация ситуации, когда ПЭП приобретает вид выпуклой асимметричной кривой со сравнительно узким максимумом, расположенным вблизи приемо-передающей плоскости АИСВ. Это объясняется в основном влиянием пространственного множителя E_{np2} . Показано, что при учете энергии шумового порога длина ЗВ в обоих случаях уменьшается при увеличении расстояний S_{o6} и S_{3ad} . Используемое в литературе выражение $\Delta S_{3B} = c(\Delta t_{na3} + \Delta t_{\phi n})/2$ справедливо только в случаях, когда максимальные значения контраста сигнала, достигаемые в пределах ЗВ, близки к единице.

- [1] Горобец В.А., Кабанов В.В., Кабашников В.П., Кунцевич Б.Ф., Метельская Н.С., Шабров Д.В. Активно-импульсные системы видения и алгоритмы определения расстояний до объектов // Журн. прикл. спектр. – 2014. – Т. 81,№ 2. – С. 283.
- [2] Горобец В.А., Кабанов В.В., Кабашников В.П., Кунцевич Б.Ф., Метельская Н.С., Шабров Д.В. Закономерности формирования изображения и определение расстояния до объекта при его движении относительно активно-импульсной системы видения // Журн. прикл. спектр. – 2015. – Т. 82,№ 1. – С. 68.
- [3] Кунцевич Б.Ф. Особенности пространственно-энергетического профиля сигнала, регистрируемого активно-импульсными системами видения, при учете энергии шумового порога // Журн. прикл. спектр. – 2022. – Т. 89,№ 6. – С. 869.

УДК 535.14; 535.3

И. А. Пешко¹

АНОМАЛЬНОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТА В ФОТОННЫХ СЕТЯХ С ДИССИПАТИВНОЙ СВЯЗЬЮ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь i.peshko@dragon.bas-net.by

В нашей работе мы рассматриваем одномерную цепочку линейно связанных бозонных мод, где каждая вторая мода подвергается искусственным потерям (см. рис. 1(а)). Эта схема может быть описана следующим управляющим уравнением для полной матрицы плотности системы

$$\frac{d}{dt}\rho_{tot} = -\frac{i}{\hbar}[H,\rho_{tot}] + \Gamma \sum_{\forall j} (2b_j \rho_{tot} b_j^+ - \rho_{tot} b_j^+ b_j - b_j^+ b_j \rho_{tot}), \tag{1}$$

где гамильтониан взаимодействия мод

$$H = \sum_{\forall j} \hbar v (b_j^+ (a_j + a_{j+1}) + (a_j^+ + a_{j+1}^+) b_j).$$
(2)

Операторы b_j и b_j^+ являются операторами уничтожения и рождения мод волноводов с искусственными потерями, причём Г - скорость этих потерь. Операторы уничтожения и рождения a_j и a_{j+1} описывают моды в волноводах только без потерь. Нужно отметить, что в реальных системах неизбежны пассивные потери во всех модах, однако если положить, что они одинаковые во всех волноводах, а также что скорость этих пассивных потерь много меньше Г, то учёт их всё равно можно эффективно свести к уравнению (1) с наложением определённых пределов.

В пределе $v/\Gamma \rightarrow 0$, моды с потерями b_j можно адиабатически исключить из уравнения (1). В результате можно получить управляющее уравнение для диссипативно связанных бозонных мод a_j , схематически изображённой на рисунке 1(b) (см. например [1]).

$$\frac{d}{dt}\rho = \gamma \sum_{\forall j} \left(2L_j \rho L_j^+ - \rho L_j^+ L_j - L_j^+ L_j \rho \right), \tag{3}$$

где $\gamma = v^2/\Gamma$ это константа диссипативной связи, а $L_j = a_j + a_{j+1}$ это так называемый оператор Линдблада, описывающий симметричную диссипативную связь между *j*-й и j + 1-й модами с операторами уничтожения a_j и a_{j+1} .



Рисунок 1 – (а) Схема одномерной цепочки линейно связанных бозонных мод, где каждая вторая мода подвергается искусственным потерям. (b) Схема диссипативно связанных бозонных мод. (c) Зависимость дисперсии возбуждения от времени в диссипативно-связанной цепочке бозонных мод для различных начальных состояний.

Известным фактом является то, что дисперсия возбуждения в марковской цепочке, связь между элементами которой является тепловой, увеличивается со временем линейно (диффузионный режим) [2], тогда как для системы мод, связанных унитарным гамильтонианом, дисперсия возбуждения увеличивается квадратично со временем (баллистический режим) [2].

Для демонстрации обнаруженных аномальных режимов распространения, на рисунке 1(с) изображены изменения дисперсии возбуждения в цепочке со временем для различных начальных состояний. Число волноводов равно 300. Все волноводы изначально находятся в вакуумном состоянии, кроме 142-го, 150-го, 158-го и 166-го. В этих волноводах изначально возбуждается когерентное состояние с амплитудой 1, но различными фазами. Так, толстая сплошная, тонкая сплошная, пунктирная и штрихпунктирная линии соответствуют следующим фазовым сигнатурам (то есть различным знакам) в этих модах: $\{+, +, -, -\}, \{+, -, -\}, \{-, +, -, +\}, \{+, +, +, +\}$. Верхние и нижние пунктирные линии соответствуют линейным зависимостям $3\gamma t$ и γt .

Из рисунка 1(c) видно, как различные начальные состояния, отличные только знаками при амплитудах когерентных состояний, имеют значительные различия в транспортной динамике.

Также, мы предложили ряд физических систем, которые могут быть использованы для практической реализации описанных, диссипативно-связанных волноводов, а также для наблюдения эффектов, описанных в нашей работе [3,4].

- [1] Single-photon generation by correlated loss in a three-core optical fiber / D. Mogilevtsev and V. S. Shchesnovich // Optics Letters. 2010. №35. 3375.
- [2] Quantum random walks: An introductory overview / J. Kempe // Contemporary Physics. 2003. №44. 307.
- [3] Mobility transition from ballistic to diffusive transport in non-Hermitian lattices / T. Eichelkraut, et al., // Nature Communications. 2013. №4. 2533.
- [4] InP-based generic foundry platform for photonic integrated circuits / L. M. Augustin, et al. // IEEE J. Sel. Topics in Quantum Electron. 2018. –№24.

УДК 53.343

Р.А. Дынич, А.Н. Понявина

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И БЛИЖНЕПОЛЕВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАССЕЯНИЯ ГИБРИДНЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.ponyavina@dragon.bas-net.by

Управление оптическими свойствами наноструктур, в состав которых входят металлсодержащие плазмонные наночастицы, имеет значительные перспективы применения в нанофотонике, фотовольтаике, сенсорике. Важную роль в формировании оптического отклика гибридных наноструктур, содержащих плазмонные и полупроводниковые компоненты, играют ближнеполевые плазмон-электронные / экситонные (ПЭ) взаимодействия. В зависимости ОТ морфологических характеристик нанокомпозита, влияющих на степень спектрального перекрытия полос поверхностного плазмонного резонанса поглощения металлических наночастиц (ППРП) и полос поглощения неметаллической компоненты, могут реализовываться режимы слабой и сильной ПЭ связи.

В настоящей работе с применением расширенной теория Ми проведено моделирование спектральных и ближнеполевых характеристик рассеяния гибридных металлсодержащих наночастиц со структурой ядро-оболочка, помещенных в диэлектрические и органические полупроводниковые матрицы. Как и в [1], при численных расчетах факторов эффективности ослебления и рассеяния света нами использовались следующие выражения:

$$Q_{\text{ext}} = \frac{4\kappa_m^2}{n_m \left[1 + e^{\beta}(\beta - 1)\right]} \operatorname{Re}\left\{\frac{1}{\kappa_m - in_m} \sum_{n=1}^{\infty} \left[(2n+1)\left(\psi_n^*\psi_n' - \psi_n\psi_n'^* + b_n\psi_n'^*\xi_n + b_n^*\psi_n\xi_n'^* - a_n\psi_n^*\xi_n' - a_n^*\psi_n'\xi_n^*\right)\right]\right\}$$
$$Q_{\text{NF}} = \frac{\left(4\pi\kappa_m R_s\right)^2}{\lambda_0^2 \left[1 + e^{\beta}(\beta - 1)\right]} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{\left|a_n\right|^2 \left[(n+1)\left|h_{n-1}\right|^2 + n\left|h_{n+1}\right|^2\right] + (2n+1)\left|b_n\right|^2 \left|h_n\right|^2\right\},$$

где λ_0 – длина волны падающего излучения, a_n , b_n – коэффициенты Ми, R_{NP} – радиус частицы, n_m и κ_m – действительная часть комплексного показателя преломления матрицы, соответственно, $\beta = 4\pi R_{NP}\kappa_m/\lambda_0$, ψ_n , ξ_n , ψ_n' , ξ_n' – функции Риккати–Бесселя и их производные, h_n – сферическая функция Ганкеля первого рода порядка n.

На рисунке 1 показаны результаты моделирования спектральной зависимости факторов эффективности ослабления и рассеяния в ближней зоне для двухслойных частиц с серебряной оболочкой, размещенных во фталоцианине меди. Управление спектральным положением полосы ППРП и, за счет этого, режимом ПЭ связи, осуществлялось при сохранении постоянным общего размера гибридной наночастицы (r₂) путем изменения размеров диэлектрического ядра (r₁) и толщины плазмонной оболочки. Режим слабого взаимодействия плазмонной и органической компоненты реализуется, когда полосы поглощения CuPc и полоса ППРП серебряной нанооболочки

спектрально разделены и/или перекрытие спектров незначительно. Такое разделение полос достигается при малых объемных долях диэлектрического (полупроводникового) ядра в двухслойной наночастице. Как видно из рисунка 1 а (кривая 1), в режиме слабой связи в спектре ослабления двухслойной наночастицы с серебряной оболочкой наблюдается интенсивная полоса ППРП в области 450 нм и некоторое увеличение Q_{ext} в области полос поглощения CuPc (330, 640 нм и 730 нм).

Когда частота плазмонного резонанса металлической нанооболочки с полупроводниковым ядром совпадает с частотой поглощения света в спектре поглощения матрицы (фталоцианина меди), в гибридной наноструктуре реализуется режим сильной связи. Это приводит к радикальному изменению спектральной зависимости факторов эффективности ослабления, поглощения и рассеяния двухслойной наночастицы с серебряной оболочкой (кривая 2 на рисунке 1а).



Рисунок 1. – Спектральная зависимость фактора эффективности ослабления (а) и рассеяния в ближней зоне (б) для двухслойных частиц с серебряной оболочкой, размещенных во фталоцианине меди. Показатель преломления материала ядра n_{core}=2.5, r₂ = 10 нм, r₁ = 2 нм (кривая 1) и 7 нм (кривая 2)

Влияние на ближнеполевые характеристики перехода от режима слабой ПЭ связи к режиму сильной ПЭ связи показано на рисунке 16. Как видно из рисунка, в режиме слабой связи наблюдается одна интенсивная полоса $Q_{\rm NF}$ в области 450 нм (кривая 1). В максимуме этой полосы $Q_{\rm NF}$ = 2570. В режиме сильного взаимодействия наблюдаются две полосы $Q_{\rm NF}$ в области 550 нм и 780 нм (кривая 2). Значения $Q_{\rm NF}$ в максимумах этих полос, однако, почти на порядок меньше: $Q_{\rm NF}$ = 600 для 550 нм и $Q_{\rm NF}$ = 100 для 780 нм.

Таким образом, уникальная особенность двухслойных наночастиц с металлической нанооболочкой, которая состоит в возможности «подстраивать» спектральное положение полосы ППРП под полосы выбранных неметаллических компонент за счет варьирования размеров ядра и толщины плазмонной оболочки, может быть использована для контроля и перестройки режима ПЭ связи в гибридных наноструктурах.

[1] Дынич Р.А. Усиление локального поля вблизи сферических наночастиц в поглощающей среде / Р.А. Дынич, А.Н. Понявина, В.В. Филиппов // Журн. прикл. спектр. – 2009. – Т. 76. – С. 746.

УДК 535.3

Г. А. Пицевич, А.Е. Малевич, В. В. Сапешко, Я. В. Полякова, Е. Е. Ковалева

СИЛОВОЕ И КИНЕМАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВНУТРЕННИХ ВОЛЧКОВ В МОЛЕКУЛЕ МЕТАНДИОЛА

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь pitsevich@bsu.by

Молекула метандиола (МД), строение которой можно описать формулой HO(CH₂)OH, является простейшим представителем диолов и достаточно давно используется в косметической и пищевой промышленности. Долгое время считалось, что молекуле МД присуща единственная равновесная конфигурация. Однако позднее молекула установлено, что характеризуется было двумя равновесными конфигурациями. Транс- конфигурация, в которой гидроксильные группы направлены противоположно, энергетически существенно предпочтительнее цис- конфигурации, в которой О-Н группы почти параллельны. Всплеск интереса к молекуле был недавно инициирован установлением того факта, что МД играет важную роль в формировании атмосферных аэрозолей, а также может присутствовать в межзвездном пространстве и в кометах. Возможность туннелирования между конфигурационно эквивалентными структурами обоих конформеров анализировалась в работах [1,2]. Недавно аналогичные исследования были выполнены для ряда близких по строению молекул НОООН, HSOSH, HOSOH, HSSSH [3-6]. Вместе с тем, детальный анализ силового и кинематического взаимодействия двух некооксиальных внутренних волчков в молекуле МД выполнен не был. Гамильтониан в уравнении Шредингера ограниченной размерности описывается формулой (1)

$$-F_{\gamma\gamma}(\gamma,\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} - F_{\varphi\varphi}(\gamma,\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - F_{\gamma\varphi}(\gamma,\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\gamma\partial\varphi} + U(\gamma,\varphi)$$
(1)

Как следует из (1) кинематическое взаимодействие двух гидроксильных волчков в молекуле МД носит весьма сложный характер. Действительно, не только третье слагаемое в (1) описывает это взаимодействие. Первое и второе слагаемые также содержат вклад взаимодействия двух волчков. На Рис.1 представлена 2D поверхность этого типа кинематического взаимодействия, а также 2D поверхности диагонального кинематического коэффициента в отсутствии взаимодействия и с полным его учетом.



Рисунок 1 2D поверхность коэффициента $F_{\gamma\gamma}(\gamma, \varphi)$ в случае отсутствия кинематического взаимодействия (правый рисунок), в случае полного учета кинематического взаимодействия (левый рисунок) и вклад этого взаимодействия в первое слагаемое уравнения (1).

В свою очередь, 2D поверхность потенциальной энергии, обусловленная силовым взаимодействием, представлена на Рис.2



Рисунок 2 2D поверхность $U(\gamma, \varphi)$ в случае отсутствия силового взаимодействия (правый рисунок), в случае полного учета силового взаимодействия (левый рисунок) и силового взаимодействия.

Выполнены расчеты, позволяющие определить влияние кинематического и силового взаимодействия на частоты туннелирования в основных и возбужденных торсионных состояниях обоих конформеров молекулы метандиола, а также на частоты торсионных колебаний этих конформеров.

- [1] Pitsevich G. A. The hydroxyl groups internal rotations in a methanediol molecule. / G. A. Pitsevich, A. E. Malevich, V. V. Sapeshko // J.Mol.Spectr. - 2019. - V. 360. - P. 31.
- [2] Pitsevich G.A. Barriers to internal rotation and tunnelling splittings of the torsional states in the HO(CH₂)OH, DO(CH₂)OH, and DO(CH₂)OD molecules. / G. A. Pitsevich, A. E. Malevich, F. V. Markovich, U. U. Sapeshka // Mol.Phys. – 2020. – V.118. – e1746425.
- [3] Pitsevich G. A. Modelling of the torsional IR spectra of the HSSSH, DSSSH, and DSSSD molecules. /G. A. Pitsevich, A. E. Malevich, U. U. Sapeshka, D. Kisuryna, I. Yu. Doroshenko // J.Mol.Spectr. - 2023. - V. 1222. - 114080.
- [4] Pitsevich G. A. The torsional spectrum of the hydrogen trioxide molecule. / G. A. Pitsevich, A. E. Malevich, V. V. Sapeshko // Chem.Phys. - 2020. - V. 530. -110633.
- [5] Pitsevich G. A. Torsional states and tunneling probability in HOSOH, DOSOD, and DOSOH molecules analyzed at the CBS limit. / G. A. Pitsevich, A. E. Malevich, D. G. Kisuryna, A. A. Ostyakov, U. U. Sapeshka // J.Phys.Chem. A – 2020. – V. 124. – P. 8733.
- [6] Pitsevich G. Torsional vibrations of two thiol groups in the HSOSH, DSOSD and DSOSH molecules: 2D PES study in CBS limit. / G. Pitsevich, A. Malevich, V. Zheutok, A. Khrapunova, U. Sapeshka // Vibr.Spectr. – 2021. – V. 113. – 103208.

УДК 53.535.343

Я. О. Крывелёва, Д. Д. Качкина, Н. А. Хурсевич

КОНФОРМАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, ТОРСИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ЧАСТОТЫ ТУНЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЫ РЕЗОРЦИНА

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>yana.kryveleva@gmail.com</u>

Молекула резорцина ($C_6H_4(OH)_2$) представляет значительный интерес, поскольку широко используется в медицине, при производстве полимеров и красителей. Она реализуется в виде нескольких стабильных конформеров, представленных на Рис.1



Рисунок 1 Геометрические конфигурации стабильных конформеров молекулы резорцина.

Рис.1 показывает, что все конформеры молекулы резорцина реализуются за счет вращения гидроксильных (O-H) групп, находящихся в мета- положении по отношению друг к другу, вокруг C-O связей. Конформеры 1 и 2 являются эквивалентными и между ними возможен процесс туннелирования. Расчеты показывают также, что конформеры 1 и 2 обладают минимальной энергией, потенциальная энергия конформера 2 лишь на 10,6 см⁻¹ больше, чем у конформеров 1 и 2, а потенциальная энергия конформера 4 на 227,4 см⁻¹ больше, чем у конформера 3. Все конформеры разделены достаточно высокими потенциальными барьерами, что должно обеспечивать их стабильность в том числе при комнатных температурах. Все конформеры молекулы описываются группой молекулярной симметрии C $_{2V}(M)$ аналогично тому, как это имело место в случае молекулы катехона [1], в которой две гидроксильные группы расположены в ортоположении по отношению друг к другу.

Для определения частот туннелирования в основном и возбужденных торсионных состояниях и нахождения частот торсионных колебаний различных конформеров была рассчитана 2D поверхность потенциальной энергии, обусловленная вращением гидроксильных групп на уровне теории B3LYP/Aug-cc-pVTZ. Расчеты проводились с помощью квантово-химического пакета ORCA 5.0.0. Торсионные углы варьировались в интервале 0-360° с шагом 8°. Одновременно рассчитывались 2D поверхности кинематических коэффициентов и компонент дипольного момента. Далее, в соответствии с [1], строилась матрица Гамильтониана, диагонализация которой

позволила определить значения энергий возбужденных торсионных состояний и построить соответствующие волновые функции. В частности, расчеты предсказывают, что расщепление основного колебательного состояния за счет туннелирования между конфигурациями 1 и 2, составляет 2*10⁻⁷ см⁻¹. Определены также частоты торсионных колебаний всех конформеров молекулы резорцина.

[1] Pitsevich G. A. Torsional motions of the free and H-bonded hydroxyl groups of the catechol molecule. / G. A. Pitsevich, A. E. Malevich // J. Mol. Spectr. – 2022. – V. 387. – 111664 УДК 535.3

И. В. Балыкин¹, А. А. Рыжевич^{1,2}, Н.С. Казак³

ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПО АЗИМУТУ ОТКЛОНЕНИЙ УГЛА КОНУСНОСТИ АКСИКОНА НА БЕССЕЛЕВ СВЕТОВОЙ ПУЧОК

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>b97@dragon.bas-net.by</u>

² Белорусский государственный университет, np. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u>

³ Государственное научное производственное объединение "Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника", пр. Независимости, 68-1, 220072 Минск, Беларусь lod@dragon.bas-net.by

Одним из наиболее энергетически эффективных способов формирования бесселева светового пучка нулевого порядка (БСП₀) на практике является преобразование гауссова пучка с использованием конической линзы – аксикона [1]. Известно, что отклонения формы аксикона от конической влияют на распределение интенсивности в БСП₀, например, скругление верхушки аксикона приводит к формированию осевых осцилляций интенсивности [2], а наличие у аксикона эллиптичности приводит к распаду приосевого кольца [3]. В связи с этим представляет интерес вопрос влияния периодических по азимуту отклонений угла при основании конической поверхности аксикона на формируемый им БСП₀ в общем случае, когда число полных периодов отклонения (модуляции) угла от среднего значения, укладываемых в полный круг, больше 2.

Нами рассмотрен случай, когда угол при основании конуса аксикона зависит от азимутальной координаты следующим образом

 $\alpha = \alpha_0 [1 + A \sin(\varphi N)],$

где α₀ – среднее значение угла при основании конуса, *A* – амплитуда модуляции, φ – азимутальная координата, *N* – число периодов модуляции, укладываемых в полный круг.

С использованием методов Фурье-оптики [4, 5] нами рассчитаны распределения интенсивности за аксиконом для разных N и A при $\alpha_0 = 5^\circ$, длине волны $\lambda = 633$ нм, показателе преломления материала аксикона n = 1.5, представленные на рисунке 1.

Видно, что с ростом амплитуды модуляции A наблюдаемые отклонения от распределения в идеальном пучке становятся более выраженными, при этом число минимумов интенсивности, наблюдаемых в приосевом кольце при малом значении A (≤ 0.05) в случае нечетного N равно N, а в случае четного – равно 2 N. При больших значениях A (>0.05) как в случае четного N, так и в случае нечетного N число минимумов в приосевом кольце пучка равно 2 N.


Рисунок 1 – Поперечные распределения интенсивности в БСП₀, полученных для аксиконов с различной амплитудой модуляции *A* и числа периодов *N*

Полученные результаты могут быть использованы для формирования специальных световых полей с заданным порядком осевой симметрии, а также для оценки качества изготовления аксиконов (наличия периодической зависимости угла при основании конуса от азимутальной координаты) на основе анализа формируемых ими БСП₀.

Работа выполнена в рамках задания 1.1 «Разработка методов и устройств диагностики материалов, процессов и изделий в оптическом и терагерцовом диапазонах спектра и их применение для оптической связи, микроскопии и определения характеристик различных объектов» (№ гос. рег. 20210300) ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» (2021-2025 гг.).

[1] Scott G. Efficient generation of nearly diffraction-free beams using an axicon // Opt. Eng. – 1992. – T. 31. № 12. – C. 2640. DOI: 10.1117/12.60017.

[2] Brzobohatý, O. High quality quasi-Bessel beam generated by round-tip axicon / O. Brzobohatý, T. Cižmár, P. Zemánek // Optics Express – 2008 – T. 16. № 17. – C. 12688. DOI: 10.1364/oe.16.012688.

[3] Wu F. Effect of elliptical manufacture error of an axicon on the diffraction-free beam patterns // Opt. Eng. -2008. - T. 47. No 8. - C. 083401.

[4] Гудмен Дж. Введение в фурье-оптику. –М.: Мир, 1970.

[5] Townson M. J. AOtools: a Python package for adaptive optics modelling and analysis / M. J. Townson, O. J. D. Farley, G. Orban de Xivry, J. Osborn, A. P. Reeves // Opt. Express – 2019. – T. 27. – C. 31316-31329.

УДК 535.3:551.551

И. В. Балыкин¹, А. А. Рыжевич^{1,2}, Н.С. Казак³

ОПТИЧЕСКИЙ ФУРЬЕ-СПЕКТР БЕССЕЛЕВА СВЕТОВОГО ПУЧКА, СФОРМИРОВАННОГО ИЗ ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА, ПРОШЕДШЕГО ЧЕРЕЗ ИМИТАТОР АТМОСФЕРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>b97@dragon.bas-net.by</u> ² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u> ³ Государственное научное производственное объединение "Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника", пр. Независимости, 68-1, 220072 Минск, Беларусь lod@dragon.bas-net.by

После прохождения лазерного пучка через среду с турбулентностью он не только претерпевает изменения в поперечных распределениях фазы и амплитуды, но при некоторых условиях также отклоняется от прежнего направления распространения. Экспериментально показано, что у сформированного из него неподвижным аксиконом бесселева светового пучка (БСП) любого порядка при этом также изменяется направление распространения, из-за чего смещается оптический Фурье-спектр БСП, получаемый в фокусной плоскости установленной на оси БСП положительной линзы. Если направления распространения исходного лазерного пучка и полученного из него БСП изменяются во времени, усредненный по времени Фурье-спектр БСП уширяется в направления БСП. Турбулентность атмосферы в эксперименте имитировалась поступательным перемещением поперек исходного лазерного пучка стеклянной пластины с оптическими неоднородностями. На рис. 1 показан Фурье-спектр БСП, полученный из лазерного пучка при отсутствии и при наличии имитатора, а также усредненный по времени при движении имитатора поперек лазерного пучка.



Рисунок 1 – Фурье-спектры БСП при отсутствии (а) и при наличии имитатора без усреднения (б) и с усреднением по времени (в).

Из горизонтальных (по x) и вертикальных (по y) распределений интенсивности на рисунке 2 видно, что при наличии имитатора мощность Фурье-спектра падает вследствие отражения и рассеяния примерно 8% излучения на входной и выходной

гранях имитатора, а при усреднении Фурье-спектр уширяется. Особенно сильным является уширение вдоль оси *x*, что свидетельствует о наличии выделенного направления в ориентации слоёв, образующих турбулентность, причем в данном случае слои ориентированы вертикально.



Рисунок 2 – Диаметральные распределения интенсивности в Фурье-спектрах при отсутствии (горизонтальное – а, вертикальное – г) и наличии имитатора без усреднения (горизонтальное – б, вертикальное – д) и с усреднением (горизонтальное – в, вертикальное – е).

Рисунок 3 показывает, что в процессе перемещения имитатора турбулентности отклонения оси БСП были более сильными именно в горизонтальном направлении, что и привело к более сильному уширению Фурье-спектра в этом направлении.



Рисунок 3 – Зависимость отклонения оси БСП от положения оси невозмущенного пучка от времени для различных значений продольной координаты *z*, рассчитанная методом моментов при пороге 0,8.

Полученные результаты могут быть использованы для быстрой оптической диагностики турбулентной среды, в том числе, в реальном режиме времени.

Работа выполнена в рамках задания 1.1 «Разработка методов и устройств диагностики материалов, процессов и изделий в оптическом и терагерцовом диапазонах спектра и их применение для оптической связи, микроскопии и определения характеристик различных объектов» (№ гос. рег. 20210300) ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» (2021-2025 гг.).

УДК 530.182

М. А. Князев

РЕШЕНИЕ ТИПА КИНКА УРАВНЕНИЯ ШАРМЫ-ТАССО-ОЛВЕРА-БЮРГЕРСА

Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости, 65, 220013 Минск, Беларусь <u>maknyazev@bntu.by</u>

Уравнения Бюргерса и Шармы-Тассо-Олвера применяются для описания процессов синтеза и деления с использованием состояний, описываемых солитонами [1, 2]. Это позволяет расширить свойства солитонов, которые раньше рассматривались как объекты, не испытывавшие распадов, а при столкновениях сохранявшие свою форму [3]. В последнее время объединенное уравнение Шармы-Тассо-Олвера-Бюргерса (STOB) рассматривается как модель для исследования возможностей формирования молекул, состоящих из солитонов или солитоноподобных объектов [4].

Уравнение STOB записывается в виде [4]:

$$u_t + \alpha(3u_x^2 + 3u^2u_x + 3uu_{xx} + u_{xxx}) + \beta(2uu_x + u_{xx}) = 0,$$
(1)

где α и β – константы.

Новое решение уравнения (1) можно построить, используя модифицированный метод Хироты [5]. Если применить к уравнению (1) преобразование Коула-Хопфа вида $u = \sigma F_x/F$, где F = F(x,t) – неизвестная функция, а σ – константа, которая должна быть определена дополнительно, и потребовать дополнительно выполнения условий $\sigma^2 - 3\sigma + 2 = 0$ и $\sigma^2 - 5\sigma + 4 = 0$, то можно найти приемлимое для рассматриваемой задачи значение $\sigma = 1$, а уравнение (1) записать в билинейном виде

$$F_{xt}F - F_xF_t - \alpha F_xF_{xxx} + \alpha F_{xxxx}F + \beta F_{xxx}F - \beta F_xF_{xx}0.$$
(2)

Значение σ находится из приведенных выше дополнительных условий, которые, в свою очередь, позволяют избавиться в уравнении (2) от членов более высоких степеней.

Запишем функцию *F* в виде формального ряда

J

$$F = 1 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \cdots.$$
(3)

где $f_i = f_i(x,t), i = 1,2,...$ - новые неизвестные функции, а ε , вообще говоря, не малый параметр. Подставив соотношение (3) в уравнение(2), получим бесконечную систему линейных уравнений в частных производных для функций f_i , в которой каждая последующая функция определяется только через предыдущие. Первое уравнение этой системы является однородным, в то время как все остальные – неоднородными. Решая последовательно эту систему уравнений, можно в принципе найти все f_i . Поскольку нас интересует только решение, соответствующее одиночному кинку, для наших целей достаточно использовать только первые два уравнения этой системы. Они имеют вид

$$f_{1,xt} + \alpha f_{1,xxxx} + \beta f_{1,xxx} = 0, \tag{4}$$

$$f_{2,xt} + \alpha f_{2,xxxx} + \beta f_{2,xxx} = f_{1,x} f_{1,t} + \alpha f_{1,x} f_{1,xxx} + \beta f_{1,x} f_{1,xx} = 0.$$
(5)

Представим функцию f_1 в виде $f_1 = \exp(kx - \omega t + \eta_0)$. Значения параметров решения k и ω необходимо рассмотреть дополнительно. Параметр η_0 , описывающий начальное положение решения, без потери общности, можно положить равным нулю. Подставив выражение для f_1 в уравнение (4), получим дисперсионное соотношение вида $\omega = \alpha k^3 + \beta k^2$. В соответствии с методом Хироты подставим выражение для f_1 в правую часть уравнения (6) и приравняем её нулю. Тем самым выполняется условие обрывания ряда (3). В результате получим соотношение, которое совпадает с дисперсионным соотношением. Таким образом, для одного параметра решения точное значение определить не удалось.

Теперь решение уравнения (1) можно записать следующим образом:

$$u = \sigma \frac{f_{1,x}}{f_1} = -\frac{k}{2} \Big[1 + \tanh\left(\frac{kx - \omega t + \eta_0}{2}\right) \Big] = -\frac{k}{2} \Big[1 + \tanh\left(\frac{kx - (\alpha k^3 + \beta k^2) + \eta_0}{2}\right) \Big],\tag{6}$$

где параметр k остается произвольной постоянной. Непосредственной подстановкой соотношения (6) в уравнение (1) можно убедиться, что оно является решением этого уравнения. Полученное решение является новым по сравнению с решениями, приведенными в работах [1, 4].

- Wang S. Soliton fission and fusion: Burgers equation and Sharma-Tasso-Olver equation / S. Wang, X.Y. Tang, S.Y. Lou // Chaos, Solitons, Fractals. – 2004. – V. 21. – P. 231.
- [2] Князев, М.А. Состояния типа кинков в модели Шармы-Тассо-Олвера / М.А. Князев // Известия вузов. Физика. 2011. № 3. С. 111.
- [3] Додд Р. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. / Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис. М.: Мир, 1988. 694 с.
- [4] Zhaowen Yan. Soliton molecules in Sharma-Tasso-Olver-Burgers equation / Zhaowen Yan, Senyue Lou // httt:xxx.lanl.gov (arXiv:1912.13324 [nlin.PS]).
- [5] Князев, М.А. Кинки в скалярной модели с затуханием. / М.А. Князев. Минск: Тэхналогія, 2003. 115 с.

УДК 535.372; 537.868.4; 681.7.031

И.А.Ходасевич¹, В.С. Степура¹, А.С. Пиотух¹, В.А. Длугунович¹, А.В. Исаевич¹, М.В. Корольков¹, Д.С. Могилевцев¹, Е.В. Колобкова², А.С.Грабчиков¹

АП-КОНВЕРСИЯ ВО ФТОРФОСФАТНЫХ СТЕКЛАХ С ИОНАМИ ИТТЕРБИЯ И ТУЛЛИЯ, ВОЗБУЖДАЕМАЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 1038 HM, ЛИБО НЕПРЕРЫВНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ В ОБЛАСТИ 975 HM.

¹ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь a.grabtchikov@dragon.bas-net.by

²Университет ИТМО Кронверкский пр. 49, Санкт-Петербург 197101, Россия <u>kolobok106@rambler.ru</u>

Ап-конверсионное (АК) преобразование инфракрасного (ИК) излучения в видимый диапазон находит многочисленные применения [1-3]. Хотя для возбуждения АК люминесценции широкое распространение получили непрерывные лазеры, представляет интерес использование в нелинейных процессах ап-конверсии фемтосекундных систем, излучение которых обладает значительными средними мощностями и высокими интенсивностями энергии в импульсах.

В докладе приводятся данные по сравнительному анализу эффекта ап-конверсии при непрерывной накачке и при возбуждении высокочастотной (100 МГц) последовательностью фемтосекундных импульсов длительностью 100 фс. В обоих случаях мощность выходного излучения достигала 2 Вт.

Ап-конверсия развивается на образцах фторфосфатных стекол с ионами туллия (Tm) и иттербия (Yb). Возбуждение осуществляется непрерывным ($\lambda = 975$ нм) или фемтосекундным ($\lambda = 1038$ нм) излучением с длинами волн, попадающими в полосу поглощения ионов Yb. Энергия возбуждения эффективно переносится с ионов Yb на ионы Tm, приводя к ап-конверсионной люминесценции ионов тулия (Puc. 1) Измерения для образца с концентрациями 0.1%Tm и 10%Yb показали, что ап-конверсионная люминесценция в областях 450, 475, 650 и 790 нм из состояний ¹D₂, ¹G₄, ³H₄, ³F_{2,3} в случае непрерывной накачки характеризуются нелинейным коэффициентом n, равным 3.43, 2.31, 2.28 и 1.57, соответственно [4]. Использование для накачки фемтосекундного излучения с длиной волны 1038 нм привело к заниженных значения коэффициента n – 1.54, 1.22, 1.18, 0.84. Возможной причиной заниженных значений коэффициента п при фемтосекундном возбуждении может являться более высокая степень вовлеченности в нелинейные процессы с сопутствующим энергопереносом вследствие значительных интенсивностей импульсов.

Повышение концентрации туллия до 3% при снижении содержания иттербия до 5% кардинально изменяет спектральную картину, оставляя доминирующую полосу на 790 нм и минимизируя проявления остальных линий (Рис. 16). При обоих вариантах возбуждения (непрерывном и фемтосекундном) наблюдался эффект подавления апконверсионного испускания, причем фемтосекундная накачка обеспечивала большую степень подавления.



Рисунок 1 – Спектры ап-конверсионной люминесценции образцов, возбуждаемых фемтосекундными импульсам, при разном содержании ионов тулия и иттербия: 0.1%Tm и 10%Yb (a); 3%Tm и 5%Yb (б)

Авторы благодарны Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований (проект №Ф22В-008) за финансовую поддержку работы.

[1] Tsang M.-K. Stimuli responsive upconversion luminescence nanomaterials and films for various applications / M.-K. Tsang, G. Bai, and J. Hao // Chem. Soc. Rev. – 2015. – Vol. 44. – P. 1585.

[2] Upconversion luminescence nanomaterials: A versatile platform for imaging, sensing, and therapy / J. Yao, C. Huang, C. Liu, M. Yang // Talanta. – 2020. – Vol. 208. – P. 120157.

[3] Pollack S. A. Upconversion-pumped infrared erbium laser / S. A. Pollack, D. B. Chang, N. L. Moise, // J. Appl. Phys. – 1986. – Vol. 60. – P. 4077.

[4] Kolobkova E. Upconversion Luminescence and Energy Transfer in the Fluorophosphate Glasses with low Phosphate Content doped with Tm^{3+} and Yb^{3+} ions / E. Kolobkova, A. S. Grabtchikov, I. A. Khodasevich // Journal of Non-Crystalline Solids: X. – 2021. – Vol. 11-12. – P. 100065.

УДК 535.8

Г. А. Гусаков¹, Н. В. Белько¹, М. П. Самцов¹, А. А. Луговский¹, В. А. Пархоменко¹, Е. С. Воропай²

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОМПЛЕКСОВ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ АЛМАЗОВ С КРАСИТЕЛЯМИ СТИРИЛОВОГО И ЦИАНИНОВОГО РЯДА

¹ НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь <u>gga68@rambler.ru</u>

²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

voropay@bsu.by

Ультрадисперные алмазы (УДА) детонационного синтеза рассматриваются в качестве перспективной наноплатформы для доставки лекарственных препаратов и диагностических молекул. В последние годы большое внимание уделяется проблеме создания флуоресцентных зондов на основе наноалмазов. Ковалентное связывание органических молекул красителя с подходящими функциональными группами на поверхности УДА может способствовать повышению его фотостабильности, обеспечивает биосовместимость и химическую инертность, а также позволяет управлять фармакокинетикой.

В настоящей работе были получены нанокомплексы УДА с двумя органическими красителями К1 и К2, структурные формулы которых представлены на рисунке 1. Стириловый краситель К1 является аналогом широко известного флуоресцентного биосенсора тиофлавина Т. К2 является симметричным катионным цианиновым красителем. Ковалентная прививка молекул красителей к поверхности УДА осуществлялась с использованием гексаметилендиамина в качестве линкера. Образование ковалентных связей между аминогруппами линкера и карбоксильными группами красителей регистрировалась методом ИК-спектроскомии. Полученные комплексы далее обозначаются как УДА-К1 и УДА-К2.



Рисунок 1. Структурные формулы исследованных красителей

Были приготовлены суспензии нанокомплексов УДА-К1 и УДА-К2 в воде и этаноле с концентрацией 1 мг/мл. Спектры поглощения полученных суспензий приведены на рис.2. Для обоих образцов полосы поглощения красителя проявляется на фоне светорассеяния на наночастицах УДА. Для УДА-К1 полоса поглощения красителя находится в области 500–600 нм, а для УДА-К2 – в области 650-800 нм. Причем для

комплексов УДА-К2 наблюдается два максимума поглощения при 670 и 734 нм, которые связаны с присутствием красителя в форме димеров и мономеров. Для УДА-К1 водные суспензии нанокомлпексов обладают достаточной седиментационной стабильностью. В этаноле наблюдается существенное убывание оптической плотности со временем. Для УДА-К2 суспензии нанокомлпексов характеризуются седиментационной стабильность как в воде, так и в этаноле.



Рисунок 2 – Спектры поглощения нанокомплексов УДА-К1 (а) и УДА-К2 (б) в этаноле, зарегистрированные сразу после приготовления (1) и спустя 2 ч (2)

Положение и форма спектров флуоресценции и возбуждения флуоресценции близки для суспензий нанокомплексов в этаноле и воде. В спектре флуоресценции УДА-К1 проявляется полоса при 597 нм, а в спектре возбуждения – соответствующая ей полоса при 517 нм (рис. 3а). В спектре флуоресценции суспензии нанокомплексов УДА-К2 проявляется полоса при 758 нм, а в спектре возбуждения флуоресценции – полоса при 729 нм (Рис.3б). Флуоресценция может быть отнесена к мономерам красителя, ковалентно связанного с поверхностью УДА.



Рисунок 3 – Нормированные спектры возбуждения флуоресценции при регистрации на 660 нм (1) и флуоресценции при возбуждении на 540 нм (2) нанокомплексов УДА-К1 (а) и нормированные спектры возбуждения флуоресценции при регистрации на 810 нм (1) и флуоресценции при возбуждении на 700 нм (2) нанокомплексов УДА-К2 (б)

Таким образом, полученные нанокомлпексы ультрадисперсных алмазов с молекулами стирилового и цианинового красителей демонстрируют флуоресцентные свойства, пригодные для биомедицинских применений.

УДК 535.37

А. Д. Замковец, Е.А. Барбарчик, О.В. Буганов, А.Н. Понявина, С.А. Тихомиров

СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИБРИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ Аg-CuPc

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.zamkovets@dragon.bas-net.by

Изучение спектрально-кинетических свойств плазмонных нанокомпозитов важно для разработки быстродействующих оптических модуляторов и переключателей. Ранее было установлено, что характеристические времена релаксации наводимых изменений металло-диэлектрических нанокомпозитах определяются в в основном конструктивными параметрами плазмонного монослоя и лежат в диапазоне времен ~ 1.8 - 4 пс [1,2]. Для гибридных металл-полупроводниковых нанокомпозитов, содержащих монослои плазмонных наночастиц и тонкие наноструктурированные пленки органических И неорганических полупроводников, закономерности сверхбыстрой динамики электронных возбуждений существенно зависят от режима экситон-плазмонного взаимодействия в композите. В частности, в [3] при возбуждении фемтосекундными лазерными импульсами была экспериментально обнаружена плазмон-зависимая модификация оптических свойств тонкой пленки фталоцианина меди (CuPc), граничащей с плотноупакованным монослоем наночастиц серебра. В данной работе исследуются спектрально-кинетические свойства многослойных гибридных нанокомпозитов (Ag-CuPc)ⁿAg (n=1-6) и основное внимание, в отличие от [3], обращается не на полосы просветления, а на область наведенного поглощения органической пленки.

