

7 - Оптика и спектроскопия

Арсентьев Сергей Сергеевич, ст. лаборант-исследователь
Нижний Новгород, Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН, отделение нелинейной динамики и оптики

Исследование магнитохирального эффекта в кристаллах лангасита и катангасита в двухпроходной оптической схеме

Новиков Михаил Афанасьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: underslim1@gmail.com стр. 138

Арсентьев Сергей Сергеевич, ст. лаборант-исследователь
Нижний Новгород, Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН, отделение нелинейной динамики и оптики

Исследование фотоиндуцированных эффектов в кристаллах фототермическим интерференционным методом

Новиков Михаил Афанасьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: underslim1@gmail.com стр. 139

Бабинович Анастасия Евгеньевна, 3 курс
Томск, Национальный исследовательский Томский государственный университет, физико-технический факультет, Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН

Индикатрисы рассеяния света для ледяных атмосферных агрегатов, полученные в рамках приближения физической и геометрической оптики

Коношонкин Александр Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: anastasiababinovich@gmail.com стр. 140

Бакина Ксения Андреевна, аспирант, инженер-исследователь
Сыктывкар, Коми научный центр УрО РАН, физико-математический институт

Методика определения распределения сил осцилляторов на примере оксида скандия Sc_2O_3

e-mail: tylxen@gmail.com стр. 141

Бетлени Павел Игоревич, аспирант 1 года обучения
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический факультет

Оптическая система для выполнения точных двухкубитовых вентилей с нейтральными атомами

Бетеров Илья Игоревич, к.ф.-м.н.
e-mail: pavl90bar@gmail.com стр. 142

Боронин Виктор Александрович, 2 курс
Челябинск, Институт электрофизики УрО РАН

Зависимость энергии Урбаха оптических керамик $0.5at\%Er:YAG$ и $3at\%Tm:YAG$ от температуры

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: boronin1996vitek@mail.ru стр. 143

Брущенко Альберт Игоревич, магистрант 2 года обучения
Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики

Алгоритм “unfolding-synthesis” в некорректных задачах обработки мёссбауэровских спектров

Дулов Евгений Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: greatvalorlight@mail.ru стр. 145

Войлошников Алексей Данилович, 3 курс
Томск, Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий

Симметрия потенциальных функций молекул $XYZZ$ ($C3v$) и $XY2Z2$ ($C2v$)

Уленев Олег Николаевич, к.ф.-м.н.
e-mail: adv10@tpu.ru стр. 145

Гаппель Екатерина Витальевна, 4 курс
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, факультет физики
Исследование абсолютных интенсивностей спектра поглощения сероводорода H₂MS (M = 32, 33, 34) в районе первой декады
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: katya_gappel@mail.ru стр. 147

Ивченко Илья Дмитриевич, м.н.с.
Челябинск, Институт электрофизики УрО РАН, лаборатория нелинейной оптики
Определение фокусного расстояния сфокусированного пучка с дислокацией волнового фронта по дифракции на прямоугольном экране
Бибикова Эвелина Анатольевна, к.ф.-м.н.
e-mail: ivchenkoid@susu.ru стр. 148

Кузьминов Данила Андреевич, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Случайные резонансы в многоатомных молекулах: H₂C=CD₂, состояния (v₂=1, A₁)/(v₇=2, A₁)/(v₈=2, A₁)
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
e-mail: dak97@tpu.ru стр. 149

Макаров Павел Андреевич, с.н.с.
Сыктывкар, Коми научный центр УрО РАН, физико-математический институт
Программные пакеты для расчёта и анализа XAFS-спектров
e-mail: makarovpa@ipm.komisc.ru стр. 151

Назаров Равшанжон Холикбердиевич, аспирант 3 года обучения
Санкт-Петербург, Национальный исследовательский университет ИТМО, физический факультет
Связанные состояния в континууме в цепочке из керамических дисков со структурным беспорядком
Кондратенко Зарина Фаильевна, к.ф.-м.н.
e-mail: r.nazarov@metalab.ifmo.ru стр. 152

Петрова Ольга Викторовна, н.с.
Сыктывкар, Коми научный центр УрО РАН, физико-математический институт
Синхротронное излучение: ультрамягкая спектроскопия поглощения биологических объектов и композитов на их основе
e-mail: teiou@mail.ru стр. 154