1а приведены стационарные спектры оптической плотности рис. Ha изготовленных термическим испарением в вакууме гибридных нанокомпозитов $(Ag-CuPc)^{2}Ag$ и $(Ag-CuPc)^{6}Ag$, для которых суммарная толщина разделительных слоев CuPc является одинаковой (~ 40 нм). Для нанослоя серебра (кривая 1) в области длин волн λ ~400-550 нм наблюдается полоса ППРП с максимумом на длине волны λ ~ 490 нм, а полосы поглощения пленки CuPc (кривая 2) расположены в спектральном диапазоне λ~550-750 нм. Присутствие наночастиц серебра в гибридных композитах $(Ag-CuPc)^{2}Ag$ (кривая 3) и $(Ag-CuPc)^{6}Ag$ (кривая 4) приводит к существенному увеличение оптической плотности в области полос поглощения фталоцианина меди (Ag-CuPc)[°]Ag вследствие ближнепольных эффектов. Причем, для композита оптическая плотность в области полос электронного поглощения CuPc возрастает в большей степени вследствие сопоставимости в данном композите размеров наночастиц серебра и толщин слоев органического материала.

Нестационарные спектры поглощения данных систем, измеренные при времени задержки Δt =0.4 пс (когда являются максимальными наведенные изменения в чистой пленке CuPc) приведены на рис 16. Анализ нестационарных спектров показывает, что полоса наведенного поглощения фталоцианина меди при λ = 525-530 нм перекрывается краем полосы просветления ППРП. По этой причине кинетика в области этих длин волн имеет сложную форму и на временах в несколько пс определяется в основном релаксацией сильной полосы просветления ППРП. На больших временных задержках регистрируется уже чистое затухание полосы наведенного поглощения CuPc,

отражающее уменьшение заселенности возбужденного синглетного состояния за счет быстрой интеркомбинационной конверсии, которая у фталоцианина меди является основным каналом дезактивации возбужденных синглетных состояний [4]. Подобная ситуация имеет место в области высоких значений наведенного поглощения пленки CuPc (λ≈525-550 нм).



Рис. 1. (а) Спектры оптической плотности монослоя серебра с $d_{cp} \sim 5$ нм и параметром перекрытия $\eta \sim 0.5$ (1), пленки CuPc толщиной $l \sim 40$ нм (2), а также гибридных структур (Ag-CuPc1)²Ag (3) и (Ag-CuPc2)⁶Ag (4). CuPc1: $l_1 \sim 20$ нм. CuPc2: $l_2 \sim 7$ нм; (б) спектры нестационарного поглощения пленки CuPc толщиной $l \sim 40$ нм (1), композитов (Ag-CuPc1)²Ag (2) и (Ag-CuPc2)⁶Ag (3) (в), измеренные при времени задержки $\Delta t = 0.4$ пс; (в) – кинетика пленки CuPc на $\lambda = 525$ нм. $\lambda_{воз6} = 395$ нм. $E_{воз6} = 5-10$ мкДж.

Для структуры (Ag-CuPc)²Ag фитирование дает на длине волны $\lambda = 540$ нм постоянную затухания ~35 пс, что заметно короче аналогичного времени (~ 50 пс) для чистой пленки фталоцианина меди толщиной 40 нм. Для гибридной структуры (Ag-CuPc)⁶Ag постоянная затухания на этой же длине волны становится еще более короткой, равной ~15 пс. Для этого композита также достигается более высокая оптическая плотность в области электронных полос поглощения в стационарном спектре за счет эффектов ближнего поля (рис. 1а).

Уменьшение для гибридного композита времени релаксации в спектральной области наведенного поглощения фталоцианина меди свидетельствует о том, что наличие плазмонных наночастиц в композите ускоряет переход органических молекул в триплетное состояние. Время интеркомбинационной конверсии в органической подсистеме изученных гибридных композитов в присутствии плазмонных частиц сокращается за счет увеличении интенсивности действующего на органическую подсистему локального поля по мере усложнения структуры гибридного нанокомпозита.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант № Ф20ЕА-006).

- [1] Динамика электронных возбуждений в плазмонных плотноупакованных наноструктурах Ag/Na₃AlF₆ при импульсном лазерном воздействии/О.В.Буганов [и др.]// Журн. прикл. спектр. 2011. Т. 78, №5. С. 735-741.
- [2] Спектрально-временная динамика нестационарного поглощения многослойных периодических плазмонных наноструктур/ О.В.Буганов [и др.] //Известия НАН Беларуси. Серия физ.-мат. наук. -2017. №2. С.82-90.
- [3] Плазмонзависимая модификация спектрально-кинетических свойств тонких пленок фталоцианина меди в присутствии наночастиц серебра/О.В.Буганов [и др.] //Журн. прикл. спектр.- 2014. Т.81,№1.-С.93-98.
- [4] Sergeeva, N.N. Photochemical Transformations Involving Porphyrins and Phthalocyanines/ N.N. Sergeeva, M.O. Senge // CRC Press. 2012. P.831-879.

УДК 543.42

В. В. Кирис, К. Ю. Кацалап, М. В. Бельков

СРАВНЕНИЕ РЕГРЕССИИ НА ЛАТЕНТНЫЕ СТРУКТУРЫ И РЕГРЕССИИ ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ ПРИ АНАЛИЗЕ СОСТАВА НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЕЙ И ЧУГУНОВ ПО СПЕКТРАМ ЛИЭС

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.kiris@dragon.bas-net.by

Количественный спектральный анализ методами ЛИЭС (лазерно-искровая обычно производится с помощью построения эмиссионная спектроскопия) калибровочного графика с использованием серии стандартных образцов известного состава. График отображает связь между интенсивностью характеристических спектральных линий и содержанием искомого элемента в образце. Наиболее простая калибровочная зависимость строится в виде линейной либо логарифмической функции интенсивности одиночной спектральной линии от концентрации элемента в образце. Такой однофакторный анализ может применяться только в отсутствии наложения на аналитическую линию спектральных линий других элементов входящих в состав образца, что труднореализуемо при анализе сталей, поскольку как само железо, так и легирующие элементы (хром, марганец никель, и др.)дают широкие перекрывающиеся спектры. Кроме того, спектры, зарегистрированные при помощи современных многоканальных датчиков, содержат детальную информацию о распределении интенсивности в широком спектральном диапазоне включающую интенсивности многих спектральных линий, которая не может быть использована для уточнения результатов анализа при однофакторном подходе. Более полное использование информации, содержащейся в спектрах, может быть осуществлено за счет использования методов многофакторного анализа, таких как регрессия на латентные структуры (РЛС) [1] (PLS(R) partial least square regression) или регрессия опорных векторов (POB) [2] (SVM(R) support vector machine regression).

Эксперименты проводились на ЛИЭС спектрометре, разработанном в Институте физики НАН Беларуси. Подробное описание установки, методики регистрации и предобработки спектральных данных приведено в [3].

Для обоих типов регрессии применялись следующие методы предобработки спектров 1) нормировка на линию основы (Fe II 315,42 нм), 2) локализация спектрального диапазона вокруг линии элемента, 3) дополнение входящих данных спектром возведенным в квадрат, 4) дополнение спектром возведенным в куб. Применение каждого следующего метода предобработки осуществлялось после применения предыдущих, возведение в куб осуществлялось только по отношению к линейной части. Для РОВ использовалось линейное ядро, при быстрой проверке оно обеспечило лучшие результаты по сравнению с другими типами ядер (сигмоидальным, радиальным и полиномиальным).

Результаты проверки для обоих методов приведены в таблице 1. В целом РЛС и РОВ схоже ведут себя по отношению к различным методикам предобработки спектров.

Как для первого метода, так и для второго локализация спектрального диапазона дала наибольший вклад в уменьшение среднеквадратичной ошибки (СКО) проверочных образцов, а добавки нелинейных членов улучшают результаты для тех элементов, у которых в анализируемой области спектра находятся атомные линии (медь, никель, кремний, алюминий, молибден, ванадий), для которых можно ожидать более высокого уровня самопоглощения. На нелокализованных спектрах некоторое преимущество имеет РОВ, демонстрирующая лучшие результаты для всех элементов, однако после локализации аналитического диапазона для всех элементов кроме молибдена лучшие результаты показывает РЛС. Следует также отметить, что при построении модели РОВ количество опорных векторов в конечных решениях явно не задается и при выбранных величинах параметров C=1 и v = 0,1 количество векторов в конечном решении существенно превосходит число факторов в моделях РЛС.

Таблица 1. Среднеквадратичное отклонение анализа содержания элементов (%) по проверочным образцам для РЛС и РОВ в зависимости от методики предобработки данных.

Элеме нт	Исходный спектр		Нормирован ие на линию основы		Локализаци я		Добавка квадратов		Добавка кубов	
	РЛС	POB	РЛС	POB	РЛС	POB	РЛС	POB	РЛС	POB
Si	0,59	0,27	0,62	0,24	0,13	0,18	0,11	0,12	0,1	0,1
Mn	0,072	0,077	0,074	0,044	0,063	0,067	0,044	0,036	0,043	0,045
Cr	0,069	0,094	0,054	0,087	0,056	0,065	0,057	0,068	0,19	0,066
Ni	0,36	0,23	0,4	0,22	0,28	0,38	0,15	0,23	0,11	0,15
V	0,033	0,02	0,033	0,021	0,026	0,029	0,015	0,028	0,03	0,038
Mo	0,16	0,061	0,16	0,049	0,062	0,057	0,048	0,039	0,044	0,034
Ti	0,024	0,028	0,023	0,041	0,015	0,021	0,014	0,025	0,022	0,029
Cu	0,19	0,22	0,17	0,19	0,051	0,098	0,049	0,064	0,034	0,049
Al	0,11	0,073	0,11	0,082	0,034	0,046	0,027	0,042	0,029	0,044

- [1] C.R. Ytsma. Accuracies and detection limits of major, minor, and trace element quantification in rocks by portable laser-induced breakdown spectroscopy. / C.R. Ytsma, C.A. Knudson, M. Darby Dyar, A.C. McAdam, D.D. Michaud, L.M. Rollosson // Spectrochimica Acta B – 2020. – V. 171. – 105946.
- [2] Jianhong Yang. A laser induced breakdown spectroscopy quantitative analysis method based on the robust least squares support vector machine regression model / Jianhong Yang, Cancan Yi Jinwu Xu, Xianghong Ma // J. Anal. At. Spectrom. – 2015. – V. 30, – P. 1541-1551
- [3] Бельков М.В. Предобработка лазерно-искровых эмиссионных спектров низколегированных сталей и чугунов при анализе с использованием регрессии на латентные структуры. / Бельков М.В., Кирис В.В., Кацалап К.Ю. // Журнал прикладной спектроскопии. 2022. Т. 89. С. 782-788.

УДК 535.33/.34; 535.37; 54.057

В. В. Ковгар¹, М. З. Зиятдинова², Н. В. Варапай¹

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА УЪ-СОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ И ОКСИФТОРИДНЫХ СТЕКОЛ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>v.kouhar@ifanbel.bas-net.by</u>

² Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, пл. Миусская, 9, 125047 Москва, Россия

Легированные иттербием оптические материалы используются в качестве активной среды ИК-лазеров и усилителей благодаря простой структуре уровней ионов Yb³⁺ с энергетической щелью ~ 10000 см⁻¹, малым стоксовым потерям, отсутствию кроссрелаксационного тушения люминесценции и наведённого поглощения, а также возможности накачки мощными полупроводниковыми лазерами [1, 2]. При соактивации таких материалов рядом иных редкоземельных ионов, они могут быть использованы для визуализации ИК-излучения, либо его генерации. Вместе с тем, несмотря на продолжительный период исследования и использования, «спектроскопический потенциал» Yb-содержащих оптических материалов далёк от исчерпания.

Целью данной работы являлось исследование влияния фторирования на спектрально-люминесцентные свойства Yb-содержащих иттрий-алюмоборатных стекол.

Исследуемые образцы были синтезированы методом плавления. Плавку осуществляли в платиновых тиглях в электрических лабораторных печах сопротивления с SiC нагревателями на воздухе в течение часа при температуре $T_{\text{синт}} = 1480 \,^{\circ}\text{C}$. Фтор вводился в стекло путём частичного замещения в шихте оксида иттербия на фторид при сохранении идентичной концентрацией оксида иттербия, дополнительные работы по обезвоживанию помимо фторирования (F⁻ замещает примесные OH⁻) из-за относительно малых объемов варок не проводились. Спектры поглощения синтезированных стёкол записывались на спектрофотометре Cary-500 (США-Австралия) (разрешение в голубой области спектра ~ 0,05 нм), а спектры люминесценции – на спектрофлуориметре Fluorolog-3 (США). Все спектральные измерения выполнены при температуре $T = 298 \, \text{K}$.

Исследование спектров поглощения синтезированных стекол показало, что при концентрации Yb₂O₃ 0,1 и 1,0 мол. % (по расчету) до и после фторирования практически не наблюдается каких-либо отличий между полосами поглощения указанных образцов. При введении в стекло 5,0 мол. % оксида иттербия (III) фторирование приводит к увеличению коэффициента поглощения в переходе ${}^{2}F_{7/2} \rightarrow {}^{2}F_{5/2}$ ионов Yb³⁺ (см. рисунок 1 *a*). Показано, что для всех фторированных образов фиксируется уменьшение значения поглощения в области основного колебания ОН⁻-групп (см. вставку на рисунке 1 *a*).

Сравнение спектров люминесценции Yb-содержащих оксидных и оксифторидных стекол при длине волны возбуждения 976 нм показало, что фторирование для образцов с концентрацией оксида иттербия (III) 0,1 мол. % не приводит к каким-либо изменениям положения и интенсивности люминесценции в полосе ${}^{2}F_{5/2} \rightarrow {}^{2}F_{7/2}$. При увеличении концентрации оксида иттербия до 1,0 мол. % фторирование приводит к снижению

интенсивности люминесценции, при этом для образцов с концентрацией 5,0 мол. % оно увеличивает интенсивность люминесценции ионов Yb^{3+} в ИК области спектра (рисункок 1 δ).





Рисунок 1 – Спектры поглощения (*a*) и люминесценции (б) стёкол состава (мол. %): *1* – 0,1YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃; *2** – 0,1YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃– 60,0B₂O₃+F; *3* – 1,0YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃; *4** – 1,0YbO₃–9,0YO₃– 30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃+F; 5 – 5,0YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃; 6* – 1,0YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃

Стоит отметить, что при возбуждении исследуемых образцов на длине волны 976 нм (мощность ~ 0,3 мВт) наблюдается дополнительная полоса кооперативной люминесценции от парных Yb–Yb-центров с максимумом при $\lambda \approx 490$ нм. При этом повышение концентрации иттербия и фторирование приводит к увеличению её интенсивности.

Отмеченные изменения интенсивности люминесценции можно объяснить тем, что для образца состава (мол. %) 1,0YbO₃–9,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃ фторирование приводит к разрыву связей Yb–O–B–O–Yb (кислород частично замещается фтором), что может сопровождаться уменьшением минимального расстояния между активаторами и, как следствие, повышением потерь на кооперативную люминесценцию ионов Yb³⁺ и, возможно, облегчением фотовосстановления Yb³⁺ до Yb²⁺. В тоже время для образца состава (мол. %) 5,0YbO₃–5,0YO₃–30,0Al₂O₃–60,0B₂O₃ доля разорванных связей незначительна, что не приводит к заметному снижению интенсивности люминесценции. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф21PM-011), а также Российского фонда фундаментальных исследований (грант 20-53-04006 Бел_мол_а) и Министерства науки и высшего образования России (FSSM-2020-0003).

[1] Reversible photo-darkening and resonant photo-bleaching of Ytterbium-doped silica fiber at in-core 977-nm and 543-nm irradiation / A.D. Guzman Chavez [et al.] // Laser Phys. Lett. – 2007. – Vol. 4. – P. 734–739.

[2] 56-fs diode-pumped SESAM mode-locked Yb: YAl₃(BO₃)₄ laser / Huang-Jun Zeng [et al.] // Opt. Expr. -2023. - Vol. 31, No 6. - P. 10617–10624.

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук, А. М. Сохибова, А. Ю. Шакель

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ СПЕЦИФИЧЕСКОЙ СОЛЬВАТАЦИИ ПРОТОНИРОВАННОЙ И ДЕПРОТОНИРОВАННОЙ ФОРМ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ КОРРОЛОВ

Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь m.kruk@belstu.by

Корролы представляют собой сокращенные макроциклические соединения, поскольку в по сравнению с порфиринами в макроцикле отсутствует один из C_m атомов углерода и, соответственно, два соседних пиррольных фрагмента соединены C_a-C_a связью. В макроцикле корролов содержатся три пиррольных и одно пирролениновое кольцо, при этом пиррольный фрагмент донирует в π -электронную систему макроцикла на один электрон больше, чем пирролениновый, и, таким образом, компенсирует уменьшение количества *п*-электронов из-за отсутствия одного С_m-атома. В результате макроцикл коррола содержит 26 π-электронов, поэтому правило Хюккеля удовлетворяется и молекулы корролов в основном электронном состоянии являются ароматическим соединениями. Следует отметить, что в результате наличия в ядре макроцикла свободных оснований корролов трех протонов, они имеют дополнительные особенности. Во-первых, стерические взаимодействия трех протонов в ядре макроцикла приводят к нарушению его планарности даже при отсутствии любых других возмущающих факторов [1]. Во-вторых, свободные основания коррола всегда существуют в виде конформеров – NH-таутомеров, отличающихся расположением трех протонов в асимметричном тетрапиррольном макроцикле. Сокращение размеров ядра макроцикла и формирование непланарной конформации тетрапиррольного макроцикла приводит к существенным отличиям в кислотно-основных равновесиях свободных оснований корролов, а также к значительному усилению межмолекулярных взаимодействий, поскольку иминные атомы азота в результате поворота пиррольных колец относительно средней плоскости макроцикла и экспонируются пирамидализации В раствор, И, таким образом вероятность межмолекулярных контактов существенно увеличивается по сравнению с порфиринами [2]. Возрастание реакционной способности NH групп в свободных основаниях порфиринов с неплоским строением макроцикла привело к формулировке концепции активной NH связи, которая использовалась для объяснения особенностей кислотно-основных равновесий свободных оснований корролов в растворах [3].

Свободные основания корролов способны к формированию депротонированной формы в полярных апротонных растворителях [4]. В настоящей работе нами исследованы кислотно-основные равновесия свободного основания 2,3,7,8,12,13,17,18-октаалкилкоррола (далее – Н₃ОАлкК) в диметилформамиде (ДМФА) при добавлении кислоты (H₂SO₄) либо основания (ДБУ – 1,8-диазабицикло[5.4.0]ундец-7-ен) и влияние строения сольватной оболочки на спектрально-люминесцентные и фотофизические характеристики его протонированной и депротонированной форм. Основные результаты измерений суммированы в нижеприведенной таблице.

Форма	Раствор	B_x/B_y ,	Qx(0,0)/	λ _{фл} макс,	$\Phi_{\phi\pi}$ ·10 ²
		HM	Q _y (0,0), нм	HM	
Н ₃ ОАлкК	ДМФА	410/398	612/593	617/598	14,2
Н ₂ ОАлкК-	ДМФА+ДБУ	425/417	595/577	604	32,0
Н ₂ ОАлкК-	ДМФА+H ₂ SO ₄ +ДБУ	424/417	595/577	602	25,0
Н4ОАлкК+	ДМФА+H ₂ SO ₄	417 плечо/411	604/581	623	3,5
Н4ОАлкК+	ДМФА+ДБУ+Н ₂ SO ₄	417 плечо/411	604/581	625	4,4

Таблица. Спектрально-люминесцентные и фотофизические характеристики H₃OAлкК и его протонированной и депротонированной форм в ДМФА (для H₃OAлкК числитель и знаменатель содержат характеристики T1/T2 таутомеров).

Анализ представленных результатов показывает, что при циклических кислотноосновных превращениях под воздействием кислот либо оснований формируются протонированная либо депротонированная формы, спектры поглощения которых не зависят от того, каким образом эти формы были получены. Однако в нижнем возбужденном синглетном S₁ состоянии отмечаются сдвиги полос в спектрах флуоресценции, указывающие на то, что в сольватной оболочке депротонированных молекул содержатся кислоты (анионы кислотных остатков), а в сольватной оболочке протонированных молекул содержатся слабо связанные молекулы ДБУ. Результаты измерения квантового выхода флуоресценции $\Phi_{\phi\pi}$ показывают, что его величина существенно зависит строения сольватной оболочки. от Формирование депротонированной формы H₂OAлкK⁻ сопровождается планаризацией макроцикла и, следовательно, уменьшением вероятности безызлучательных внутримолекулярных переходов, приводящей к росту величины $\Phi_{\phi\pi}$ до 0,32 по сравнению со свободным основанием ($\Phi_{\phi\pi} = 0,142$). Однако, наличие анионов SO₄⁻ в сольватной оболочке депротонированной формы приводит к тушению флуоресценции из-за усиления спинорбитального взаимодействия (эффект внешнего тяжелого атома) и величина Фал снижается до 0,25. Включение молекул ДБУ в сольватную оболочку протонированной формы Н4ОАлкК⁺, напротив, приводит к возрастанию величины квантовго выхода флуоресценции Ффл до 0,044. Предполагается, что в данном случае молекулы ДБУ образуют слабые водородные связи с NH группами пиррольных колец, что препятствует вовлечению валентных NH колебаний в процессы безызлучательной внутримолекулярной дезактивации S₁ состояний.

- [1] Kruk M. M. Molecular structure and conformation of free base corroles / M.M. Kruk, D.V. Klenitsky, W. Maes // Macroheterocycles. 2019. Vol. 12. P. 58 67.
- [2] Senge M. O. Conformational control of cofactors in nature the influence of proteininduced macrocycle distortion on the biological function of tetrapyrroles / M. O. Senge, S. A. MacGovan, J. O'Brien // Chem. Commun. – 2015. – Vol. 51. – P. 17031–17063.
- [3] Березин Д. Б., Каримов Д. Р., Кустов А. В. Корролы и их производные: синтез, свойства, перспективы практического применения. Москва: ЛЕНАНД 2018. 304 с.
- [4] Крук Н. Н. Сольватохромия свободных оснований корролов / Н. Н. Крук // Журн. прикл. спектр. 2022. Т. 89. С. 455 462.

УДК 535.37

М. В. Корольков¹, И. А. Ходасевич¹, А. С. Пиотух¹, А.С. Грабчиков¹, Е. В. Колобкова², Д. С. Могилевцев¹

ВЕРИФИКАЦИЯ ЛИНИЙ В СПЕКТРАХ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ФТОРФОСФАТНЫХ СТЁКОЛ, ДОПИРОВАННЫХ ИОНАМИ ИТТЕРБИЯ И ТУЛИЯ, ПО СТЕПЕНИ НЕЛИНЕЙНОСТИ ПРОТЕКАЮЩИХ АП-КОНВЕРСИОННЫХ ПРОЦЕССОВ.

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь ² Университет ИТМО, Санкт Петербург, РФ <u>m.korolkov@dragon.bas-net.by</u>

Анализу нелинейности процессов ап-конверсионного (АК) преобразования излучения в средах допированных редкоземельными ионами (РЗИ) посвящено не мало теоретических и экспериментальных работ. Такие исследования порой позволяют прояснить динамику протекающих процессов и внести определенную ясность в спектры ап-конверсионной люминесценции (АКЛ) [1].

В данной работе исследовалась ап-конверсионная люминесценция фторфосфатного стекла (АКЛФС) допированного РЗИ иттербия Yb³⁺ и тулия Tm³⁺ в стационарном режиме возбуждения. Возбуждение образцов, осуществлялось пучком непрерывного излучения диодного лазера МЛ151-980 фирмы Милон (РФ) с волоконным выводом излучения мощностью до 2 Вт. На выходе оптического волокна пучок излучения с длиной волны $\lambda_{\rm p} \approx$ 975 нм фокусировался объективом в перетяжку с плотностью мощности до 12.4 кВт/см². В перетяжку вводился исследуемый образец фторфосфатного стекла содержащего ионы редкоземельных элементов (Yb³⁺ и Tm³⁺) в той либо иной концентрации. Излучение лазера J_р возбуждало ионы иттербия и от них передавалось на ионы тулия [2]. Излучение АКЛФС вводилось в оптическое волокно под углом 90 градусов к направлению распространения пучка возбуждения и направлялось в спектрометр. На входе в волокно спектрометра стеклянный фильтр, подавлявший возбуждающее излучение и устанавливался пропускавший излучение видимого спектрального диапазона. Спектр АКЛФС регистрировался спектрометром S-100 фирмы Солар ЛС (РБ).

На рисунке 1 (а, в, д, ж) представлены четыре основные фрагмента «видимой» части спектра АКЛФС для одной пары концентраций (Tm 0.1%, Yb 10%). На каждом из рисунков мы видим, как минимум два перекрывающиеся фрагмента спектра АКЛ, которые могут соответствовать процессам с разной степенью нелинейности по интенсивности возбуждающего излучения. Степень нелинейности оценивается по наклону *n* кривых $J_{AKЛ} = J_{AKЛ} (J_p)$ в двойном логарифмическом масштабе, как на рис. 1(б, г, е, з)). Поясним проведенный нами анализ на примере рисунков 1(а, б). На рис.1(а) представлен фрагмент спектра в области 330-360нм. Видны два перекрывающихся спектра, которые могут соответствовать переходам ${}^{1}I_{6} - {}^{3}F_{4}$ и ${}^{1}D_{2} - {}^{3}H_{4}$. Для возбуждения ${}^{1}I_{6}$ требуется 975 нм – как минимум 4 фотона. На рис.1б видно, что в диапазоне накачки от J_{p1} до J_{p2} (соответствующих мощностям лазера 653 мВт и 1109 мВт и токам 1300 мА и 2000 мА) наклон кривых *n*(340нм) ≈ 4.3 , *n*(345нм) ≈ 4.3 *n*(360нм) ≈ 3.5 и *n*(365нм) ≈ 2.6 , что подтверждает предполагаемые АК



Рисунок 1 – Зависимость АКЛ от интенсивности возбуждения (J_p) и длины волны ($\lambda_{aкл}$).

процессы 5-ти фотонного возбуждения перекрывающихся состояний ${}^{1}I_{6}$, ${}^{3}P_{0}$, ${}^{3}P_{1}$ и 4-х фотонного возбуждения состояния ${}^{1}D_{2}$. Аналогичный анализ проведен на основании рис.1 (г), (е), (з) для спектров АКЛ, представленных, соответственно, на рис.1(в), (д), (ж), а также для ряда других концентраций РЗИ тулия и иттербия.

- [1] Pollnau M., et al. Power dependence of upconversion luminescence in lanthanide and transition-metal-ion systems. // Phys. Rev. B 2000. V. 61. P. 3337.
- [2] Kolobkova E., et al. Cooperative Energy Transfer as a Probe of Clustering in Yb³⁺ Doped Fluoroaluminate Glasses. // J. Lum. – 2023. – V. 257. - P. 119755.

УДК 535

А. О. Негриенко, В. В. Кабанов

ОБРАБОТКА И УПРАВЛЕНИЕ ВОЛНОВЫМ ФРОНТОМ ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА МЕТОДОМ АДАПТИВНОЙ ЦИФРОВОЙ ГОЛОГРАФИИ

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.nehryienka@dragon.bas-net.by</u>

В работе рассматривается эффективность цифрового анализа, обработки и управления волновым фронтом лазерного пучка методом адаптивной цифровой голографии (АЦГ) с экспериментальной апробацией на АЦГ-системе с обратной связью [1]. Обсуждаются особенности Фурье-анализа и интерпретации амплитудных и фазовых портретов оцифрованных интерференционных картин (ИК), с учетом несовершенства оптико-электронных компонентов и системы в целом (размеры дискретизации сигнала, чувствительность к микро-деформациям и точности юстировки, особенности цифровой записи и обработки ИК, образованных лазерными пучками с широким диапазоном яркости и сопутствующим спекл-шумом). Рассмотрены способы корректного решения обозначенных проблем и обсуждаются результаты их экспериментальной реализации. Сформулированы основные критерии построения эффективной АЦГ-системы.

С помощью Фурье-анализа ИК, взаимодействующих опорного и объектного лазерных пучков, записанной на экспериментальной установке АЦГ-системы, работающей в пассивном режиме с замещением пространственного модулятора света (ПМС) плоским зеркалом, были продемонстрированы особенности проявления их структуры. В качестве исходного был использован коллимированный лазерный пучок одномодового источника с гауссовым профилем распределения интенсивности, линейной поляризацией 0,99, $\lambda = 532$ нм. Представленный на Рис. 1а фазовый портрет, выделенного фурье-образа плюс первого порядка I_+ исходной ИК, характеризует поведение волнового фронта исходной волны. Амплитудный портрет (Рис. 2, сечение плоскостью y = 4) по сути является голограммой, в принципе, позволяющей восстановить объектную волну без помех, обусловленных присутствием в спектре исходной ИК нулевого компонента взаимодействующих волн.

Корректировка высокочастотных помех, сгруппированных вблизи фурье-образов плюс/минус первого порядков $I_{+/-}$, посредством выделения в матрице частотного спектра ячейки, соответствующей несущей частоте $[k(x_{\pm 1}), k(y_{\pm 1})]$, и последующей фильтрации по заданному алгоритму, иллюстрируется на рисунках 1, 2. При высокой степени фильтрации, $N_i/N_0 \leq 0.2$ относительная вариация фазы стремится к пределу $\Delta V_{np} \approx 0.24$ от своего максимального значения, $\Delta V_0 = 1$ в отсутствии фильтрации, что, характеризует реальную плоскостность волнового фронта исходного лазерного пучка с учетом некоторых факторов, характеризующих АЦГ-систему. Эффективность фильтрации высокочастотных помех, обусловленных, например, спекл-шумом, в области локализации фурьеобраза плюс первого порядка I_+ , можно оценить из сравнения фазовых и амплитудных портретов на рисунках 1, 2 и численных оценок, приведенных в подписях под ними.



Рис. 1. Фазовый портрет I_+ исходной ИК, восстановленный а) без фильтрации и б) с фильтрацией; в) сравнение поведений фазы для случаев а) и б) в сечении плоскостью x=4. Максимальный разброс и относительная вариация фазы: а) $\Delta W = 3,09$ рад, $\Delta V_0 = 1$ и б) $\Delta W = 2,49$ рад, $\Delta V = 0,24$.

Активный режим работы АЦГ-системы, с ПМС вместо зеркала, демонстрирует (рис. 3) возможности управления волновым фронтом лазерного пучка. В этом случае, оцифрованная на ПЗС-камере ИК может быть проанализирована и обработана по заданному алгоритму в цепи обратной связи. Далее, с помощью сгенерированной на ПМС модифициро-



Рис. 2. Сечение плоскостью y = 4 амплитудного портрета, выделенного фурье-образа плюс первого порядка I_+ исходной ИК: а) без фильтрации и б) с фильтрацией $N_i/N_0 = 0.08$.

ванной голограммы можно воспроизвести лазерный пучок с откорректированными параметрами и затем, посредством анализа зафиксированной на ПЗС-камере ИК, вновь оценить результаты заданной корректировки. Рис. 3 иллюстрирует эффективность работы АЦГ-системы в активном режиме управления волновым фронтом лазерного пучка.



Рис. 3. Фазовый портрет I_+ ИК с участием объектной волны, сгенерированной на ПМС голограммой: а) I_+ , без фильтрации; б) I_- с фильтрацией, $N_i/N_0 = 0,25$; в) сравнение поведений фазы для случаев а) и б) в сечении плоскостью x=4. Максимальный разброс и относительная вариация фазы: а) $\Delta W = 10,40$ рад, $\Delta V_0 = 1$ и б) $\Delta W = 2,76$ рад, $\Delta V = 0,72$.

Отметим, что для оптимального воспроизведения заданной структуры светового пучка важен компромисс между степенью фильтрации и частотным контентом.

[1] Негриенко А. О., Согласование масштабов при записи, обработке и воспроизведении цифровых голограмм / А. О. Негриенко, В. В. Кабанов // Материалы XIII МНТК Квантовая электроника, Минск. – 2021. – С. 64. УДК 535.37; 535.354; 535.343

М. В. Пархоц¹, Н. В. Ивашин¹, С. В. Лепешкевич¹, Л. В. Мкртчян², А. А. Закоян², А. Г. Гюльханданян², Т. Е. Сеферян², Г. В. Гюльханданян², Б. М. Джагаров¹

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КАТИОННОГО ПИРИДИЛПОРФИРИНА В КОМПЛЕКСЕ С ФОЛИЕВОЙ КИСЛОТОЙ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Беларусь <u>m.parkhots@dragon.bas-net.by</u> ²Институт биохимии НАН Армении, ул. П.Севака, 5/1, 0014, Ереван, Армения gvg536898@gmail.com

Соединения порфиринового ряда в настоящее время широко используются как флуоресцентной диагностики и сенсорики, так и в качестве целей для фотосенсибилизаторов (ФС) для фотодинамической терапии (ФДТ). Особое внимание катионным пиридилпорфиринам, исследуется уделяется ИХ потенциал В инактивации микроорганизмов. фотодинамической В отличие ОТ анионных порфиринов, катионные имеют большое сродство к ДНК и способны запускать апоптотический механизм гибели клетки. При этом действие метилпиридильных порфиринов не ограничивается простым разрушением опухолевых клеток. Известно, катионный тетраметилпиридилпорфирин способен подавлять что активность теломеразы и, тем самым, сдерживать рост раковых клеток. Тем не менее, большой проблемой остается небольшая селективность накопления ФС в опухолевых клетках. Одним из способов преодоления данного недостатка является использование векторных носителей, в частности фолиевой кислоты (ФК), которая представляет особый интерес из-за ее низкой стоимости, высокой стабильности при хранении и неиммуногенности.

В данной работе представлены результаты исследования флуоресцентных характеристик катионного *мезо*-тетра-[N-оксиэтил-4-пиридил]порфирина (TOEt4PyP) в комплексе с фолиевой кислотой. Для получения комплексов раствор порфирина титровали раствором ФК. Концентрацию ФК варьировали в пределах 0 - 630 мкМ. Все исследования проводились в 0.1 М Na-фосфатном буфере pH 7.4.

Установлено, что в буферном растворе при рН 7.4 ТОЕt4РуР образует нековалентные комплексы с фолиевой кислотой. При образовании комплекса происходит смещение полос поглощения порфирина в длинноволновую область спектра на 9 – 13 нм. Обнаружено, что при взаимодействии TOEt4PyP с фолиевой кислотой образуются несколько типов комплексов с разными характеристиками возбужденных состояний. Большая часть комплексов не флуоресцирует. Примерно 5% образовавшихся комплексов являются флуоресцирующими, причем время жизни синглетного возбужденного S1-состояния TOEt4PyP в таком комплексе в два раза превышает время жизни S1-состояния свободного порфирина. Спектр флуоресценции TOEt4PyP в комплексе с фолиевой кислотой имеет более структурированный вид (рисунок), свидетельствующий о существенном затруднении вращения пиридильных колец порфирина при связывании с фолиевой кислотой.



Рисунок - Нормированные спектры флуоресценции TOEt4PyP с различной концентрацией фолиевой кислоты, 1- [ФК] = 0, 2 - [ФК] = 50 мкМ, 3 - [ФК] = 630 мкМ

Были также проведены квантово-химические расчеты структуры и электронных спектров поглощения возможных комплексов порфирина с фолиевой кислотой в водном растворе (в рамках модели поляризуемого континуума, РСМ метод). Установлена структура ряда комплексов, образованных за счёт кулоновских взаимодействий между положительно заряженными боковыми пиридильными кольцами порфирина и отрицательно заряженными карбоксильными группами фолиевой кислоты. Показано, что образование данных комплексов не приводит к существенному смещению полос поглощения порфирина. Установлено, что в водном растворе взаимодействие TOEt4PvP с фолиевой кислотой может осуществляться также по центру порфиринового макроцикла. Образование одного из таких комплексов происходит за счет водородных связей С=О группы птеринового фрагмента ФК (ПФФК) с пиррольными кольцами TOEt4PyP, а также за счет $\pi\pi$ взаимодействия между порфириновым макроциклом и ПФФК. Для такого комплекса характерно усиление искажения макроцикла по типу седла, сопровождающееся увеличением наклона относительного него пиридильных колец, и, как следствие, расширение π системы порфирина. Такие структурные изменения приводят к смещению рассчитанного электронного спектра поглощения в длинноволновую область на 7-10 нм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Для комплекса TOEt4PyP с ПФФК рассчитаны энергии двух возможных состояний с разделением заряда (CT), соответствующих переносу электрона с птеринового и р-аминобензоатного фрагментов ФК на порфириновый макроцикл. Показано, что во втором случае энергетический уровень СТ состояния лежит ниже уровня локально возбужденного ππ состояния, что позволяет объяснить тушение флуоресценции порфирина при взаимодействии с ФК.

Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ № Ф21АРМ-014.

УДК 539.22

Г. А. Пицевич, Е. Н. Дюбкина, П. В. Еременко

НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ N4OYBDHA

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь pitsevich@bsu.by

Новые жидкокристаллические устройства с улучшенными электрооптическими свойствами активно разрабатываются в последнее время. Одно из перспективных направлений – сегнетоэлектрические жидкие кристаллы. Хиральные жидкие кристаллы, образующие смектическую фазу С, являются подходящей группой соединений для этих целей. С другой стороны, известно, что добавление наночастиц в жидкий кристалл вызывает, как правило, изменение его ориентации, уменьшение фазовой задержки и ускорение оптического отклика с увеличением их концентрации. На этом основании было синтезировано оптически активное соединение N4OYBDHA, содержащее четвертичную аммонийную группу, и исследованы его структурные, конформационные и спектральные характеристики [1]. Расчеты выполнялись в рамках формализма теории функционала плотности с использованием полноэлектронных двух- и трехкратно валентно-расщепленных базисов Дюннинга сс-рVDZ и сс-рVTZ и гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP. Целью настоящей работы являлось исследование нелинейных оптических характеристик молекулы N4OYBDHA, а также установление зависимости значений рассчитываемых величин от 1) полноты используемых базисных наборов, 2) наличия алифатических цепочек, 3) конформационного строения молекулы. Как известно, нелинейные оптические свойства молекул связаны с обобщением понятия энергии их взаимодействия с сильным электрическим полем, что отражено в следующей формуле:

 $\hat{\mathbf{E}} = \mu_i E_i + 1/2! (\alpha_{ii} E_i E_i) + 1/3! (\beta_{iik} E_i E_i E_k) + 1/4! (\gamma_{iikl} E_i E_i E_k E_l) + \cdot (1)$

В формуле (1) Ê – полная энергия взаимодействия молекулы с электрическим полем, $E_i - i$ – компонента напряженности электрического поля, $\mu_i - i$ – компонента дипольного момента молекулы, α_{ii} - соответствующий элемент тензора поляризуемости соответствующий элемент кубического тензора первой молекулы, β_{iik} гиперполяризуемости молекулы, γ_{iikl} - соответствующий элемент четверичного тензора второй гиперполяризуемости молекулы. Используя уровень теории B3LYP/cc-pVTZ для ряда конформеров молекулы N4OYBDHA были рассчитаны компоненты тензора поляризуемости и некоторые его инварианты: усредненный след тензора поляризуемости - а и его анизотропия – b. Результаты расчетов представлены в Табл.1.

Таблица 1 Рассчитанные на уровне теории B3LYP/cc-pVTZ значения компонент и инвариантов тензоров поляризуемости конформеров I-IV молекулы N4OYBDHA. Результаты представлены в атомных единицах.

Конформер	а	b	α_{xx}	α_{xy}	$\alpha_{_{xz}}$	$\alpha_{_{yy}}$	$\alpha_{_{yz}}$	α_{zz}
1	425.4	279.0	336.8	6.9	10.3	347.4	70.3	592.1
II	424.1	238.3	439.2	17.3	118.1	349.5	-4.9	483.5
III	424.5	271.2	473.6	25.1	136.9	344.6	16.4	455.2
IV	422.9	197.9	413.5	18.9	86.4	360.7	-25.9	494.8

На уровне теории B3LYP/cc-pVTZ для конформеров молекулы N4OYBDHA были компонент кубического также рассчитаны значения тензора первой гиперполяризуемости и некоторые его инварианты. Расчеты показывают, что компоненты и инварианты тензора поляризуемости и кубического тензора первой гиперполяризуемости слабо зависят от структурных трансформаций при переходе от одного конформера к другому. С учетом аналогичного поведения компонент дипольного момента молекулы можно утверждать, что конформационные переходы не должны сколько ни будь существенным образом сказываться на электрооптических свойствах перспективных ЖК материалов, созданных на основе анализируемой молекулы.

Выполнены также обширные расчеты, позволяющие оценить зависимость рассчитываемых нелинейных оптических свойств молекулы N4OYBDHA от полноты базисных наборов. С этой целью были использованы 7 базисных наборов степень полноты которых нарастала в следующем ряду STO-3G, 3-21G, 6-311G, cc-pVDZ, Aug-cc-pVDZ, cc-pVTZ, 6-311++G(d,p). Результаты расчетов компонент тензора поляризуемости и некоторых его инвариантов представлены в Табл.2

Таблица 2 Значения компонент тензора поляризуемости и некоторых его инвариантов, рассчитанные с использованием ряда базисных наборов и DFT метода B3LYP. Все результаты представлены в атомных единицах.

Базисный набор	а	b	α_{xx}	α_{xy}	$\alpha_{_{xz}}$	$\alpha_{_{yy}}$	α_{yz}	α_{zz}
STO-3G	222	160	177	-9	-56	186	16	304
3-21G	363	248	293	-9	-76	295	21	500
6-311G	396	251	324	-7	-69	322	19	541
cc-pVDZ	404	267	322	-8	-65	326	24	562
Aug-cc-pVDZ	417	271	331	-7	-64	341	24	571
cc-pVTZ	425	279	337	-7	-70	347	30	592
6-311++G(d,p)	427	265	352	-8	-65	345	22	584

Кроме того, аналогичные расчеты были выполнены для компонент и некоторых инвариантов кубического тензора первой гиперполяризуемости молекулы N4OYBDHA.