Рутковский Валерий Олегович, 2 курс
Сыктывкар, Сыктывкарский государственный университет имени Питирима Сорокина, Коми научный центр УрО РАН, ИТНиИТ, физико-математический институт
Определение оптических констант фуллеренов в области аномальной дисперсии методом Крамерса-Кронига
Сивков Виктор Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: valeriy.rutkovskiy@mail.ru стр. 155

Сидько Сергей Сергеевич, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Новая модель эффективного дипольного момента молекул типа аксиальной симметрии C_{3v}: приложения к исследованию абсолютных интенсивностей в полосе ν₆ молекулы CH₃³⁵Cl
Уленев Олег Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: sss60@tpu.ru стр. 156

Скандаков Роман Николаевич, инженер-исследователь
Сыктывкар, Коми научный центр УрО РАН, физико-математический факультет
Комплексные исследования нанопористого кремния, полученного путём травления с добавлением 5 % раствора йода
Сивков Виктор Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: scanick@yandex.ru стр. 157

Хамуд Гайсаа Аббас, аспирант 1 года обучения
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический
Спектральная зависимость фототока в МДП-структурах на основе нестехиометрических германосиликатных плёнок
Володин Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н.
e-mail: k.gaisaa@gsnu.ru стр. 157

Худякова Юлия Вадимовна, 4 курс
Томск, Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
Исследование субмиллиметрового спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2\text{Z}^5\text{Cl}_2$
Громова Ольга Васильевна, к.ф.-м.н.
e-mail: yvh7@tpu.ru стр. 159

Чэн Юйчжу, 1 курс
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический факультет
Фототок в PIN структурах на основе аморфного гидрогенизированного кремния с включениями нанослоёв германия
Володин Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н.
e-mail: chengyuzhu9@gmail.com стр. 160

Яковлев Лев Алексеевич, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический факультет
Исследование структуры основанной на переходе металл-диэлектрик в диоксиде ванадия
Иванова Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.
e-mail: liakovlev@sfedu.ru стр. 162

Янина Ирина Юрьевна, доцент
Саратов, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Институт физики
Зависимость дозы введения апконверсионных наночастиц с изменениями оптических параметров опухоли
e-mail: irina-yanina@yandex.ru стр. 163

Исследование магнитохирального эффекта в кристаллах лангасита и катангасита в двухпроводной оптической схеме

Арсентьев Сергей Сергеевич

Смирнова Евгения Александровна, Хышов Андрей Александрович, Новиков Михаил Афанасьевич

Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН

Новиков Михаил Афанасьевич, к.ф.-м.н.

underslim1@gmail.com

Особый интерес в области оптических явлений, обусловленных проявлением пространственной дисперсии, представляет их исследование при наличии внешних воздействий, таких как, например, магнитное поле [1].

В присутствии магнитного поля в нецентросимметричных средах возникает магнитохиральный эффект, который, в частности, проявляется в невзаимном магнитооптическом линейном двупреломлении [2]. В настоящей работе исследуется явление магнитохирального эффекта в кристаллах лангасита и катангасита при приложении к ним поперечного переменного магнитного поля.