[1] Pitsevich G. Structure, IR and Raman spectra of the optically active quaternized ammonium salt – promising object for liquid crystal systems. / G. Pitsevich, I. Doroshenko, M. Shundalau, L. Rutkovskaya, A. Lugovski, G. Gusakov, V. Lapanik // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2022. – V. 748. – P. 73. УДК 543.42:535.8

С. Н. Терехов, Н. В. Ивашин

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ Ni-OKTAAЛКИЛПОРФИРИНОВ В ОСНОВНОМ И ФОТОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЯХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь s.terekhov@ifanbel.bas-net.by

Для Ni-комплексов порфиринов, как в твёрдом состоянии, так и в растворе, характерно наличие конформеров с неплоскостным искажением макроцикла [1,2]. Исследование их фотофизических и спектроскопических проявлений представляет интерес в связи *с* обнаруженными неплоскостными деформациями макроциклических аналогов в белках.



Рис.1 Структура исследуемых соединений

С использованием DFT методов проведены расчеты структуры и колебаний для 4-координированного Ni-октаэтилпорфирина (Ni-OЭП) (рис. 1) в основном и в ряде возбужденных состояний (d, d) и (π , d) типа. Показано, что только состояния, соответствующие электронным конфигурациям (d_{xy}, d_{x2-y2}) и (d_{z2}, d_{x2-y2}) являются устойчивыми. Рассчитанные частоты колебаний подтверждают отнесение спектров РКР 4-координированных Ni-комплексов октаалкилпорфиринов (Ni-OAП), регистрируемых при импульсном наносекундном возбуждении в режиме насыщения, к рассеянию из состояния ${}^{3}(d_{z2}, d_{x2-y2})$. Установлено, что отсутствие в кинетике релаксации энергии электронного возбуждения Ni-OAП признаков состояния ${}^{3}(\pi, \pi^{*})$ обусловлено тем, что для них, в отличие от соответствующих Cu-, Zn-, и Pd-комплексов с бОльшим ионным радиусом, в данном состоянии нет локального минимума.

Установлено, что в растворе Ni-OЭП присутствует большое количества конформеров, отличающихся величиной рифления макроцикла, что приводит к уширению линий в спектрах резонансного комбинационного рассеяния (PKP). В возбуждённом состоянии ${}^{3}(d_{z2}, d_{x2-y2})$ по сравнению с основным различие частоты колебания v₁₀ для конформеров, отличающихся по энергии на kT (~200 см⁻¹), в ~7 раз меньше, что объясняет уменьшение полуширины лини PKP v₁₀ из этого состояния.

Показано, что наблюдаемое в спектрах РКР с временным разрешением в интервале задержек 2-10 пс изменение полуширины и частоты линии v_{10} [3] может быть связано с изменением конформационного состава в процессе установления термодинамического равновесия. Отмеченные в работе [3] сдвиг частоты и уменьшение полуширины линии v_4 в стоксовой области спектра РКР не могут быть связаны с таким процессом, поскольку ее частота практически не зависит от степени рифления макроцикла. Этот вывод согласуется с отнесением поведения v_4 в стоксовой области на счёт изменения силы ангармонического взаимодействия с низкочастотными колебаниями в процессе установления термодинамического равновесия.

На примере ряда 4-координированных Ni(II)-этиопорфиринов (Ni-ЭП) и их моно-мезо-метил производных проведено экспериментальное и теоретическое исследование влияния стерического напряжения в одном из мезо-положений на структуру и частоты колебаний v_{10} , v_2 , v_3 , v_4 в спектрах PKP в основном и в возбуждённом ${}^3(d_{z2}, d_{x2-y2})$ состоянии. Показано, что переход в конфигурацию ${}^3(d_{z2}, d_{x2-y2})$ состоянии. Показано, что переход в конфигурацию ${}^3(d_{z2}, d_{x2-y2})$ состоянии.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» (Задание 1.8).

[1] Alden G. Ruffling of Nickel(II) Octaethylporphyrin in Solution. / G. Alden, B.A. Crawford, R. Doolen, M.R. Ondrias and J.A. Shelnutt // J. Am. Chem. Soc. – 1989. – V. 111. – P. 2070.

[2] Shelby M. L. Ultrafast Excited State Relaxation of a Metalloporphyrin Revealed by Femtosecond X-ray Absorption Spectroscopy / M. L Shelby, P. J. Lestrange, N. E. Jackson et al. // J. Am. Chem. Soc. -2016– V. 138. – P. 8752.

[3] Mizutani Y. Intramolecular vibrational energy redistribution and intermolecular energy transfer in the (d,d) excited state of nickel octaethylporphyrin / Y. Mizutani, Y. Uesugi, T. Kitagawa // J. Chem. Phys. – 1999. – V. 111. – P. 8950.

УДК 535.343, 535.42

И. Г. Даденков¹, А. Л. Толстик¹, И. П. Урбанович¹, Ю. И. Миксюк², К. А. Саечников²

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И ЗАПИСИ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В КРИСТАЛЛАХ СИЛИКАТА ВИСМУТА

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

dadenkov.ivan@gmail.com; tolstik@bsu.by

² Белорусский государственный педагогический университет, ул. Советская, 18, 220030 Минск, Беларусь

Фотоиндуцированные эффекты в фоторефрактивных кристаллах семейства силленитов (силикат, титанат и германиат висмута) вызывают интерес вследствие их высокой чувствительности к излучению видимой области спектра. Достигнутый в последние лва десятилетия прогресс в разработке интерференционных И голографических систем на основе фоторефрактивных кристаллов указывает на перспективность их использования в устройствах оптической памяти, системах оптической обработки световых полей в реальном времени, системах хранения и передачи информации, при создании управляемых элементов адаптивной и волноводной оптики, а также в голографической интерферометрии, включая измерения амплитуд колебаний в субнанометровом диапазоне [1, 2].

Одной из характерных особенностей фоторефрактивных кристаллов является существование многочисленных примесных и дефектных центров, имеющих различную природу возникновения и активно участвующих в процессах перераспределения носителей заряда. Исследуемый в данной работе кристалл силиката висмута относится к семейству силленитов и является широкозонным полупроводником с многочисленными донорными и акцепторными энергетическими уровнями в запрещенной зоне. При освещении кристаллов семейства силленитов в них происходит перераспределение носителей заряда по долгоживущим (секунды, часы) и короткоживущим ловушечным уровням (микро – и миллисекунды), характеристики и механизм проявления которых определяются интенсивностью и длиной волны падающего излучения [3].

Для исследования зависимости амплитудных и временных характеристик динамических голограмм и фотоиндуцированного поглощения в кристалле силиката висмута в качестве источника лазерного излучения использовался параметрический генератор, возбуждаемый третьей гармоникой Nd:YAG лазера. Параметрический генератор позволил плавно изменять длину волны генерации в диапазоне от 400 нм до 2 мкм. Зондирование записанной голографической решетки проводилось излучением гелий-неонового лазера на длине волны 632,8 нм. Была разработана оригинальная схема записи и восстановления голограмм, основанная на использовании дифракционной решетки с известным периодом и телескопической системы, фокусирующей первые порядки дифракции на исследуемый кристалл. Отличительной особенностью данной схемы является то, что при изменении длины волны менялся и угол между первыми порядками дифракции, что приводило к сохранению периода формируемой голографической решетки в исследуемом кристалле независимо от длины волны падающего излучения. Регистрация кинетики релаксации записанной голографической решетки и фотоиндуцированного изменения коэффициента поглощения проводилась при помощи двух PIN фотодиодов и цифрового осциллографа. В качестве рабочих длин волн был выбран спектральный диапазон 450 - 600 нм. Коротковолновая граница обусловлена высоким поглощением излучения в кристалле силиката висмута при приближении к длине волны, отвечающей прямым межзонным переходам. Верхняя граница выбранного диапазона обусловлена снижением дифракционной эффективности при записи голограмм в красной области спектра.

Установлены два механизма записи голографических решеток, связанных с заселением короткоживущих и долгоживущих ловушек. Показано, что вклад каждого механизма существенно зависит от длины волны лазерного излучения. В сине – зеленой области спектра (450 – 500 нм) эффективно записываются короткоживущие решетки с временм жизни порядка 100 мкс. В то же время, в красной области (550 – 600 нм) преимущественно записываются долгоживущие решетки с временем жизни порядка сотен миллисекунд – секунд. В качестве примера на рис.1 приведены характерные осциллограммы, полученные на длине волны 460 нм. Видно, что времена релаксации наведенного поглощения (фотохромный эффект) существенно превышают времена релаксации короткоживущих динамических решеток, формируемых В фоторефрактивных кристаллах силиката висмута, и существенно меньше времени релаксации долгоживущих решеток. Сказанное позволяет говорить о локальном механизме записи короткоживущих решеток и диффузионном механизме записи долгоживущих решеток.



Рисунок 1. Осциллограммы дифрагированного сигнала (снизу) и прошедшего (испытавшего наведенное поглощение) сигнала (сверху) при временных разрешениях 25 мс (а) и 500 мкс (б)

- [1] Петров М., Степанов С., Хоменко А. Фоторефрактивные кристаллы в когерентной оптике. // СПб.: Наука, 1992. 317с.
- [2] Ромашко Р. В. Адаптивная голографическая интерферометрия: техника, прогресс и приложения. // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук, 2021, № 4, С. 40–47.
- [3] I.G. Dadenkov, A.L. Tolstik, Yu.I. Miksyuk, K.A. Saechnikov. Photoinduced Absorption and Pulsed Recording of Dynamic Holograms in Bismuth Silicate Crystals // Optics and Spectroscopy. 2020. Vol. 128, No. 9. P. 1401–1406.

УДК 535.514:544.77

Л. И. Гуринович, Л. Л. Троцюк, О. С. Кулакович

Поляризация люминесценции плёнок ПВС, содержащих ориентированные наностержни Au

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>l.gurinovich@ifanbel.bas-net.by</u>

Использование поляризованного света очень востребовано в таких приложениях, как светоизлучающие жидкокристаллические дисплеи [1] и как новые поляризационноселективные маркеры для высококонтрастного детектирования [2]. Поэтому разработка эффективных источников поляризованного света представляет общий интерес в целом и для нанофотоники, и для материаловедения.

В настоящей работе исследованы люминесцентные свойства анизотропных плазмонных плёнок поливинилового спирта (ПВС), содержащих коллоидные наностержни золота (AuHC), синтезированные по методике, описанной в [3]. Анизотропия плёнок получена методом двукратного механического растягивания, описанного в работе [4]. Спектр фотолюминесценции (ФЛ) плазмонной плёнки представлен длинноволновым излучением в области пика поглощения, соответствующего продольному плазмонному резонансу AuHC в области 660-670 нм, и имеет вид широкой полосы с полушириной 57 нм и максимумом на 660 нм (рис. 1). При последовательном уменьшении длины волны возбуждения с 632 нм до 449 нм полоса ФЛ в области длин волн 600-700 нм падает по интенсивности на порядок, а её максимум смещается в коротковолновую сторону.



Рисунок 1 – Спектр ФЛ анизотропной плёнки ПВС с плазмонными наностержнями Au при возбуждении в продольном плазмонном резонансе **He-Ne-**лазером на длине волны 632 нм.

ФЛ анизотропной плёнки частично поляризована. Направление оси поляризации полосы ФЛ полностью совпадает с направлением растягивания. Это свидетельствует о том, что в плёнке получена преимущественная пространственная ориентация AuHC вдоль одного направления. Интенсивность и степень поляризации ФЛ зависит от длины волны возбуждающего излучения и изменяется относительно частоты поверхностного плазмонного резонанса. Максимальная степень поляризации достигается при длине волны возбуждения 632 нм (He-Ne-лазер) — наиболее близкой к частоте продольного плазмонного резонанса. Степень поляризации составляет 72%. Возбуждение вблизи поперечного плазмонного резонанса на 532 нм (**Nd**-лазер) даёт поляризацию 59%, а в случае вне резонансного возбуждения на 449 нм (**GaN**-лазер) – 34% (рис. 2).



Рисунок 2 – Диаграмма поляризации ФЛ плазмонной анизотропной плёнки ПВС, содержащей ансамбль частично упорядоченных наностержней Au, при λ_{возб}=632 нм в сравнении с диаграммой ФЛ плёнки в изотропном состоянии до вытягивания (а), и диаграммы поляризации ФЛ плёнки при возбуждении на длинах волн: λ_{возб}=532 нм и λ_{возб}=449 нм (б). Частичная поляризация ФЛ изотропной плёнки (~12 %) и наклон главной оси диаграмм обусловлены аппаратной функцией спектрометра.

Полученные результаты открывают возможность использования наноструктур с пространственно ориентированными AuHC в качестве высококонтрастных источников поляризованного излучения, например, в переключаемых люминофорах для подсветки ЖК-дисплеев или в качестве нетоксичных поляризованных биомаркеров для научных исследований.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ в рамках совместного белорусскокитайского проекта № Ф20ПТИ-004 на 2020 – 2022 гг.

- [1] Chang C.-H. Enhanced Photoluminescence in Gold Nanoparticles Doped Homogeneous Planar Nematic Liquid Crystals. / C.-H. Chang, R.-J. Lin, C.-L. Tien, and S.-M. Yeh // Advances in Condensed Matter Physics. – 2018. – Volume 2018. – Article ID 8720169. – https://doi.org/10.1155/2018/8720169.
- [2] Carattino A. Background Suppression in Imaging Gold Nanorods through Detection of Anti-Stokes Emission. / A. Carattino, V. I. P. Keizer, M. J. M. Schaaf, M. Orrit // Biophysical Journal. – 2016. – V. 111 (11). – P. 2492-2499.
- [3] Trotsiuk L. Plasmon-enhanced Fluorescence in Gold Nanorod-Quantum Dot Coupled Systems. / L. Trotsiuk, A. Muravitskaya, O. Kulakovich, D. Guzatov, A. Ramanenka, Y. Kelestemur, H. V. Demir, S. Gaponenko // Nanotechnology. – 2020. – V. 31 (10). – P. 105201.
- [4] Gurinovich L. I. Polarization Properties of Photoluminescence of Anisotropic Polymer Films Containing Aligned Au Nanorods and Semiconductor Nanoparticles of Various Shape. / L. I. Gurinovich, L. L. Trotsiuk, O. S. Kulakovich, N. I. Sushko, H. V. Demir, S. V. Gaponenko // Semiconductors. – 2018. – V. 52 (16). – P. 2054-2056.

УДК 53

А. И. Водчиц, И. А. Ходасевич, В. А. Орлович

ПИКОСЕКУНДНОЕ ИНФРАКРАСНОЕ ВКР В КРИСТАЛЛАХ КGW И РЬWO4

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.vodchits@dragon.bas-net.by</u>

Вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) является эффективным нелинейно-оптическим методом частотного сдвига лазерного излучения. Особый интерес представляет получение инфракрасного (ИК) излучения, используя ВКР в комбинационно-активных кристаллах. Для этой цели можно применять такие кристаллы как KGW и вольфрамат свинца (PbWO₄). Эти кристаллы характеризуются широкой полосой прозрачности (приблизительно от 330 нм до 5500 нм) и имеют сильные комбинационно-активные моды (KGW – 901 и 768 см⁻¹, и низкочастотная мода вблизи 86 см⁻¹; PbWO₄ – 901 и 323 см⁻¹) и сравнительно большие коэффициенты ВКР-усиления [1, 2].

В данной работе мы представляем результаты наших экспериментальных исследований пикосекундного ВКР в кристаллах KGW и PbWO₄ в ближнем ИК диапазоне спектра. Основная цель исследований заключалась в получении многочастотного ВКР в стоксовой области.

В экспериментах использовался пикосекундный лазер LS-2151 (LOTIS TII, Belarus). Лазер генерировал импульсы длительностью 80 пс на длине волны 1064 нм. Частота следования импульсов оставляла 15 Гц. Гауссовский лазерный пучок имел диаметр приблизительно 8 мм. Поляризация излучения была линейной (в горизонтальной плоскости). В эксперименте применялись кристаллы KGW (длиной 30 мм) и PbWO₄ (длиной 230 мм). Эти кристаллы возбуждались фокусированным лазерным пучком. Оптимальное фокусное расстояние фокусирующей линзы равнялось 25 см. Интенсивности излучения в фокальной перетяжке варьировались от 80 до 350 ГВт/см². После образцов устанавливалась коллимирующая линза. Для регистрации спектров ВКР использовался спектрометр (M150, Solar LS, Belarus), оборудованный ССD-линейкой (Hamamatsu, Japan). Спектральный диапазон регистрации составляет приблизительно 1000-2500 нм. Спектральное разрешение спектрометра – 1.25 нм.

Получено многочастотное ВКР в кристаллах КGW и PbWO₄ в ИК области спектра. Измерены спектры ВКР кристаллов для различных ориентаций их кристаллографических осей относительно вектора поляризации возбуждающего излучения. В кристалле KGW генерировалось 3-4 стоксовые компоненты ВКР и одна антистоксовая компонента на колебательных модах, в кристалле PbWO₄ – 3 стоксовые компоненты. На рисунке 1 приведен спектр ВКР кристалла KGW для случая n_p ориентации. Видно, что генерируются четыре стоксовые и одна антистоксовая компоненты ВКР с участием колебательной моды 760 см⁻¹. Кроме того, генерируются низкочастотные моды вблизи линии накачки – 86 см⁻¹ и 174 см⁻¹. Насколько нам известно в данное время мода 174 см⁻¹ обнаружена нами впервые в спектре ВКР кристалла KGW. Низкочастотные моды (фактически это интеркомбинационные линии

с участием низкочастотных и колебательных мод) обнаруживаются вблизи первой, второй и третьей колебательных стоксовых компонент. Однако, кроме моды 86 см⁻¹, новая низкочастотная мода вблизи 131-138 см⁻¹ появляется вместо моды 174 см⁻¹. Это может быть связано с различными условиями в процессе ВКР усиления этих мод. Новые низкочастотные моды, обнаруженные нами в спектре ВКР кристалла KGW, наблюдались ранее в спектрах спонтанного комбинационного рассеяния [3].



Рисунок 1. Спектр ВКР кристалла KGW.

В заключение, мы исследовали пикосекундное ВКР в кристаллах KGW и PbWO₄ в ближнем ИК диапазоне спектра. Для обоих кристаллов получено многочастотное ВКР ИК излучение на 28 длинах волн в диапазоне от 970 до 1730 нм. В случае кристалла KGW обнаружены новые низкочастотные комбинационно-активные моды. Полученные результаты могут быть использованы для создания ВКР лазеров, генерирующих многочастотное излучение в ближнем ИК диапазоне.

- Eichler H. J. Raman crystal lasers in the visible and near-infrared. / H. J. Eichler, G. M. A. Gad, A. A. Kaminskii, H. Rhee // J. Zhejlang University SCIENCE. 2003. V. 4. P. 241.
- [2] Dashkevich V. I. Raman laser based on a KGd(WO₄)₂ crystal: generation of stokes components in the 1.7-1.8 μm range. / V. I. Dashkevich, V. A. Orlovich // J. Appl. Spectrosc. – 2013. – V. 79. – P. 975.
- [3] Macalik L. Polarized infrared and Raman spectra of KGd(WO₄)₂ and their interpretation based on normal coordinate analysis. / L. Macalik, J. Hanuza, A. A. Kaminskii // J. Raman Spectrosc. – 2002. – V. 33. – P. 92.

УДК 538.958, 547.022

С. С. Ануфрик¹, С. Н. Анучин¹

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ РОДАМИНА 110 С ЦИКЛИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

¹ Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь <u>anufrick@grsu.by</u>, <u>anuchin_sn@grsu.by</u>

Внимание исследователей в настоящее время все чаще привлекает создание различных молекулярных машин и устройств на основе комплексов типа «хозяингость». Такие системы могут подвергаться разрушению и сборке под действием различных внешних воздействий, таких как облучение, изменение кислотности среды, добавление катионов металлов. Ранее были изучены комплексообразующие свойства некоторых родаминовых красителей с циклодекстрином [1,2]. В данной работе продолжены исследования систем, в которых происходят управляемые процессы образования комплексов красителей с различными молекулами-хозяевами.

Эффективность генерации жидкостных лазеров на красителях прежде всего определяется фотофизическими и фотохимическими свойствами активной среды растворами молекул красителей. В качестве растворителей обычно используются полярные спирты, преимущественно этанол и метанол [3]. Весьма перспективным растворителем является вода, которая по своим термооптическим, химическим, экономическим показателям является предпочтительной. Однако, многие красители в воде испытывают агрегацию молекул, особенно при достижении оптимальных лазерных концентраций, при которых в растворе образуются не флуоресцирующие димеры и резко снижается эффективность генерации за счет роста потерь [3]. Для устранения эффекта агрегации и димеризации необходимо защитить молекулы красителя от водной сольватной оболочки и, таким образом, снизить потери на поглощение и фотораспад. В литературе предложены различные варианты создания защитной оболочки молекул красителей путем создания комплексов «гость-хозяин» в водном растворе [1,2,4]. Наноструктурированные комплексы включения могут образовываться при смешивании комплексообразователя и красителя либо в сухом состоянии, либо в растворах или суспензиях. Приготовление комплекса включения проводилось методом термической активации в водно-этанольном растворе [4]. Предложенные комплексообразователи (у-циклодекстрин (у-CD) и кукурбит[7]урил (СВ[7])) хорошо растворяются в воде и практически не изменяют оптических свойств водно-этанольных растворов [5].

В качестве «гостя» при комплексообразовании был выбран родамин 110, который характеризуется достаточно высокой эффективностью генерации и наличием незамещённых аминогрупп, существенно уменьшающих объём молекулы. Эффективность встраивания определялась по изменениям в электронных и ИКспектрах поглощения комплексов включения красителя по сравнению с его водноэтанольным раствором.

Сравнение полученных спектров поглощения и флуоресценции показало, что при

образовании комплексов включения родамина 110 с γ-CD и CB[7], наблюдается значительное гипсохромное смещение максимумов: на ~10 нм в спектрах поглощения и на ~15 нм – в спектрах флуоресценции.

Для выяснения механизма комплексообразования родамина 110 исследовались ИК-спектры поглощения исходного красителя, γ -CD, CB[7] и их комплексов включения Анализ полученных спектров показал, что в ИК-спектре КВ родамина 110 с CB[7] не появляется новых полос, но при этом наблюдается значительное увеличение их интенсивности (в ~1,5 раза). Частоты, соответствующие родамину 110 в спектре КВ, испытывают незначительное батохромное смещение относительно своего исходного положения на 1-5 см⁻¹. Падение интенсивности линий, характеризующих валентные колебания C=O, скелетные и внеплоскостные деформационные колебания NH групп в ~1,5-2 раза по сравнению с чистым CB[7], указывает на формирование комплекса включения с родамином 110. Линия внеплоскостных деформационных колебаний группы ArC-H гликольурильных элементов CB[7] усиливает колебания полос родамина 110 в KB, соответствующие валентным колебаниям групп NH и OH. Это и рост общей интенсивности всех линий ИК-спектра KB относительно исходного красителя свидетельствует об образовании устойчивого комплекса «гость-хозяин» [6].

Родамин 110 содержит две незамещённые аминогруппы на концах цепи сопряжения ядра молекулы. Наличие незамещённых аминогрупп и остатка бензойной кислоты (карбоксифенильная группа) приводит к делокализации заряда по цепи сопряжения родаминового ядра, что значительно снижает общий pH раствора (~3,8-3,9) и усиливает взаимодействие молекулы как с гидрофобной полостью γ-CD, так и кукурбит[7]урилом. Это подтверждается коротковолновым смещением спектров поглощения и флуоресценции комплексов включения. Формирование комплексов включения, вероятно, осуществляется образованием водородных связей концевых амино- и гидроксигрупы красителя с атомами кислорода на портальной области тора для CB[7] и встраиванием аминогрупп в полость тора для γ-CD.

- [1] Ануфрик, С.С. Спектральные особенности комплексов включения родаминов с γциклодекстрином / С. С. Ануфрик, С. Н. Анучин, В. В. Тарковский // Балтийский морской форум: матер. VI Междунар. Балтийского морского форума, Калининград. 2018. – С.11-20.
- [2] Ануфрик, С.С. Спектрально-генерационные свойства и механизм формирования интеркалированных нанокомплексов краситель-циклодекстрин / С.С. Ануфрик, С.Н. Анучин, В.В. Тарковский // Оптика и спектроскопия = Optics and Spectroscopy. 2022. Т. 130. № 8. С. 1181-1192.
- [3] Brackmann, Ulrich Lambdachrome. Laser Dyes / Ulrich Brackmann // Lambda Physik AG D-37079, Goettingen, Germany, 3rd Edition, 2000 294 p.
- [4] Капустин, М.А. Методы получения нанокомплексов биологически активных веществ с циклическими олигосахаридами, анализ их физико-химических свойств и использование в пищевом производстве / М.А. Капустин [и др.] // Труды БГУ-2016, т. 11, ч. 1 Мн.: Изд-во БГУ, 2016, с. 73-100
- [5] Герасько, О.А. Супрамолекулярная химия кукурбитурилов / О.А. Герасько, Д.Г. Самсоненко, В.П. Федин // Успехи химии, т.71, №9 -2002, С.840–861.
- [6] Справочные таблицы основных спектроскопических данных (ИК-, УФ-, ЯМРспектроскопия и масс-спектрометрия) // КОХ ХФ БГУ, Мн., 2001, 44 с.

УДК 535.34+535.37

Н. В. Белько¹, А. М. Мальтанова², А. Г. Тимошенко³, Н. В. Лабода³, С. К. Позняк², М. П. Самцов¹

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕНСОРОВ рН И ИОНОВ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ СПИРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ РОДАМИНА Б

¹ Институт прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь

<u>samtsov@bsu.by</u>

² Институт физическо-химических проблем БГУ, ул. Ленинградская, 14, 220006 Минск, Беларусь

³ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Разработка новых сенсоров, чувствительных к различным ионам металлов, остается практически значимой задачей. Ионы металлов играют важную роль в функционировании живых организмов, поэтому необходимы неинвазивные методы определения их концентрации как *in vitro*, так и *in vivo*. Флуоресцентные сенсоры на основе производных родаминов широко применяются в науке и технике, в частности, для визуализации биологических процессов [1]. Спироциклические производные родаминов особенно перспективны для создания химических сенсоров [2].

В данной работе исследуются перспективы использования ацилгидразона родамина Б (АРБ) и гидразида родамина Б (ГРБ) в качестве флуоресцентных сенсоров рН и ионов металлов.

В спектре электронного поглощения водно-ацетонитрильного раствора АРБ наблюдается ряд полос в ультрафиолетовой области, а поглощение в видимой области отсутствует. Кроме того, такой раствор не обладает флуоресценцией. При добавлении избытка ионов водорода в спектре поглощения АРБ проявляется полоса при 560 нм, а в спектре флуоресценции – полоса при 580 нм (Рисунок 1, а). Аналогичные изменения спектральных свойств наблюдаются при добавлении в растворы красителей ионов Fe³⁺. С течением времени после добавления ионов Fe³⁺ или избытка ионов водорода в раствор АРБ наблюдается постепенное ослабление окраски и флуоресценции. При добавлении ионов в раствор ГРБ наблюдаются аналогичные полосы поглощения и флуоресценции, однако их интенсивность ниже в ~10 раз.

Причиной появления полос поглощения и флуоресценции ГРБ и АРБ в видимой области в присутствии избытка ионов водорода является протонирование, обусловленное понижением pH среды. Ионы металлов способны связывать гидроксидионы, что также приводит к понижению pH. Протонирование приводит к раскрытию спиролактамового цикла и возникновению более протяженной системы сопряженных двойных связей. Поскольку свободная аминогруппа обладает значительно более выраженными основными свойствами в сравнении с основанием Шиффа, для АРБ преобладает окрашенная протонированная форма с раскрытым циклом, а для ГРБ – неокрашенная форма с закрытым циклом и протонированной аминогруппой. Снижение оптической плотности АРБ со временем после добавления ионов водорода или металлов можно объяснить гидролизом по связи С=N, приводящим к образованию ГРБ.


Рисунок 1 – (а) Спектры поглощения (1,2) и флуоресценции при возбуждении на 490 нм (1',2') водно-ацетонитрильных растворов ГРБ (1,1') и АРБ (2,2') концентрации 25 мкмоль/л, содержащих 10 экв. ионов водорода; (б) Спектр поглощения водноацетонитрильного раствора АРБ концентрации 25 мкмоль/л спустя 0 мин (1), 5 мин (2), 270 мин (3) и 24 ч (4) после добавления 10 экв. ионов Cu²⁺

При добавлении ионов Cu^{2+} в раствор АРБ в спектре поглощения проявляются полосы при 556 и 705 нм. При возбуждении на 490 нм в спектре флуоресценции такого раствора проявляется полоса при 580 нм, а при возбуждении на 650 нм – полоса при 790 нм. Спектральные свойства ГРБ и АРБ в присутствии ионов меди практически идентичны. Анализ методом масс-спектрометрии показал, что ионы меди катализируют превращение ГРБ в родамин Б. а также производное фенантренона с поглощением и флуоресценцией в ближнем ИК диапазоне.

АРБ может использоваться в качестве многофункционального флуоресцентного сенсора, позволяющего детектировать изменение pH и присутствие ионов Fe³⁺ и Cu²⁺. Длинноволновая полоса люминесценции продуктов превращений АРБ и ГРБ расположена в диапазоне 700-1000 нм, что соответствует области прозрачности особенности на перспективы биотканей. Названные указывают применения исследованных красителей для определения концентрации ионов металлов в биологических объектах и визуализации биологических процессов, а также для совершенствования неинвазивных методов диагностики патологий, связанных с повышенными концентрациями ионов металлов.

Данная работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция – 2025» (задание 3.03.6) и проектов БРФФИ № Х21М-073 и № Ф22УЗБ-044.

- [1] A new trend in rhodamine-based chemosensors: application of spirolactam ring-opening to sensing ions. / H. N. Kim [et al.] // Chem. Soc. Rev. 2008. Vol. 37, №. 8. P. 1465–1472.
- [2] Beija M. Synthesis and applications of Rhodamine derivatives as fluorescent probes / M. Beija, C. A. M. Afonso, J. M. G. Martinho // Chem. Soc. Rev. 2009. Vol. 38, №. 8. P. 2410–2433.

УДК 621.3

И. В. Семченко¹, А. Л. Самофалов², П. В. Сомов²

ДВОЙНАЯ ДНК-ПОДОБНАЯ ПЛАНАРНАЯ СПИРАЛЬ КАК НОВЫЙ Элемент метаповерхностей

¹ ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-1, 220072 Минск, Беларусь <u>semchenko@oelt.basnet.by</u>

² Учреждение образования "Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины", ул. Советская, 104, 246028, Гомель, Беларусь

В последние годы активно исследуются искусственные планарные структуры (метаповерхности), в которых используются бианизотропные материалы различной природы. Метаповерхности состоят из периодических двумерных массивов близко расположенных микрорезонаторов, или мета-атомов, то есть из структурных элементов малых размеров. Настраивая параметры метаповерхностей (свойства отдельных структурных элементов и период массива), можно получать практически любой электромагнитный отклик, полностью контролируя поляризацию, амплитуду, фазу и даже волновой фронт одновременно для отражённых и прошедших волн. Ключевой особенностью метаповерхностей, наряду с проектируемыми требуемыми свойствами, является их толщина, которая много меньше длины волны падающего излучения. Можно проектировать искусственные плоские структуры с беспрецедентно малой толщиной: не более нескольких сантиметров в СВЧ диапазоне и до одного молекулярного слоя в видимом диапазоне. Более того, данная концепция допускает контроль электромагнитного отклика метаповерхностей независимо от падающего излучения с обеих сторон.

Авторами данной работы при проектировании и создании метаматериалов и метаповерхностей предлагается использовать микрорезонаторы принципиально новой формы в виде пары полувитковых планарных спиралей (рисунок 1).



Такие микрорезонаторы для СВЧ волн могут быть созданы в рамках технологий печатных плат. Оптимальные параметры спирали и подложки печатной платы: длина (*l*), ширина полоски (w) и угол между полосками (β), толщина подложки (h_s) и её материал, толщина проводящего слоя (t), диаметр отверстия (d), расстояние между парными спиралями (D), могут быть смоделированы на этапе проектирования микрорезонатора, ячейки и метаповерхности в целом.

Каждая спираль состоит только из двух металлических полосок на разных сторонах печатной платы и одного соединительного отверстия, что позволяет значительно уменьшить её размеры по сравнению с используемой в настоящее время двухвитковой спиралью [1], образуемой четырьмя полосками И тремя соединительными отверстиями. Использование всего половины витка спирали является достаточным для возбуждения в ней колебаний зарядов и одновременно круговых токов. Следовательно, будут индуцироваться электрический дипольный момент и магнитный момент, взаимно согласованные, что приведёт к получению метаматериала в целом с требуемыми, проектируемыми значениями диэлектрической и магнитной проницаемости. Например, могут быть созданы метаматериал или метаповерхность с равными значениями «эпсилон» и «мю», аналогичные вакууму по своему волновому сопротивлению. Такие метаматериалы практически не отражают электромагнитные волны, но при этом сильно взаимодействуют с волнами (селективно поглощают их) вследствие наличия металлических или металлизированных элементов.

Для полувитковой планарной спирали рассчитан импеданс $Z = -j \frac{H_s S N_t}{\alpha_{me}^{(11)}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$, где $H_s = 2lsin \frac{\beta}{2}$ – высота полувитковой планарной спирали, $S = 2h_s lcos \frac{\beta}{2}$ – площадь витка парной планарной спирали, $N_t = \frac{1}{2}$ – число витков, $\alpha_{me}^{(11)}$ – компонента тензора магнитоэлектрической восприимчивости $\alpha_{ee}^{(ik)}$, для которого, в общем случае, индексы *i* и *k* могут принимать значения от 1 до 3, ε_0 и μ_0 – диэлектрическая и магнитная постоянные, *j* – мнимая единица.

Вычислена также добротность спирали как колебательного контура через компоненты трёх восприимчивостей: $Q = \frac{|\alpha_{me}^{(11)}|}{\sqrt{|\alpha_{ee}^{(11)}||\alpha_{mm}^{(11)}|}}$. Для оптимальной спирали

компоненты всех трёх восприимчивостей равны друг другу [1] $\alpha_{mm}^{(11)} = \alpha_{ee}^{(11)} = \alpha_{me}^{(11)}$. Поэтому для оптимальной спирали получаем Q=1. Следовательно, для оптимальной спирали волновое сопротивление равно её активному сопротивлению.

Таким образом, импеданс и добротность спирали как колебательного контура можно выразить через компоненты диэлектрической $\alpha_{ee}^{(11)}$, магнитной $\alpha_{mm}^{(11)}$ и магнитоэлектрической $\alpha_{me}^{(11)}$ восприимчивостей (поляризуемостей), которые являются основными характеристиками спирали как бианизотропной частицы. Аналогично можно определить ёмкость $C = \frac{\varepsilon_0 \alpha_{ee}^{(11)}}{H_s^2}$ и индуктивность $L = \frac{\mu_0}{\alpha_{mm}^{(11)}} S^2 N_t^2$ спирали. В свою очередь, все восприимчивости планарной спирали можно вычислить путём моделирования.

Использование полувитковых спиралей в паре, при взаимном повороте их вокруг общей оси на 180 градусов, обеспечит симметрию микрорезонатора, присущую, например, двухвитковой спирали и не свойственную одновитковой спирали. Такая новая форма спирали позволит: а) значительно повысить резонансную частоту, вплоть до миллиметрового диапазона; б) достичь миниатюризации «мета-атомов» и повышения плотности их расположения в метаматериале; в) повысить широкополосность проектируемого устройства. УДК 535.014

В. С. Старовойтов, В. Н. Чижевский, А. А. Смоляков, С. Я. Килин

ИЗМЕРЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВРЕМЯ-РАЗРЕШАЮЩЕЙ МАТРИЦЫ ДЕТЕКТОРОВ ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.starovoitov@dragon.bas-net.by

Знание корреляционной функции интенсивности второго порядка $g^{(2)}$ крайне необходимо при создании фантомных изображений высокого пространственного разрешения. В работе представлен алгоритм определения пространственно-временных свойств функции $g^{(2)}$ псевдо-теплового излучения при использовании времяразрешающей матрицы детекторов одиночных фотонов (МДОФ).

Источником излучения служит светящееся лазерное пятно, образованное CWлазерным лучом Гауссова профиля ($\lambda \sim 672$ нм) на поверхности вращающегося светорассеивающего диска. Излучение имеет вид спекл-структуры, состоящей из пучков коррелированных фотонов и изменяющейся на временах > 1 мкс. Степень коррелированности фотонов повышается путем уменьшения диаметра пятна *w*.

Фотоны детектируются МДОФ SuperEllen, фотоприемная поверхность (1.4×1.4 мм²) которой образована матрицей из 32×32 однофотонных детекторов. Каждый из детекторов снабжен собственным преобразователем «время—цифровой код» (диапазон преобразования - 8 двоичных разрядов, временное разрешение $\tau_{res}\approx0.4$ нс). Циклически (с частотой повторения $f \leq 800$ кГц), все детекторы синхронно перезаряжаются и переводятся в режим экспозиции на время $T_{gate} \leq 100$ нс, переходя в состояние готовности совершить срабатывание (отсчет) при поглощении фотона. Результаты срабатываний детекторов регистрируются в виде структурированных данных $F_N=\{(N,k,p_k)\}$ (N – порядковый номер цикла экспозиции, k – индекс сработавшего детектора, p_k – временной интервал между началом экспозиции и отсчетом).

При статистической постобработке данных *F_N*, вычисляются вероятности отсчетов для одного или пары детекторов. Рассчитываемая вероятность $\Gamma^{(1)}[k,p]$ отсчета k-го детектора во временном интервале *р* пропорциональна интенсивности поля $G^{(1,1)}(\mathbf{r}_k, \tau_{\text{res}}p)$. Вероятность задержанных совпадений $\Gamma^{(2)}[k, m, s]$ двух детекторов k и m с временем задержки между ними *s*∈[-255,255] пропорциональна корреляционной $G^{(2,2)}(\mathbf{r}_{k},\mathbf{r}_{m};\tau_{res}s).$ Степень порядка интенсивности поля функции второго коррелированности отсчетов, регистрируемых детекторами k и m в наносекундном временном диапазоне, определяется в виде отношения $g^{(2)}[k,m,s] = \Gamma^{(2)}[k,m,s]/C_F[k,m,s]$, где *C_F*[*k*,*m*,*s*] – взаимно-корреляционная функция для временных распределений $\Gamma^{(1)}[k,p]$ и $\Gamma^{(1)}[m,p+s]$. Типичные «наносекундные» корреляционные характеристики для случаев, когда *w*=141 мкм (*) и *w*=32 мкм (•) показаны на Рис. 1 для детекторов (*k*=530 и *m*=496), расположенных в центре матрицы. Случай, когда излучение нашего источника обладает минимальной коррелированностью и $g^{(2)}$ *а priori* близко к 1, отображен на рисунке символами ◊.



При изучении временных свойств излучения с микросекундным разрешением, мы анализируем события срабатывания детекторов вне зависимости от значений кода p в виде псевдослучайных бинарных последовательностей, порядковым номером которых является число N.

Для характеризации пространственной коррелированности излучения мы анализируем как коррелируют отсчеты одного выбранного детектора («пробного» детектора с индексом M), с отсчетами, регистрируемыми совокупностью всех остальных $k \neq M$ детекторов. Распределения таких парных корреляций представляется в виде набора из 1024 функций от пространственных координат-индексов детекторов (i_k, j_k):

$$g_{M}^{(2)}(i_{k},j_{k}) \coloneqq \overline{g}^{(2)} \Big[k \big(i_{k},j_{k} \big); m = M \big(i_{M},j_{M} \big) \Big] (1),$$

где $\overline{g}^{(2)}[k,m]$ находится как среднее от $g^{(2)}[k,m,s]$ по индексу *s* с весовой функцией $C_F[k,m,s]$. Функции (1), найденные путем измерений, содержат аппаратные искажения (например,

несистематические «пиксел-локализованные» дефекты при отображении корреляций для «горячих» детекторов, обладающих повышенной чувствительностью к внутренним шумам МДОФ). Для минимизации этих искажений, функция $g_M^{(2)}(i_k,j_k)$ усредняется по всем 1024 значениям индекса M. Найденная функция распределения $g_{\perp}^{(2)}(i,j) = \langle g_M^{(2)}(i_k,j_k) \rangle_M$ (*i* и *j* – новые независимые координаты-индексы с областью изменения $i,j \in [-31,31]$), «очищенная» от аппаратных дефектов, в наиболее точной мере отображает поперечную пространственную часть функции корреляции интенсивности второго порядка. На Рис 2 отображено измеренное пространственное распределение корреляционных характеристик (двоичные логарифмы от $g_M^{(2)}(i_k,j_k)$ и $g_{\perp}^{(2)}(i,j)$) для анализируемого излучения в случаях, когда *a priori* $g^{(2)} = 1$ (панель A), w = 141 мкм (B), w = 32 мкм (С и D).



Проведенный эксперимент продемонстрировал возможности детальной характеризации временных и пространственных корреляционных свойств излучения, регистрируемого МДОФ. Результаты работы показывают, что время-разрешающая МДОФ в сочетании с псевдо-тепловым источником, основанным на применении лазера и вращающегося светорассеивающего диска, может быть успешно применена для создания и анализа фантомных изображений высокого пространственного разрешения.

УДК 535.21; 534

И. А. Тимощенко¹, О. Г. Романов¹, А. В. Подберезский¹, Т. А. Кулагова²

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТОАКУСТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ МИКРО- И НАНОСТРУКТУР

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>timoshchenkoia@bsu.by</u>, <u>romanov@bsu.by</u> ² НИУ «Институт ядерных проблем БГУ», ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь

Оптоакустичекий (фотоакустический) эффект – это возбуждение акустических импульсов в окружающей среде за счет быстрого нагрева и расширения поглощающей частицы или структуры при поглощении импульсного или импульсно-периодического лазерного излучения [1]. В настоящее время фотоакустический эффект широко используется в биомедицинских исследованиях, фотоакустической спектроскопии и других приложениях. Особый интерес представляет исследование взаимодействия импульсного лазерного излучения с поглощающими микро- и наноструктурами, поскольку частота возбуждаемых акустических колебаний в таких структурах может достигать гига- и терагерцовых значений [2]. В частности, устройства, основанные на уникальных физических свойствах графеноподобных структур, в настоящее время рассматриваются как наиболее перспективные для разработки новых поколений наносенсоров и нанопреобразователей.

Целью данной работы является разработка компьютерной модели оптоакустического отклика многослойных углеродных микро- и наноструктур при воздействии сверхкоротких лазерных импульсов и проведение вычислительного эксперимента для определения возможности применения многослойной углеродной наноструктуры графен-алмаз на практике.

Основу теоретического рассмотрения процесса термооптического возбуждения акустических импульсов в сплошной среде при действии на нее импульсного лазерного излучения, используемого в данной работе, составляет решение уравнений движения среды в форме Лагранжа, а также уравнения теплопроводности в геометрии, адекватной рассматриваемой задаче [3]. В качестве численного метода решения системы уравнений движения сплошной среды используется явная схема с искусственой взякостью [4], адаптированную на случай произвольной многослойной структуры. Развитая в работе компьютерная модель позволяет описать процессы термомеханического действия импульсного лазерного излучения на многослойные углеродные микро- и наноструктуры в широком диапазоне длительностей лазерных импульсов. В результате проведенного численного моделирования рассчитываются поля изменения температуры, давления, плотности, скорости среды в зависимости от параметров лазерных импульсов, оптических, акустических и теплофизических свойств многослойной структуры. Показано, что в поглощающем слое материала происходит формирование цуга высокочастотных биполярных акустических сигналов, временная форма которых определяется длительностью лазерного импульса.

Рабочее окно разработанной компьютерной программы представлено на рисунке 1. Программа написана в среде Embarcadero RAD Studio на языке C++. Предусмотрена возможность изменения количества слоев структуры и параметров материалов, энергетических и временных параметов лазерных импульсов. Графический вывод пространственно-временных зависимостей изменения температуры, давления, плотности и скорости среды происходит в процессе производимых расчетов, что позволяет визуально контролировать правильность проводимых расчетов.



Рисунок 1 — Интерфейс компьютерной программы

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.17 «Моделирование и разработка методов интегрирования графеноподобных материалов в фотонные и оптоэлектронные наноструктуры для управления оптическим излучением».

- [1] Лямшев Л. М. Лазерное термооптическое возбуждение звука. М.: Наука, 1989.
- [2] Романов О. Г. Воздействие фемтосекундных лазерных импульсов на металлические наночастицы в жидкости / О. Г. Романов, Г. И. Желтов, Г. С. Романов // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. Т.75. – №12. – С. 1693.
- [3] Романов О. Г. Численное моделирование термомеханических процессов при поглощении лазерного излучения в пространственно-неоднородных средах / О. Г. Романов, Г. И. Желтов, Г. С. Романов // Инженерно-физический журнал – 2011. – Т.84. – №4. – С.715.
- [4] Romanov, O. Numerical simulation of photoacoustic effect in one-dimensional carbon nanostructures. / O. Romanov, I. Timoshchenko // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2022. – Vol. 25, No. 4. – P. 341.

УДК 504.064.3

А. Л. Уласевич, А. А. Кузьмук **ЛАЗЕРНЫЙ СЕНСОР УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В АТМОСФЕРНОМ ВОЗДУХЕ**

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.ulasevich@dragon.bas-net.by

Мониторинг парниковых газов является одним из самых быстроразвивающихся направлений современной экологии в связи с глобальными изменениями климата. Основными целями мониторинга является измерение концентрации парниковых газов в атмосфере, изучение источников их эмиссии, оценка эффективности мер по сокращению их выбросов. Одной из актуальных задач является оценка баланса потоков парниковых газов антропогенного или биогенного происхождения в приземном слое атмосферы для экосистем различных типов и размеров.

В данной работе представлен лазерно-спектральный сенсор углекислого газа, разработанный для работы в составе комплекса измерения газовых потоков методом турбулентных пульсаций (eddy covariance method). Этот метод является одним из наиболее точных и теоретически обоснованных, и заключается в расчете переноса целевого вещества воздушными течениями в турбулентной атмосфере на основе высокочастотных измерений в режиме реального времени [1-2]. Следует отметить, что для данного метода требуется оборудование с определенными характеристиками – сверхмалое временное разрешение измерений, высокая чувствительность, малый размер области измерений, оборудование не должно нарушать воздушный поток [3].

Представленная предназначена разработка ДЛЯ замены существующего оборудования импортного решении актуальных экологического при задач мониторинга. Принцип работы основан на сенсора методе инфракрасной абсорбционной спектроскопии, и заключается в регистрации излучения, прошедшего через исследуемый образец. качестве источника излучения использован В перестраиваемый по длине волны одномодовый лазерный диод с распределённой обратной связью. При этом длина волны излучения диода соответствует одной из спектральных линий поглощения углекислого газа в области 1,6 мкм. Поглощение излучения газом происходит в открытой многопроходовой кювете (длина оптического пути не менее 30 м), что обеспечивает высокое быстродействие измерений. Длина волны излучения модулируется изменением тока накачки с частотой несколько сот герц. Прошедшее через кювету излучение регистрируется фотодиодом, напряжение на котором анализируется на частоте модуляции и на частоте её гармоник.

- E Foken, T., 2008. Micrometeorology. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, 310 pp.
- [2] Monson R., and D. Baldocchi, 2014. Terrestrial Biosphere-Atmosphere Fluxes. Cambridge University Press, New York: 487 pp.
- [3] Burba, G., 2013. Eddy Covariance Method for Scientific, Industrial, Agricultural and Regulatory Applications: a Field Book on Measuring Ecosystem Gas Exchange and Areal Emission Rates. LI-COR Biosciences, Lincoln, USA, 331 pp.

АУДК 535.37

Д. С. Филимоненко¹, В. М. Ясинский¹, С. К. Секацкий²

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СКАНИРУЮЩЕЙ БЛИЖНЕПОЛЕВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ЛОКАЛЬНОГО ФОТОТЕРМИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА, ИНДУЦИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЕМ ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

<u>d.filimonenko@dragon.bas-net.by</u>

² Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH1015 Lausanne-Dorigny, Switzerland Лозанна, Швейцария

Анализ химического состава наночастиц имеет важное значение для многих приложений в физике, аналитической химии, материаловедении и биологии. Существенную роль в неразрушающей диагностике наноразмерных объектов играет их взаимодействие со световым излучением. Одним из методов получения информации о химическом составе объектов с нанометровым разрешением является метод сканирующей микроскопии фототермически индуцированного резонанса (PTIR). Стандартная схема наноспектроскопии PTIR предусматривает использование зонда атомно-силового микроскопа для регистрации фототермического расширения образца в результате поглощения излучения в ИК-диапазоне. Существуют лишь единичные работы, где фототермическое расширение индуцировано воздействием видимого излучения [1]. В настоящей работе представлен новый подход к детектированию PTIR в видимой области спектра, основанный на использовании метода сканирующей ближнеполевой оптической микроскопии (СБОМ).

Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 1. В работе использовался наносекундный импульсный лазер видимого диапазона (671 нм) с плавно перестраиваемой частотой повторения импульсов. Лазерное излучение вводилось с помощью микрообъектива в зонд СБОМ в виде острозаточенного оптического волокна, который в свою очередь приклеивался к кварцевому камертону с резонансной частотой 32,7 кГц, выступавшему в роли датчика контакта с поверхностью. При этом частота второй моды изгибных колебаний зонда совпадала с резонансной частотой камертона, что позволяло реализовать высокую добротность датчика [2]. Для обеспечения постоянного расстояния между зондом и поверхностью использовался метод регистрации боковых сил (shear force), возникающих между зондом и образцом при возбуждении колебаний зонда.

Для исследования эффекта PTIR в качестве модельных калибровочных объектов использовался набор полимерных наносфер компании ThermoFisher. Микросферы с имели диаметр 40 нм и сильно поглощали в красной области спектра. Микросферы, предварительно разведенные дистиллированной водой, наносили на предметное стекло и сушили на воздухе.

Для повышения чувствительности измерений использовался синхронный усилитель (СУ). Внутренний высокочастотный генератор СУ вырабатывал опорный синусоидальный сигнал, который служил для запуска генерации лазерных импульсов.

В качестве входного сигнала для СУ использовался предварительно усиленный сигнал с зажимов камертона. Выходной сигнал СУ подавался на внешний вход блока управления СБОМ и, вместе с данными о положении зонда по координате Z, передавался в компьютер.

На рисунке 2 приведены характерные топографическое и РТІR-изображения одного и того же участка поверхности образца, содержащего наносферы, полученные при включенном и выключенном лазере. Наблюдаемый РТІR-контраст в данном случае был обусловлен термическим воздействием лазерного излучения на образец.



Рис. 1. Схема экспериментальной установки



Рис. 2. Топографическое (а) и РТІR-изображения наносфер при включенном (а) и выключенном (б) лазере

- Zhou J. Gap-Plasmon-Enhanced High-Spatial-Resolution Imaging by Photothermal-Induced Resonance in the Visible Range. / J. Zhou, A. Smirnov, G. Dietler and S. K. Sekatskii // Nano Letters. – 2019. – T. 19. – C. 8278.
- [2] Smirnov A. True tapping mode Scanning Near-Field Optical Microscopy with bent glass fiber probes / A. Smirnov, V. M. Yasinskii, D. S. Filimonenko, E. Rostova, G. Dietler, S. K. Sekatskii // Scanning 2018. Vol. 2018. P. 3249189.

УДК 674.055:621.934

В. В. Чаевский¹, М. А. Андреев²

СТРУКТУРА И СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Cr-НАНОАЛМАЗЫ/ Hf – Zr – ZrN

¹ Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь <u>chayeuski@belstu.by</u> ² ОХП «Институт сварки и защитных покрытий» НАН Беларуси, ул. Платонова, 12Б, 220005 Минск, Беларусь <u>andreyev.mikhail@gmail.com</u>

В настоящее время достигнут существенный прогресс в улучшении характеристик инструментальных материалов путем нанесения модифицирующих покрытий с применением различных технологий их осаждения, среди которых одной из основных тенденций является развитие гибридных (комбинированных) технологий [1]. Целью данной работы было сформировать на поверхности лезвий стальных (сплава HHS 18% W) ножей дереворежущего инструмента комбинированные гальвано-ионно-плазменные хром - наноалмазы детонационного синтеза (ДНА) Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия и исследовать их структуру и элементный состав.

Для формирования комбинированных Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытий на поверхность ножей предварительно напылялись Hf – Zr – ZrN пленки, после чего осаждались Cr-ДНА слои. Перед осаждением Hf – Zr – ZrN покрытия проводилась ионная очистка содержащей Zr и Hf мишени ЦГ20 потоком ионов аргона. Затем методом ионнолучевого распыления напылялась пленка Hf на поверхность лезвия ножа. После чего методом конденсации с ионно-плазменной бомбардировкой (КИБ) осаждалось ZrN покрытие. В результате формировалось слоистое Hf – Zr – ZrN покрытие на поверхностях лезвий ножей фрезерного инструмента. Сг-ДНА композиционные электрохимические покрытия осаждались на поверхность ZrN покрытий в гальваностатическом режиме электролиза при средней катодной плотности тока 50 А/дм² из классического электролита хромирования при содержании CrO3 - 250 г/л, H2SO4 - 2,2-2,5 г/л с добавлением ДНА марки «УДА-ВК» 2,5–5,1 г/л. С целью улучшения адгезии Cr-ДНА слоя с ZrN покрытием поверхность ZrN покрытия дополнительно осаждались химическим на И электрохимическим методами промежуточные слои никеля и меди, соответственно.

Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) образцов и рентгеноспектральный микроанализ сформированных покрытий исследовались с помощью электронных микроскопов MIRA 3 (TESCAN) и Hitachi S-4800.

Комбинированные Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия имеют слоистую структуру, состоящую из ионно-плазменных нижнего Zr-Hf и среднего ZrN слоев и верхнего гальванического Cr-ДНА слоя (рис. 1а). ZrN слой не перемешивается с Cr-ДНА и Zr-Hf слоями. Поверхность верхнего Cr-ДНА слоя Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытия (рис. 1) имеет характерную структуру в виде глобулярных образований, сформированных, как доказано в работах [2, 3] фосфидом никеля (Ni₃P) и кластерами наноалмазов. СЭМ-снимок поперечного излома образца с Cr-ДНА/ZrN покрытием (рис. 2) показывает наличие слоев различной микроструктуры и толщины. Толщина верхнего Cr-ДНА слоя

составляет 304 нм, промежуточного слоя меди и никеля – 939 нм, нижнего ZrN слоя – 2,50 мкм. Промежуточный слой не перемешивается с верхним слоем и нижним слоем.



Рис. 1. СЭМ-снимки лезвия ножа с Cr-ДНА/ Hf – Zr – ZrN покрытием: (a) режущей кромки и (б) выделенной зоны В скола на острие лезвия



Рис. 2. Микроструктура Cr-ДНА/ ZrN покрытия на твердосплавной (WC - Co) основе

- Chayeuski V. Structural and mechanical properties of the ZrC/Ni-nanodiamond coating synthesized by the PVD and electroplating processes for the cutting knifes / V. Chayeuski, V. Zhylinski, O. Cernashejus, N. Visniakov, G. Mikalauskas // JMEP. – 2019. – Vol. 28, no. 3. – P. 1278–1285.
- [2] Tseluikin V. N. On the structure and properties of composite electrochemical coatings. A review / V. N. Tseluikin // Prot. Met. Phys. Chem. Surf. – 2016. – Vol. 52, no. 2. – P. 254–266.
- [3] Чаевский В. В. Влияние параметров электрохимического осаждения на структуру и фазовый состав покрытия сплавом Ni-P / В. В. Чаевский, В. В. Жилинский, О. Чернашеюс // Труды БГТУ. – 2016. – № 6. – С. 106–109.

УДК 535

В. Н. Чижевский, Н. В. Лахмицкий

УСИЛЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ В ИСКУСТВЕННОМ ИМПУЛЬСНОМ НЕЙРОНЕ МЕТОДОМ ВИБРАЦИОННОГО РЕЗОНАНСА

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь vnc@dragon.bas-net.by

В работе представлены результаты экспериментального наблюдения явления вибрационного резонанса (ВР) в искусственном импульсном нейроне (ИИН) на основе однофотонного лавиннонного фотодиода и вертикально-излучающего лазера (ВИЛ) [1]. Явление ВР было впервые численно продемонстрировано в работе [2] для бистабильного передемфированного осциллятора и впервые наблюдалось в экспериментах с ВИЛ [3] и аналоговых электрических цепях [4]. В данной работе показано, что слабый подпороговый низкочастотный (НЧ) периодический сигнал может быть значительно усилен в ИИН дополнительной высокочастотной (ВЧ) модуляцией с оптимальной амплитудой.

Экспериментальные исследования были проведены с ИИН, состоящим из ВИЛ с длиной волны генерации 850 нм, переменного оптического аттенюатора и детектора одиночных фотонов (id100-MMF50, idQuantique), работающего в автономном режиме с активной схемой гашения, частотой темновых импульсов 32 Гц и мертвым временем около 45 нс. Выходной импульс детектора имеет длительность около 10 нс и амплитуду 2 В. Два синусоидальных/прямоугольных НЧ и ВЧ периодических сигнала от генератора произвольной формы с частотами $f_L = 100$ кГц и $f_H = 2$ МГц и различными амплитудами A_L и A_H подавались непосредственно на лазерный диод. Период сигналов значительно превышает мертвое время детектора. Временные характеристики ИИН регистрировались USB-осциллографом с частотой дискретизации до 500 МГц и входной полосой пропускания 250 МГц. Особенностью исследуемого ИИН является вероятностный характер отклика детектора на действие ослабленных лазерных импульсов, поскольку эффективность детектирования фотона на длине волны генерации ВИЛ составляет примерно 3 процента.

На рисунке 1 показаны временные отклики ИИН при различных значениях амплитуды управляющего сигнала $A_{\rm H}$, подаваемого на лазерный диод при фиксированном значении амплитуды НЧ сигнала $A_{\rm L}$ =0,2 В, что значительно меньше порога лазерной генерации (около 1,845 В в непрерывном режиме накачки). При отсутствии ВЧ сигнала отклик ИИН демонстрирует очень редкие одиночные импульсы, соответствующие в основном темновым импульсам детектора (рисунок 1(а)). При добавлении к лазерному диоду дополнительной модуляции с $A_{\rm H}$ =1,67 В (рисунок 1(б)) наблюдается появление периодического отклика с нерегулярными импульсами в пределах полупериодов НЧ сигнала. При оптимальной амплитуде $A_{\rm H}$ =1,94 В наблюдаются пакеты импульсов следующие с частотой ВЧ-сигнала. (рисунок 1(в)). Дальнейшее увеличение $A_{\rm H}$ приводит к исчезновению НЧ составляющей в отклике ИИН (рисунок 1(г)).

В экспериментальных исследованиях ВР количественно характеризуют НЧ амплитудой отклика, которую получают из Фурье-спектров временных сигналов. На рисунках 2 (а) и 2 (б) показана зависимость амплитуды отклика $R_{\rm L}$ от амплитуды управляющего ВЧ-сигнала для синусоидального и прямоугольного сигналов соответственно. На обоих рисунках хорошо видно типичное для ВР поведение амплитуды отклика $R_{\rm L}$ в зависимости от управляющей амплитуды $A_{\rm H}$, а именно немонотонность поведения кривых с прохождением через максимум, уширение кривых отклика, смещение и увеличение максимального значения $R_{\rm L}$ при увеличении амплитуды $A_{\rm L}$. Наблюдаемые различия в амплитуде откликов и форме кривых для прямоугольного и синусоидального сигналов связаны с вероятностным характером отклика детектора одиночных фотонов.







 $A_{\rm L} = 0,05$ (1), 0,1 (2), 0,15 (3), 0,2000 (4), 0,25 (5) В Рисунок 2 – Отклик нейрона $R_{\rm L}$ на действие (а) синусоидального и (б) прямоугольного периодических сигналов на частоте $f_{\rm L}$ в зависимости от амплитуды управляющего сигнала $A_{\rm H}$ при различных значениях амплитуды $A_{\rm L}$.

Таким образом, в работе показано, что явление ВР может быть эффективным методом управления передачей периодических сигналов через искусственный импульсный нейрон. Этот подход может найти применение при разработке и функционировании импульсных нейронных сетей.

- [1] Chizhevsky, V.N. Artificial spiking neuron based on a single-photon avalanche diode and a microcavity laser. / V. N. Chizhevsky, V. A. Kulchitsky, S. Ya. Kilin. // Appl. Phys. Lett. - 2021. - V. 119. - P. 041107-5.
- [2] Landa, P. S. Vibrational resonance / P. S. Landa, P. V. E. McClintock // J. Phys. A: Math. Gen. - 2000. - Vol. 33, no. 45. - Pp. L433–L438.
- [3] Chizhevsky, V.N. Experimental evidence of "vibrational resonance" in an optical system / V. N. Chizhevsky [et al.] // Phys. Rev. Lett. - 2003. - Vol. 91. - P. 220602.
- [4] Experimental evidence, numerics, and theory of vibrational resonance in bistable systems / J.P. Baltanás [et al.] // Phys. Rev. E. 2003. V. 67. P. 066119.

УДК 539.234

С. А. Максименко¹, Д. В. Адамчук¹, М. И. Демиденко¹ В. К. Ксеневич², В. В. Углов²

НОВЫЙ МАТЕРИАЛ НАГРЕВАТЕЛЯ ДЛЯ ВАКУУМНОГО РЕЗИСТИВНОГО ИСПАРИТЕЛЯ

¹ Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская 11, 220006, Минск, Беларусь <u>adamchuk_dzmitry@yahoo.com</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

ksenevich@bsu.by

Метод вакуумного термического напыления, основанный на испарении материала посредством его нагрева резистивным нагревателем и конденсации на подложке в вакуумной камере, является наиболее простым и технологичным способом синтеза пленочных структур. Данный метод до настоящего времени широко распространен как в лабораториях, так и в промышленном производстве, например, для получения зеркал и затворов транзисторных структур. Метод термического напыления является более экологичным по сравнению с гальваническим осаждением покрытий, так как не требует большого количества опасных химических реактивов и соответственно не имеет проблем с их утилизацией. Однако, наряду с большим количеством достоинств, таких как простота конструкции и физических процессов испарения/конденсации, протекающих при осаждении покрытий, присутствует ряд проблем при использовании этого метода. Одной из наиболее существенных из них является подбор оптимального материала резистивного испарителя. Основные требования к такому материалу: высокая температура плавления и химическая инертность к осаждаемому покрытию. Наиболее распространенными материалами для резистивных лодочек являются тугоплавкие металлы, такие как вольфрам, молибден и их сплавы. При их использовании ключевой проблемой является образование интерметаллидов в результате химического взаимодействия между материалом резистивного испарителя и распыляемым металлом. Это приводит к разрушению лодочки, загрязнению напыляемого покрытия чужеродными включениями материала испарителя и существенному снижению его рабочего ресурса. Данная проблема очень актуальна при термическом напылении алюминия. Пленки металлического алюминия широко используются в качестве отражающего слоя зеркал в силу его высокого коэффициента отражения. Следует отметить, что частичным решением проблемы старения лодочек при напылении алюминия является изготовление нагревателей в виде спиралей и распыление алюминия из навесок в виде «капель». К техническим недостаткам таких методов можно отнести их низкую технологичность и высокую трудоемкость подготовки и проведения напылительного процесса.

Целью работы был поиск экономически эффективных, характеризующихся повышенным сроком службы материалов для вакуумного резистивного распыления активных металлов. Нами предложено использовать в качестве такого материала для нагревательного элемента пироуглерод, легированный бором. Для его синтеза применялся метод химического осаждения из газовой фазы (CVD), основанный на использовании установки, в состав которой входит нагреваемая до 1480 – 1560 °C циллиндрическая графитовая сборка, через которую пропускается контролируемый поток реактивных газов (метан, пропан-бутановая смесь, BCL₃ и азот). Преимущество данного материала по сравнению с традиционно используемыми при получении пленок методом резистивного вакуумного испарения заключается в большей скорости напыления и уменьшении удельных затрат энергии.

Исследования фазового состава образца проводились на дифрактометре ULTIMA IV фирмы Rigaku методом рентгенофазового анализа с использованием монохроматизированного медного (Cu_K α) излучении с длиной волны 0,15418 нм в геометрии параллельного пучка. Регистрация данных проводилась в диапазоне углов 2 θ = 10-120°, с шагом 0,05° и скоростью движения детектора 2°/мин. На рисунке 1 представлена рентгенограмма синтезированного образца.



Рисунок 1 - Рентгенограмма пиролитического углерода, легированного бором.

В результате анализа рентгенограмм установлено, что фаза пиролитического графита (пространственная решетка – гексагональный Р63/mmc) имеет следующие параметры решетки: $a=b=0,2434\pm0,0016$ нм, $c=0,688\pm0,017$ нм. Анализ рентгенограммы образца РуС свидетельствует о преимущественном формировании пиролитического графита в ориентации (002) [1]. Также обнаружены рефлексы, соответствующие отражению рентгеновского излучения на плоскостях (100), (101), (004) и (110). Анализ рентгенограммы образца РуС, полученной при прецизионном изменении скорости движения детектора, выявил асимметрию дифракционных пиков РуС (002), (101) и (110) и наличие пиков в области углов $2\theta=30-40^\circ$, которые могут свидетельствовать об образовании других фаз в структуре синтезируемого материала.

Список литературы:

[1] X-ray diffraction patterns of graphite and turbostratic carbon / Z.Q. Li [et al.] // Carbon. – 2007. – Vol. 45, № 8. – P. 1686-1695.

УДК 621.373.826

С. С. Ануфрик, К. Ф. Зноско, А. П. Володенков

ШИРОКОАПЕРТУРНЫЙ ЭЛЕКТРОРАЗРЯДНЫЙ ХеСІ ЛАЗЕР

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь Anufrick@grsu.by

Широкоапертурные эксимерные лазеры в силу ряда своих свойств, таких как высокая пиковая мощность излучения, в сочетании с выходной энергией в несколько джоулей, находят все большее применение в различных областях науки и техники. Разработка таких лазеров открывает новые возможности в фотолитографии, лазерной обработке материалов, фотохимии, лидарном исследовании атмосферы [1-2].

Важнейшим звеном электроразрядного эксимерного лазера является система возбуждения. Она в значительной степени определяет выходную энергию, мощность, длительность и форму импульса генерации. Технические же характеристики элементов, входящих в систему возбуждения, например, конденсаторов, определяют возможность работы лазера в моноимпульсном или частотном режимах. Системы возбуждения эксимерных лазеров выполненные на керамических конденсаторах серии К15-10 позволили получать высокие мощности генерации, однако они не смогли обеспечить режим работы с частотой выше 1 Гц [2-3].

При разработке широкоапертурного электроразрядного эксимерного XeC1 лазера использовался опыт разработки аналогичных лазеров меньшей мощности [2-4]. Система возбуждения построена по модульному типу на базе LC-контуров со встречным включением и выполнена на частотных конденсаторах серии KMЧ и разрядниках серии РУ-65. Построение системы возбуждения по типу LC-контура обусловлено ее простотой, надежностью и возможностью сравнения полученных результатов с теми, что были получены нами ранее [2-4]. Второй отличительной особенностью лазера является достаточно большая апертура пучка генерации - 7×3 см². Компьютерное моделирование характеристик лазера проводилось согласно методики,



Рис.1. Электрическая схема ХеС1 лазера

описанной в [5-6] с учетом данных работы [7].

Принципиальная электрическая схема XeCl-лазера представлена на рис. 1. Система возбуждения поперечного разряда представляла собой LC-контур с накопительными ёмкостями C₁ и обострительной C₀. Накопительная ёмкость набиралась из шести конденсаторов KMЧ 50-0.1, ёмкостью 100 нФ, 50 кВ. Обострительная ёмкость C₀ была образована конденсаторами K15-10, ёмкостью 3,3 нФ, 30 кВ. L_1 и R_1 индуктивность и сопротивление в цепи перезарядки C_1 на C_0 . Они образованы сопротивлением и индуктивностью коммутаторов и токоведущих шин. L_0 - индуктивность в контуре разряда ёмкости C_0 на межэлектродный промежуток. В качестве коммутаторов в системе возбуждения основного разряда использовались по три параллельно включенных и синхронизированных разрядника РУ-65 на каждую из двух симметрично расположенных линий накопителя.

Излучатель лазера выполнен на базе диэлектрической трубы длиной 1350 мм. Внутри нее располагались электроды основного разряда (1) и электроды предионизации (2) из нержавеющей стали. Электроды (1) имели перфорированную поверхность 40x1000 мм² светопропусканием в 50%. Межэлектродный промежуток между электродами основного разряда - 70 мм. Разрядный объём лазера составлял 100x7x4 см³. Электроды предионизации (2) расположены под электродами основного разряда. В сечении они представляли прямоугольник 40x30 мм с округленными рёбрами под R=7 мм. Поверхность электродов покрыта диэлектриком толщиной 0,6 мм. Промежутки между электродами (1) и (2) составляли 5 мм. Предионизация рабочей смеси в межэлектродном промежутке осуществлялась разрядами, ограниченными диэлектриком из-под перфорированных электродов (1).

Проведены исследования генерационных характеристик разработанного лазера в зависимости от состава и давления рабочей смеси, зарядного напряжения, параметров цепи возбуждения разряда. Максимальное значение выходной энергии составляло 3 Дж на смеси состава HC1 : Xe : Ne – 1 : 15 : 3000 при общем давлении 4 атмосферы и зарядном напряжении 36 кВ. Длительность импульса генерации равнялась ~120 нс.

- 1. Коновалов И. Н. Электроразрядный ХеС1-лазер с энергией генерации 10 Дж и длительностью импульса излучения 300 нс. / В. Ф. Лосев, Ю. Н. Панченко, Н. Г. Иванов, М. Ю. Сухов // Квантовая электроника. 2005. Т. 35, № 3. С. 237-240.
- 2. Ануфрик С. С. Влияние параметров LC-контура на энергию генерации XeCl-лазера / С. С. Ануфрик, К. Ф. Зноско, А. Д. Курганский // Квантовая электроника. 1989. Т. 16, № 11. С. 2228–2231.
- 3. Ануфрик С. С. Энергетические характеристики XeCl-лазера с возбуждением LCинвертором / С. С. Ануфрик, А. П. Володенков, К. Ф. Зноско // Журнал прикладной спектроскопии. – 1999. – Т. 66, № 5. – С. 702–707.
- Anufrik S. S. Influence of the preionization system on the lasing energy of a XeCl laser / S. S. Anufrik, A. P. Volodenkov, K. F. Znosko // Journal of Optical Technology. – 2000. – Vol. 67, No. 11. – P. 961–967.
- Anufrik S. S. Modeling of the active medium based on XeCl molecules with allowance for the halogencarrier regeneration process / S. S. Anufrik, A. P. Volodenkov, V. F. Losev, K. F. Znosko // Russian Physics Journal. – 2012. – Vol. 54, No. 11. – P. 1264–1271.
- Volodenkov A. Modeling of discharge characteristics in a mixture of mercury vapor with argon / A. Volodenkov, S. Anufrick, K. Znosko // High Temperature Material Processes. – 2017. – Vol. 21, No. 4. – P. 377–390.
- Белаш В. Ч. Температура и концентрация электронов импульсного разряда в смеси паров ртути с аргоном / В. Ч. Белаш, К. Ф. Зноско // Веснік ГрГУ Серыя 2.. – 2018. – Т. 8, № 3. – С. 83–92.

УДК 535.41

А. В. Баглов^{1,2}, М. С. Тиванов¹, Л. С. Хорошко^{1,2}, Л. С. Ляшенко¹

К ВОПРОСУ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ ПРОПУСКАНИЯ ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК НА ОПТИЧЕСКИ ПРОЗРАЧНОЙ ПОДЛОЖКЕ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

baglov@bsu.by

² Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь

Оптические методы позволяют исследовать такие фундаментальные свойства полупроводниковых материалов, как ширина запрещенной зоны и тип первого перехода, фотопроводимость, фото-ЭДС и т.д. Для их реализации исследуемый материал формируется в виде тонкой пленки микронной или субмикронной толщины на оптически прозрачной подложке, обычно кварцевой, позволяющей анализировать отражение, рассеяние и поглощение (пропускание) света в самом материале. Поверхность полученной пленки обладает некоторой шероховатостью, что будет сказываться на ее оптических свойствах, в частности коэффициенте пропускания, особенно при малых толщинах. Явление интерференции в тонких пленках позволяет определить их оптические характеристики и толщину (например, эллипсометрически). Для минимизации ошибки при оценке толщины покрытия и коэффициентов поглощения и преломления важным является учет шероховатости поверхности тонких пленок и неоднородности ее толщины, что продемонстрировано в данной работе.

Теоретический анализ системы из двух материалов, толщина одного из которых (подложка) много больше толщины другого (исследуемый материал), был проведен в работах *R. Swanepoel* [1, 2]. Было показано, что коэффициент пропускания однородной пленки с учетом поглощения может быть описан уравнением (1):

$$T = \frac{A \cdot x}{B + C \cdot x \cdot \cos\varphi + D \cdot x^2} \tag{1}$$

где *A*, *B*, *C* и *D* – некоторые переменные, определяемые через коэффициент преломления *n*, *x* учитывает собственное поглощение света материалом, а φ – параметр, связанный с толщиной покрытий *d*, коэффициентом преломления *n* и длиной волны λ (подробнее см. [2]). Уравнение (1) может быть модифицировано для случая неоднородной толщины следующим образом:

$$T = \frac{1}{\varphi_2 - \varphi_1} \cdot \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{A \cdot x}{B + C \cdot x \cdot \cos\varphi + D \cdot x^2} d\varphi$$
(2)

где ϕ_1 и ϕ_2 – параметры, связанные с вариацией толщины пленки *d* на величину неоднородности Δd .

В работах [1, 2] проведено моделирование спектров пропускания кремния. Для более точного моделирования спектра пропускания кремния мы использовали дисперсию показателя преломления материала, которая в области поглощения значительно отличается

от значения в области прозрачности, и экспериментальные значения показателя поглощения. Для решения уравнений (1) и (2) с учетом дисперсии показателя поглощения и преломления мы разработали программную реализацию, В которой численное интегрирование проводится методом трапеций (случай равномерных отрезков – формула Котеса). Толщина пленки d составляла 500 нм, а величина неоднородностей Δd выбиралась 10, 20, 40 и 80 нм. Спектры пропускания (рис. 1) показывают, что неоднородности пленки обладают значительным влиянием на форму кривой коэффициента пропускания и ее огибающих. С ростом величины неоднородностей интерференционная картина сглаживается и в случае $\Delta d = 80$ нм наблюдается инверсия экстремумов кривой в области от ≈ 1000 нм и менее. Это может объясняться близким к экспоненциальному росту коэффициента поглощения из-за межзонных процессов поглощения света, что приводит к более сильному отклику на неоднородности толщины пленки.



Рисунок 1. Спектры пропускания кремниевой пленки толщиной 500 нм ($\Delta d = 0$ нм) и различным размером неоднородности толщины: а) 10 нм; б) 20 нм; в) 40 нм; г) 80 нм.

Полученные результаты показывают важность учета неоднородности поверхности при исследовании тонкопленочных покрытий даже в случае мономатериала. Задачей дальнейших исследований является анализ оксидных и халькогенидных полупроводниковых пленок, а также полупроводниковых бислоев.

- Swanepoel, R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon / R. Swanepoel // J. Phys. E: Sci. Instrum. – 1983. – Vol. 16, Iss. 12. – P. 1214–1222.
- [2] Swanepoel, R. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films / R. Swanepoel // J. Phys. E: Sci. Instrum. – 1984. – Vol. 17, Iss. 10. – P. 896–903.

УДК 544.225.22/.23+544.183.24/.25:538.911+538.915 А. В. Баглов^{1,2}, Л. С. Хорошко^{1,2}

ДИСУЛЬФИД РЕНИЯ – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ СЛОИСТЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

baglov@bsu.by

² Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь

Дихалькогениды переходных металлов, в первую очередь элементов побочной подгруппы VI-й группы (хром, молибден и вольфрам) длительное время удерживают интерес научного сообщества благодаря уникальному сочетанию слоистой структуры и электронных свойств, что делает их перспективными материалами для различного применения. В настоящее время усиливается интерес к дихалькогенидам других металлов 6-го периода, в частности рения, ранее использовавшего, в основном, в химической (платинорениевые катализаторы риформинга) и аэрокосмических технологиях (жаропрочные химически стойкие сплавы). На основе дисульфида рения ReS2 созданы (фото)катализаторы, продемонстрированы полевой и фототранзистор, а также конструкция высокочувствительного детектора поляризованного света и т.д., что подробно рассмотрено в обзоре [1]. Существенным отличием ReS2 от хорошо исследованных WS₂ (MoS₂) является его структура: элементарная ячейка является пинакоидальной (центросимметричной), обладает пространственной группой P1 и относится к триклинной сингонии, в то время как WS₂ (MoS₂) являются гексагональными. Вследствие этого большой интерес представляет изучение электронной структуры как объемного материала, так и двумерной формы.

Исследование проводили путем квантово-механического моделирования в рамках теории функционала плотности и теории псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX*. Численное моделирование проводили в рамках приближения локальной плотности, выбор которого обусловлен возможностью корректного описания структурных свойств слоистых материалов с выраженным Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием между слоями, в том числе в WS₂ и MoS₂. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по Γ -центрированной регулярной сетке *k*-точек размером $4 \times 5 \times 5$. Перед расчетом электронных свойств проводили структурную оптимизацию (релаксацию) элементарной ячейки с изменяемым объемом и позициями ионов до тех, пока любая компонента тензора напряжений или силы, действующих на ионы, становились менее 10 мэB/Å.

Элементарная ячейка ReS_2 включает в себя четыре формульные единицы, для всех ионов занимаемая позиция Вайкоффа – 2i, что соответствует наличию двух ионов рения и четырех ионов серы с неэквивалентными позициями для объемной фазы и монослоя. Это предполагает, что свойства ReS_2 при легировании будут изменяться не только за счет свойства допанта, но и за счет позиции, в которой он замещает ион серы. Зонная структура ReS_2 представлена на рис. 1. Для объемного ReS_2 ширина запрещенной зоны

составляет 1,26 эВ, что согласуется с экспериментальным значением 1,4–1,5 эВ. Наблюдается прямой переход, расположенный в точке X, что согласуется с спектроскопическими данными. Понижение размерности ReS₂ до би- и монослоя приводит к увеличению ширины запрещенной зоны до 1,32 и 1,47 эВ соответственно. При этом, в случае бислоя, сохраняется прямозонный характер объемного материала, хотя прямой переход смещается в центр зоны Бриллюэна, тогда как монослой обладает непрямозонным характером. Это значительно отличает ReS₂ от MoS₂ и WS₂, для которых наблюдается изменение непрямозонного типа на прямозонный при понижении размерности и переходу к монослою. Результаты расчета косвенно подтверждают имеющиеся данные о слабой выраженности квантового ограничения в исследуемом соединении [1, 2].

Дисперсия зон из особых точек высокой симметрии для всех случаев немонотонная и несимметричная. Наблюдается большое количество локальных экстремумов в валентной зоне и зоне проводимости. Менее выраженная, «уплощенная» дисперсия зон для низкоразмерного ReS₂ объясняется уменьшением взаимодействия между слоями (для бислоя) или полным его отсутствием (для монослоя). Более подробное обсуждение структурных и электронных свойств объемного ReS₂, включая плотность электронных состояний можно найти в [2].



Рисунок 1. Дисперсия энергетических зон в направлении точек высокой симметрии: а) объемный ReS₂; б) бислой ReS₂; в) монослой ReS₂.

Методами из первых принципов исследована зонная структура объемного и двумерного (би- и монослой) триклинного дисульфида рения ReS₂. Показано, что с понижением размерности происходит увеличение ширины энергетического зазора с изменением типа первого перехода. Многодолинная зонная структура обусловлена низкосимметричной элементарной ячейкой ReS₂, а учитывая большое количество долин можно ожидать анизотропии электрофизических и оптических свойств у ReS₂, чувствительных к механическим деформациям кристалла, особенно в двумерном состоянии, что может найти применение в различных изделиях оптоэлектроники и сенсорики.

- [1] Rahman, M.Z. Advent of 2D Rhenium Disulfide (ReS₂): Fundamentals to Applications / M. Z. Rahman, K. Davey, S.-Z. Qiao // Adv. Funct. Mater. 2017. Vol. 27. P. 1606129-1–1606129-21.
- [2] Baglov, A.V. Crystal Structure and Electronic Properties of Rhenium Disulfide / A.V. Baglov, L.S. Khoroshko // J. Appl. Spectrosc. – 2022. – Vol. 89. – P. 860–864.

УДК; 535.343.2; 538.915; 538.958

С.А. Кутень¹, А.Л. Пушкарчук^{1,2}, Т.С. Пивоварчик¹, А.А. Хрущинский¹, А.Г. Поддубская¹, Н.И. Волынец¹, Dmitry Lyakhov³, Dominik Ludewig Michels³, К.Г. Батраков¹

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА СПЕКТРЫ НАНОГРАФЕНА МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

¹ Институт ядерных проблем, БГУ, ул. Бобруйская 11, 220030 Минск, Беларусь, ² Институт физико-органической химии, НАНБ, ул. Сурганова 13, 220072 Минск, Беларусь

³Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia *<u>kgbatrakov@mail.ru</u>

Слой графена одноатомной толщины обладает способностью сильного поглощения падающего излучения в широком спектральном диапазоне: от микроволнового до оптического. Поэтому, графен является отличным кандидатом качестве рабочего для использования в элемента при разработке высокочувствительных детекторов и сенсоров. Основной вклад в поглощение излучения графеном в оптическом диапазоне вносят межзонные электронные переходы, приводя к коэффициенту поглощения всего лишь одним слоем атомов ~ $\pi\alpha$ ~2,3 % (α — постоянная тонкой структуры) [1]. В микроволновом и терагерцовом (ТГц) диапазоне, в отличии от оптического, преобладает влияние на поглощение внутризонных переходов. В этом диапазоне поглощение может быть очень большим и, в зависимости от уровня легирования электронной системы графена, параметров подложки и угла падения волны на плоскость графена, изменяется от нескольких десятков процентов до почти полного поглощения [2]. При поперечных пространственных размерах слоя графена порядка микрона и меньше, размерный эффект начинает оказывать влияние на структуру электронных уровней и спектры поглощения. В этом случае, ввиду ограничения движения электронов в поперечном направлении, для характерной энергии пиков поглощения может быть использована следующая оценка ~v_Fp=v_Fπ/L (L поперечный размер, v_F и р —скорость Ферми и квазиимпульс электронов графена), а частота пиков соответствует терагерцовому и оптическому диапазону частот для микронных и нанометровых поперечных размеров соответственно. В работе путем квантово-химического моделирования размерные эффекты анализируются в диапазоне поперечных длин \sim от одного до десяти нанометров.

При расчетах использовалась программа ZINDO/S [3]. Рассчитываемые модели графеновых квантовых точек (ГКТ) С₆H₆, С₁₀H₈, С₃₀H₁₆, С₉₀H₂₈, С₂₃₄H₄₈, С₄₆₂H₆₄ изображены на рис. 1. Расстояния С-С в полагались равными стандартным значениям 1,421Å. Оборванные связи на границах ГКТ насыщались атомами водорода с последующей оптимизацией их положения методами молекулярной механики.



Рисунок 1. Набор рассчитываемых моделей ГКТ: C_6H_6 , $C_{10}H_8$, $C_{30}H_{16}$, $C_{90}H_{28}$, $C_{234}H_{48}$, $C_{462}H_{64}$. Цифры над красными линиями обозначают расстояния между граничными атомами углерода в Å

Исследована зависимость от размеров ГКТ энергий пиков поглощения и разности ΔE_{HL} между значениями энергий LUMO (низшая свободная молекулярная орбиталь) и HOMO (высшая занятая молекулярная орбиталь). Результаты расчетов показывают уменьшение этих величин с увеличением размера системы и находятся в качественном соответствии с предварительными оценками.