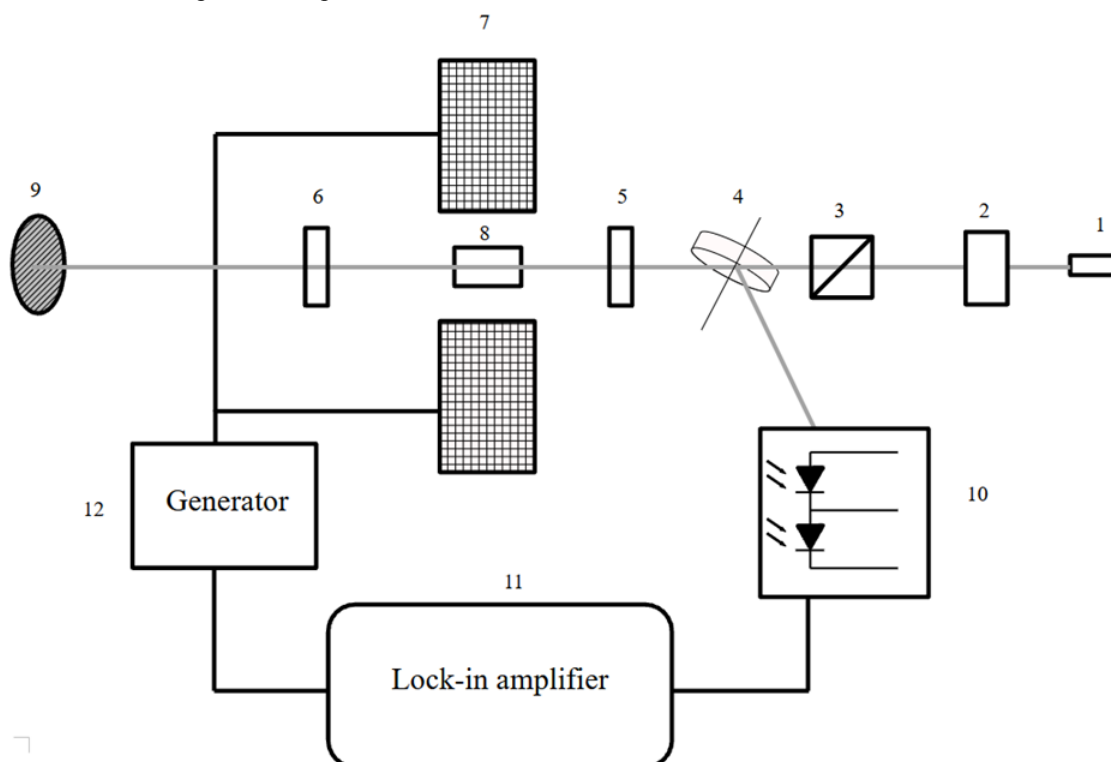


рис.1. Схема установки для исследования магнитохирального эффекта: 1 – лазер 532 нм, 2 – оптический изолятор, 3- призма Глана, 4 – изотропный делитель, 5, 6 – фазовые пластинки $\lambda/4$, 7 – обкладки магнита, 8 – кристалл, 9 – зеркало, 10 – фотодиодный детектор, 11 – синхронный детектор, 12 – генератор синуса

Для измерения предложена схема на основе двухпроводной оптической системы. Достигнута чувствительность $5 \cdot 10^{-8}$ рад. Показано, что использование изотропного делителя, близкого к углу Брюстера, позволяет увеличить отношение переменной составляющей измеряемого сигнала к постоянной составляющей в 100 раз. Измерена величина магнитохирального эффекта в кристалле лангасита $\Delta n / H^{ext} = (2.4 \pm 0.7) \cdot 10^{-14} \text{ Э}^{-1}$ и с чувствительностью $5 \cdot 10^{-8}$ рад обнаружен сигнал в кристалле катангасита.

Список публикаций:

[1] Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учётом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1965.

[2] Геликонов Г. В., Новиков М. А. // Оптика и спектроскопия. 1993. Т. 74, № 6. С. 1123.

Исследование фотоиндуцированных эффектов в кристаллах фототермическим интерференционным методом

Арсентьев Сергей Сергеевич

Смирнова Евгения Александровна, Хышов Андрей Александрович, Новиков Михаил Афанасьевич

Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН

Новиков Михаил Афанасьевич, к.ф.-м.н.

underslim1@gmail.com

В данной работе предложен оригинальный метод измерения объемных фотоиндуцированных эффектов в кристаллах на основе интерферометра Жамена-Лебедева. Интерферометр представляет собой прибор, оптическая схема которого представлена на рисунке 1.