Работа выполнена при поддержке ГПНИ «Конвергенция 2025» D.L. and D.M. were partially supported by KAUST baseline funding. All Gaussian16 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Sky-lake nodes

[1] R.R. Nair, et al., Fine structure constant defines visual transparency of graphene// Science – 2008.- V. 320 – P. 1308.

[2] K. Batrakov, et al., Enhanced microwave-to-terahertz absorption in graphene.// Applied Physics Letters, - 2016 – V.108(12) – P. 123101.

[3] Adachi M., Comparison of the INDO/S and the CNDO/S Method for the Absorption Wavelength Calculation of Organic Dyes / Adachi M., Nakamura S. // Dyes Pigm. – 1991. – V. 17. – P. 287-296

УДК 535.8

С. С. Ануфрик, А. П. Володенков, К. Ф. Зноско

Малогабаритный эксимерный лазер

Гродненский государственный университет им. Я.Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь <u>a.volodenkov@grsu.by</u>

Экспериментально исследована работа системы возбуждения эксимерного XeClлазера на основе LC-контура в режиме генерации субнаносекундных импульсов. Исследования проводились на эксимерном электроразрядном лазере, излучатель и система предыонизации активной среды которого представлены на рис.1. Излучатель представлял собой дюралевую разрядную камеру, внутри которой располагались профилирован



С1- накопительная емкость; С2-обострительная емкость;
1, 2 –лазерные электроды; 3-электроды предыонизации
Рис1. Система возбуждения лазера

Общий объем излучателя составлял 0,85 л, а активный объем ~ 0.01 л (размеры разрядной зоны (05 × 1 ×20) см³). Основные электроды 1 и 2 выполнены из дюраля и имеют с профиль Чанга. Штыри предыонизации 3 изготовлены из нержавеющей стали. Управляемый разрядник РУ-62 был использован в качестве коммутатора РУ. Предыонизация основного разрядного промежутка (МП) осуществлялась излучением вспомогательных искровых разрядов между электродом 1 и штырями 3. Вдоль каждой стороны электрода 1 было расположено по 20 штырей предыонизации - 3.

Выполнена оптимизация работы искровой предыонизации с целью получения объемного разряда. Произведен подбор величин индуктивностей Lnp, которые используются для обеспечения одновременного пробоя всех искровых промежутков в системе предыонизации. Произведена оптимизация расположения штырьков искровой предыонизации относительно основных электродов. Получен устойчивый объемный разряд в основном промежутке.

Все работы по оптимизации производились при использовании в качестве буферного газа гелия и неона.

При использовании системы возбуждения, представленной на рис.1 была произведена оптимизация системы возбуждения и состава лазерной смеси.

Величина зарядного напряжения была ограничена напряжениенм само-пробоя искрового разрядника (РУ-62) 14-15 кВ.

Экспериментально установлены оптимальные соотношения между параметрами системы возбуждения, обеспечивающие максимальную энергию генерации (10 мДж) и длительность импульса по полувысоте ~8 нс при зарядном напряжении 14 кВ и на следующей оптимальной смеси: 2 Торр HCl; 30 Торр Хе (общее давление 2,6 атм, буферный газ неон).

УДК 621.384

В. В. Гавриловец¹, В. В. Тихомиров

КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СПИРАЛЬНОГО МАГНИТОКУМУЛЯТИВНОГО ГЕНЕРАТОРА ПО КОНТУРАМ ТОКА

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь ¹bycel@tut.by

Принцип работы спирального магнитокумулятивного генератора (СМКГ) основан на сжатии магнитного потока замкнутым токопроводящим контуром. Этот принцип можно проиллюстрировать на примере одинокого, покоящегося замкнутого контура с током в отсутствии внешнего магнитного поля. Магнитный поток, связанный с контуром, по определению, вычисляется через поверхностный интеграл:

$$\Phi = \iint_{S} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \,, \tag{1}$$

где Φ – магнитный поток проходящий через поверхность *S*, которую пронизывает индукция магнитного поля *B*. При отсутствии сопротивления, внутренних и внешних источников электродвижущей силы, магнитный поток связанный с контуром постоянен и сохраняется.

Конструкция СМКГ сложнее, он состоит из соленоида (индуктор) и проводящей трубы (лайнера) внутри его. Принцип работы основан на быстром расширении лайнера, который сжимает магнитный поток между индуктором и лайнером.

Используя закон индукции Фарадея и применяя электротехнический подход, уравнение для изменения магнитного потока в СМКГ можно записать так:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{d(L \cdot I)}{dt} + RI = 0, \qquad (2)$$

где L – индуктивность генератора, I – ток в контуре, R – эффективное сопротивление, которое включает все возможные потери магнитного потока. К виду уравнения (2) можно привести все существующие модели СМКГ. Но методы определения или расчета индуктивности, сопротивления будут существенно отличаться [1].

В данной работе модели СМКГ предлагается классифицировать по используемой эквивалентной электрической схеме, так как она позволят наглядно продемонстрировать возможность описания деталей распределения плотности тока по генератору.

Модели можно разделить на следующие четыре вида:

Нульмерные (0D) – когда индуктивность и сопротивление генератора задаются как некоторые известные функции от времени и других параметров и не вычисляются в процессе моделирования. Данные модели являются удобными в том случае, если необходимо моделировать функционирование другого устройства, подключённого к СМКГ за короткое время при ограниченной вычислительной мощности.

Одномерные (1D) – когда индуктивность и сопротивление вычисляются на каждом шаге моделирования и зависят от координаты вдоль оси СМКГ, что позволяет ввести зависимость индуктивности и сопротивления от неоднородности плотности тока вдоль длины СМКГ в течении функционирования генератора. Данные модели достаточно просты и описываются формулой (2). Особенность эквивалентной электрической схемы данных моделей состоит в моделировании только одного контура с током. Учет неоднородности плотности тока в лайнере связан с предположениями, какой он должен быть в зависимости от плотности тока в индукторе.

Двумерные (2D) – в данных моделях используется метод нитей тока. Этот метод основан на разделении массивных частей описываемого объекта на отдельные контуры тока, в которых распределение тока считается однородным. Метод нитей тока хорошо подходит для описания проводников, в которых необходимо учитывать распределение плотности тока по поверхности и/или объему проводника, т.е. нельзя пренебречь распределением тока по поперечному сечению проводника, например, близко расположенные трубы, массивные кольца. Длина лайнера сравнима с длиной СМКГ и распределение плотности тока неравномерно вдоль его длины при его расширении, а также зависит от потерь на сопротивление, поэтому его следует считать массивным проводником. В двумерной модели лайнер делится на нити тока в плоскостях перпендикулярным оси генератора, а индуктор – на отдельные витки [1].

В двумерных моделях рассчитывается система уравнений, где контуры токов в лайнере рассчитываются отдельно от тока в индукторе. В эквивалентной электрической схеме присутствуют контуры токов в лайнере и при приведении системы уравнений к виду уравнения (2), индуктивность генератора, как и его эффективное сопротивление является вычисляемой величиной из распределения плотности тока и его производных по времени. Данные модели гораздо слаженнее воспринимать ввиду их сложности, но они позволяют учесть частотную зависимость параметров СМКГ и с хорошей точностью рассчитать магнитное поле вне СМКГ [2].

Трехмерные модели (3D) – в данных моделях применяется метод нитей тока и в качестве массивного проводника считаются все проводящие элементы СМКГ. Так же деление на нити тока происходит не только по поверхности проводника, но и в его глубину, в том числе и в витках индуктора.

Поэтому в трехмерной модели рассчитывается система уравнений контуров тока, которые имеют сложные связи друг с другом. Индуктивность, сопротивление и ток генератора являются вычисляемыми параметрами при приведении системы уравнений к виду уравнения (2). Данные модели очень сложны для восприятия, однако могут наиболее точно описать распределение плотности тока по проводящим элементам СМКГ, распределение и направление индукции магнитного поля как внутри, так и снаружи генератора. Однако, плохая устойчивость решения систем уравнений больших размерностей ограничивают применимость трехмерных моделей на практике.

Использование вида модели СМКГ зависит от целей применения. Более простые модели (0D, 1D) подойдут для оптимизации параметров СМКГ, многократном моделировании с известными параметрами. Более сложные модели (2D, 3D) обладают возможностью предсказывать функционирование СМКГ в новых условиях и для разработки новых конструкций.

[1] Novac, B. M. Accurate Modeling of the Proximity Effect in Helical Flux-Compression Generators / B. M. Novac, I. R. Smith, and M. C. Enache // IEEE Transactions on plasma science -2000. – Vol. 28. – No 5. – P. 1353-1355. – DOI 10.1109/27.901197.

[2] Baryshevsky, V. Magnetic field probe for noninvasive diagnostics of fcg operation: simulation and experiment / V. Baryshevsky, A. Gurinovich, I. Vasiliev, V. Tikhomirov, V. Haurylavets // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2013. – Vol. 41. – № 10. – P. 2926-2930. – DOI 10.1109/TPS.2013.2275021.

УДК: 535.373 + 539.2 +541.14 Э.И. Зенькевич¹, А.П. Ступак², К. фон Борцисковски³

ЭКСИТОН-ФОНОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПЕРЕСТРОЙКА СТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО СЛОЯ ЛИГАНДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ CdSe/ZnS

¹Белорусский национальный технический университет, 220013 Минск, np. Heзависимости 65, Беларусь 2 Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, np. Heзависимости, 68, 220072 Минск, Беларусь stupak@imaph.bas-net.by ³Институт физики, Технический университет Хемнитца, D-09107 Хемнитц, Peŭxeнхайнер штр. 70, Германия borczyskowski@physik.tu-chemnitz.de

Для полупроводниковых квантовых точек (КТ) в условиях трехмерного квантового ограничения дискретными являются не только электронные энергетические уровни, но и колебательные моды решетки (прежде всего, оптические LO фононы). В экспериментальном плане исследование этих вопросов проводится двумя методами: а) спектроскопия комбинационного рассеяния (соотношения интенсивностей бесфононных линий и фононных крыльев), б) изучение температурной зависимости параметров спектров поглощения и фотолюминсценции (ФЛ), а также величины стоксовского сдвига. Кроме того, при понижении температуры растворов КТ в жидких растворителях (когда еще не достигается температура стеклования) не исключена «фазовая перестройка» пассивирующего слоя органических лигандов, которая может привести как к изменению морфологии поверхности КТ, так и к пространственному и энергетическому перераспределению поверхностных ловушек.

В докладе представлены результаты анализа экситон-фононных взаимодействий, выполненного на основе экспериментальных температурных (77÷300 K) данных (по поглощению и ФЛ), полученных для полупроводниковых КТ CdSe/ZnS (d_{CdSe}=3.0 нм, 2 монослоя ZnS), стабилизированных триоктилфосфин оксидом (ТОФО) в смеси метилциклогексан-толуол (6:1), образующей прозрачную матрицу при низких Т.

Температурная зависимость ширины запрещенной зоны E_g проанализирована в рамках модели Дебая $E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (T + \theta_D)$ и Эйнштейна $E_g(T) = E_g(0) - k / [exp(\theta_E / T) - 1]$ для экситон-фононных взаимодействий, где $E_g(0)$ - энергия запрещенной при 0 К, α - константа и θ_D - температура Дебая, к – константа и θ_E - температура Эйнштейна. Полученные результаты объясняются в рамках простой модели 3D потенциальной ямы с конечными барьерами, в которой температур-ные зависимости энергии запрещенной зоны



для ядра CdSe и слоев ZnS являются различными.

В случае, когда температурно-зависимое неоднородное уширение сравнимо с однородным параметры экситон-фононных уширением, взаимодействий были определены из анализа экспериментальных данных по полуширине (FWHM) полосы ФЛ при вариации температуры: FWHM(T) = Γ (T) = Γ _{inh} + σ T + Γ _{LO}/ $[\exp(E_{LO} / k_B T) - 1],$ где Г_{inh} - величина неоднородного уширения, параметр Γ_{LO} определяет силу экситон-фононной связи с участием LO фононов с энергией ELO, оТ отражает процессы прямой дефазировки через акустические фононы.



Результатов теоретического анализа показывают, что частотные и энергетические параметры экситон-фононных взаимодействий, найденные из фитирования экспериментальных данных по поглощению, отличаются (хотя и не очень существенно) от таковых, определенных из экспериментальных данных по ФЛ. Это различие связывается с тем, что спектры поглощения формируются за счет экситон-фононных взаимодействий с участием оптических LO фононов ядра CdSe, тогда как формирование полосы ФЛ происходит также и с участием оптических фононов слоя ZnS.



С понижением температуры интенсивность ФЛ индивидуальных КТ CdSe/ ZnS (кривая 1) возрастает за счет возрастания квантовой эффективности экситонной ФЛ, обусловленной уменьшением электрон-фононного взаимодействия с оптическим фононами и ослаблением термически активированного захвата носителей. Нарушение монотонного хода этой зависимости

ФЛ для КТ в области 220-230 К (вдали от температуры стеклования T=151.6 К растворителя) связано с «фазовой» поверхностной перестройкой слоя стабилизирующих молекул ТОФО. Более того, для наноансамблей «КТ+порфирин» (1:1) в интегральных зависимостях интенсивности полос ФЛ КТ от температуры проявляются более выраженные эффекты.

Совокупность полученных результатов показывает, что температурные зависимости характеристик спектров поглощения для KT CdSe/ZnS могут быть объяснены проявлением преимущественно экситон-фононных взаимодействий, тогда как изменение свойств фотолюминесценции при вариации температуры может быть обусловлено несколькими причинами.

Финансовая поддержка: ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций 2021-2025 г.г., Беларусь), Грант Президента Республики Беларусь в науке на 2020 г. и Visiting Scholar Program (ТУ Хемнитца, Германия, 2020-2021 г.г.).

УДК 537.528

К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский, А. А. Казьмин

ПОГЛОЩЕНИЕ НАНОСУСПЕНЗИЙ ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПРОВОДНИКОВ В ВОДЕ

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь <u>znosko@rambler.ru</u>

Наноструктуры металлов и их сплавов, полупроводников и композитов получили широкое применение в электронике и энергетике, производстве новых материалов, чипов, сенсоров, солнечных батарей, лекарств, биологии и медицине [1-2]. Перспективным и высокоэффективным методом получения наноструктур различного типа является электрический взрыв твердофазных материалов в жидкости [2-4]. Изменяя параметры электрического взрыва можно управлять составом, размерным распределением и свойствами синтезируемых наноструктур.

В настоящей работе представлены результаты исследования оптических свойств наносуспензий полученных электрическим взрывом проводников в воде.

Синтез наночастиц проходил в плазме электрического взрыва металлических проводников на установке, которая разработана на основе систем питания эксимерных электроразрядных лазеров и ламп [4–5]. Импульс электрического тока большой величины формировался аналогично [6]. Электрическому взрыву подвергались тонкие проволочки меди, никеля, нихрома, алюминия и др. диаметром ~0,5 мм.

На рис. 1 представлены зависимости оптической плотности дистиллированной воды и наносуспензий никеля от длины волны, рабочего напряжения и числа взорванных образов в одном и том же объеме воды. Оптическая плотность наносуспензий максимальна в диапазоне коротких волн (до 250 нм). В диапазоне длин волн 300-800 нм она оставалась практически постоянной. С ростом рабочего напряжения она практически не изменялась, с ростом числа взорванных образов в одном и том же объеме воды возрастала. В диапазоне 300-800 нм разность оптической плотности наносуспензий и дистиллированной воды составляла ~0,15. В диапазоне длин волн 200-250 нм она оставляла 0,20 - 0,32, что указывает на наличие нелинейного поглощения обусловленного наночастицами никеля.



Рис. 1. Оптическая плотность наносуспензий никеля от длины волны



На рис. 2 приведены зависимости оптической плотности наносуспензий биметалла Cu-Ag (A) и Ni-Cr сплава (Б) от длины волны. На кривой оптической плотности наносуспензии, содержащей наноструктуры биметалла Cu-Ag, наблюдаются два выраженных максимума. Максимум в области 220 нм принадлежит наноструктурам меди, а максимум в области 400 нм – наноструктурам серебра. Наличие этих максимумов говорит о том, что в наносуспензии присутствуют как частицы меди, так и серебра. Слабо проявившаяся полоса в области ~330 нм обусловлена переходами в Cu₂O. Можно также предположить, что в наносуспензии присутствуют металлические частицы в оксидной оболочке и частицы одного металла в оболочке другого.

Оптическая плотность наносуспензий Ni-Cr представляют собой монотонно спадающую в длинноволновую область спектра кривую. В окрестностях 220 нм, 300 нм и 500 нм наблюдаются слабые полосы поглощения. Так как мы имеем дело со сплавом, то и синтезированные наноструктуры также состоят из Ni-Cr сплава. Вероятность того что в плазме произошло разделение атомов и синтез наноструктур Ni и Cr не высокая.

- 1. Burakov V. S. Synthesis of tungsten carbide nanopowder via submerged discharge method / V. S. Burakov [et al.] // Journal of Nanoparticle Research. 2008. Vol. 10, No. 5. P. 881–886.
- 2. Ремпель А. А. Нанотехнологии, свойства и применение наноструктурированных материалов / А. А. Ремпель // Успехи химии. 2007. Т. 76, № 5. С. 474–500.
- 3. Сергиенко И. Г. Получение наноразмерных частиц методом электроразрядного разрушения материалов в жидкости и исследование их свойств / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка.– 2017.– Т. 7, № 1.– С. 56–65.
- Сергиенко И. Г. Получение наночастиц и суспензий на их основе методом электроразрядного разрушения в жидкости при микросекундном импульсе / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский //Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка.–2018.– Т.8, №1.– С.50–61.
- 5. Сергиенко И. Г. Влияние временного фактора на поведение наночастиц меди и суспензий на их основе, полученных методами импульсной лазерной абляции и электроразрядного разрушения / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, С. Д. Лещик // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка. 2017. Т. 7, № 2. С. 47–57.
- Зноско К. Ф. Конструкция и характеристики ХеСІ-эксилампы с возбуждением импульсным разрядом / К. Ф. Зноско // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка. – 2019. – Т. 9, № 2. – С. 81–91.

УДК 535.391: 621.376

С.В.Васильев, И.К.Губаревич, А.Ю. Иванов, А.Л.Ситкевич

ФОРМИРОВАНИЕ СВЕТОДЕТОНАЦИОННОГО КОМПЛЕКСА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА, НАХОДЯЩЕГОСЯ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230022 Гродно, Беларусь ion_ne@mail.ru

Целью данной работы является исследование влияния электрических полей различной напряженности (от 0 до 10⁶ В/м) на пространственную и временную эволюцию лазерной плазмы, возникающей при воздействии миллисекундных лазерных импульсов на поверхности металлов (медь, алюминий, олово, свинец) и установление закономерностей формирования рельефа поверхности облучаемых образцов.

Описана методика экспериментальных исследований взаимодействия лазерного излучения с металлическими образцами. В качестве источника излучения, воздействовавшего на металлический образец, использовался рубиновый лазер ГОР-100М (длина волны $\lambda = 0.694 \mu$ м), работавший в режиме свободной генерации. Длительность воздействовавшего на мишень импульса составляла ~1.2 мс. Энергия лазерных импульсов варьировалась в пределах от 5 до 60 Дж.

Описана методика скоростной голографической киносъемки [1], позволяющая получать отдельные кадры интерферограмм с временным разрешением не хуже 0,8 мкс (время экспозиции одного кадра) и пространственным разрешением по полю объекта 50 мкм.

На основании анализа временного изменения вида интерферограмм, рассчитаны зависимости скорости перемещения фронта плазменного факела от времени при различном направлении вектора напряженности внешнего электрического поля. Обнаружено, что вплоть до достижения плазменным фронтом второго электрода (первым электродом является облучаемый образец) его скорость не только не уменьшается (что характерно для поздних стадий существования лазерного факела), но увеличивается, причем как при наличии внешнего электрического поля любой ориентации, так и в его отсутствие. Максимальные скорости разлета плазменного факела составили 350 м/с при отрицательном напряжении на мишени, 310 м/с без внешнего электрического поля и 270 м/с при положительном напряжении на мишени.

Интерферограммы также показывают, что электрический пробой, происходящий при достижении плазменного облака второго электрода, приводит к взрывному росту плотности электронов в плазменном образовании. В отверстии второго электрода образуется плазменный сгусток, в пределах которого плотность электронов превышает 10^{20} cm-3, что означает полную ионизацию продуктов эрозии в плазменном образовании. Это приводит к эффективному поглощению лазерного излучения плазменным факелом и, как следствие, к экранировке мишени от воздействующего излучения.



Рисунок 1. Интерферограммы сгустка лазерной плазмы, наблюдаемого после электрического пробоя. Интерферограммы получены через 90 (a), 150 (b), 270 (c), 360 (d), 450 (e), 510 (f) микросекунд после начала лазерного воздействия на свинцовый образец.

Плазменный сгусток перемещается со скоростью, превышающей скорость звука, от второго электрода в направлении, противоположном направлению распространения воздействующего на мишень лазерного излучения. Это говорит о возникновении светодетонационного комплекса [2], что является типичным для таких значений плотности электронов. Следует отметить, что в светодетонационной волне не только плотность электронов, но и температура возрастает в несколько раз по сравнению с плазменным облаком, наблюдаемым вблизи от облучаемого образца.

В связи с возникновением экранировки мишени от воздействующего лазерного излучения после достижения плазменным облаком второго электрода формирование жидких металлических капель продолжается только в период существования электрического поля. Это объясняет многократное уменьшение характерных размеров капель, наблюдаемых при наличии электрического поля, по сравнению с каплями, сформировавшимися при его отсутствии, несмотря на кратковременность существования внешнего электрического поля по сравнению с длительностью воздействующего лазерного импульса.

- [1].Барихин, Б. А. Скоростная голографическая киносъемка лазерной плазмы / Б.А.Барихин, А.Ю.Иванов, В.И.Недолугов // Квантовая электроника. 1990. Т. 17, № 11 С. 1477 1480.
- [2]. Немчинов, И.В. Экспериментальные и теоретические исследования радиационноплазмодинамических процессов взаимодействия теплового и когерентного излучения и сильных ударных волн с веществом в различных агрегатных состояниях / И.В.Немчинов // Радиационная плазмодинамика. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 376 с.

УДК 535.5

Е. П. Пантелеева, К. Г. Комяк

ПРОСТРАНСТВЕННО СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СВЕТОВЫХ ПОЛЕЙ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь pantsialeyevakate@gmail.com

Создание электрически управляемых элементов с высокой дифракционной эффективностью, формирующих световое поле с заданным пространственнополяризационным распределением, является одной из актуальных задач фотоники. Способность директора жидкокристаллической (ЖК) мезофазы переориентироваться во внешнем электрическом поле (порядка 1-10 В) обеспечивает возможность реализации различных режимов работы дифракционных ЖК-структур [1].

Настоящее исследование посвящено разработке технологии создания и исследованию свойств переключаемых дифракционных нематических ЖК-элементов, выполняющих функции преобразования исходно регулярного волнового фронта в фронт с заданными поляризационными и фазовыми характеристиками. Периодическая микроструктурированная ориентация директора в тонком слое нематического ЖК формировалась с помощью фотоориентации азокрасителя AtA-2, чувствительного в синей области спектра [2].

В ходе выполнения работы созданы дифракционные ЖК-решётки методами поляризационной голографии и текстурированной фотоориентации. Перспективность формирования жидкокристаллических дифракционных решёток методом голографической записи связана с относительно простой технологией создания компактных оптоэлектронных устройств. Структурная схема оптоэлектронных голографических ЖК-элементов представляет собой стандартную ячейку типа «сэндвич» с капиллярным зазором толщиной 7 мкм, заданным оптоволоконными спейсерами. В работе использовался ЖК с положительной оптической анизотропией ($\Delta n = 0,18$).

Поляризационно-голографическая запись поверхностной анизотропии в тонких плёнках азокрасителя AtA-2, нанесённых на стеклянные подложки склеенного ЖКосуществлялась по схеме Лейта-Упатниекса. Поляризационные элемента, пропускающие решётки записывались световой картиной суперпозиции опорного и объектного пучков с взаимно ортогональными в плоскости ЖК-ячейки линейными и поляризациями на λ=488 HM. циркулярными длине волны Заполнение электрооптических элементов жидким кристаллом происходило после записи голографических решёток.

На основе двухэтапной технологии облучения созданы дифракционные ЖК элементы с бинарной ориентацией ЖК, включающие твист-планарную и ортогональную твист-твист структуры. ЖК-решётка с твист-планарной ориентацией директора ЖК представляет собой чередование доменов с планарной ориентацией и твист-ориентацией с углом закрутки ЖК β =90⁰. ЖК-структура с ортогональной твисттвист ориентацией состоит из чередующихся доменов с противоположно закрученной ориентацией директора ЖК с углами закрутки β_1 =+45⁰, β_2 =-45⁰. Характерной особенностью дифракции на структуре с твист-планарной ориентацией ЖК является существенное уменьшение интенсивности четных дифракционных максимумов при отсутствии напряжения на ЖК ячейке, при этом было установлено, что поляризация в соседних порядках дифракции ортогональна, что характерно для дифракции на поляризационных фазовых решетках. Кроме того, стоит отметить, что поляризации +1го и - 1-го порядков дифракции одинаковые.

С помощью разработанного метода поляризационной голографии создан электрически переключаемый дифракционный поляризационный ЖК-элемент, формирующий оптические вихри в +1 и -1 порядках дифракции (рис. 1). Экспериментально исследованы зависимости дифракционных характеристик от внешнего управляющего напряжения на ЖК-ячейке. Проанализирована устойчивость фазовой топологии сингулярных пучков при воздействии внешнего напряжения на ЖКэлемент.



Рис. 1. – Микрофотографии: *а* – картины интерференции плоской волны и оптического вихря с топологическим зарядом *l* = 11 и распределения интенсивности оптического вихря в -1 (б) и +1 (в) порядках дифракции

Таким образом, изготовленные ЖК-элементы позволяют осуществлять пространственно-поляризационное управление излучением при помощи внешних электрических полей. Продемонстрированы возможности использования разработанных ЖК-элементов в качестве поляризационных делителей, а также элементов, формирующих световые поля с заданной фазово-поляризационной структурой.

- [1] Polarization Properties of the Electrically Controlled Twist-Planar Liquid Crystal Diffraction Structure / Melnikova E., Stashkevich I., Rushnova I., Tolstik A. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems, vol. 25, no. 3 (2022), pp. 229 – 244
- [2] Mikulich V.S., Murauski An.A., Muravsky Al.A., Agabekov V.E. //Appl. Spectr. 2016. V. 83 (1). P.115-120.
УДК 535.343.2

Ю. А. Кальвинковская, Т.А. Павич, В. А. Лапина

РАЗРАБОТКА ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ ТЕСТ-СИСТЕМЫ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ГАЛОГЕНОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.lapina@dragon.bas-net.by

Проблема контроля содержания пестицидов в объектах окружающей среды является сложной аналитической задачей, связанной с их низкими концентрациями и процессами взаимодействия с компонентами матрицы. Существуют различные методы их детекции: химические, биологические, биохимические [1–3]. К недостаткам известных методик определения пестицидов следует отнести длительность анализа, необходимость тщательной очистки экстракта, не всегда удовлетворительную селективность и чувствительность, высокую стоимость оборудования и реактивов, а также невозможность использования для измерений на месте для быстрого обнаружения опасных галогенуглеводородов (ГУ) в окружающей среде. Поэтому идет постоянный поиск и разработка новых высокочувствительных методов определения ГУ в окружающей среде.

Нами была поставлена задача разработки высокочувствительного оптического метода определения ГУ в водных средах с использованием нанотехнологических подходов. В основу предлагаемого метода положены полученные ранее данные об эффекте многократного усиления флуоресценции продуктов фототрансформации триптофана (ФТТ) в присутствии ГУ при облучении [4,5], а также обнаруженный нами эффект значительного увеличения интенсивности интегральной флуоресценции продуктов ФТТ при использовании в качестве сигнального агента ФТТ ковалентного комплекса наноалмаз-триптофан ND-Tr [6].



Рис.1. Спектры возбуждения флуоресценции (А) и флуоресценции (В) соединений в DMSO в присутствии хлороформа (1.0·10⁻³ M): 1 – триптофана (1.0·10⁻⁴ M), 2 – комплекса ND-Tr, 3 – суспензии ND+Tr (1.0·10⁻⁴ M) после облучения на 280 нм, 4 –

спектр возбуждения флуоресценции (А) и флуоресценции (В) суспензии ND+Tr до облучения. Длина волны возбуждения 365 нм, длина волны регистрации 450 нм.

Так на рис.1 показано, что в присутствии хлороформа для трех растворов триптофана, комплекса ND-Tr и суспензии ND+Tr в DMSO после облучения УФсветом при возбуждении 365 нм наблюдалось появление широкой интенсивной полосы флуоресценции в спектральном диапазоне от 400 нм до 600 нм с максимумом в районе 450 нм, соответствующей флуоресценции продуктов ФТТ (формилкинуренинов, кинуренинов и др). Из рисунка видно, что наиболее эффективно реакция протекает в системе с ковалентным комплексом ND-Tr.

Применимость данной реакции ФТТ была протестирована на Арохлоре 1254, содержащего 54% хлора со средним числом атомов хлора в его молекуле – 4,9, средняя молекулярная масса – 324, применяющегося в качестве стандарта при определении полихлорированных бифенилов (ПХБ) или дифенилов (ПХД) (стандарт США) и прохлоразе, который входит в состав комбинированного фунгицида «Замир», используемого против широкого диапазона заболеваний, повреждающих фрукты, овощи и полевые культуры. Для всех тест-систем, содержащих Арохлор 1254 и прохлораз, после облучения УФ-светом наблюдалось появление широкой интенсивной полосы флуоресценции в спектральном диапазоне от 400 нм до 600 нм с максимумом в районе 460 нм, соответствующей флуоресценции продуктов ФТТ. Степень чувствительности обнаружения данных ГУ составляла до 10⁻⁶ – 10⁻⁹ моль/л.

Таким образом, нами предлагается простой, эффективный оптический метод индикации аналитического сигнала с высоким пределом чувствительности для оценки содержания ГУ. Реализация данного метода основана на новом инновационном нанотехнологическом подходе с использованием наноалмазных частиц. Предложенная тест-система может быть применима для экспресс-контроля тестируемых стойких органических загрязнителей (СОЗ) в различных объектах окружающей среды. работниками аналитических лабораторий, инспекционных органов надзора за состоянием окружающей среды, работники предприятий, имеющие в качестве отходов СОЗ, осуществляющие контроль промышленных стоков.

- [1] Золотов Ю.А., Иванов В.М., Амелин В.Г. Химические тест-методы анализа. // М.: Едиториал УРСС. 2002. 304 с.
- [2] Зырянов В.В., Гольдфейн М.Д. Иммунохимические и биосенсорные методы анализа экотоксикантов окружающей среды. // Экологическая химия. 2002. № 11(1). С.45.
- [3] Rathore U.S., Sharma S.R., Mital S. Spot test analysis of pesticides: detection of carbaryl and mancozeb in water. // Water, Air and Soil Pollut. 1997. V.97. P.431.
- [4] Vorobey A.V., Chernitskii Ye.A., Konev,S.V., et. al. Chloroform-dependent photoproducts of tryptophan. // Biophysics. 1992. V.37. P.743.
- [5] Carol L. Ladner, Khai Tran, Mary La, et. al. Excited state photoreaction between the indole side chain of tryptophan and halocompounds generates new fluorophores and unique modifications. // Photochemistry and Photobiology. - 2014. - V.90. - P.1027.
- [6] Кальвинковская Ю.А., Павич Т.А., Романенко А.А и др. Влияние наноалмазов на усиление флуоресценции продуктов реакции фототрансформации триптофана в присутствии галогенуглеводородов. // Оптика и спектроскопия. 2022. Т.130. С.1646.

УДК 535.37

В. А. Лапина, Ю. А. Кальвинковская, Т.А. Павич, С.Б. Бушук

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕЗО-ТЕТРА(4-КАРБОКСИФЕНИЛ)ПОРФИРИНА В СОСТАВЕ КОВАЛЕНТНОГО КОМПЛЕКСА С НАНОАЛМАЗНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.lapina@dragon.bas-net.by

В настоящий момент проводятся многочисленные исследования по поиску носителей для молекул порфиринов, которые позволяют модулировать их те или иные свойства [1]. Одними из них являются наноалмазные частицы (ND), так как они могут образовывать биологически активные гибридные органо-неорганические комплексы [2], препятствуя общирной агрегации и сохранению свойств порфиринов, присущих их мономерной форме.

Одним из подходящих порфиринов для комплексообразования с ND является мезо-тетра(4-карбоксифенил)порфирин (TCPP). Он имеет 4-е свободные симметрично расположенные концевые карбоксильные группы удобные для комплексообразования с ND и, кроме того, хорошо растворим в водных растворителях.

На рис.1 (а и б) приведены спектры возбуждения флуоресценции и флуоресценции свободного ТСРР и включённого в нанокомплекс (ND-TCPP). Как видно, в спектре возбуждения наблюдаются характерные для порфиринов интенсивная полоса Соре в области 400 nm и обычно используемые для фотодинамической терапии Q-полосы поглощения в видимой области 450 – 650 нм. По порядку интенсивности Q-полос ТСРР в данных условиях можно отнести к этио-типу [3]. Спектры флуоресценции свободного порфирина и в составе нанокомплекса имеют две полосы испускания: полоса I (максимум 650 нм) и полоса II (максимум 718 нм) и имеют незначительные отличия.



Рисунок 1 – Спектры возбуждения флуоресцении (а) и флуоресценции (б): 1 – ТСРР; 2 – ND-TСРР в фосфатном буфере (pH 7.4) с 5% DMSO; λ воз.= 420 нм, λ рег.=650 нм.

Таким образом, конъюгирование порфирина с наночастицами не оказывает существенного влияния на электронно - возбужденные уровни TCPP, что способствует сохранению его свойств близких к свойствам в мономерной форме и является важным

фактором для использования полученного нанокомплекса в качестве фотосенсибилизатора. В работе [4] было доказано образование ковалентного комплекса ND-TCPP методами поляризационной стационарной спектроскопии.

Методами флуоресцентной микроскопии было исследовано взаимодействие ТСРР с живыми клетками в свободном виде и в составе комплекса. В качестве культуры клеток была выбрана суспензии клеток почечной ткани обезьяны BGM в буферной среде. Концентрация клеток в суспензии составляла от 5 000 до 20000 кл/мл. Наблюдение за клетками показало, что практически сразу после введения комплекса в клеточную среду ТСРР в составе конъюгата активно проникает в клетки. Практически все клетки становятся заметно окрашенными, а межклеточная среда проявляла слабую флуоресценцию. При добавлении в клеточную среду свободного ТСРР лишь незначительная часть клеток проявляет внутриклеточную флуоресценцию. Вероятно, только клетки с поврежденной клеточной мембраной могут быстро поглощать свободный порфирин и проявлять флуоресценцию. На рисунке 2 приведены изображения клеток, облучённых в суспензии в присутствии ТСРР, комплекса ND-ТСРР и окрашенных пропидий иодидом. В подвергнутом фотосензибилизируемому воздействию образце появляются прокрашенные пропидий иодидом клетки. Такая прокраска свидетельствует о повреждении ядерных мембран, что позволяет пропидий иодиду войти в клеточное ядро и связаться с нуклеиновыми кислотами с образованием флуоресцирующего комплекса.



Рисунок 2 - Изображения клеток BGM в свете флуоресценции пропидий иодида после фотосенсибилизируемого воздействия (1) ТСРР и (2) ND-TСРР. Время облучения излучением ртутной лампы 5 мин (0,42 Вт/см²)

Анализ данных показал, что в присутствии ТСРР доля погибших клеток составила 42%, а в присутствии комплекса ND-TCPP - 64%. Таким образом, ТСРР в составе коньюгата ND-TCPP при облучении сохраняет свою фотодинамическую активность и способен приводить к фотодинамической гибели клеток.

- [1] Marie E., Landfester K., Antonietti M. // Biomacromolecules. 2002. V.3. P.475.
- [2] Lapina V.A., Bushuk S.B., Pavich T.A., Vorobey A.V. New generation of photosensitizers: conjugates of chlorine e6 with diamond nanoparticles. // Journal of Applied Spectroscopy. – 2016. – V.83. – P.344.
- [3] Гуринович Г.П., Севченко А.Н., Соловьёв К.Н. Спектроскопия хлорофилла и родственных соединений. // Минск: Наука и техника. 1968. 517 с.
- [4] Кальвинковская Ю.А., Цаплев Ю.Б., Трофимов А.В. и др. Анизотропия и спектроскопические свойства коплексов молекул мезо-тетра (4карбоксифенил)порфирина с алмазными наночастицами. // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т.128. – С.1363.

УДК 538.958

В.В. Малютина-Бронская¹, А.В. Семченко², А.В. Рогачев², М.А. Ярмоленко², В.В. Сидский², К.Д. Данильченко², С.А. Сорока¹

ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ К УЛЬТРАФИОЛЕТОВОМУ ИЗЛУЧЕНИЮ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫЕ СЛОИ ZnOx:MgO НА КРЕМНИИ

¹ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», пр. Независимости, 68-1, 220072 Минск, Беларусь <u>malyutina@oelt.basnet.by</u>

²Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, ул. Советская, 104, 246019 Гомель, Беларусь <u>alina@gsu.by</u>

Поиск новых материалов для датчиков чувствительностью с к ультрафиолетовому (УФ) излучению является актуальной задачей. ZnO отличается высокой подвижностью электронов, хорошей теплопроводностью, широкой и прямой запрещенной зоной (Eg ~ 3,37 эВ) [1]. Нелегированные тонкие пленки ZnO обладают фоточувствительность в видимой области спектра из-за наличия собственных дефектов. Для варьирования оптических и электрических свойств ZnO легируют металлами из периодической таблицы группы III, такими как B, Al, Mg, Ca, Cd и Ga [2]. Для увеличения ширины запрещенной зоны выбирают легирующий элемент такой, чтобы в итоге образовалось соединение с небольшими искажениями кристаллической решетки. Радиус иона Mg²⁺ (0,57 A) сравним с радиусом иона Zn²⁺ (0,60 A), что делает Мg подходящим для замены в решетке Zn и облегчения увеличения запрещённой зоны [3]. Основной целью настоящей работы является оценка эффективности использования золь-гель метода при формировании сложнооксидных соединений ZnO_x:MgO с шириной запрещенной зоны свыше 5 эВ и определение их чувствительности к УФизлучению.

Золь-гель метод центрифугирования с использованием раздельного гидролиза. В качестве исходных материалов использовали дигидрат ацетата цинка; ацетат магния; изопропиловый спирт; дистиллированная вода; диэтаноламин. Плёнкообразующий раствор был приготовлен следующим образом: ацетат цинка и ацетат магния отдельно растворяли в изопропиловом спирте и перемешивали при 60 °C в течение 10 минут. Аналогично изготавливался золь на основе ацетата магния. Затем золи смешивались в различных концентрациях для получения пленок с различным соотношением компонентов (1:1, 1:2, 1:5). Осаждение пленки производилось методом центрифугирования со скоростью вращения 2000 об/мин в течение 40 с последующей сушкой каждого слоя при 60 °C в течение 10 минут. Окончательную термообработку производили при температурах 250 °C и 450 °C в течение 30 минут. После нанесения пятого слоя проводили отжиг при температуре 550 °C в течении часа. Толщина получаемых пленок (пять слоёв) составляла порядка 0,4 мкм. В качестве подложек использовали кварцевое стекло и 2 типа кремниевых пластин: КДБ- 4,5(р-тип); КЭФ-20 (n-тип).

Значение ширины запрещенной зоны покрытий определяли на основании анализа спектров поглощения, получаемых с помощью спектрофотометра Cary-50 (Varian, CША). Измерение фотоэлектрических характеристик (вольт-амперные характеристик) проводилось на автоматизированном базовом лазерном испытательном комплексе, где в качестве источника излучения используется набор из 9 лазерных диодов с длинами

волн 405, 450, 520, 660, 780, 808, 905, 980 и 1064 нм с общим оптоволоконным выводом с калиброванной мощностью излучения порядка 2 мВт. В качестве источника УФ (278 нм) использовался светодиод TO-3535BC-UVC265-30-6V-Е мощностью 300 мкВт, размещенный в специализированной оснастке.

Золь-гель слои ZnO_x:MgO с различным содержанием Mg характеризуются светоослаблением в видимом диапазоне от 5 до 10 %. Поскольку на спектре поглощения некоторых пленок имеется два максимума, то им будут соответствовать двум значениям запрещенной зоны (*Eg*) (рис.1, а). Значение *Eg* в диапазоне 3,21 - 3,36 эВ указывает на доминирование в тонкослойной системе ZnO (Еg порядка 3,37 эВ). Для слоев ZnO_x:MgO, с высоким содержанием Mg, *Eg* составляет 5,7 - 6,2 эВ.

По экспериментальным фотоэлектрическим вольт-амперным характеристикам было установлено, что структуры слои ZnO_x:MgO/Si обладают фоточувствительностью в видимом и/или УФ диапазоне. Для пленок ZnO_x:MgO на кремниевых подложках КДБ-4,5 фоточувствительность оказалась существенно ниже, чем для пленок, нанесенных на кремниевые подложки КЭФ-20. Селективной чувствительностью к УФ и коротковолновой части видимого диапазона обладали только образцы с большой шириной запрещенной зоны более 5 эВ (рис. 1,6).



Рисунок 1 - Ширина запрещенной зоны пленок ZnO_x:MgO в зависимости от состава золя (а) и спектральная чувствительность структур ZnO_x:MgO/Si (КЭФ-20) для образцов: 1(1:5) (графики 1 и 2) и 3(1:5) (графики 3 и 4) при напряжении смещения U= 10 B и U= 14 B, соответсвенно (б).

Полученные структуры ZnO_x:MgO/Si с *Eg* (ZnO_x:MgO) ~ 6,2 эВ проявляют селективную фоточувствительность к УФ- излучению при приложении напряжения более 10В. Спектральная чувствительность к УФ-излучению (278 нм) составляет от 0,3 А/Вт до 3,23 А/Вт при смещении от 10 В до 14 В, соответсвенно. В остальном диапазоне исследуемых длин волн чувствительность незначительна и близка к нулю.

- [1] ZnO-Based Ultraviolet Photodetectors/ K. Liu, M.Sakurai, M. Aono//Sensors 2010.-№ 10.- P.8604-8634.
- [2] Sabayev, V. Induced surface reactivity modification in Zinc oxide-based thin films // V. Sabayev, D. Aronov, L. Oster, G. Rosenman /Appl. Phys. Lett.- 2008. Vol. 93. №144.
 P. 104
- [3] Effect of magnesium dopant on the structural, morphological and electrical properties of ZnO nanoparticles by sol-gel method / S. J. Priscilla [et al.] // Materials Today: Proceedings. – 2021.- Vol. 36.- P. 793-796.

УДК 538.911, 536.212

А. С. Федотов¹, П. В. Доброгост¹, И. А. Зур², Я. Д. Титовец¹, В. Э. Мрочко¹, А. К. Страусов³

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, Минск, Беларусь Fedotov.alehandro@gmail.com dobrosun02@gmail.com

² НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская 11, 220030, Минск, Беларусь ³ Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости 64, 20013, Минск, Беларусь

В последнее время актуальность приобрело использование наноразмерных пленок алмазоподобного углерода (АПУ) в качестве резистивных покрытий электродов детекторов заряженных частиц для повышения стабильности их функционирования, что указывает на необходимость исследования электрических и теплофизических характеристик АПУ.

Целью работы является создание программного комплекса для облачных вычислений и получение с его помощью информации о структурных (степень кристалличности, плотность фононных состояний) и теплофизических (коэффициенты самодиффузии, теплоемкости и теплопроводности) свойствах наноразмерных АПУ толщиной до 20 нм. Для исследования свойств АПУ был выбран метод молекулярной динамики (МД).

Плёнки АПУ состоят из атомов углерода, связь между которыми реализуется посредством sp^2 и sp^3 гибридизации электронных облаков. В настоящем исследовании, в качестве стартовой конфигурации выбрана ГЦК решётка алмаза (угол межатомной связи 109,5°), в которую внедряются структурные дефекты концентрации n.

Радиальные функции распределения построены для анализа структуры алмазной решетки. На рисунке 1 можно видеть, что при увеличении температуры происходит уширение пиков плотности вероятности, которое объясняется увеличением энергии колеблющихся атомов, а значит и неопределённостью положения атома в пространстве. При температуре системы 3250 К и выше видно, что в переферийных частях системы наблюдается стадия предплавления (для поверхностных атомов температура плавления меньше, чем для атомов объёма). При достижении концентрации структурных дефектов $n \approx 25\%$ система утрачивает дальний порядок.

На рисунке 2 вставке представлено распределение межатомных связей по углам, из которого видно, что при достижении $n \approx 50\%$ происходит образование двух отдельных фаз: алмазоподобной и графитоподобной.

При температуре 300 К рассчитан коэффициент самодиффузии $D = 1.56 \cdot 10^{-19} \pm 0.63 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2 c^{-1}$



Рисунок 1 – Радиальные функции распределения при различной температуре *T* и концентрации дефектов *n*



Рисунок 2 – Плотность вероятности распределения межатомных связей по углам при различной концентрации дефектов *n*

УДК 548.571; 539.143.43; 535.343.2

А. П. Низовцев^{1,2}, А. Л. Пушкарчук^{2,3}, С. А. Кутень⁴, D. Lyakhov⁵, D.L. Michels⁵, Н.И. Каргин², С.Я. Килин¹

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КЛАСТЕРАХ АЛМАЗА С НЕЙТРАЛЬНЫМИ ЦЕНТРАМИ ОКРАСКИ SiV, GeV, SnV и PbV: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

apniz@dragon.bas-net.by, sergei_kilin@yahoo.com

² Национа́льный иссле́довательский я́дерный университет «МИФИ́», Каширское ш., 31, 11540 Москва, Россия

apniz@dragon.bas-net.by, alexp51@bk.ru, NIKargin@mephi.ru

³ Институт физико-органической химии НАН Беларуси, ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Беларусь

alexp51@bk.ru

⁴ Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская 11,220030, Минск, Беларусь semen kuten@list.ru

⁵ King Abdullah University of Science and Technology (KAUST), Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia

dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa, dominik.michels@kaust.edu.sa

В связи с разработкой квантовых технологий второго поколения в последние годы большое внимание уделяется изучению гибридных электронно-ядерных спиновых систем в алмазе [1], состоящих из парамагнитных центров окраски, связанных сверхтонким взаимодействием (СТВ) с ядерными спинами изотопических атомов ¹³С, присутствующими в решетке естественного алмаза в количестве ~1.1%. Наиболее известным и хорошо изученными представителями таких систем являются центры "азот-вакансия" (NV центры) и их комплексы NV-¹³C с атомами ¹³С. Недавно были обнаружены и идентифицированы другие центры окраски в алмазе, обладающие даже лучшими характеристиками для различных квантово-технологических приложений. Среди них значительное внимание привлекли связанные с вакансиями элементы IV группы (E=Si, Ge, Sn, Pb) [2] поскольку большая часть их флуоресценции приходится на узкую (~1 нм) бесфононную линию, тогда как для NV центра эта доля составляет всего ~4%. Предыдущие исследования этих дефектов в основном были сосредоточены на отрицательно заряженных центрах ЕУ, основное состояние которых имеет электронный спин S=1/2. Однако для них времена спиновой когерентности слишком малы для практических приложений, за исключением работы при субкельвиновых температурах.

Между тем, существуют нейтральные аналоги этих дефектов, имеющие орбитальное синглетное основное состояние с электронным спином S=1 [3-6], имеющие значительно большие времена спиновой когерентности. В частности, было показано [4,5], что нейтральный центр SiV⁰ имеет время спиновой когерентности порядка секунды при гелиевых температурах. Считается [6], что

все аналогичные нейтральные примесно-вакансионные центры должны иметь такие присущие им большие времена когерентности, что делает их интересными для квантово-технологических приложений. К настоящему времени изучены в основном электронные и оптические характеристики таких центров [4-6]. Данные СТВ известны только для ближайших к Si атомов ²⁹Si и ¹³C в центре SiV⁰ [3]. Между тем, существенной предпосылкой для высокоточного манипулирования спином в этих системах является полное знание характеристик CTB. Их теоретическое предсказание для указанных связанных электронно-ядерных спиновых систем EV⁰-¹³C в алмазе является целью настоящей работы.

Используя теорию функционала плотности (DFT) мы выполнили моделирование пассивированных водородом кластеров алмаза $C_{84}[EV^0]H_{78}$ (E=Si, Ge, Sn, Pb), содержащих нейтральные центры окраски SiV⁰, GeV⁰, SnV⁰ и PbV⁰, и рассчитали матрицы A_{KL} (K,L=X,Y,Z), описывающие сверхтонкие взаимодействия (СТВ) электронных спинов центров с ядерными спинами атомов 13С, расположенных во всех возможных узлах решетки в исследуемых кластерах. Показано, что уровень теории DFT/B3LYP/ЭПР-ii/TZVPP(Si)/decontract обеспечивает получение характеристик СТВ для ядерных спинов ¹³С, являющихся ближайшими соседями атома Si в кластере, близких к имеющимся экспериментальным данным [3]. Используя этот уровень DFT, мы также рассчитали неизвестные тензоры СТВ для всех возможных систем EV^{0-13} С в исследованных кластерах.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект 21-42-04416. All simulations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

[2] Chen D. Building Blocks for Quantum Network Based on Group-IV Split-Vacancy Centers in Diamond. // Chen D., Zheludev N., Gao W. / Adv. Quantum Technol. – 2019. – P. 1900069.

[3] Edmonds A. M. Electron paramagnetic resonance studies of silicon-related defects in diamond. // Edmonds A. M., Newton M. E., Martineau P. M., Twitchen D. J., Williams S. D. / Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 77. – P. 245205.

[4] B. L. Green. Neutral Silicon-Vacancy Center in Diamond: Spin Polarization and Lifetimes. / B. L. Green, S. Mottishaw, B. G. Breeze, A. M. Edmonds, U. F. S. D'Haenens-Johansson, M. W. Doherty, S. D. Williams, D. J. Twitchen, and M. E. Newton // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119. - P. 096402.

[5] Rose B. Observation of an environmentally insensitive solid-state spin defect in diamond / Rose B., Huang D., Zhang Z.-H., Stevenson P., Tyryshkin A., Sangtawesin S., Srinivasan S, Loudin L., Markham M., Edmonds A., Twitchen D., Lyon S., de Leon N. D. // Science. – 2018. – Vol. 361. – P. 60-63.

[6] G. Thiering G. The ($e_g \ge e_u$) $\ge E_g$ product Jahn–Teller effect in the neutral group-IV vacancy quantum bits in diamond // G. Thiering G., A.Gali. / npj Computational Materials. – 2019. – Vol. 5. – P. 18.

^[1] Awschalom D. D. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins // Awschalom D. D., Hanson R., Wrachtrup J., Zhou B. B. / Nature Photonics. -2018. - Vol. 516. – P. 516.

УДК 535.3; 535.375.5:621.375.8; 535:530.182:621.372.632 В. А. Орлович¹, А. И. Водчиц¹, И. А. Ходасевич¹, А. Ю. Пятышев², А. В. Скрабатун², А. А. Русак¹

ПИКОСЕКУНДНЫЙ ВКР-ЛАЗЕР НА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СМЕСИ LiOH И Sr(NO₃)₂

¹ИНСТИТУТ ФИЗИКИ НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>v.orlovich@dragon.bas-net.by</u> ²Физический институт им. П.Н. Лебедева, Ленинский пр., 53, Москва, Россия <u>jb_valensia@mail.ru</u>

Шумовые лазеры (лазеры на разупорядоченных средах) в последние годы привлекают значительное внимание исследователей, что обусловлено возможностями их применения в микроэлектронике, медицинской диагностике и других сферах [1]. К настоящему времени генерация в таких лазерах реализована в различных неорганических И органических материалах. Традиционно шумовые лазеры спектрально широкополосное излучение, ограничивает генерируют что ИХ практическое применение. Этого недостатка лишены шумовые лазеры, основанные на эффекте вынужденного комбинационного рассеяние (ВКР) (ВКР-лазеры), в которых в зависимости от выбранных сред ширина спектра излучения может составлять 1-10 см⁻¹, а генерация может возникать одновременно на нескольких стоксовых и антистоксовых линиях [2].

В настоящей работе мы исследовали процесс ВКР в твердой бинарной поликристаллической смеси LiOH и Sr(NO₃)₂. Выбор составляющих бинарной смеси был обусловлен тем, что для LiOH в спектре спонтанного КР проявляется дыхательная мода с аномально большим частотным сдвигом ~ 3664 см⁻¹, а в Sr(NO₃)₂, напротив, имеется высокоинтенсивная мода, обусловленная полносимметричными внутренними колебаниями группы NO₃ с частотой вблизи 1057 см⁻¹ [3]. В результате создаются условия для получения на такой смеси генерации на нескольких линиях в достаточно широком спектральном диапазоне. Размеры частиц в смеси составляли 5-10 мкм. Смесь содержала 50 % LiOH и 50 % Sr(NO₃)₂ по объему.

Для возбуждения ВКР использовалось излучение второй гармоники (532 нм) пикосекундного (60 пс) Nd:YAG лазера. Измерялись спектры ВКР указанной смеси со спектральным разрешением приблизительно 1 нм. Оценивалась также интегральная мощность преобразованного посредством ВКР излучения. Подробно методика измерений описана в нашей работе [2].

На рисунке приведен спектр ВКР смеси при возбуждении фокусированным излучением с диаметром фокального пятна 50 мкм на поверхности смеси при энергии 11.3 мДж (интенсивность излучения 9×10¹² Вт/см²). Порог возбуждения ВКР в смеси достигался при энергии импульсов 0.3 мДж. Вблизи порога генерируются только две стоксовые линии на колебании 1095 и 3680 см⁻¹. При максимальной энергии импульсов 11.3 мДж в спектре излучения ВКР проявляются четыре линии в длинноволновой (по отношению к длине волны возбуждающего излучения) области спектра,

соответствующие первой стоксовой компоненте на дыхательной моде LiOH со сдвигом 3670 см⁻¹ и трем стоксовым компонентам (1064, 2129, 3183 см⁻¹), относящимся к колебанию группы NO₃ нитрата стронция. В коротковолновой области спектра генерируются первые антистоксовые компоненты со сдвигами 3665 и 1060 см⁻¹, соответствующие указанным выше полносимметричным модам LiOH и Sr(NO₃)₂. Кроме того, в спектре в длинноволновой области присутствуют две слабые линии со сдвигами 2432 см⁻¹ (611 нм) и 3919 см⁻¹ (672 нм), относящиеся к энергетическим



переходам в атомах лития.

Рисунок 1. Спектр ВКР смеси LiOH и $Sr(NO_3)_2$.

Таким образом, при возбуждении ВКР в поликристаллической смеси LiOH и Sr(NO₃)₂ пикосекундным излучением с длиной волны 532 нм генерируются шесть спектральных компонент, расположенных в диапазоне 446 – 662 нм. По оценкам, интенсивности в линиях преобразованного излучения могут более чем на порядок превышать интенсивности, возникающие вследствие спонтанного КР. Следовательно, исследованная поликристаллическая смесь может быть использована для создания многочастотных пикосекундных источников излучения ультрафиолетового-видимого диапазонов спектра.

Авторы выражают благодарность за финансовую поддержку работы Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований РФФИ (проект №Ф21РМ-021).

- [1] Cao H. Lasing in random media. / H. Cao // Waves Random Media. 2003. V. 13. P. R1-R39.
- [2] Pyatyshev A. Yu. Picosecond Raman random lasing in the spectral range of 360-630 nm using powders of potassium, sodium and strontium nitrates. / A. Yu. Pyatyshev, A. V. Skrabatun, A. I. Vodchits, A. V. Larkina, I. A. Khodasevich, V. A. Orlovich // Laser Phys. Lett. - 2023. - V. 20. - 025401 (5pp).
- [3] Каминский А. А. Нитраты Sr(NO₃)₂ и CsNO₃ (II) новые χ⁽³⁾ и χ⁽²⁾ нелинейноактивные кристаллы: многокомпонентное вынужденное комбинационное рассеяние и генерация второй гармоники. / А. А. Каминский, Й. Хуллигер, Г. Эйхлер, Ю. Финдайзен, Ф. Эттер // ДАН. – 1990. – Т. 364, № 6. – С. 761-765.

УДК 548.571; 539.143.43; 535.343.2

В.А.Пушкарчук¹, А.П. Низовцев², Д.С. Могилевцев², С.Я.Килин², А.Л. Пушкарчук³, С.А. Кутень⁴, А.А. Хрущинский⁴, Dmitry Lyakhov⁵, Dominik Ludewig Michels⁵

СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ НА ОСНОВЕ ДВУХ SiV ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. Петруся Бровки, 6, 220013, Минск, Беларусь, <u>pushkarchuk@bsuir.by</u>

²Институт физики им. Б.И.Степанова НАНБ Минск, Беларусь, пр. Независимости, 68 220072Минск, Беларусь

kilin@dragon.bas-net.by, apniz@ifanbel.bas-net.by, dmogilevtsev@yahoo.co.uk

³ Институт физико-органической химии, НАНБ, Беларусь, ул. Сурганова, 13 220072 г. Минск, Беларусь <u>alexp51@bk.ru</u>

⁴ Институт Ядерных Проблем Белорусского Государственного университета, Минск, Беларусь, Бобруйкая 11 220030 <u>kut@inp.bsu.by</u>

⁵Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division,

4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia <u>dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa</u>, <u>dominik.michels@kaust.edu.sa</u>

Благодаря последним прорывным разработкам в области нанотехнологий стало возможным создание внутренне квантовых систем, способных служить высоконаправленными антеннами в терагерцовом, инфракрасном и оптическом диапазонах. Собственно, квантовые антенны, как устройства, формирующие свет на уровне одиночных квантов, уже стали ключевыми элементами нанооптики и наноэлектроники. Квантовые антенны активно изучаются на предмет возможного применения квантовых коммуникациях, квантовой визуализации В И зондировании, а также в сборе энергии. Однако конструкция и оптимизация этих излучающих/приемных устройств еще недостаточно разработаны по сравнению с известными способами для обычных радиочастотных антенн [1]. В данной статье мы обсуждаем концепцию квантовой антенны как устройства, использующего такие свойства, как дискретность энергетических уровней излучателя. В качестве эмиттерной модели рассматриваются «кремниево-вакансионные» центры (SiV-) в наноалмазе. В данной модели квантовый излучатель, состоящий из двух двухуровневых эмиттеров, может быть реализован с помощью пары центров окраски в алмазе, в частности – отрицательно заряженных центров «кремнийвакансия» SiV⁻. В связи с этим, нами выполненр прямое компьютерное моделирования методами квантовой химии системы двух SiV центров, расположенных недалеко друг от друга в кластере алмаза. В работе квантовохимическим методом РМ6 изучен пассивированный водородом кластер С₃₁₃[2SiV⁻²]Н₁₇₂, моделирующий наноалмаз, содержащий два заряженных

отрицательно центра SiV⁻¹ (Рисунок 1).



Рисунок 1 - Структура двухкратно отрицательно заряженного «двухцентрового» кластера C₃₁₃[2SiV⁻²]H₁₇₂ в триплетном состоянии, содержащего два центра SiV⁻

Кроме того, для сравнения рассматривались результаты изучения двух «одноцентровых» кластеров $C_{315}[Si8V^{-1}]H_{172}$ и $C_{315}[Si1V^{-1}]H_{172}$, в которых были оставлены только одиночные SiV⁻ центры. Для оценки оптической активности электронов, локализованных в области SiV⁻ центров, были проведены расчеты с использованием метода TD-SCF PM6. Для кластера $C_{313}[2SiV^{-2}]H_{172}$ был рассчитан спектр поглощения, оптическая часть которого представлена на рисунке 2.



Рисунок 2 – Оптическая часть спектра поглощения, рассчитанная для «двухцентрового» кластера C₃₁₃[2SiV⁻²]H₁₇₂

Из рисунка видно, что в оптической области спектра поглощения имеются три максимума – два с большими амплитудами и энергиями переходов 1.204 эВ и 1.847 эВ, и один максимум с незначительной амплитудой и энергией перехода 1.536 эВ.

Таким образом, показано что, в запрещенной зоне двухцентровых кластеров формируются дублетные состояния, соответствующие симметричным и антисимметричным состояниям пары Дикке взаимодействующих излучателей и следовательно, возможно создание квантового излучателя, состоящего из пары эмиттеров, которыми являются два SiV⁻ центра.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция 2025». All Gaussian 16 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes

[1] Gregory Ya. Slepyan, Svetlana Vlasenko, Dmitri Mogilevtsev Quantum Antennas / Gregory Ya. Slepyan, Svetlana Vlasenko, Dmitri Mogilevtsev // Adv. Quantum Technol– 2020. – Vol. 3 – P. 1900120.

УДК 535.375.54+546.57+544.023 А. А. Романенко¹, С. А. Бацанов², В. В. Крюков¹, А. К. Гутаковский²

ФОРМИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ НАНОЧАСТИЦ «МАГНЕТИТ-ЗОЛОТО» И ИХ ГКР-АКТИВНОСТЬ

¹ Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь a.ramanenka@ifanbel.bas-net.by

² Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, пр. ак. Лаврентьева, 13, 630090 Новосибирск, Россия

Магнитные плазмонные наночастицы типа «магнетит-золото» активно исследуются в последние годы и перспективны для биомедицинских и других приложений в силу того, что одновременно обладают как суперпарамагнитными свойствами наночастиц магнетита Fe₃O₄, так и плазмонными свойствами золотых наночастиц [1]. В данной работе предложен метод получения подобных наноструктур путём формирования электростатических комплексов наночастиц золота и магнетита в воде и апробирована их эффективность для гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) света.

Предварительно отдельно синтезировались квазисферические наночастицы магнетита и золота. Наночастицы магнетита получали методом высокотемпературного синтеза [2] из ацетилацетоната железа в присутствии октадецена и олеиламина с редиспергированием в хлороформе и последующим переводом в водную среду с помощью бромида цетилтриметиламмония (ЦТАБ). Наночастицы золота получали по модифицированному методу Туркевича [3] в воде. Оба метода позволяют получать золи с невысокой полидисперсностью. Средний диаметр наночастиц магнетита по данным просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ, рис. 1*а*) составил 9 нм, наночастиц золота – 14 нм.



Рисунок 1 – ПЭМ-изображение высокого разрешения (*a*) и энергодисперсионный рентгеновский спектр (б) электростатических комплексов наночастиц Fe₃O₄-Au. На вставке показано Фурье-преобразование ПЭМ-изображения

Электростатические комплексы наночастиц магнетита и золота в воде формировались за счёт взаимодействия разноименно заряженных лигандов на поверхности наночастиц: положительно заряженных молекул ЦТАБ на поверхности наночастиц магнетита и отрицательно заряженных цитрат-ионов на поверхности наночастиц золота. К золю магнетита добавлялся золь золота порциями по 50-100 мкл, смесь перемешивалась на шейкере, осадок отделялся магнитом, а надосадочный раствор удалялся. После перемешивания красная окраска золя золота исчезала и надосадочный раствор становился прозрачным. Процедура повторялась несколько раз.



Рисунок 2 – ГКР-спектры молекул малахитового зелёного ($\lambda_{B036} = 632.8$ нм) для образцов с осаждёнными Fe₃O₄-Au на стеклянные подложки с разными объёмами добавленного золя золота на этапе формирования комплексов

Для ГКР-эксперимента электростатические комплексы наночастиц Fe₃O₄-Au осаждались на стеклянные подложки, высушивались и поверх наносился раствор аналита. Продемонстрирована ГКР-эффективность подобных наноструктур на примере органической молекулы-аналита малахитового зеленого с концентрацией 2·10⁻⁵ М (рис. 2). Показано, что интенсивность полезного сигнала возрастает с увеличением доли наночастиц золота в электростатических комплексах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф21РМ-118). Авторы выражают благодарность А.В. Антановичу и Л.Л. Троцюк за помощь в синтезе наночастиц магнетита и золота.

- [1] Salihov S. V. Recent advances in the synthesis of Fe₃O₄@Au core/shell nanoparticles / S. V. Salihov et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2015. Vol. 394. P. 173-178.
- [2] Xu Z. Oleylamine as Both Reducing Agent and Stabilizer in a Facile Synthesis of Magnetite Nanoparticles / Z. Xu et al. // Chem. Mater. 2009. Vol. 21. P. 1778–1780.
- [3] Bastús N. G. Kinetically Controlled Seeded Growth Synthesis of Citrate-Stabilized Gold Nanoparticles of up to 200 nm: Size Focusing versus Ostwald Ripening / N. G. Bastús, J. Comenge, V. Puntes // Langmuir. – 2011. – Vol. 27. – P. 11098-11105.

УДК 535.37:(547.979.733+667.211.43)

В. Ю. Плавский¹, А. Н. Собчук¹, А. И. Третьякова¹, А. В. Микулич¹, О. Н. Дудинова¹,
Л. Г. Плавская¹, Р. К. Нагорный¹, А. Д. Свечко¹, Т. С. Ананич¹, Н. Д. Прокопенко¹,
С. В. Якимчук¹, И. А. Леусенко¹, Н. В. Дудчик², О. А. Емельянова²

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СЕНСИБИЛИЗИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА НИТРОФУРАНОВЫХ СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ И ИХ ФОТОХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ

¹ Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>v.plavskii@ifanbel.bas-net.by</u> ²Республиканское унитарное предприятие «Научно-практический центр гигиены»,

ул. Академическая, 8, 220012, Минск, Беларусь <u>n_dudchik@mail.ru</u>

Одной из острейших проблем современной медицины стала устойчивость патогенной микрофлоры к действию антибактериальных и противогрибковых препаратов вследствие выработки микроорганизмами резистентности к ним. В качестве альтернативного, многообещающего метода лечения локализованных инфекций (в том числе обусловленных лекарственно-устойчивыми формами патогенов) рассматривается антимикробная фотодинамическая терапия (АФДТ). Однако широкому применению методов АФДТ препятствует отсутствие доступных фотосенсибилизаторов (ФС), разрешенных к применению в медицинской практике. При этом разработка технологии получения новых ФС и их медицинская сертификация – весьма длительная, затратная и сложная процедура. Это побудило нас провести оценку возможности использования в качестве ФС препаратов, разрешенных к применению в медицинской практике, но использующихся по другому назначению.

Задача настоящей работы – выяснение способности нитрофурановых препаратов фурацилина и фурасола, традиционно и широко использующихся в качестве антисептиков, выступать в качестве фотосенсибилизаторов; оценка чувствительности грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов, а также раковых клеток HeLa к фотодинамическому воздействию синего света при их сенсибилизации нитрофуранами, изучение сенсибилизирующих свойств и фотохимической устойчивости фурацилина и фурасола.

Исследования показали, что длинноволновые полосы поглощения исследуемых антисептиков расположены на границе длинноволновой УФ и видимой областей спектра. При этом фурасол характеризуется более длинноволновым расположением максимума спектра поглощения: $\lambda_{max} = 396$ нм (для фурацилина в водном растворе $\lambda_{max} = 374$ нм). Для фотовозбуждения указанных препаратов могут использоваться широко распространенные лазерные и светодиодные источники с длиной волны $\lambda = 405$ нм.

Характерной особенностью спектров флуоресценции фурацилина и фурасола является значительное стоксовое смещение относительно полосы поглощения, чрезвычайно низкий квантовый выход флуоресценции (ϕ_{fl}), а также очень короткая длительность затухания флуоресценции (τ_{fl}) при комнатной температуре. Так, для фурацилина в воде при комнатной температуре $\phi_{fl} = 0,0002$, $\tau_{fl} \approx 10$ ps, для фурасола ϕ_{fl}

= 0,0008, $\tau_{\rm fl} \approx 10$ ps. Наиболее вероятная причина столь низких значений $\phi_{\rm fl}$ и $\tau_{\rm fl}$ – наличие альтернативных путей диссипации энергии возбужденного состояния, прежде всего таких как процессы конфигурационной *цис-транс*-фотоизомеризации молекул нитрофуранов по двойной –C=N– связи. В пользу такого вывода свидетельствует резкое увеличение интенсивности флуоресценции и времени ее затухания при снижении температуры растворов до 6°C и переходе к вязким средам, используя в качестве растворителей глицерин или тритон X-100.

Исследования показали, что как фурасол, так и фурацилин способны выступать в качестве Φ C. Об этом свидетельствует их способность генерировать $A\Phi$ K, включая синглетный кислород ${}^{1}O_{2}$ и перекись водорода. Показано, что добавление известного тушителя синглетного кислорода азида натрия блокирует фотоинактивацию раковых клеток HeLa, инициируемую светом в присутствии Φ C. Та же закономерность отмечается при изучении фотохимических процессов методом хемилюминесценции. Однако последующие исследования показали, что практически полное блокирование фотобиологических реакций азидом может быть обусловлено как тушением синглетного кислорода, так и ускорением фотолиза самого Φ C.

Установлено, что воздействие на бактериальные клетки в присутствии фурацилина или фурасола светом, соответствующим спектру поглощения указанных антисептиков, приводит к выраженному фотобиологическому эффекту. Это проявляется в потере способности микроорганизмов образовывать колонии: при совместном действии света и фурацилина наблюдается полное подавление способности к колониеобразованию *S. aureus, S. haemolyticus* и *C. albicans.* Следовательно, фурацилин совместно со светом, соответствующим его спектру поглощения, способен оказывать бактерицидное действие.

Характерно, что фурацилин и фурасол способны инициировать фотодинамическую инактивацию не только инактивацию грамположительных *S. aureus, S. haemolyticus* и дрожжеподобных грибов *C. albicans*, но и грамотрицательных *E. coli*. Причем фоточувствительность *E. coli* значительно более выражена к сенсибилизирующему действию фурасола, чем фурацилина, что может быть связано с особенностями взаимодействия указанных препаратов с мембранными структурами данных бактериальных клеток.

Совокупность полученных экспериментальных данных, а также анализ литературных источников позволяют заключить, ЧТО светоиндуцированный бактерицидный эффект синего света в присутствии фурацилина и фурасола является синергетическим и обусловлен следующими процессами: а) реакциями синглетного кислорода, генерируемого триплетно-возбужденными фотосенсибилизаторами; б) участием перекиси водорода в инактивации микроорганизмов; в) фотовысвобождением из структуры антисептиков NO[•] и его последующим взаимодействием с компонентами микробных клеток; г) цитотоксическим эффектом в отношении микроорганизмов цис-трансфотопродуктов фурацилина И фурасола (включая продукты фотоизомеризации); д) фотовозбуждением эндогенных ФС порфириновой и флавиновой природы, локализованных в микробных клетках.

Тушитель синглетного кислорода азид натрия вызывает ускоренную деструкцию исследуемых нитрофуранов, чему способствует образование их комплексов с NaN₃.

УДК 535.35

А.Л.Пушкарчук¹, Т. В. Безъязычная¹, В.И. Поткин¹, Е. А. Дикусар¹, А.Г. ,Солдатов А.Г. ^{1,2}, С.Я. Килин ³, А.П. Низовцев³, С.А. Кутень⁴, Д. В. Ермак⁴, Т.С. Пивоварчик⁴, В.А.Пушкарчук ⁵, Dominik Ludewig Michels⁶, Dmitry Lyakhov⁶, В.А. Кульчицкий⁷

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ HF-3c Конъюгата карбоплатин – Фуллеренол как перспективной структуры для противоопухолевой терапии

¹Институт физико-органической химии, НАНБ, Беларусь, ул. Сурганова, 13 220072 г. Минск, Беларусь <u>alexp51@bk.ru</u>, <u>potkin@ifoch.bas-net.by</u>

²ГО «Научно-практический центр НАНБ по материаловедению», ул. Петруся Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь <u>andreisoldatov@mail.ru</u>

^{3 2}Институт физики им. Б.И.Степанова НАНБ Минск, Беларусь, пр. Независимости, 68 220072 Минск, Беларусь

kilin@dragon.bas-net.by,

apniz@ifanbel.bas-net.by

⁴ Институт Ядерных Проблем Белорусского Государственного университета, Минск, Беларусь, Бобруйкая 11 220030 <u>kut@inp.bsu.by</u>

⁵ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. Петруся Бровки, 6, 220013, Минск, Беларусь, <u>pushkarchuk@bsuir.by</u>

⁶Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia

dmitry.lyakhov@kaust.edu.saE dominik.michels@kaust.edu.sa

⁷Институт физиологии НАН Беларуси, ул. Академическая 28, 220072, Минск, Беларусь, <u>vladi@fizio.bas-net.by</u>

В работе изложены результаты компьютерного моделирования методом HF-3c структурных и электронных характеристик коньюгата C₆₀(OH)₂₄ – CBDCA сформированного на основе фуллеренола C₆₀OH₂₄ и цитотоксического препарата карбоплатина (C₆H₁₂N₂O₄Pt или CBDCA), а также предложены возможные механизмы формирования биологической активности данного коньюгата.

Известно, что водорастворимые производные углеродных наноструктур представляют собой перспективный материал для использования в качестве средства доставки лекарственных препаратов [1]. Возможность эффективного использования коньюгатов противоопухолевых препаратов и наноуглеродных веществ изложена в ряде работ [2-6]. Задачей нашей работы является теоретическое исследование оптимальных и рациональных подходов к созданию наноконтейнеров для адресной доставки лекарственных препаратов, таких, как карбоплатин. Для решения данной задачи в рамках метода HF-3с, учитывающего межмолекулярное взаимодействие, с использованием программного пакета ORCA 5.03 [7] проведены расчеты, как для индивидуальных соединений, так и для их конъюгатов в двух вариантах: изолированные молекулы в вакууме и в водной среде, что имитирует ситуацию в живых клетках. Водная среда моделировалась в приближении PCM [8]. Расчет электронной структуры проводили с целью выяснения зависимости биологической активности изучаемых структур от их состава и электронной структуры на основе анализа энергетического положения таких дескрипторов биологической активности, как граничные орбитали (ГО).

Установлено, что конъюгаты $C_{60}(OH)_{24}$ – CBDCA в водном растворе формируют устойчивые нековалентно связанные комплексы. Показано, что в случае формирования комплекса $C_{60}(OH)_{24}$ – CBDCA, фуллеренол является не столько инертным носителем биологически активного препарата CBDCA, сколько своеобразным триггером биологической активности конъюгата по сравнению с CBDCA, за счет участия молекулы $C_{60}(OH)_{24}$ в первичном акте взаимодействия конъюгата при сближении с белковой мишенью. Совокупность этих факторов позволяет объяснить усиление противоопухолевого эффекта карбоплатина при его взаимодействии с фуллеренолом.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция 2025» и гранта БРФФИ № Т22Мн-005 от 04.05.2022 г. D.L. and D.M. were partially supported by KAUST baseline funding.

All ORCA 5.03 package computations were performed on KAUST's Ibex HPC and partly on Computer cluster of Institute for Nuclear Problems BSU. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes

[1] A. Bianco Opportunities and Challenges of Carbon-based Nanomaterials for Cancer Therapy / A. Bianco, K. Kostarelos, M. Prato // Expert Opin. Drug Delivery 2008. – Vol.5 - p. 331-342.

[2] R. Injac Fullerenol nanoparticles: toxicity and antioxidant activity./ R. Injac, M. Prijatelj, B. Strukelj //Methods Mol. Biol. 2013 – Vol. 1028 – p. 75-100.

[3] Z. Edis Nanocarriers-Mediated Drug Delivery Systems for Anticancer Agents: An Overview and Perspectives / Zehra Edis, Junli Wang, Muhammad Khurram Waqas, Muhammad Ijaz, and Munazza Ijaz // Int J Nanomedicine 2021. – Vol. 2021. – p. 1313–1330.

[4] A.A. Elshater Fullerene C_{60} nanoparticles ameliorated cyclophosphamideinduced acute hepatotoxicity in rats / A.A. Elshater, M.A.M. Haridy, M.M.A. Salman // Biomed. Pharmacother. 2018. – Vol. 97. – p. 53-59.

[5] M.A. Orlova Anti-cancer activity of fullerene derivatives and its application possibility for the targeted drug delivery /M.A. Orlova, T.P. Trofimova, A.P. Orlov, et al.// New directions of medical science. Oncohematology 2013. – Vol. 2. – p. 83-89 (in Russian).

[6] M.A. Orlova Perspective of Fullerene Derivatives in PDT and Radiotherapy of Cancers / M.A. Orlova, T.P. Trofimova, A.P. Orlov et al. // British Journal of Medicine & Medical Research 2013. – Vol. 4. – p. 1731-1756.

[7] ORCA 5.03

[8] J. Tomasi Quantum Mechanical Continuum Solvation Models / J. Tomasi, B. Mennucci, R.Cammi // Chem. Rev. 2005. – Vol. 105. – p. 2999–3094.

[9] Chemcraft - graphical software for visualization of quantum chemistry computations. <u>https://www.chemcraftprog.com</u> УДК 535.37:(547.979.733+667.211.43)

В. Ю. Плавский¹, <u>А. Н. Собчук</u>¹, А. И. Третьякова¹, А. В. Микулич¹, О. Н. Дудинова¹, Л. Г. Плавская¹, Р. К. Нагорный¹, Т. С. Ананич¹, А. Д. Свечко¹, С. В. Якимчук¹, И. А. Леусенко¹, Н. Д. Прокопенко¹, А.И.Будевич², Д.М.Богданович², С. А. Сапсалев², Е. В. Петрушко

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ СТАЦИОНАРНОЙ И КИНЕТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРИИ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЭНДОГЕННЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ В КЛЕТКАХ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ

¹ Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.plavskii@ifanbel.bas-net.by

²РУП «Научно-практический центр НАН Беларуси по животноводству», ул. Фрунзе, 11,222160, г. Жодино, Минская обл., Беларусь <u>budevich7388100@mail.ru</u>

Интерес идентификации спектроскопических И исследованию К И сенсибилизирующих свойств эндогенных фотосенсибилизаторов, локализованных в клетках различных типов (эукариот, прокариот, клеток крови (эритроцитов), сперматозоидов), и способных поглощать излучение видимой области спектра, обусловлен их определяющей ролью в реализации как биостимулирующего, так и ингибирующего действия указанного физического фактора [1-5]. Выполненные ранее исследования [1-5] показали, что ведущая роль в реализации биологического действия низкоинтенсивного оптического излучения синей области спектра принадлежит эндогенным флавинам, а также безметальным и цинк-содержащим порфириновым фотосенсибилизаторам. Концентрация указанных соединений чрезвычайно низка: для флавинов она составляет единицы микромолей, а концентрация порфиринов находится на нано- или субнаномолярном уровнях и зависит от типа клеток, их видового происхождения, условий культивирования и т.п. При этом вследствие чрезвычайно низкой концентрации порфиринов, низкого квантового выхода их флуоресценции, а также влияния интенсивной флавиновой флуоресценции, идентификация порфириновых соединений в клетках спектрально-флуоресцентными методами представляет собой достаточно сложную задачу. Для ее решения нами исследовалась как аутофлуоресценция живых клеток, так и их экстрактов, что позволяло снизить вклад рассеянного клетками света в регистрируемый сигнал, а также концентрировать флуоресцирующие молекулы.

Как и ожидалось, для всех типов живых клеток (грамотрицательные и грамположительные бактерии, грибки, эритроциты крови, соматические клетки, сперматозоиды рыб, хряков, козлов) основной вклад во флуоресценцию в видимой области спектра вносят флавины. В клетках различных типов они представлены рибофлавином, флавинмононуклеотидом и флавинадениндинуклеотидом. Их спектрально-флуоресцентные характеристики весьма близки, и сильно изменяются при образовании комплексов с белками. Максимум флуоресценции флавинов в клетках находится в области 525-537 нм.

Выполненные исследования позволили впервые обнаружить в суспензии живых соматических клеток (включая опухолевые), а также в спермиях козла на фоне интенсивной флавиновой люминесценции флуоресценцию порфириновой компоненты.

Так, для опухолевых клеток HeLa при возбуждении в области $\lambda_{ex} = 416$ нм на длинноволновом склоне полосы флавиновой флуоресценции регистрируется 3 плеча в области 585 нм, 640 нм и 680 нм. В спектре возбуждения флуоресценции суспензии клеток регистрируется выраженный максимум в области 416 нм, соответствующий полосе Соре порфиринов. Для спермы козла порфириновая компонента обнаружена при лазерном возбуждении излучением с длиной волны 532 нм. Анализ литературных данных, а также исследования спектральных свойств химически чистых порфиринов позволяют заключить, что одним из тетрапирролов, присутствующих в клетках, является Zn-протопорфирин III, характеризующийся в водном растворе максимумами флуоресценции в области 582 и 635 нм.

Еще одно подтверждение принадлежности к порфириновым соединениям зарегистрированных спектров аутофлуоресценции клеток в красной области спектра получено при изучении спектрально-флуоресцентных и кинетических характеристик их экстрактов, используя в качестве экстрагента диметилсульфоксид (ДМСО), ацетон или 3 М соляную кислоту. Как показали исследования, наиболее эффективными экстрагентами для идентификации порфириновых фотосенсибилизаторов являются ацетон и 3 M HCl, что обусловлено низким квантовым выходом флуоресценции флавинов и достаточно высоким квантовым выходом флуоресценции порфиринов в указанных растворителях. Параллельно проводились исследования спектральнофлуоресцентных и кинетических характеристик химически чистых порфиринов и флавинов, присутствие которых в клетках предполагалось на основании ранее полученных результатов [1-3, 5]. Установлено, что обработка порфиринов 3М HCl переводит их в мономерную дипротонированную форму. При этом квантовый выход флуоресценции протопорфирина IX в 3 М HCl увеличивается примерно в 20 раз по сравнению с его водным раствором. Напротив, квантовый выход флуоресценции флавинмононуклеотида уменьшается более чем в 60 раз в указанных условиях. Это позволяет идентифицировать порфирины в экстрактах по их флуоресцентным свойствам.

Выполненные исследования позволили установить присутствие в клетках безметальных порфиринов (протопорфирин IX, копропорфирин III, уропорфирин III), а также цинковых комплексов протопорфирина IX и III. Оценки показали, что концентрация протопорфирина IX в клетках HeLa находится на уровне 0.5 нМ.

[1] Plavskii, V.Y. Porphyrins and flavins as endogenous acceptors of optical radiation of blue spectral region determining photoinactivation of microbial cells. / V.Y. Plavskii [et al.] // J. Photochem. Photobiol. B.Biol.– 2018. –Vol. 183, P. 172–183

[2] Plavskii, V. Comparative effect of low-intensity laser radiation in green and red spectral regions on functional characteristics of sturgeon sperm. / V. Plavskii [et al.] // Photochem Photobiol. – 2020. – Vol. 96(6). – P. 1294-1313.

[3] Plavskii,V.Y. Effect of continuous wave, quasi-continuous wave and pulsed laser radiation on functional characteristics of fish spermatozoa. / V.Y. Plavskii [et al.] // J Photochem Photobiol B: Biol. –2021. – Vol. 216, 112112.

[4] Plavskii, V.Yu. The role of porphyrins as theranostic agents during the exposure of biological systems to low-level optical radiation. / V.Yu. Plavskii [et al.] // Trends Photochem & Photobiol. –2022. – Vol. 21. – P. 1-14

[5] Плавский, В.Ю. Эндогенные фотоакцепторы, сенсибилизирующие фотобиологические реакции в соматических клетках. / В.Ю. Плавский [и др.] // ЖПС. – 2023. – Т. 90, № 2. – С. 239–252.