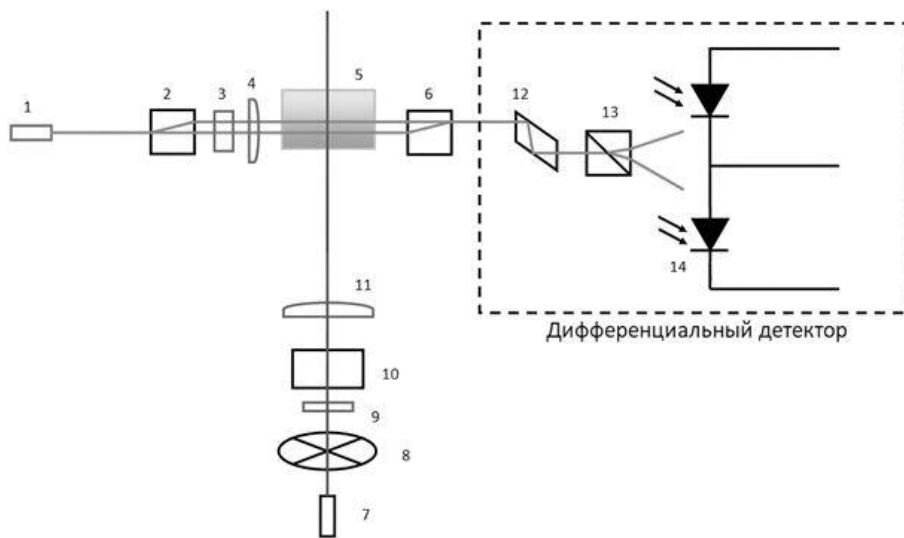


рис.1. Схема интерферометра для исследования объемного поглощения: 1 – зондирующий лазер, 3, 6 – расщепители, 13 – призма Волластона, 4 – ротатор на 90° , 2 и 11 – линзы, 5 – исследуемый кристалл, 7 – лазер накачки, 8 – механический прерыватель, 9 – пластинка $\lambda/4$, 10 – поляризатор, 12 – ромб Френеля, 14 – фотодиоды

Метод обладает высокой чувствительностью и возможностью прецизионного сканирования всего объема кристалла за счет малых диаметров зондирующего пучка и пучка накачки. Выявлена возможность применения данного метода к измерению многих линейных и нелинейных фотоиндуцированных эффектов. Показана возможность измерения коэффициента объемного поглощения среды.

Проведены измерения на кристаллических образцах KDP. Результаты показаны на рисунке 2.

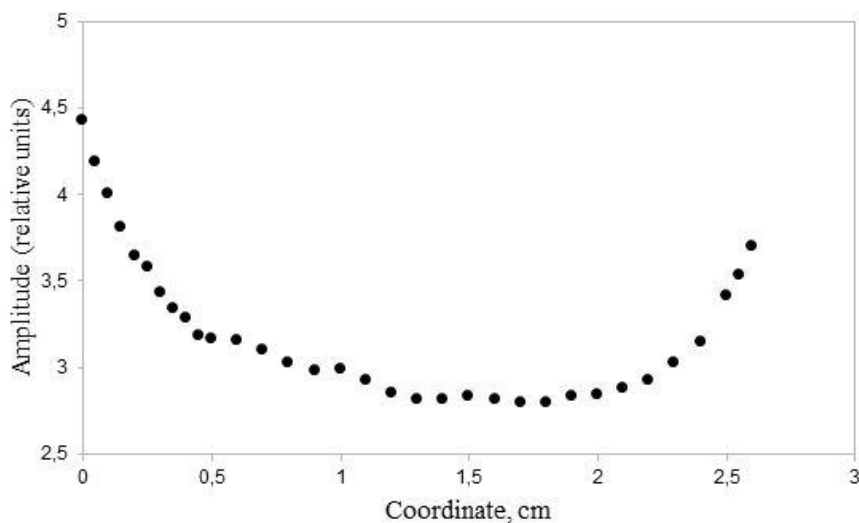


рис.2. Экспериментальная зависимость амплитуды сигнала от положения пучков в кристалле (X-скан)

Индикатрисы рассеяния света для ледяных атмосферных агрегатов, полученные в рамках приближения физической и геометрической оптик

Бабинович Анастасия Евгеньевна^{1,2}

Шишко Виктор Андреевич^{1,2}, Тимофеев Дмитрий Николаевич²

Национальный исследовательский Томский государственный университет¹,

Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН²

Коношонкин Александр Владимирович^{1,2}, д.ф.-м.н.

anastasiababinovich@gmail.com

Перистые (кристаллические) облака, располагающиеся преимущественно в умеренных широтах и в полярных регионах Земли, на высотах 6-12 км, являются существенным фактором неопределенности в исследовании климата планеты. Размеры ледяных частиц, из которых состоят кристаллические облака, варьируются от 10 до 1000 мкм, а геометрическая форма в своей основе имеет вид гексагональной призмы. В отличие от сферических частиц жидко-капельных облаков, изучать процесс рассеяния света на кристаллических частицах достаточно сложно в силу разнообразия форм и фактора пространственной ориентации. Агрегаты кристаллических частиц, которые составляют существенную фракцию частиц в кристаллических облаках, по-прежнему остаются малоизученными из-за того, что принципиально отличаются от единичных частиц. Частицы, из которых они состоят, могут отличаться по количеству, размеру, форме, степени разреженности и взаимному расположению.