УДК 535.37+577.3

Н. В. Белько¹, Т. А. Кулагова², А. В. Богданова², М. В. Пархоц¹, С. В. Лепешкевич¹, В. Н. Чижевский¹, Д. С. Могилевцев¹

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С ЭРИТРОЦИТАМИ В ТЕМНОВЫХ УСЛОВИЯХ И ПРИ ФОТОВОЗДЕЙСТВИИ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр-т Независимости, 68-2, 220072 Минск, Беларусь <u>d.mogilevtsev@ifanbel.bas-net.by</u>

² НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, Минск, Беларусь

Графеновые квантовые точки (ГКТ) являются перспективным биосовместимым наноматериалом с интенсивной флуоресценцией [1]. В настоящее время активно исследуются перспективы применения ГКТ в качестве флуоресцентных сенсоров для визуализации различных биологических процессов. Исследования биосовместимости ГКТ показали, что данный наноматериал характеризуется низкой токсичностью в отношении различных клеточных культур [2]. При этом до сих пор существует крайне мало информации о влиянии ГКТ на эритроциты. Можно ожидать, что в отличие от эндоцитирующих клеток, накапливающих ГКТ в цитоплазме [3], эритроциты будут преимущественно адсорбировать наноматериал на поверхности.

В данной работе исследуются темновые и фотоиндуцированные процессы в эритроцитах, накопивших ГКТ.

Эритроциты выделяли из крови здоровых доноров и инкубировали с ГКТ при концентрации 1 или 50 мкг/мл. Накопление ГКТ в эритроцитах исследовали при помощи флуоресцентного микроскопа Nikon Eclipse Ti2 с объективом 40× Nikon CFI Plan Fluor DLL. В качестве источника возбуждающего излучения использовали светодиод с максимумом спектра испускания при 474 нм и полушириной 27 нм. Сигнал флуоресценции регистрировали в диапазоне 490 – 530 нм при помощи монохроматической камеры DS-Qi2 с КМОП матрицей.

Эритроциты в контрольном образце демонстрируют характерную форму двояковогнутых дисков и не флуоресцируют при возбуждении на 474 нм. После инкубирования с ГКТ (50 мкг/мл) мембраны эритроцитов обладают интенсивной флуоресценцией, а также наблюдается возникновение спикул у части клеток. При концентрации ГКТ 1 мкг/мл деформация мембран эритроцитов менее выражена, а сигнал флуоресценции отличается значительно меньшей интенсивностью, но все же позволяет визуализировать клетки. Несмотря на значительную деформацию мембран эритроцитов при взаимодействии с ГКТ, лизис клеток не наблюдается даже после инкубирования с нанообъектами в концентрации 50 мкг/мл в течение 24 ч, при этом сохраняется интенсивность флуоресценции ГКТ.

Были проведены дополнительные эксперименты по влиянию гемоглобина на люминесцентные характеристики ГКТ. Обнаружено, что в присутствии гемоглобина спектр люминесценции ГКТ трансформируется вследствие эффекта реабсорбции люминесценции молекулами гемоглобина, тем не менее, люминесценция ГКТ не тушится. Следовательно, отсутствие сигнала люминесценции ГКТ внутри эритроцитов не является следствием тушения люминесценции ГКТ гемоглобином, а свидетельствует о накоплении ГКТ только в мембранах эритроцитов.

Было обнаружено, что при воздействии излучения с длиной волны 474 нм на эритроциты, инкубированные с ГКТ, происходит лизис клеток. Количество клеток, подвергшихся гемолизу, зависит от концентрации ГКТ и дозы излучения. Для эритроцитов в контрольном образце и после инкубирования с ГКТ при концентрации 1 мкг/мл гемолиз не наблюдается даже при дозе излучения 740 Дж/см². При концентрации ГКТ 50 мкг/мл и дозе излучения 200 Дж/см² наблюдается лизис 20% эритроцитов, а при дозе излучения 250 Дж/см² – 90% эритроцитов. После фотоиндуцированного эритроцитов образцах визуализируются лизиса В флуоресцирующие «тени» эритроцитов, что еще раз подтверждает вывод о необратимой локализации ГКТ в мембранах клеток.

Повреждение инкубированных с ГКТ эритроцитов при фотовоздействии может быть обусловлено генерацией синглетного кислорода и/или образованием активных свободно-радикальных интермедиатов. В модельных системах нами показано, что при фотоактивации данные ГКТ способны генерировать синглетный кислород с квантовым выходом около 1,5%, а восстановители снижают фотодеградацию ГКТ.

Известно, что эффективность ГКТ в качестве фотосенсибилизаторов зависит от метода синтеза этих наноструктур. Было обнаружено, что фотодинамические процессы как типа I (перенос заряда – образование радикалов), так и типа II (перенос энергии – образование синглетного кислорода) участвуют в производстве активных форм кислорода путем фотоактивации ГКТ, допированных азотом ГКТ и химически-восстановленных ГКТ [4].

Таким образом, ГКТ накапливаются в мембранах эритроцитов и могут применяться для их визуализации. Часть эритроцитов превращается в эхиноциты в результате взаимодействия с ГКТ, при этом клетки сохраняют жизнеспособность в течение длительного времени. Степень изменения морфологии эритроцитов зависит от концентрации ГКТ. При фотовоздействии эритроциты, инкубированные с ГКТ, подвергаются лизису, причем доля поврежденных клеток зависит от дозы излучения и концентрации ГКТ. Гемолиз может быть обусловлен генерацией синглетного кислорода и/или свободно-радикальных интермедиатов.

Данная работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (договоры № Ф22В-008 и М22МВ-19).

- [1] Henna T. K. Graphene quantum dots redefine nanobiomedicine / T. K. Henna, K. Pramod
 // Mater. Sci. Eng. C. 2020. Vol. 110. P. 110651.
- [2] Recent advances in synthesis and biological applications of graphene quantum dots / S. Karmakar [et al.] // J. Ind. Chem. Soc. 2021. Vol. 98, № 5. P. 100069.
- [3] One-pot green synthesis of biocompatible graphene quantum dots and their cell uptake studies / A. Halder [et al.] // ACS Appl. Bio Mater. 2018. Vol. 1, № 2. P. 452–461.
- [4] Superior photodynamic effect of carbon quantum dots through both type I and type II pathways: Detailed comparison study of top-down-synthesized and bottom-up-synthesized carbon quantum dots. / T. Pillar-Little [et al.] // Carbon 2018. Vol. 140. P. 616–623.

УДК 535.371

А.А. Иванов¹, А.К. Королик², О.В. Козлякова³, М.С. Тарасик¹ ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА СВЯЗЫВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ОСНОВНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ ПЛАЗМЫ КРОВИ БЕРЕМЕННЫХ ЖЕНЩИН С РЕЗУС-ИММУНИЗАЦИЕЙ

¹Белорусский государственный медицинский университет, пр. Дзержинского, 83, 220116 Минск, Беларусь

<u>qetuo22@mail.ru</u>

²ГУ Минский научно – практический центр хирургии, трансплантологии и гематологии, ул. Семашко, 8, 220045 Минск, Беларусь

anna.korolik@mail.ru

³Городской центр трансфузиологии УЗ 6-ой ГКБ, ул. Уральская, 5, 220037 Минск, Беларусь

olga-kozlyakov@yandex.ru

Цель данной работы - изучение методом флуоресцентного зондирования особенностей транспорта различных гидрофобных метаболитов белками плазмы крови (альбумином (ЧСА) и липопротеинами (ЛП)), беременных женщин с резус – иммунизацией (Rh - иммун.), а так же беременных с положительным (Rh⁺) и отрицательным (Rh⁻) резус-фактором при нормально протекающей физиологической беременности.

Спектры зондовой флуоресценции регистрировались на спектрофлуориметре SFL-1211A (фирма «СОЛАР»). Условия эксперимента приведены в работе [1]. В работе была проанализирована плазма крови: здоровых доноров (п=30), беременных женщин с Rh - иммун. (n=17), беременных женщин при нормально протекающей физиологической беременности с Rh⁺ (n=38) и Rh⁻ (n=12) резус-фактором с разными сроками беременности.

Были проанализированы спектры флуоресценции зонда 1-анилинонафталин-8сульфонат (АНС) в плазме крови всех трех групп беременных женщин. Известно [1], что зонд АНС в плазме крови флуоресцирует, в основном, при связывании с альбумином. Интенсивность флуоресценции зависит от количества альбумина в плазме крови. При высокой концентрации альбумина и большой загруженности его гидрофобными лигандами интенсивность флуоресценции АНС может быть низкой. Поэтому, с целью получения объективных данных, была изучена интенсивность флуоресценции этого зонда, нормированная на единицу концентрации альбумина (I/C_{чсА}). В процессе изучения спектров флуоресценции зонда АНС в плазме крови беременных женщин с положительным и отрицательным резус-фактором при нормально протекающей физиологической беременности установлено, что средние значения интенсивности флуоресценции этого зонда незначительно уменьшается по сравнению со здоровыми донорами. Однако, наблюдается существенное увеличение интенсивности АНС для беременных женщин с резус - иммунизацией по отношению как к контрольной группе, так и к другим группам исследованных женщин. По данным биохимического анализа концентрации ЧСА для беременных женщин с Rh⁺ и Rh⁻ резусфактором существенно не отличалась от таковых для контрольной группы, а при Rh иммун. – достоверно уменьшается. Поэтому наблюдаемое изменение в связывающей способности альбумина в плазме крови беременных женщин с Rh⁺ и Rh⁻ резусфактором при нормально протекающей физиологической беременности можно объяснить увеличением содержания отрицательно заряженных гидрофобных лигандов, а в случае беременных женщин с Rh - иммун. – конформационными изменениями молекулы альбумина.

В случае зонда Нильского красного (НК), сольватохромные свойства которого делают его удобным для тестирования распределения нейтральных гидрофобных веществ между сывороточными ЛП и ЧСА в нефракционированной плазме крови, был использован флуоресцентный параметр – отношение пиковой интенсивности липопротеин-связанного зонда НК (λ_{max} =554 нм) к альбумин-связанному зонду НК (λ_{max} =592 нм) – I₅₅₄/I₅₉₂ [1]. Анализ спектров НК показал, что отношение I₅₅₄/I₅₉₂ в спектрах флуоресценции зонда НК для образцов плазмы крови всех групп беременных женщин выше, чем для контрольной группы. Наблюдаемое увеличение отношения I554/I592 указывает на перераспределение связывания зонда НК между фракциями липопротеинов низкой и очень низкой плотности и альбумином в сторону липопротеинов. Особое внимание в работе уделялось анализу полученных данных для всех групп беременных женщин в интервале беременности 28-34 недели, поскольку именно в эти сроки происходит максимальное увеличение массы плода, что сопровождается активацией всех метаболических процессов в организме матери, чтобы обеспечить растущие потребности плода. Для беременных женщин с положительным резус фактором на протяжении всего срока беременности наблюдается тенденция к увеличению отношения I554/I592. Однако следует отметить, что на сроке беременности 30-34 недели для этой группы беременных характерно неизменность этого параметра. В то же время у беременных женщин с отрицательным резус-фактором максимальное значение I554/I592 достигается на 29-32 неделях беременности. Несколько иная картина наблюдается для беременных женщин с резус - иммунизацией: незначительное уменьшение этого отношения на 26-29 неделях беременности и увеличение I554/I592 при более поздних сроках беременности.

Таким образом, метод флуоресцентного зондирования с использования разнозаряженных зондов позволил оценить связывающую способность основных транспортных систем плазмы крови беременных женщин с резус – иммунизацией, а также с положительным и отрицательным резус-фактором при нормально протекающей физиологической беременности, и выявить особенности в связывании флуоресцентных зондов в зависимости от сроков беременности для каждой группы.

Литература

1. Короленко Е.А. Оценка связывающей способности основных транспортных белков плазмы крови при циррозе печени методом флуоресцентного зондирования / Е.А. Короленко, Е.В. Королик, А.К. Королик // ЖПС. – 2007.– № 4. – С. 507-511.

УДК 535.3; 535.4

В. М. Катаркевич, Т. Ш. Эфендиев

КИНЕТИКА ЗАПИСИ И РЕЛАКСАЦИИ ОБЪЕМНЫХ ГОЛОГРАММ В ТОЛСТОСЛОЙНОМ ГЕЛЕОБРАЗНОМ ЖЕЛАТИНЕ, ДОПИРОВАННОМ ЭОЗИНОМ Н

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>katarkevich@dragon.bas-net.by</u>

Разработка и исследование новых регистрирующих сред является актуальной задачей объемной голографии. Особый интерес представляют толстослойные регистрирующие среды ($d \ge 1$ мм), позволяющие осуществлять запись объемных голограмм с чрезвычайно высокими значениями спектральной и угловой селективности.

Ранее нами был предложен и исследован новый вид самопроявляющейся записи – светочувствительной среды для стационарной фазовой объемной активированный лазерным красителем (родамин 6Ж, родамин С) гелеобразный желатин. Такая среда позволяет на слоях толщиной ~ 1 мм осуществлять запись как одиночных, так и мультиплексных голограмм с высокими значениями дифракционной эффективности и угловой селективности [1, 2]. На основе данного материала были успешно реализованы такие компактные фотонные устройства, как голографический светоделитель и лазер на красителях со стационарной распределенной обратной связью (РОС). Наши недавние исследования показали, что замена достаточно токсичных родаминовых красителей на низкотоксичный и биосовместимый эозин Н позволяет значительно улучшить экологические свойства созданного ранее материала при одновременном улучшении его голографических и генерационных характеристик [3]. Перспективность использования такой светочувствительной среды, а также созданных на ее основе устройств в биомедицине, экологии и других областях делает актуальной задачу более детального и всестороннего изучения ее голографических характеристик.

В настоящем докладе представлены результаты исследований временного поведения дифракционной эффективности η и угловой селективности $\Delta \theta_{0,5}$ пропускающих фазовых голограмм-решеток ($\Lambda = 5,11$ мкм), записываемых с помощью двух симметрично сходящихся пучков излучения непрерывного Ar-лазера ($\lambda_r = 514$ нм) в толстых (d = 1 мм) слоях 10%-го гелеобразного желатина, допированного эозином Н ($C_d \sim 0,098$ мг/г; $D_{514} \approx 1,1$). Диаметр зоны облучения геля составлял $d \approx 0,4$ см. В процессе своей записи и последующей релаксации голограммы под углом Брэгга считывались пучком излучения одномодового He-Ne–лазера ($\lambda = 632,8$ нм, $P \sim 1$ мВт), которое не поглощалось светочувствительной средой. Измерение энергетических характеристик записывающего и зондирующего излучений осуществлялось с помощью фотодиодов $\Phi Д$ –24K и аналого-цифрового преобразователя ADCS5K-12-8.

На рисунке 1 представлено временное поведение дифракционной эффективности η голографических решеток в процессе их записи и последующей релаксации для двух различных значений интенсивности записывающего излучения: $I_r = 429 \text{ мBt/cm}^2$ (а) и

748 мВт/см² (b). Там же приведены времена записи голограмм t_r и соответствующие дозы облучения геля $E_r = I_r t_r$.



Рисунок 1 – Временное поведение дифракционной эффективности объемных голограмм η в процессе их записи и последующей релаксации. На вкладках – соответствующие контуры угловой селективности решеток, измеренные после завершения регистрации их релаксации.

Из рис. 1 (a) видно, что при $I_r \sim 429 \text{ мBt/cm}^2$ увеличение времени t (дозы E_r) облучения геля в процессе записи голограммы приводит к соответствующему росту ее дифракционной эффективности с последующим выходом (при $t \sim 2299$ с, $E_r \sim 988$ Дж/см²) значения η на некоторый максимальный (насыщенный) уровень ($\eta_{max} \sim 90\%$ при $\Delta \theta_{0.5} \sim 20'$). В то же время при $I_r \sim 748 \text{ мBt/cm}^2$ (рис. 1 (b)) зависимость $\eta = f(t)$ совершенно иной (осциллирующий) характер. носит являясь следствием перемодуляции, при которой амплитуда фазовой модуляции голограммы превышает значение $\pi/2$. При этом максимальное значение η ($\eta_{max} \sim 90\%$ при $\Delta \theta_{0.5} \sim 20'$) достигается всего за время $t \sim 160$ с ($E_r \sim 120$ Дж/см²), являясь свидетельством значительного возрастания голографической чувствительности регистрирующего материала. Увеличение времени записи решетки до *t* ~ 7942 с приводит к падению ее дифракционной эффективности в ~1,6 раза при более чем трехкратном ухудшении угловой селективности ($\Delta \theta_{0.5} \sim 71'$ вместо ~ 20'). В обоих случаях прекращение записи голограммы сопровождается плавным падением ее дифракционной эффективности *n*. которая, однако, во втором случае (рис. 1 (b)) затем начинает медленно возрастать.

- [1] Эфендиев Т. Ш. Запись объемных голограмм в водно-желатиновом геле, активированном красителем / Т. Ш. Эфендиев, В. М. Катаркевич, А. Н. Рубинов // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, № 21. – С. 62–68.
- [2] Katarkevich V. M. Highly efficient volume hologram multiplexing in thick dye-doped jelly-like gelatin / V. M. Katarkevich, A. N. Rubinov, T. Sh. Efendiev // Opt. Lett. 2014.
 V. 39, № 15. P. 4627–4630.
- [3] Катаркевич В. М. Запись высокоэффективных объемных голограмм в толстослойном гелеобразном желатине, допированном эозином Н / В. М. Катаркевич, Д. Пантелич, Т. Ш. Эфендиев // Материалы XIII Международной научно-технической конференции «Квантовая электроника» (КЭ'2021) (22-26 ноября 2021 г., Минск). С.52-55.

УДК 535.37; 535.354; 535.343

М. В. Пархоц¹, С. В. Лепешкевич¹, А. В. Петкевич², А. А. Рогачев², С. Н. Терехов¹, Б. М. Джагаров¹

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРОВАННОГО ОБРАЗОВАНИЯ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА рН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ СЕНСИБИЛИЗАТОРОМ НА ОСНОВЕ ПИРИДИЛПОРФИРИНА И НАНОЧАСТИЦ ГИДРОКСИАПАТИТА

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Беларусь <u>m.parkhots@dragon.bas-net.by</u>

²Институт химии новых материалов НАН Беларуси, ул. Ф.Скорины, 36, 220141, Минск, Беларусь

Бурное развитие нанотехнологий в последнее время стимулировало интерес к использованию наночастиц в биологии и медицине. Одно из перспективных направлений в данной области – разработка систем доставки препаратов в опухолевые клетки. Среди неорганических наночастиц все большую популярность приобретают наночастицы гидроксиапатита (ГА), которые, в отличие от других неорганических наночастиц (полупроводниковых, золотых, серебряных), обладают рядом преимуществ. ГА – минерал на основе фосфата кальция Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂ – является полностью биосовместимым и биоразлагаемым материалом. Продукты его разложения – фосфаты и ионы кальция, естественным образом присутствуют в организме человека. Другим существенным преимуществом ГА является его рН-зависимая растворимость. Наночастицы ГА устойчивы при физиологических значениях pH, но их растворимость существенно увеличивается при слабокислых значениях pH, характерных для межклеточного пространства опухолевых клеток (pH ~ 6.5) и лизосом (pH ~ 5.0). Поэтому использование ГА позволяет не только доставлять лекарственные препараты, но и высвобождать их в большом количестве в опухолевых тканях.

данной работе представлены результаты эффективности В исследования фотосенсибилизированного образования синглетного кислорода фотосенсибилизатором основе катионного порфирина наночастиц на И гидроксиапатита.

Для создания комплексов использовали катионный 5,10,15,20-тетра(4-N-метил)порфирин (TMPyP4) и наночастицы гидроксиапатита овальной формы с длиной < 75 нм и удельным объемом (29.7 – 33.5 мл/г). Люминесценцию синглетного кислорода регистрировали на созданном в Институте физики НАН Беларуси лазерном кинетическом флуорометре. Возбуждение образцов осуществлялось лазерными импульсами длительностью 10 нс и энергией ≤ 1 мкДж, следующими с частотой 2.5 кГц на длине волны $\lambda = 532$ нм (Nd:YAG-лазер DTL-314QT, Россия). Для спектральной селекции использовался полосовой интерференционный фильтр с максимумом 1270 нм. Растворы готовили в дистиллированной воде со значениями pH 7.6 – 4.5.



Рисунок – Кинетики люминесценции синглетного кислорода фотосенсибилизированного TMPyP4 в комплексе с наночастицами гидроксиапатита в дистиллированной воде при различных значениях pH

Обнаружено, что в водном растворе при рН 7.6 связывание порфирина с наночастицами гидроксиапатита приводит к смещению его спектра поглощения в длинноволновую область, спектр флуоресценции из бесструктурного трансформируется в хорошо разрешенный двухполосный спектр. Наблюдаемые изменения могут быть связаны с уменьшением свободы вращения периферических пиридильных заместителей порфирина в комплексе с гидроскиапатитом.

Исследования фотосенсибилизированного образования синглетного кислорода тетраметилпиридилпорфирином в комплексе с наночастицами гидроксиапатита показали, что при взаимодействии с наночастицами происходит инвертирование кинетики люминесценции синглетного кислорода, при этом наблюдается увеличение времени жизни триплетного состояния порфирина в 7.7 раза и сокращение времени жизни синглетного кислорода в 3 раза. Следует отметить, что при образовании комплекса происходит также существенное (в ~ 10 раз) падение интегральной интенсивности люминесценции синглетного кислорода, что может быть связано, как с тушением синглетного кислорода, так и с падением квантового выхода его образования. Обнаружено, что уменьшение рН раствора менее 5.0 приводит к наночастиц и высвобождению фотосенсибилизатора, разрушению при этом фотосенсибилизированного образования эффективность синглетного кислорода восстанавливается вплоть до исходного значения, характерного для свободного порфирина.

Таким образом, можно заключить, что при физиологических значениях pH фотодинамическая активность сенсибилизатора на основе TMPyP4 и наночастиц ГА будет подавлена, тогда как при кислых значениях pH, характерных для опухолевых клеток, эффективность фотосенсибилизатора будет восстановлена.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проект № Ф22ТУРЦ-008).

УДК 535.35

T.C. Пивоварчик¹, С.А. Кутень¹, А. Л. Пушкарчук^{1,2}, Д.Б. Мигас³, Dominik Ludewig Michels⁴, Dmitry Lyakhov⁴

DFT МОДЛИРОВАНИЕ КОНЪЮГАТА ГРАФЕНОВАЯ КВАНТОВАЯ ТОЧКА-МОЛЕКУЛА ДОКСОРУБИЦИНА КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ

¹ Институт Ядерных Проблем Белорусского Государственного университета, Минск, Беларусь, Бобруйкая 11 220030 <u>kut@inp.bsu.by, tantanhlopina@gmail.com,</u>

²Институт физико-органической химии, НАНБ, Беларусь, ул. Сурганова, 13 220072 г. Минск, Беларусь <u>alexp51@bk.ru</u>,

³Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. Петруся Бровки, 6, 220013, Минск, Беларусь <u>migas@bsuir.by</u>

⁴Computer, Electrical and Mathematical Science and Engineering Division, 4700 King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal 23955-6900, Saudi Arabia <u>dmitry.lyakhov@kaust.edu.sa</u> <u>dominik.michels@kaust.edu.sa</u>

Доксорубицин (DOX) является одним из химиотерапевтических средств, которое используется при лечении онкологических заболеваний. Однако, недостатком DOX является его плохая избирательность по отношению к клеткам-мишеням и неконтролируемое распределение по организму, что вызывает серьезные побочные эффекты. Следовательно, требуется разработка нетоксичных носителей для доставки лекарств с хорошей проницаемостью в опухолевой ткани, высокой нагрузочной способностью и контролируемым высвобождением лекарственного средства. Одним из таких носителей являются графеновые квантовые точки. В данной работе представлены результаты DFT моделирования атомарной и электронной структуры графеновой квантовой точки (GQD) и конъюгата графеновая квантовая точка – доксорубицин (GQD – DOX).

Расчеты проведены для индивидуальных соединений и для их конъюгатов в вакууме и в водной среде, что имитирует ситуацию в живых клетках. В расчетах использовался уровень теории *DFT/M062X/cc-pvdz*. Графеновая квантовая точка состоит из 114 атомов углерода 20 атомов водород и 10-ти гидроксильных групп. Водная среда моделировалась в приближении РСМ. Оптимизированные структуры молекулы DOX, GQD, комплекса GQD – DOX изображены на рисунке 1.



Рисунок 1. Атомная структура молекулы доксорубицина (б), графеновой квантовой точки (а) и их комплекса (в) после полной оптимизации геометрии

На рисунке 2 представлены результаты расчета электронной структуры DOX, GQD и комплекса GQD-DOX после полной оптимизации геометрической структуры в вакууме.



Рисунок 2. Электронная структура DOX (а), GQD (б), коньюгата GQD-DOX (в) после полной оптимизации геометрии без учета растворителя

Анализ электронной структуры DOX и конъюгата GQD_DOX в вакууме показал, что ΔE , где $\Delta E = E_{HOMO} - E_{LUMO}$ — разность энергий граничных орбиталей (ГО) низшей свободной и высшей занятой молекулярных орбиталей) уменьшается с 5.6326 до 3.6189 эВ, что говорит о формировании устойчивого комплекса молекул. ΔE для DOX изменяется при попадании молекулы в водную среду (уменьшается с 5.6326 до 5.5487 эВ.). Малая ширина запрещенной зоны представляет собой мягкую молекулу с высокой поляризуемостью и химической реакционной способностью и низкой кинетической стабильностью [1].

Дипольный момент (D) — показатель реакционной способности, определяющий биологические свойства, связанные с взаимодействием с активными центрами фермента. Кроме того, D и ΔE связаны с растворимостью в воде [2]. Чем больше D, тем лучше растворимость. Дипольный момент GQD, полученный после оптимизации геометрии, составил 5.81 Д, который увеличился до 9.59 Д после образования комплекса. Также D комплекса, при попадании в водную среду, становится равным 18.17 Д. Увеличение D повышает гидрофильность комплекса и помогает комплексу беспрепятственно достигать места назначения в живых системах.

Таким образом, при формировании конъюгата GQD–DOX в водной и безводной среде, происходит уменьшение ΔE , что свидетельствует об увеличении стабилизации комплекса. D молекулы определяет растворимость молекулы. Расчеты показали, что комплекс имеет D (9.59; 18.17 в вакууме и воде), который значительно выше дипольных моментов DOX (5.95) и GQD (5.81). Это означает, что комплекс благоприятен для его выведения из организма, не нагружая живую иммунную систему.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Конвергенция 2025». D.L. and D.M. were partially supported by KAUST baseline funding. All GAUSSIAN package computations were performed on KAUST's Ibex HPC and partly on Computer cluster of Institute for Nuclear Problems BSU. The authors thank the KAUST Supercomputing Core Lab team for assistance with execution tasks on Skylake nodes.

[1] Fukui, K. A Molecular Orbital Theory of Reactivity in Aromatic Hydrocarbons / Fukui, K. Yonezawa, T. Shingu, H. // J. Chem. Phys. – 1952. – Vol. 20. – P.722–725.

[2] J.M. Aceves-Hernández Solubility of simvastatin: A theoretical and experimental study. / Aceves-Hernández, J.M. Hinojosa-Torres, J. Nicolás-Vázquez, I. Miranda-Ruvalcaba, R. // Journal of Molecular Structure. – 2011. – Vol. 995. – P. 41-50.

УДК 537.528

К. Ф. Зноско, С. Д. Лещик, И. Г. Сергиенко

РАЗМЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И МОРФОЛОГИЯ НАНОЧАСТИЦ ЭЛЕКТРОПЛАЗМЕННОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь <u>znosko@rambler.ru</u>

В последнее время для получения наночастиц используется электровзрывной разряд в жидкостях [1-2]. К тонкому проводнику, расположенному между двумя электродами в жидкости, прикладывается высокое импульсное напряжение. За короткое время проводник нагревается, плавится, испаряется, а его пары ионизируются. В жидкости формируется токопроводящий плазменный канал зажигается электровзрывной разряд. Синтез наночастиц происходит после прекращения импульсного тока в процессах рекомбинации плазмы. Окружающая плазменный канал жидкость аккумулирует образовавшиеся частицы и таким образом получается наносуспензия.

В настоящей работе представлены результаты исследования морфологии и размерных распределений наночастиц полученных при электроплазменном диспергировании Ni-Cr и Cu-Ag в дистиллированной воде.

Электроплазменному диспергированию подвергались проводники из цветных металлов и их сплавов. Их диаметры оставляли 0,4 - 0,6 мм, а длины равнялись 80 мм. Диспергирование проводников проводились в одинаковых объемах дистиллированной воды равных 500 см³. Система формирования высоковольтных импульсов была создана по аналогии с системами возбуждения электроразрядных эксимерных лазеров и ламп [3-5]. Изучение размерных распределений и морфологии полученных наночастиц проводилось на атомно-силовом микроскопе NT-206 (ACM) аналогично [4-6].



Рис. 1. Боковые 3D ACM-изображения наночастиц Cu-Ag (A, Б, B) и Ni-Cr (Г, Д, Е)



Для ACM исследований несколько капель наносуспензии наносились на предметное стекло. Вода испарялась, а содержащиеся в наносуспензии частицы осаждались на предметное стекло.

На рис. 1 представлены боковые 3D ACM-изображения наночастиц Cu-Ag (A, Б, В) и Ni-Cr (Г, Д, Е), осажденных на кварцевую подложку из полученных наносуспензий. На рис. 2 приведены их размерные распределения. Они показывают наличие наночастиц как правильной, так и неправильной формы. В поле сканирования ACM наночастицы расположены хаотично. Основное их количество находится в диапазоне 40-80 нм. На фоне мелких рассеянных частиц видно наличие крупных частиц субмикронного уровня, а также конгломератов. Наблюдаются одиночные достаточно крупные, вытянутые вверх, конусообразные структуры. Характерным является наличие на ACM-изображениях овальных структур. Морфологическое разнообразие наночастиц Ni-Cr имеют большие размеры, большее, чем наночастиц Cu-Ag. Наночастицы Ni-Cr имеют большие размеры, большее отклонение от сферичности и большую угловатость, а профиль их размерного распределения зависит от используемого рабочего напряжения.

- 1. Майер Г. Г. Объемные наноструктурные материалы: современные методы создания и исследования / Г. Г. Майер. Томск: ИФПМ СО РАН, 2013. 32 с.
- 2. Назаренко О. Б. Электровзрывные нанопорошки: получение, свойства, применение / О. Б. Назаренко; под ред. А. П. Ильина. Томск: Изд-во ПТУ, 2005. 148 с.
- 3. Зноско К. Ф. Конструкция и характеристики XeCl-эксилампы с возбуждением импульсным разрядом / К. Ф. Зноско // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка. 2019. Т. 9, № 2. С. 81–91.
- 4. Сергиенко И. Г. Получение наноразмерных частиц методом электроразрядного разрушения материалов в жидкости и исследование их свойств / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка.— 2017.– Т. 7, № 1.– С. 56–65.
- 5. Сергиенко И. Г. Получение наночастиц и суспензий на их основе методом электроразрядного разрушения в жидкости при микросекундном импульсе / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский //Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка.–2018.– Т.8, №1.– С.50–61.
- 6. Сергиенко И. Г. Влияние временного фактора на поведение наночастиц меди и суспензий на их основе, полученных методами импульсной лазерной абляции и электроразрядного разрушения / И. Г. Сергиенко, К. Ф. Зноско, С. Д. Лещик // Веснік ГрДУ імя Я.Купалы. Серыя 6. Тэхніка. 2017. Т. 7, № 2. С. 47–57.

УДК 53

Шафаревич Ю.В.¹, Федотов А.С.¹, Зур И.А.^{1,2}

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

¹ Республика Беларусь, Минск, Белорусский государственный университет, физический факультет, ул. Бобруйская, д.5, <u>uliasafarevic@gmail.com</u>, <u>fedotov.alehandro@gmail.com</u>, <u>zur.ilya01@gmail.com</u>

^{,2} НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская 11, 220030, Минск, Беларусь

Известно, что нанокластеры золота отличны от соответствующего ему объемного материала структурными, оптическими, химическими и термодинамическими свойствами. Эти свойства в значительной мере зависят от размера и формы нанокластера и используются в различных сферах науки и медицины в качестве катализаторов, в сенсорах для биохимического анализа, оптоэлектронике и т.д..

Для моделирования нанокластера золота использован молекулярно-динамический подход: система кластера золота из n атомов (рисунок 1a) рассматривалась как NVE ансамбль с потенциалом Леннарда-Джонса со степенями n = 1.96, m = 5.56. Для интегрирования уравнений движения задействован модифицированный алгоритм Верле.



Рисунок 1a - Структура нанокластера Au для количества атомов n = 321

Рисунок 16 – зависимость процента поверхностных атомов от количества атомов в кластерах

В отличие от объемного кристалла золота, его нанокластеры менее стабильны и имеют более низкую температуру плавления, причем с уменьшением количества атомов эта температура падает. Моделирование импульсной лазерной абляции нанокластера проводилось с помощью баростата Берендсена, задающего скорость изменения температуры в соответствие с энергетическими характеристиками падающего импульса. Как видим из рис. 16, доля поверхностных атомов растет с уменьшением диаметра нанокластеров, что приводит к уменьшению температуры плавления системы.

Для расчета разработана программа на Intel Fortran (oneAPI 2023), позволяющая рассчитывать динамику системы с шагом порядка 1 фс на временных отрезках в десятки наносекунд за минуту реального времени. Результаты будут полезны для моделирования динамики каскадного импульсного плавления нанокластеров золота наносекундным лазером.

Работа выполнена в СНИЛ "Вычислительного эксперимента и игровых технологий" БГУ.

Список литературы:

- [1] Бухурова, М.М., Применение межатомных потенциалов взаимодействия для моделирования наносистем / М.М. Бухурова Нальчик; КБНЦ, 2020 23 с.
- [2] Либенсон, М.Н., Взаимодействие лазерного излучения с веществом (силовая оптика)/М.Н. Либенсон, Е.Б. Яковлев, Г.Д. Шандыбина – 2-е изд., Санкт-Петербург, 201 – 130 с.
УДК 535; 004.94

О. Г. Романов, Г. Г. Крылов, И. А. Тимощенко, А. Н. Козловский, С. А. Липский

УЧЕБНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НЕЛИНЕЙНЫМИ СРЕДАМИ И НАНОМАТЕРИАЛАМИ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь romanov@bsu.by

Моделирование (численное, компьютерное) является на сегодняшний день исключительно важным методом исследования физических процессов. Предсказательный характер вычислительных экспериментов позволяет в значительной степени ускорить процесс проектирования новых структур, приборов и установок, сократить затраты, связанные с разработкой тех или иных систем. Все это в полной мере относится и к решению оптических задач, задач взаимодействия лазерного излучения с веществом, задач нанофотоники.

Целью данной работы являлась разработка учебного программного комплекса для использования в учебном процессе первой и второй ступени высшего образования в ВУЗах Республики Беларусь, специализирующихся в области оптических, лазерных и информационных технологий. Изучение многообразия явлений взаимодействия электромагнитного излучения с веществом ставит перед студентами, обучающимися по оптическим специальностям, ряд взаимосвязанных проблем: требует глубокого понимания сути физических механизмов, обуславливающих те или иные виды нелинейно-оптических явлений, процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом, привлечения эффективных численных методов решения уравнений электродинамики и механики сплошных сред, использования высокопроизводительных вычислительных комплексов.

Основной подход при разработке учебного программного комплекса состоял в реализации основанного на прямом численном решении системы уравнений электродинамики и механики сплошных сред подхода для моделирования процессов распространения и взаимодействия лазерного излучения с материалами и структурами, в том числе наноструктурами, на различных пространственно-временных масштабах. В соответствие с вышесказанным разработанный комплекс виртуальных лабораторных работ имеет следующую модульную структуру: модуль «Волновая оптика», модуль «Нанофотоника», модуль «Нелинейная оптика», модуль «Взаимодействие лазерного излучения с веществом». В каждом модуле реализовано по 4 виртуальных лабораторных работы. Разработана компьютерная программа «Учебный программный комплекс: Моделирование процессов взаимодействия лазерного излучения с нелинейными средами и наноструктурированными материалами» [1]. Доступность исходного кода программы позволяет использовать ее в качестве шаблона приложений для самостоятельного выполнения лабораторных работ студентами. Программа может также использоваться в качестве приложения, демонстрирующего широкий спектр оптических явлений и процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Отличительная особенность разработанной компьютерной программы – проведение вычислительных экспериментов в реальном времени.

Программный комплекс представляет собой статически собранное Win32 многооконное приложение, выполненное на языке C++ в среде быстрой разработки Embarcadero RAD Studio версии 10.2 Tokyo и использующее стороннюю библиотеку визуализации TeeChartPro фирмы Steema Software. Язык интерфейса – русский, локализация программы – русская. Программный комплекс поставляется в виде 5 приложений: Main.exe, WaveOptics.exe, Nanophotonics.exe, NonlinearOptics.exe, MatterInteraction.exe. Вместе с программой пользователям поставляются шестнадцать файлов помощи формата *.chm, отдельных для каждой лабораторной работы, и архив исходного кода программы для использования при выполнении виртуального практикума. Интерфейс одного из модулей компьютерной программы представлен на рисунке 1.



Рисунок 1 — Интерфейс модуля «Волновая оптика»

Работа выполнена в рамках подпрограммы «Научно-учебное оборудование» государственной научно-технической программы «Эталоны и научные приборы» Республики Беларусь.

[1] Свидетельство НЦИС РБ о регистрации компьютерной программы «Учебный программный комплекс: Моделирование процессов взаимодействия лазерного излучения с нелинейными средами и наноструктурированными материалами» (№1383 от 31.12.2020. Романов О.Г. и др.). УДК 621.3.036.27

М. А. Медведева

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОБОДНОЙ КОНВЕКЦИИ В СЛОЕ НАНОЖИДКОСТИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь miha3272727@gmail.com

В настоящее время наножидкости находят широкое применение в сфере энергетики и микроэлектроники в целях повышения эффективности систем охлаждения. Введение наночастиц в жидкость в ряде случаев способствует улучшению её теплофизических свойств в сравнении с традиционными теплоносителями. Эти изменения зависят, в первую очередь, от свойств базовой жидкости, а также от физических параметров наноразмерных частиц, и по-прежнему остаются предметом обсуждения среди исследователей.

Идеальная наножидкость представляет собой дисперсную систему, химическое взаимодействие между элементами которой отсутствует. В данной работе в качестве дисперсионной среды рассматривалась вода, а в качестве дисперсной фазы – закисьокись железа Fe₃O₄. Кристаллиты Fe₃O₄ не реагируют с водой. Кроме того, согласно экспериментальным данным, наножидкости из окислов металлов имеют меньшую склонность к агломерации, а также хорошую экспериментальную воспроизводимость с коэффициентом теплопроводности в пределах, предсказываемых существующими расчётными моделями[1].

Особый интерес представляет естественная конвекция в наножидкости. На данный момент нет однозначного ответа на вопрос о влиянии наночастиц на интенсивность теплообмена посредством конвективного механизма. Задача о конвекции в тонком горизонтальном слое наножидкости в поле силы тяжести решалась в COMSOL Multiphysics методом конечных элементов. Была поставлена следующая начально-краевая задача:

$\begin{cases} \vec{v} _{t=0} = 0, \ (x, y) \in D, \\ T _{t=0} = T_0, \ (x, y) \in D. \end{cases}$	$\begin{cases} I = I_{top}, \ y = 0, \ x \in I, \\ T = T_{bottom}, \ y = h, \ x \in \Gamma, \\ \vec{v} = 0, \ x \in \Gamma, \\ -\vec{n} \cdot \vec{q} = 0, \ T = T_0, \ x = 0, \ y \in \Gamma, \\ -\vec{n} \cdot \vec{q} = 0, \ T = T_0, \ x = 10h, \ y \in \Gamma. \end{cases}$
	$(n, q = 0, 1 = 10, x = 100, y \in 1)$

где D – расчётная область с аспектным соотношением сторон 1:10, Γ – граница расчётной области, \vec{v} – векторное поле скорости, T – скалярное поле температуры, $T_0 = 293,15 \ K$ – начальная температура, $T_{top} = T_0$ и $T_{bottom} = T_0 + \Delta T$ – температуры верхней и нижней границ соответственно, h = 0,1 м – высота области, \vec{n} – нормаль к боковой стенке, \vec{q} – плотность теплового потока. Средний диаметр наночастиц 13 нм.

В работе анализировались и сравнивались распределения температур и скоростей в слое при объёмных концентрациях наночастиц $\varphi = 0,2; 0,6; 1; 2\%$ и различных числах Рэлея. Физические параметры нанодисперсии (Fe₃O₄/H₂O) взяты из экспериментальных данных, описанных в работе[2].

[1] Терехов, В. И. Механизм теплопереноса в наножидкостях: современное состояние проблемы (обзор). Часть 1. Синтез и свойства наножидкостей. / В. И. Терехов, С. В. Калиниа, В. В. Леманов // ТА – 2010. – Т. 17. – С. 1–15.

[2] Syam Sundar, L. Investigation of thermal conductivity and viscosity of Fe₃O₄ nanofluid for heat transfer applications./ L. Syam Sundar, M. K. Singh, A. C. M. Sousa // ICMHT. – 2013. – Vol. 44, – P. 7–14.