Под агрегатом понимается частица, состоящая из нескольких частиц, касающихся друг друга в одной или множестве точек. Частицы считаются неподвижными относительно друг друга, и, когда агрегат вращается, все частицы вращаются одновременно. Было получено подтверждение гипотезы о том, что агрегаты кристаллов рассеивают свет аналогично одиночным хаотически ориентированным кристаллам, из которых они состоят. Что в свою очередь позволило значительно продвинуться в области исследования оптических свойств агрегатов. Данная работа посвящена исследованию оптических характеристик агрегатов атмосферных ледяных частиц и их отличий от характеристик одиночных частиц.

Типичной формой агрегатов, встречающихся в кристаллических облаках, являются «bullet-rosette» (рис.1). Метод физической оптики ограниченно применим к таким типам частиц, в силу того, что вычислительная сложность метода сильно возрастает с количеством граней и размером частиц. Поэтому, в первом приближении, агрегаты частиц можно рассчитать в рамках приближения геометрической оптики.

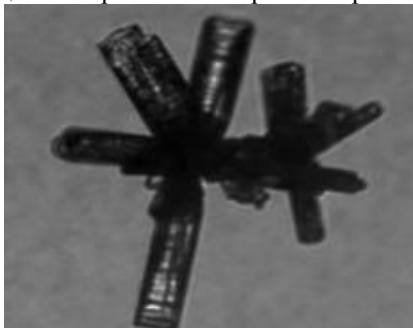


рис.1 Снимок агрегата типа «bullet-rosette»

Метод физической оптики основан на алгоритме трассировки пучков, который похож на алгоритм трассировки лучей, но работает с плоскопараллельными оптическими пучками. В этом алгоритме частица, рассеивающая свет, состоит из граней, состоящих из вершин с трехмерными координатами. Алгоритм разбивает свет, падающий на грани, на пучки. Эти пучки распространяются в частице и могут быть многократно разделены на преломленные и отраженные пучки, прежде чем они покинут частицу и рассеются. Метод физической оптики рассчитывает рассеянное поле в ближней зоне в рамках приближения геометрической оптики, а в дальней зоне – в рамках приближения физической оптики. Однако расчет дифракции для каждого рассеянного луча – очень затратная операция, особенно для случая произвольно ориентированных частиц в облаке. Больше всего время расчета в методе физической оптики возрастает с увеличением количества граней в частице. Поэтому в первую очередь матрица рассеяния света агрегатов рассчитывается в приближении геометрической оптики.

В рамках геометрической оптики были рассчитаны матрицы рассеяния света для агрегатов типа «bullet-rosette», а также агрегатов, в которых в качестве базовых частиц были использованы гексагональный столбик и пластинка (рис. 2). Количество частиц варьировалось от 1 до 9 (от 1 до 6 для «bullet-rosette»).



рис.2 Геометрические модели агрегата состоящего из столбиков и пластинок (расположенных как компактно, так и некомпактно), и агрегата типа «bullet-rossette».

Использовались следующие размеры базовых частиц: высота 100 мкм, диаметр основания 70 мкм (для столбика); высота 16 мкм, диаметр основания 100 мкм (для пластинки); высота 100 мкм, диаметр 42 мкм; угол пика – 20 градусов (для bullet). Рассчитывалась полная матрица рассеяния в рамках однократного рассеяния, для случая хаотической пространственной ориентации частиц (около 5 млн. ориентаций), с показателем преломления 1,3116. Первый элемент матрицы (M_{11}) соответствует индикатрисе рассеяния света, остальные элементы матрицы описывают поляризационные характеристики света.

Результаты численного исследования подтвердили гипотезу, о том, что агрегат частиц рассеивает свет подобно входящему в его состав отдельному кристаллу для целого ряда форм агрегатов. Было установлено, что отношение M_{11}/S слабо меняется в зависимости от числа частиц в агрегате N , за исключением случая компактных агрегатов пластинок. Здесь S – геометрическое сечение рассеяния агрегата.

Таким образом, получен ценный результат, позволяющий вместо ресурсоемкого расчета всего многообразия атмосферных агрегатов, получить решение на основе решения для входящих в его состав одиночных частиц и геометрического сечения рассеяния, которые очень легко поддаются расчету по формуле (1).

$$M_{11}^{agr} = M_{11}^{sing} \cdot S, \quad (1)$$

где M_{11}^{agr} и M_{11}^{sing} – индикатрисы рассеяния света агрегата и отдельной частицы, соответственно.