СОДЕРЖАНИЕ

С. О. Комаров, А. К. Горбацевич, Г. В. Верещагин ОПРЕДЕЛЕНИЕ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ С БОЛЬШИМИ НОМЕРАМИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ЗАРЯДА, АСИМПТОТИЧЕСКИ ПРИБЛИЖАЮЩЕГОСЯ К ЧЕРНОЙ ДЫРЕ ШВАРЦШИЛЬДА	5
Y.A. Kulchitsky, P.V. Tsiareshka STUDY OF KNO SCALING IN pp-COLLISIONS AT ENERGIES 0.9 - 13 TeV WITH ATLAS AT LHC	7
Y.A. Kulchitsky, E. M. Plotnikova, P.V. Tsiareshka TWO-PARTICLE BOSEEINSTEIN CORRELATIONS IN pp-COLLISIONS AT 13 TeV WITH ATLAS AT LHC	9
Г.В.Грушевская, Г.Г.Крылов НЕАБЕЛЕВА СТАТИСТИКА В КОРРЕЛЯЦИЯХ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ И ТОПОЛОГИЧЕСКАЯ НЕТРИВИАЛЬНОСТЬ ПЛОСКИХ ЗОН В ГРАФЕНЕ	11
I.A. Serenkova BOUNDS ON THE MASS AND MIXING OF Z' AND W' BOSONS DECAYING INTO DIFFERENT PAIRINGS OF W, Z OR HIGGS BOSONS USING CMS AND ATLAS DATA AT THE LHC	13
I. D. Feranchuk, Nguyen Quang San, O.D. Skoromnik ALL-COUPLING SOLUTION FOR THE POLARON PROBLEM IN THE SCHRODINGER REPRESENTATION	15
С. В. Гапоненко ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ: ОТ НАНОСТРУКТУР ДО АСТРОФИЗИКИ	17
В. В. Гавриловец, В. В. Тихомиров, А.С. Лобко, Н.С. Сочивко УЧЁТ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ СРЕДЫ В GEANT4 ЧЕРЕЗ МОДИФИКАЦИЮ СТАНДАРТНОГО ТРЕККИНГА	19
С.В. Власенко, А.Б. Михалычев, Д.С. Могилевцев ЭМУЛЯЦИЯ КВАНТОВЫХ ИЗМЕРЕНИЙ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СМЕСИ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ	21
V.G. Baryshevsky TIME REVERSAL INVARIANCE VIOLATING INTERACTIONS OF HIGH ENERGY SHORT-LIVED PARTICLES IN BENT AND STRAIGHT CRYSTALS	23

А.В. Баран, В.В. Кудряшов РЕШЕНИЕ КВАЗИУГЛОВОГО УРАВНЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ В ДВУМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ ЛОБАЧЕВСКОГО	25
S.V. Anishchenko, A.A. Gurinovich PHASE DIFFUSION IN RELATIVISTIC REFLEX TRIODES	27
Е. С. Кокоулина, М. Л. Левчук, М. Н. Невмержицкий, Р. Г. Шуляковский СЕЧЕНИЯ И ОДНОСПИНОВЫЕ АСИММЕТРИИ В РЕАКЦИИ НЕКОГЕРЕНТНОГО ФОТОРОЖДЕНИЯ ПИОНА НА ДЕЙТРОНЕ В ПОРОГОВОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ	29
A. Naumenko, S. Andrukhovich, E. Saprunov UNDERWATER IN SITU GAMMA SPECTROMETERS BASED ON NAI(TL) AND SRI2(EU2+) SCINTILLATORS: COMPARISON, TEMPERATURE DEPENDENCES, METHODS OF TEMPERATURE STABILIZATION OF SPECTRA	31
А. Ю. Манько1, Р. Г. Шуляковский2 ДВУХ-ФОТОННОЕ WW ПАР НА LHC : ЛЕПТОННЫЙ И АДРОННЫЙ КАНАЛ РАСПАДА.	33
Н. Г. Крылова, В. М. Редьков ГЕОМЕТРИЗАЦИЯ ТЕОРИИ СПИНОРНОЙ ЧАСТИЦЫ В ПРОСТРАНСТВЕ НЬЮМЕНА-УНТИ-ТАМБУРИНО	35
A.V. Ivashkevich, V.M. Red'kov NONRELATIVISTIC APPROXIMATION IN THE PAULI – FIERZ THEORY FOR A SPIN 3/2 PARTICLE IN PRESENCE OF EXTERNAL FIELDS	37
А.К. Горбацевич, Г.С. Верещагин, А.С. Гаркун, С.О. Комаров, Я.Д. Коробов УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ОДНОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В СИЛЬНЫХ ГРАВИТАЦИОННЫХ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	39
А.В. Новицкий, Д.В. Новицкий, А.Н. Фурс, Ф.М. Морозько, А. Коробчевская НЕЭРМИТОВОСТЬ В НАНООПТИКЕ	41
A.V. Ivashkevich, V.M. Red'kov SPIN 3/2 PARTICLE IN THE COULOMB FIELD, TETRAD FORMALISM, NONRELATIVISTIC APPROXIMATION	43
А. В. Саечников, Э. А. Чернявская, В.А. Саечников МАТРИЦА АКТИВНЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ ДЛЯ ВЫСОКОЧУВИТЕЛЬНОГО БИОХИМИЧЕСКОГО ДЕТЕКТИРОВАНИЯ	45

М. М. Кугейко ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОПТИКИ РАССЕИВАЮЩИХ СРЕД А.А. Спиридонов, В.С. Баранова, В.Е. Черный, Д.В. Ушаков, В.А. Саечников ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОРБИТЫ СВЕРХМАЛОГО КОСМИЧЕСКОГО АППАРАТА	47 49
И. В. Саечников, В. В. Скакун, Э. А. Чернявская АДАПТИРОВАННАЯ ТЕХНИКА ДЕТЕКТИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ДИНАМИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ОПТИЧЕСКОМ ПОТОКЕ ДЛЯ ЗАДАЧ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА	51
В.П.Стефанов, И.А. Пешко ИЗЛУЧЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИПОЛЕЙ В СЛОЕ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ГАУССОВЫМ ПУЧКОМ	53
С. Н. Сытова МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ	55
В.В. Тихомиров, В.В. Гавриловец, А.С. Лобко, Н.С. Сочивко ПРОТЯЖЕНЫЕ КАСКАДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ КАК ИНСТРУМЕНТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ	57
I. D. Feranchuk, Nguyen Quang San SUPERRADIANT PARAMETRIC X-RAY EMISSION	59
Н.Д. Шайковская ЗАДАЧА О РАССЕЯНИИ В ПРОСТРАНСТВЕ ГАУССА В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ	61
А. О. Шаплов ДВИЖЕНИЕ СИСТЕМЫ ТЕЛ ВО ВНЕШНИХ ГРАВИТАЦИОННОМ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЯХ	63
 А. В. Бурый, А. В. Ивашкевич 50-КОМПОНЕНТНАЯ ТЕОРИЯ ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 2, ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ, МАССИВНЫЙ И БЕЗМАССОВЫЙ СЛУЧАИ 	65
В. Н. Белый, Н. С. Казак, Н. А. Хило ФОРМИРОВАНИЕ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВИХРЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В ЛИНЕЙНЫХ И НЕЛИНЕЙНЫХ КРИСТАЛЛАХ	67
Е.С. Воропай, К.Ф. Ермалицкая, Д.С. Тарасов, М.П. Самцов, К.А. Шевченко, А.А. Кирсанов СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОБРАЗЦОВ ДВУХИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ АТОМНО-ЭМИССИОННЫМ СПЕКТРОМЕТРОМ С АХРОМАТИЧЕСКОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМОЙ	69

Н. Н. Крук, Л. Л. Гладков, Д. В. Кленицкий РОЛЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ КОНФОРМАЦИИ В ФОРМИРОВАНИИ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК N-ЗАМЕЩЕННЫХ ПОРФИРИНОВ	71
С.Н. Курилкина, Н.А. Хило, П.И. Ропот, А.М. Варанецкий ЛАЗЕРНЫЙ ИЗЛУЧАТЕЛЬ БЕССЕЛЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ С СУБВОЛНОВЫМ ДИАМЕТРОМ ОСЕВОГО МАКСИМУМА ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ	73
В. Ю. Курстак, С. С. Ануфрик НАВЕДЕННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ АКТИВИРОВАННОГО КРАСИТЕЛЕМ КОМПОЗИТА ПРИ ПИКОСЕКУНДНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ	75
Н.В. Лахмицкий, В.Н.Чижевский, С.Я.Килин ПЕРЕДАЧА ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОГО ИМПУЛЬСНОГО СТОХАСТИЧЕСКОГО НЕЙРОНА	77
Г. Е. Малашкевич, В. В. Ковгар, Н. В. Варапай, Т. А. Павич, Г.П. Шевченко, Ю. В. Бокшиц СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА Ег-СОДЕРЖАЩИХ КВАРЦЕВЫХ СТЕКОЛ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРЯМЫМ И ГИБРИДНЫМ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ	79
А.В. Малинка, А.П. Чайковский, И.А. Алексеев, В.А. Базылевич, В.П. Дик, Е.А. Илькевич, А.И. Калевич, И.Л. Кацев, М.М. Король, В.А. Пещеренков, А.С. Прихач ИССЛЕДОВАНИЯ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ И СНЕЖНОГО ПОКРОВА АНТАРКТИДЫ МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОГО ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ	81
Н. С. Метельская, А. П. Чайковский, А. И. Бриль, В. А. Пещеренков ОПТИМАЛЬНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ И МОДЕЛИРОВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ	83
А.А. Мискевич, В.А. Лойко, Н.А. Лойко ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ «МОНОСЛОЙ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В ПОГЛОЩАЮЩЕЙ СРЕДЕ»: РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОГЛОЩЁННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ И СРЕДОЙ	85
А. Б. Михалычев, К. И. Жевно, С. В. Власенко, Д. С. Могилевцев ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ РАЗРЕШЕНИЯ ФЛУКТУАЦИОННОЙ МИКРОСКОПИИ	87
Д. В. Новицкий ВИРТУАЛЬНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И УСИЛЕНИЕ В РЕЗОНАНСНЫХ СРЕДАХ	89

В. А. Орлович, А. И. Водчиц, И. А. Ходасевич, А. Ю. Пятышев, А.В. Скрабатун, А. А. Русак ПИКОСЕКУНДНЫЙ ВКР-ЛАЗЕР НА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СМЕСИ LiOH И Sr(NO3)2	91
А. И. Конойко, В. М. Кравченко, А.С. Кузьмицкая СПЕКТРАЛЬНОЕ УПЛОТНЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ В ВОЛОКОННО- ОПТИЧЕСКОМ КАНАЛЕ НА БАЗЕ РЕЗОНАТОРОВ ФАБРИ-ПЕРО	93
И. А. Тимощенко, О. Г. Романов АКУСТО-ФОТОННЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СВЕРХБЫСТРОЙ МОДУЛЯЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	95
А. Л. Толстик ДИНАМИЧЕСКАЯ ГОЛОГРАФИЯ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯ	97
Ф.М. Трухачев, Н.В. Герасименко, М.М. Васильев, О.Ф. Петров ПЕРЕНОС ВЕЩЕСТВА КАК ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ СВОЙСТВО ИОННО-ЗВУКОВЫХ СОЛИТОНОВ	99
Д. В. Ушаков, А. А. Афоненко, В.И. Гавриленко, Р.А. Хабибуллин ПРОГРЕСС GaAs/AlGaAs КВАНТОВО-КАСКАДНЫХ ЛАЗЕРОВ ТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА	101
О. Х. Хасанов, О. М. Федотова, А. С. Берестовский, Т. В. Смирнова, Г.А. Русецкий СОЛИТОНЫ В НАНОКОМПОЗИТАХ С ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ	103
М. А. Ходасевич, Д. А. Королько, М. В. Бельков, К. Ю. Кацалап, П.С. Колодочка, П. А. Куликовская КАЧЕСТВЕННЫЙ И КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ	105
В. Н. Чижевский ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ШУМОВ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СИГНАЛОВ НА ЧАСТОТЕ БИЕНИЙ В БИСТАБИЛЬНОМ ЛАЗЕРЕ С БИГАРМОНИЧЕСКИМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ	107
В. М. Катаркевич, Т. Ш. Эфендиев ВЛИЯНИЕ ПОРЯДКА БРЭГГОВСКОГО ОТРАЖЕНИЯ НА ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РОС-ЛАЗЕРА НА КРАСИТЕЛЯХ СО СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЙ РЕШЕТКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПРИ СУБНАНОСЕКУНДНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ	109

Р.А. Дынич, А.Н. Понявина МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И БЛИЖНЕПОЛЕВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАССЕЯНИЯ ГИБРИДНЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ	111
S.T. Pashayan, V.A. Anishchik, S.V. Zlotski, A.V. Butsen SYNTHESIS AND COMPARATIVE STUDY OF NANOSCALE THIN-FILM STRUCTURES BY VACUUM PULSED LASER DEPOSITION AND LASER ABLATION IN LIQUIDS	113
А. Н. Чумаков, В. В. Лычковский, И. С. Никончук, В. Э. Анискевич, Д.С. Милованович, Б. М. Райчич, Б. Д. Станков СТРУКТУРИРОВАНИЕ И АЗОТИРОВАНИЕ CrVN ПОКРЫТИЙ НА СТАЛИ И КРЕМНИИ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ В ВОЗДУХЕ	115
 B. D. Stankov, B. M. Rajcic, B. M. Gakovic, V.V. Luchkouski, A. N.Chumakov, D. M. Milovanovic LASER IRRADIATION EFFECTS ON CrVN HARD COATINGS SURFACE MORPHOLOGY 	117
П. В. Шпак, А. Н. Чумаков, Л. В. Баран, В. В. Малютина-Бронская, Н.А. Босак, В. С. Дробуш, А. С. Кузьмицкая МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ, ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ОКСИДА ЦИРКОНИЯ ZrO2, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ	119
А. А. Горбачев, О. Н. Третинников ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ НАНОКЛАСТЕРОВ СЕРЕБРА, ВЫРАЩЕННЫХ В ПОВЕРХНОСТНО- ПРИВИТОМ КАРБОКСИЛЬНОМ ПОЛИМЕРЕ	121
Э.И. Зенькевич, К. фон Борцисковски НАНОАНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ: ИНТЕРФЕЙСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ, РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ, ПРИМЕНЕНИЯ	123
 А. В. Богданова, Ю. В. Осика, Я. А. Недбальская, М. И. Демиденко, М.Б. Шундалов, Т. А. Кулагова СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА СТРУКТУРНЫХ И СПЕКТРАЛЬНО- ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ БОР-НИТРИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК 	125
Е. В. Луценко РАЗВИТИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ III-НИТРИДНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	127

А.В. Мазаник, Е.А. Стрельцов, А.И. Кулак РАМАНОВСКАЯ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ	129
А. В. Мазаник, И. А. Свито, В. К. Ксеневич, Е. А. Стрельцов, А. И. Кулак ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ВИСМУТА: ЭКОЛОГИЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И СЕНСОРИКИ	131
 А.П. Низовцев, А.Л. Пушкарчук, С.А. Кутень, В.П. Стефанов, D. Lyakhov, D.L. Michels, А.С. Гусев, Н.И. Каргин, С.Я. Килин КВАНТОВАЯ ПАМЯТЬ НА ДИМЕРАХ 13С-13С В АЛМАЗЕ С NV- ЦЕНТРАМИ: МОДЕЛИРОВАНИЕМЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ 	133
Н. А. Поклонский РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ В ПОЛЕВОМ ТРАНЗИСТОРЕ	135
А.И. Серокурова, С.А. Шарко, Н.Н. Новицкий, А.И. Стогний ФОРМИРОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК МЕТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ Ве, Ni и Au B УСЛОВИЯХ МНОГОКРАТНОГО ПОВТОРЕНИЯ ЦИКЛОВ ИОННО-ЛУЧЕВОГО РАСПЫЛЕНИЯ – ОСАЖДЕНИЯ	137
Д. С. Филимоненко, В. М. Ясинский, А. П. Низовцев, С. Я. Килин МАГНИТОМЕТРИЯ НА ОСНОВЕ РЕГИСТРАЦИИ ПРОЦЕССОВ КРОСС- РЕЛАКСАЦИИ МЕЖДУ РАЗЛИЧНЫМ ОБРАЗОМ ОРИЕНТИРОВАНЫМИ ГРУППАМИ NV-ЦЕНТРОВ В СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	139
В.В. Филиппов, В.А. Лабунов, И.А. Кашко, Д.В. Грапов, А.К. Тучковский ПАССИВАЦЦИЯ ГРАНИЦЫ ПЕРОВСКИТА И ТРАНСПОРТНЫМ СЛОЕМ ОКСИДА НИКЕЛЯ ГРАФИТОМ И КАРБИДОМ БОРА	141
О. Х. Хасанов, О. М. Федотова, Г. А Русецкий, А. В. Пашкевич, К.В. Писцова, Я. Д. Горбач, Д. К. Жарков, В. Г. Никифоров АПКОНВЕРСИОННОЕ ФОТОННОЕ ЭХО В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ДИОКСИДА ТИТАНА	143
С.А. Шарко, А.И. Серокурова, Н.Н. Новицкий, Н.Н. Поддубная, В.А. Кецко, А.И. Стогний ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА НА ИНТЕРФЕЙСЕ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК/СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК	145
В. В. Чаевский, М. А. Андреев СТРУКТУРА И СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Cr-НАНОАЛМАЗЫ/ Hf – Zr – ZrN	147

Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов ФУЛЛЕРЕНЫ, КАК КОМПОНЕНТЫ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ	149
М.В. Войтикова НЕЛИНЕЙНЫЙ И ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СИГНАЛОВ АРТЕРИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ	151
Е.В.Васьковцев, Г.В.Грушевская, В.П.Егорова, Н.Г.Крылова, И.В. Липневич ВЛИЯНИЕ ОДНОНУКЛЕОТИДНЫХ ЗАМЕН НА ПЕРЕХОД СПИРАЛЬ- КЛУБОК В ДНК-КОНЬЮГАТАХ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ	153
 А.В. Казак, А.А. Кириллов, Л.В. Симончик, М.М. Кураица, Б.М. Обрадович, Г.Б. Сретенович БАКТЕРИЦИДНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ВОЗДУШНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ СТРУЙ: ОБРАЗОВАНИЕ И ДИАГНОСТИКА 	155
Т. А. Кулагова ТЕРАНОСТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК	157
С.В. Лепешкевич, И.В. Сазанович, М.В. Пархоц, С.Н. Гилевич, Б.М. Джагаров ЛАЗЕРНАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПРОЦЕССОВ ОКСИГЕНАЦИИ И КОНФОРМАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ ГЕМОГЛОБИНА ЧЕЛОВЕКА	159
А.В. Казак, Л.В. Симончик, Н.В. Дудчик, О.А. Емельянова СТЕРИЛИЗАТОР НА ОСНОВЕ АЗОТНЫХ РЕАКТИВНЫХ ЧАСТИЦ ВОЗДУШНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ	161
О. Х. Хасанов, Г. А Русецкий, О. М. Федотова, К. В. Писцова СОЛИТОНЫ В БИОСУСПЕНЗИЯХ	163
В.И. Архипенко К 220 ГОДОВЩИНЕ КНИГИ В.В. ПЕТРОВА «ИЗВЕСТИЕ О ГАЛЬВАНИ- ВОЛЬТОВСКИХ ОПЫТАХ» (КАКОЙ РАЗРЯД ЗАЖЕГ В.В. ПЕТРОВ)	164
Н. В. Тарасенко, А. А. Невар, М. И. Неделько, В.Г. Корнев, Н. Н. Тарасенко ПЛАЗМЕННО-ЛАЗЕРНЫЙ СИНТЕЗ КОМПОЗИТНЫХ НАНОСТРУКТУР В ЖИДКИХ СРЕДАХ	166
Г. В. Грушевская, Г. Г. Крылов ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ГРАФЕНОЙ ПЛАЗМОНИКЕ	168
В. В. Лычковский, А. Н. Чумаков ОСОБЕННОСТИ АБЛЯЦИИ СТЕКЛА БК-110 И ОБРАЗОВАНИЯ ПЛАЗМЫ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПАРНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ 355 И 532 НМ	170

А.А. Кириллов, Л.В. Симончик, Н.В. Томкович НАРУШЕНИЕ СКАЙЛИНГОВЫХ ЗАКОНОВ В КАТОДНОЙ ОБЛАСТИ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ	172
М. С. Усачёнок, Л. В. Симончик, С. Е. Андреев, Н. Н. Богачёв ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЕННОЙ НЕСИММЕТРИЧНОЙ ВИБРАТОРНОЙ АНТЕННЫ, РЕАЛИЗОВАННОЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ПЛАЗМЫ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ	174
Е. А. Невар, Н. А. Босак, М. И. Неделько, Н. Н. Тарасенко, Н. В. Тарасенко, G. Chen, L. Shi РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ЧАСТИЦ КРЕМНИЯ И КРЕМНИЕВО-УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ ДЛЯ АНОДОВ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ	176
А. В. Агашков ДВУХЛУЧЕВАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ БЕЗ ПРОБЛЕМЫ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЗНАКА ФАЗОВОГО СДВИГА	178
Praskowya D.Serowa, Ivan A. Kovalew and Dmitry W. Serow QUASICRISTALS, SNARKS AND FOUR COLOURS PROBLEM	180
С. Н. Сытова, А. Р. Барткевич, К. А. Веренич, В. В. Гавриловец, А. П. Дунец, А. Н. Коваленко, Н. И. Поляк, А. Л. Холмецкий, С. В. Черепица БЕЛОРУССКИЙ НАУЧНЫЙ АРХИВ НА ОСНОВЕ ПОРТАЛА ЯДЕРНЫХ ЗНАНИЙ BelNET	182
И. И. Ташлыкова - Бушкевич, А. Ю. Бобрик, Т. Б. Русецкая, И. А. Столяр БФО В БГУИР: ОПЫТ ИНТЕГРАЦИИ ПРОЕКТА «ЭВРИСТИКА В ФИЗИКЕ» В УЧЕБНЫЙ ПРОЦЕСС	184
О. Г. Романов, Г. Г. Крылов, А. С. Федотов, А. Н. Козловский, Л.Б. Елисеева, И. А. Тимофеева, С. А. Липский УЧЕБНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ	186
Н. А. Никоненко, М. А. Шеламова, И. А. Кохановская ДИНАМИКА ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ ВЫСШЕЙ КВАЛИФИКАЦИИ В ОБЛАСТИ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК В РЕСПУБЛИКЕ БЕЛАРУСЬ	188
В.А. Люшкевич, С. В. Гончарик, И. И. Филатова, М. Е. Маслинская ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ СЕМЯН ЛЬНА МАСЛИЧНОГО	190

N. Tarasenka, V. Kornev, A. Nevar, M. Nedelko and N. Tarasenko LASER ABLATION FABRICATION OF ZINC OXIDE/CARBON NANOSTRUCTURES FOR APPLICATION AS SUPERCAPACITOR ELECTRODES	192
А. В. Сидоренко ПЕРЕМЕЩЕНИЕ МОБИЛЬНОГО РОБОТА С ОГИБАНИЕМ ПРЕПЯТСТВИЙ	194
В. А. Длугунович, А. В. Исаевич, И. В. Корсеко, Е. А. Круплевич, А.В. Механиков, С. В. Никоненко, О. Б. Тарасова НАЦИОНАЛЬНАЯ СИСТЕМА МЕТРОЛОГИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ В ОБЛАСТИ ФОТОНИКИ И ЛАЗЕРНОЙ ТЕХНИКИ	196
 В. Ю. Плавский, А. Н. Собчук, А. И. Третьякова, А. В. Микулич, О.Н. Дудинова, Л. Г. Плавская, Р. К. Нагорный, А. Д. Свечко, Т.С. Ананич, Н. Д. Прокопенко, С. В. Якимчук, И. А. Леусенко, Н. В. Дудчик, О.А. Емельянова ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СЕНСИБИЛИЗИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА НИТРОФУРАНОВЫХ СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ И ИХ ФОТОХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ 	198
В. Ю. Плавский, Л. Г. Плавская, О. Н. Дудинова, А. И. Третьякова, А.В. Микулич, Р. К. Нагорный, А. Д. Свечко, А. Н. Собчук, Т. С. Ананич, С.В. Якимчук, И. А. Леусенко ФОТОАКЦЕПТОРЫ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ПОВЫШЕННУЮ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ РАКОВЫХ КЛЕТОК К ДЕЙСТВИЮ ИЗЛУЧЕНИЯ СИНЕЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА	200
S.A. Tikhomirov, A.P. Blokhin, V.A. Povedailo, A.S. Pilipovich, D.L. Yakovlev, P.H. Minh, P.V. Duong FÖRSTER RESONANCE ENERGY TRANSFER BETWEEN MOLECULAR ROTORS SYBR GREEN INTERCALATED IN DNA	202
В.А. Ковтун – Кужель, Е.В. Дроботов ВЛИЯНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ДИМЕРОВ НА ИХ БЛИЖНЕПОЛЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ	204
Б.Ф.Кунцевич ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИГНАЛОВ АКТИВНО- ИМПУЛЬСНЫХ СИСТЕМ ВИДЕНИЯ ДЛЯ ДВУХ СПОСОБОВ НАБЛЮДЕНИЯ	206
И. А. Пешко АНОМАЛЬНОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТА В ФОТОННЫХ СЕТЯХ С ДИССИПАТИВНОЙ СВЯЗЬЮ	208

Р.А. Дынич, А.Н. Понявина МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И БЛИЖНЕПОЛЕВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАССЕЯНИЯ ГИБРИДНЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦ	210
Г. А. Пицевич, А.Е. Малевич, В. В. Сапешко, Я. В. Полякова, Е. Е. Ковалева СИЛОВОЕ И КИНЕМАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВНУТРЕННИХ ВОЛЧКОВ В МОЛЕКУЛЕ МЕТАНДИОЛА	212
Я. О. Крывелёва, Д. Д. Качкина, Н. А. Хурсевич КОНФОРМАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, ТОРСИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ЧАСТОТЫ ТУНЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЫ РЕЗОРЦИНА	214
И.В.Балыкин, А.А.Рыжевич, Н.С.Казак ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПО АЗИМУТУ ОТКЛОНЕНИЙ УГЛА КОНУСНОСТИ АКСИКОНА НА БЕССЕЛЕВ СВЕТОВОЙ ПУЧОК	216
И.В.Балыкин, А.А.Рыжевич, Н.С.Казак ОПТИЧЕСКИЙ ФУРЬЕ-СПЕКТР БЕССЕЛЕВА СВЕТОВОГО ПУЧКА, СФОРМИРОВАННОГО ИЗ ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА, ПРОШЕДШЕГО ЧЕРЕЗ ИМИТАТОР АТМОСФЕРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ	218
М. А. Князев РЕШЕНИЕ ТИПА КИНКА УРАВНЕНИЯ ШАРМЫ-ТАССО-ОЛВЕРА- БЮРГЕРСА	220
И.А.Ходасевич, В.С. Степура, А.С. Пиотух, В.А. Длугунович, А.В. Исаевич, М.В. Корольков, Д.С. Могилевцев, Е.В. Колобкова, А.С.Грабчиков АП-КОНВЕРСИЯ ВО ФТОРФОСФАТНЫХ СТЕКЛАХ С ИОНАМИ ИТТЕРБИЯ И ТУЛЛИЯ, ВОЗБУЖДАЕМАЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬЮ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 1038 НМ, ЛИБО НЕПРЕРЫВНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ В ОБЛАСТИ 975 НМ.	222
Г. А. Гусаков, Н. В. Белько, М. П. Самцов, А. А. Луговский, В.А. Пархоменко, Е. С. Воропай ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОМПЛЕКСОВ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ АЛМАЗОВ С КРАСИТЕЛЯМИ СТИРИЛОВОГО И ЦИАНИНОВОГО РЯДА	224
А. Д. Замковец, Е.А. Барбарчик, О.В. Буганов, А.Н. Понявина, С.А. Тихомиров СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИБРИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ Ag-CuPc	226
В. В. Кирис, К. Ю. Кацалап, М. В. Бельков СРАВНЕНИЕ РЕГРЕССИИ НА ЛАТЕНТНЫЕ СТРУКТУРЫ И РЕГРЕССИИ ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ ПРИ АНАЛИЗЕ СОСТАВА НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЕЙ И ЧУГУНОВ ПО СПЕКТРАМ ЛИЭС	228

В. В. Ковгар, М. З. Зиятдинова, Н. В. Варапай СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ҮЬ-СОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ И ОКСИФТОРИДНЫХ СТЕКОЛ	230
Н. Н. Крук, А. М. Сохибова, А. Ю. Шакель СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ СПЕЦИФИЧЕСКОЙ СОЛЬВАТАЦИИ ПРОТОНИРОВАННОЙ И ДЕПРОТОНИРОВАННОЙ ФОРМ СВОБОДНЫХ ОСНОВАНИЙ КОРРОЛОВ	232
М. В. Корольков, И. А. Ходасевич, А. С. Пиотух, А.С. Грабчиков, Е.В. Колобкова, Д. С. Могилевцев ВЕРИФИКАЦИЯ ЛИНИЙ В СПЕКТРАХ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ФТОРФОСФАТНЫХ СТЁКОЛ, ДОПИРОВАННЫХ ИОНАМИ ИТТЕРБИЯ И ТУЛИЯ, ПО СТЕПЕНИ НЕЛИНЕЙНОСТИ ПРОТЕКАЮЩИХ АП- КОНВЕРСИОННЫХ ПРОЦЕССОВ.	234
А. О. Негриенко, В. В. Кабанов ОБРАБОТКА И УПРАВЛЕНИЕ ВОЛНОВЫМ ФРОНТОМ ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА МЕТОДОМ АДАПТИВНОЙ ЦИФРОВОЙ ГОЛОГРАФИИ	236
М. В. Пархоц, Н. В. Ивашин, С. В. Лепешкевич, Л. В. Мкртчян, А.А. Закоян, А. Г. Гюльханданян, Т. Е. Сеферян, Г. В. Гюльханданян, Б. М. Джагаров ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КАТИОННОГО ПИРИДИЛПОРФИРИНА В КОМПЛЕКСЕ С ФОЛИЕВОЙ КИСЛОТОЙ	238
Г. А. Пицевич, Е. Н. Дюбкина, П. В. Еременко НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ N4OYBDHA	240
С. Н. Терехов, Н. В. Ивашин ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ Ni-OKTAAЛКИЛПОРФИРИНОВ В ОСНОВНОМ И ФОТОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЯХ	242
И. Г. Даденков, А. Л. Толстик, И. П. Урбанович, Ю. И. Миксюк, К.А. Саечников СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФОТОИНДУЦИРОВАННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И ЗАПИСИ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В КРИСТАЛЛАХ СИЛИКАТА ВИСМУТА	244
Л. И. Гуринович, Л. Л. Троцюк, О. С. Кулакович Поляризация люминесценции пленок ПВС, содержащих ориентированные наностержни Au	246
А. И. Водчиц, И. А. Ходасевич, В. А. Орлович ПИКОСЕКУНДНОЕ ИНФРАКРАСНОЕ ВКР В КРИСТАЛЛАХ КGW И PbWO4	248

С. С. Ануфрик, С. Н. Анучин СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ РОДАМИНА 110 С ЦИКЛИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ	250
Н. В. Белько, А. М. Мальтанова, А. Г. Тимошенко, Н. В. Лабода, С.К. Позняк, М. П. Самцов ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕНСОРОВ рН И ИОНОВ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ СПИРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ РОДАМИНА Б	252
И. В. Семченко, А. Л. Самофалов, П. В. Сомов ДВОЙНАЯ ДНК-ПОДОБНАЯ ПЛАНАРНАЯ СПИРАЛЬ КАК НОВЫЙ ЭЛЕМЕНТ МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ	254
В. С. Старовойтов, В. Н. Чижевский, А. А. Смоляков, С. Я. Килин ИЗМЕРЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ВРЕМЯ- РАЗРЕШАЮЩЕЙ МАТРИЦЫ ДЕТЕКТОРОВ ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ	256
И. А. Тимощенко, О. Г. Романов, А. В. Подберезский, Т. А. Кулагова КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТОАКУСТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ МИКРО- И НАНОСТРУКТУР	258
А. Л. Уласевич, А. А. Кузьмук ЛАЗЕРНЫЙ СЕНСОР УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА В АТМОСФЕРНОМ ВОЗДУХЕ	260
Д. С. Филимоненко, В. М. Ясинский, С. К. Секацкий ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СКАНИРУЮЩЕЙ БЛИЖНЕПОЛЕВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ЛОКАЛЬНОГО ФОТОТЕРМИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА, ИНДУЦИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЕМ ВИДИМОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА	261
В. В. Чаевский, М. А. Андреев СТРУКТУРА И СОСТАВ ТОНКИХ ПЛЕНОК Cr-НАНОАЛМАЗЫ/ Hf – Zr – ZrN	263
В. Н. Чижевский, Н. В. Лахмицкий УСИЛЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ В ИСКУСТВЕННОМ ИМПУЛЬСНОМ НЕЙРОНЕ МЕТОДОМ ВИБРАЦИОННОГО РЕЗОНАНСА	265
С. А. Максименко, Д. В. Адамчук, М. И. Демиденко, В. К. Ксеневич, В.В. Углов НОВЫЙ МАТЕРИАЛ НАГРЕВАТЕЛЯ ДЛЯ ВАКУУМНОГО РЕЗИСТИВНОГО ИСПАРИТЕЛЯ	267
С. С. Ануфрик, К. Ф. Зноско, А. П. Володенков ШИРОКОАПЕРТУРНЫЙ ЭЛЕКТРОРАЗРЯДНЫЙ ХеСІ ЛАЗЕР	269

А. В. Баглов, М. С. Тиванов, Л. С. Хорошко, Л. С. Ляшенко К ВОПРОСУ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ ПРОПУСКАНИЯ ТОНКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК НА ОПТИЧЕСКИ ПРОЗРАЧНОЙ ПОДЛОЖКЕ	271
А. В. Баглов, Л. С. Хорошко ДИСУЛЬФИД РЕНИЯ – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ СЛОИСТЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ	273
С.А. Кутень, А.Л. Пушкарчук, Т.С. Пивоварчик, А.А. Хрущинский, А.Г. Поддубская, Н.И. Волынец, Dmitry Lyakhov, Dominik Ludewig Michels, К.Г. Батраков МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА СПЕКТРЫ НАНОГРАФЕНА МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	275
С. С. Ануфрик, А. П. Володенков, К. Ф. Зноско МАЛОГАБАРИТНЫЙ ЭКСИМЕРНЫЙ ЛАЗЕР	277
В. В. Гавриловец, В. В. Тихомиров КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СПИРАЛЬНОГО МАГНИТОКУМУЛЯТИВНОГО ГЕНЕРАТОРА ПО КОНТУРАМ ТОКА	279
Э.И. Зенькевич, А.П. Ступак, К. фон Борцисковски ЭКСИТОН-ФОНОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ПЕРЕСТРОЙКА СТАБИЛИЗИРУЮЩЕГО СЛОЯ ЛИГАНДА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ CdSe/ZnS	281
К. Ф. Зноско, В. В. Тарковский, А. А. Казьмин ПОГЛОЩЕНИЕ НАНОСУСПЕНЗИЙ ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПРОВОДНИКОВ В ВОДЕ	283
С.В. Васильев, И.К. Губаревич, А.Ю. Иванов, А.Л. Ситкевич ФОРМИРОВАНИЕ СВЕТОДЕТОНАЦИОННОГО КОМПЛЕКСА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА, НАХОДЯЩЕГОСЯ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ	285
Е.П.Пантелеева, К.Г.Комяк ПРОСТРАНСТВЕННО СТРУКТУРИРОВАННЫЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СВЕТОВЫХ ПОЛЕЙ	287
Ю. А. Кальвинковская, Т.А. Павич, В. А. Лапина РАЗРАБОТКА ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ ТЕСТ- СИСТЕМЫ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ГАЛОГЕНОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ	289

В. А. Лапина, Ю. А. Кальвинковская, Т.А. Павич, С.Б. Бушук ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МЕЗО- ТЕТРА(4-КАРБОКСИФЕНИЛ)ПОРФИРИНА В СОСТАВЕ КОВАЛЕНТНОГО КОМПЛЕКСА С НАНОАЛМАЗНЫМИ ЧАСТИЦАМИ	291
В.В. Малютина-Бронская, А.В. Семченко, А.В. Рогачев, М.А. Ярмоленко, В.В. Сидский, К.Д. Данильченко, С.А. Сорока ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ К УЛЬТРАФИОЛЕТОВОМУ ИЗЛУЧЕНИЮ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫЕ СЛОИ ZnOX:MgO НА КРЕМНИИ	293
А. С. Федотов, П. В. Доброгост, И. А. Зур, Я. Д. Титовец, В. Э. Мрочко, А.К. Страусов МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	295
А.П. Низовцев, А.Л. Пушкарчук, С.А. Кутень, D. Lyakhov, D.L. Michels, Н.И. Каргин, С.Я. Килин СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КЛАСТЕРАХ АЛМАЗА С НЕЙТРАЛЬНЫМИ ЦЕНТРАМИ ОКРАСКИ SiV, GeV, SnV и PbV: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ	297
В. А. Орлович, А. И. Водчиц, И. А. Ходасевич, А. Ю. Пятышев, А.В. Скрабатун, А. А. Русак ПИКОСЕКУНДНЫЙ ВКР-ЛАЗЕР НА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СМЕСИ LiOH И Sr(NO3)2	299
В.А.Пушкарчук, А.П. Низовцев, Д.С. Могилевцев, С.Я.Килин, А.Л. Пушкарчук, С.А. Кутень, А.А. Хрущинский, Dmitry Lyakhov, Dominik Ludewig Michels СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ НА ОСНОВЕ ДВУХ SiV ЦЕНТРОВ В НАНОАЛМАЗЕ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	301
А. А. Романенко, С. А. Бацанов, В. В. Крюков, А. К. Гутаковский ФОРМИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ НАНОЧАСТИЦ «МАГНЕТИТ-ЗОЛОТО» И ИХ ГКР-АКТИВНОСТЬ	303
 В. Ю. Плавский, А. Н. Собчук, А. И. Третьякова, А. В. Микулич, О.Н. Дудинова, Л. Г. Плавская, Р. К. Нагорный, А. Д. Свечко, Т. С. Ананич, Н. Д. Прокопенко, С. В. Якимчук, И. А. Леусенко, Н. В. Дудчик, О.А. Емельянова ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СЕНСИБИЛИЗИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА НИТРОФУРАНОВЫХ СЕНСИБИЛИЗАТОРОВ И ИХ ФОТОХИМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ 	305

А.Л.Пушкарчук, Т. В. Безъязычная, В.И. Поткин, Е. А. Дикусар, А.Г., Солдатов, С.Я. Килин, А.П. Низовцев, С.А. Кутень, Д. В. Ермак, Т.С. Пивоварчик, В.А.Пушкарчук, Dominik Ludewig Michels, Dmitry 307 Lyakhov, B.A. Кульчицкий МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ HF-3c КОНЪЮГАТА КАРБОПЛАТИН -ФУЛЛЕРЕНОЛ КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ В. Ю. Плавский, А. Н. Собчук, А. И. Третьякова, А. В. Микулич, О.Н. Дудинова, Л. Г. Плавская, Р. К. Нагорный, Т. С. Ананич, А. Д. Свечко, С. В. Якимчук, И. А. Леусенко, Н. Д. Прокопенко, А.И.Будевич, Д.М. Богданович, С. А. Сапсалев, Е. В. Петрушко 309 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ СТАЦИОНАРНОЙ И КИНЕТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРИИ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЭНДОГЕННЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ В КЛЕТКАХ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ Н. В. Белько, Т. А. Кулагова, А. В. Богданова, М. В. Пархоц, С.В. Лепешкевич, В. Н. Чижевский, Д. С. Могилевцев ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С 311 ЭРИТРОПИТАМИ В ТЕМНОВЫХ УСЛОВИЯХ И ПРИ ФОТОВОЗДЕЙСТВИИ А.А. Иванов, А.К. Королик, О.В. Козлякова, М.С. Тарасик ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА СВЯЗЫВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ОСНОВНЫХ 313 ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ ПЛАЗМЫ КРОВИ БЕРЕМЕННЫХ ЖЕНЩИН С РЕЗУС-ИММУНИЗАЦИЕЙ В. М. Катаркевич, Т. Ш. Эфендиев КИНЕТИКА ЗАПИСИ И РЕЛАКСАЦИИ ОБЪЕМНЫХ ГОЛОГРАММ В 315 ТОЛСТОСЛОЙНОМ ГЕЛЕОБРАЗНОМ ЖЕЛАТИНЕ, ДОПИРОВАННОМ ЭОЗИНОМ Н М. В. Пархоц, С. В. Лепешкевич, А. В. Петкевич, А. А. Рогачев, С.Н. Терехов. Б. М. Джагаров ЭФФЕКТИВНОСТЬ ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРОВАННОГО ОБРАЗОВАНИЯ 317 СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА рН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫМ СЕНСИБИЛИЗАТОРОМ НА ОСНОВЕ ПИРИДИЛПОРФИРИНА И НАНОЧАСТИЦ ГИДРОКСИАПАТИТА Т.С. Пивоварчик, С.А. Кутень, А. Л. Пушкарчук, Д.Б. Мигас, Dominik Ludewig Michels, Dmitry Lyakhov **DFT МОДЛИРОВАНИЕ КОНЪЮГАТА ГРАФЕНОВАЯ КВАНТОВАЯ** 319 ТОЧКА-МОЛЕКУЛА ДОКСОРУБИЦИНА КАК ПЕРСПЕКТИВНОЙ

СТРУКТУРЫ ДЛЯ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ТЕРАПИИ

К. Ф. Зноско, С. Д. Лещик, И. Г. Сергиенко РАЗМЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И МОРФОЛОГИЯ НАНОЧАСТИЦ ЭЛЕКТРОПЛАЗМЕННОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ	321
Ю.В. Шафаревич, А.С. Федотов, И.А. Зур МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	323
О. Г. Романов, Г. Г. Крылов, И. А. Тимощенко, А. Н. Козловский, С.А. Липский УЧЕБНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С НЕЛИНЕЙНЫМИ СРЕДАМИ И НАНОМАТЕРИАЛАМИ	325
М. А. Медведева МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОБОДНОЙ КОНВЕКЦИИ В СЛОЕ НАНОЖИДКОСТИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ	327

Организаторы выражают благодарность за спонсорскую помощь: Национальной академии наук Беларуси, Белорусскому физическому обществу, Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований, ЗАО «Солар ЛС»