Список публикаций:

- [1] Характеристики обратного рассеяния света для типичных моделей атмосферных агрегатов в рамках приближения физической и геометрической оптики/В.А. Шишко, А.Е. Бабинович, Д.Н. Тимофеев, А.В. Коношонкин, Н.В. Кустова// Материалы 21-й международной конференции "Современные проблемы дистанционного зондирования земли из космоса" - Москва, 2023. - С. 61.
- [2] Коношонкин А. В., Кустова Н. В., Шишко В. А., Тимофеев Д. Н., Ткачев И. В., Бакуте Е., Бабинович А. Е., Zhu X., Wang Zhengzhi. Характеристики обратного рассеяния света на полых ледяных гексагональных столбиках для построения оптической модели перистых облаков. // Оптика атмосферы и океана. 2023. Т. 36. № 12. С. 1013–1019.
- [3] Сравнение характеристик рассеяния света на хаотически и квазигоризонтально ориентированных атмосферных ледяных кристаллах/ Н.В. Кан, Д.Н. Тимофеев, А.В. Коношонкин, А.Е. Бабинович// Юбилейная XXX конференция Аэрозоли Сибири. - Томск, 2023 - с. 7.

Методика определения распределения сил осцилляторов на примере оксида скандия Sc_2O_3

Бакина Ксения Андреевна

*Сивков Виктор Николаевич, Некипелов Сергей Вячеславович, Петрова Ольга Викторовна,
Скандаков Роман Николаевич*

*Федеральный исследовательский центр «Коми научный центр» УрО РАН
tylxen@gmail.com*

В современных исследованиях наноструктур, неорганических материалов и биологических объектов широко используются методы ультрамягкой рентгеновской абсорбционной спектроскопии, которые включают в себя анализ спектральных зависимостей сечений поглощения в области ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS) и связанных с ними сил осцилляторов. Силы осцилляторов рентгеновских переходов представляют собой фундаментальные характеристики электронной структуры вещества, которые играют важную роль при описании формирования резонансной структуры рентгеновских спектров поглощения.

В данной работе рассматриваются проблемы, возникающие при выполнении абсолютных измерений спектральных зависимостей сечений поглощения и определении распределений сил осцилляторов в области NEXAFS на примере оксида скандия Sc_2O_3 . Исследования рентгеновских спектров поглощения оксида скандия Sc_2O_3 проводились на канале НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ-Курчатов, г. Москва, Россия). Для измерения сечений поглощения в области NEXAFS использовался метод квантового

выхода рентгеновского фотоэффекта, который был осуществлён путём регистрации полного электронного выхода (total electron yield, TEY) с поверхности исследуемого образца. Для подавления уровня длинноволнового немонахроматического рассеянного фона и излучения кратных порядков дифракции в диапазоне энергий квантов от 450 до 900 эВ использовался титановый фильтр (Ti-фильтр), который был установлен на металлической сетке.

С применением методики измерения сечений поглощения методом TEY с учётом аппаратных искажений и немонахроматического фона, описанной подробно в работе [1], были получены спектральные зависимости сечения поглощения $\sigma(E)$ в области 2р-края поглощения оксида скандия Sc_2O_3 , что позволило определить распределение сил осцилляторов. Для приведения зависимостей $\sigma(E)$ к абсолютным единицам использовались данные сечений поглощения из таблиц Хенке.

Список публикаций:

[1] Sivkov D., Petrova O., Mingaleva A., Ob'edkov A., Kaverin B., Gusev S., Vilkov I., Isaenko S., Bogachuk D., Skandakov R., Sivkov V., Nekipelov S. // *Nanomaterials*. 2020. V. 10. № 374.

Оптическая система для выполнения точных двухкубитовых вентиляей с нейтральными атомами

Бетлени Павел Игоревич

Новосибирский государственный университет

Бетеров Илья Игоревич, к.ф.-м.н.

pavl90bar@gmail.com

Реализация квантового компьютера – одна из интереснейших задач современной физики. В последнее время наблюдается значительный прогресс в реализации квантовых вычислений с использованием в качестве кубитов переходов Джозефсона в сверхпроводниках, фотонов и ультрахолодных ионов.

Ультрахолодные нейтральные атомы – физическая платформа для реализации квантовых вычислений, преимущество которой заключается в практически неограниченном масштабировании благодаря идентичности атомов, захваченных в массивы оптических дипольных ловушек [1-2]. Эксперименты по захвату атомов в оптические дипольные ловушки проводятся в условиях сверхвысокого вакуума (давление не более 10^{-10} мм.рт.ст.), для этого используются специальные вакуумные камеры или ячейки.

Основной проблемой квантовых вычислений с нейтральными атомами является реализация двухкубитовых вентиляей [1]. Для этого происходит кратковременное возбуждение атомов в высоковозбужденные (ридберговские) состояния, поскольку дальнедействующие диполь-дипольные взаимодействия ридберговских атомов позволяют получить их перепутанные состояния. Для возбуждения ридберговских атомов используется двух-фотонная схема возбуждения с комбинацией излучения с длинами волн 480 нм и 780 нм.

Для захвата и возбуждения атомов применяют фокусирующую оптику, как правило, используют много линзовые объективы, которые размещают снаружи вакуумной камеры, или асферические линзы, размещаемые внутри вакуумной камеры [3-4]. Однако конструкции с объективами снаружи вакуумной камеры вносят ограничения на максимальный размер вакуумной камеры и требуют учитывать при разработке объектива толщину стекла окна вакуумной камеры, а конструкции с асферическими линзами усложняют оптический доступ к облаку холодных атомов и могут создавать паразитные электрические поля.

В работе была разработана схема объектива с числовой апертурой 0,39 и рабочим отрезком 19 мм для размещения внутри вакуумной камеры. Схема объектива приведена на рис. 1. Объектив состоит из 4 линз диаметром 25,4 мм, обозначенных как А, В, С, D, выбранных из каталога Thorlabs [5], а также изготовленной из стекла BK-7 менисковой линзы Е с радиусами кривизны оптических поверхностей 19 мм и 29,9 мм и толщиной 4 мм. За счет уменьшения диаметра менисковой линзы до 21 мм обеспечивается лучший оптический доступ к области лазерного возбуждения. Объектив оптимизирован для излучения с длиной волны 850 нм, с помощью которого формируются оптические дипольные ловушки.

Оптическая схема объектива может быть адаптирована для различных длин волн, в том числе и для длины волны 480 нм, которая используется для ридберговского возбуждения. Подстройка осуществляется изменением расстояний между линзами А-В и В-С. Объектив, оптимизированный на длину волны 850 нм, используется также для фокусировки второй компоненты ридберговского возбуждения с длиной волны 780 нм.

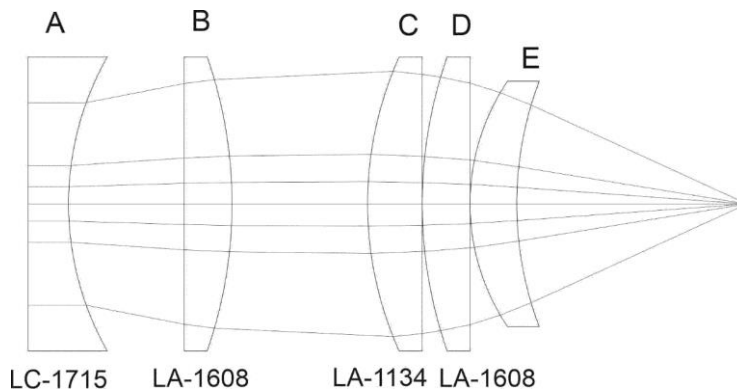


рис. 1. Оптическая схема объектива для установки внутри вакуумной камеры. Названия линз приведены в соответствии с каталогом компании Thorlabs.

Таким образом, была предложена схема малогабаритного объектива с числовой апертурой 0,39 для установки внутри вакуумной камеры. Такое размещение позволяет использовать его с крупногабаритными вакуумными камерами. За счет рабочего отрезка 19 мм по сравнению с асферическими линзами обеспечивается лучший оптический доступ для охлаждающих лазерных пучков.

Список публикаций:

- [1] Saffman, M. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2003. Т. 49. № 20. С. 202001.
 [2] Рябцев И. И., Бетеров И. И., Третьяков Д. Б., Энтин В. М., Якишина Е. А. // *УФН.* 2016. Т. 186. № 2. С. 206–219.
 [3] H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2019. Т. 123. № 17. С. 170503.
 [4] C. J. Picken, R. Legaie, and J. D. Pritchard // *Appl. Phys. Lett.* 2017. Т. 111. № 16. С. 164102.
 [5] Каталог Thorlabs. URL: <https://www.thorlabs.com>.

Зависимость энергии Урбаха оптических керамик 0.5at%Er:YAG и 3at%Tm:YAG от температуры

Боронин Виктор Александрович^{1,2}

Подгорнов Федор Валерьевич², Кундикова Наталия Дмитриевна^{1,2}

Иванов Максим Геннадьевич¹

Институт электрофизики УрО РАН¹

Южно-Уральский государственный университет²

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.

boronin1996vitek@mail.ru

Алюмоиттриевый гранат (YAG) – кристаллический материал, в состав которого входит оксид иттрия и оксид алюминия. Керамики на основе алюмоиттриевого граната являются диэлектриками (ширина запрещенной зоны 6,5 эВ), обладают высокой механической прочностью, термической и химической стойкостью, а в случае выполнения ряда условий [1] и высокой прозрачностью. В случае допирования редкоземельными ионами керамики YAG демонстрируют люминесценцию в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазонах [2] и могут быть использованы в лазерах, светодиодах и устройствах отображения информации. Для оценки возможностей использования YAG, допированного редкоземельными элементами, необходимо знать параметры запрещенной зоны, такие как энергия запрещенной зоны и энергия Урбаха, характеризующая энергетический беспорядок на краях зон полупроводника, а также энергия электрон-фононного взаимодействия.

Целью данного исследования является идентификация зависимости энергии Урбаха от температуры для оптических керамик 0.5at%Er: YAG и 3at%Tm: YAG.

Спектральные характеристики исследовались с помощью двухлучевого спектрофотометра Agilent Cary 300 в широком температурном диапазоне (-120⁰С + 50⁰С).

В исследуемых керамиках в соответствии с теорией Таука ширина запрещенной зоны определяется следующим выражением:

$$\alpha = \frac{\beta}{h\nu} (h\nu - E_g)^{1/2} \quad (1)$$

где β – константа, называемая параметром затухания, независящая от энергии, E_g – ширина запрещенной зоны, $h\nu$ – энергия фотона. Используя данную формулу были получены графики $\alpha^2 \sim h\nu$, из которых определялась ширина запрещенной зоны E_g (рис. 1) и её зависимость от температуры для керамики 0.5at%Er: YAG и 3at%Tm: YAG.

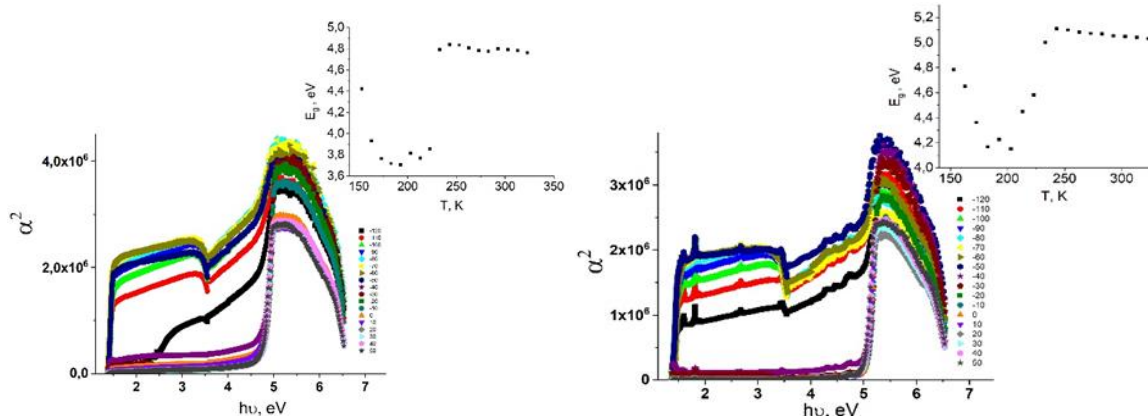


рис 1. Зависимость квадрата коэффициента пропускания от энергии фотона и ширины запрещенной зоны от температуры для образцов 0.5at%Er: YAG (слева) и 3at%Tm: YAG (справа)

При переходе электронов из верхней части валентной зоны в нижнюю часть зоны проводимости возникает беспорядок, электроны сталкиваются с плотностью своих состояний $\rho(h\nu)$, которые приводят к попаданию в энергетическую щель. Данная область $\rho(h\nu)$, находящаяся в запрещенной зоне, называется хвостом Урбаха, а ширина этой зоны называется энергией Урбаха E_U [2]. Энергию Урбаха можно найти из спектра оптического поглощения материала в соответствии с формулой:

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\nu}{E_U}\right), \quad (2)$$

где α_0 константа, E_U – энергия Урбаха.

Экспериментально энергия E_U находилась из зависимости $\ln(\alpha) \sim h\nu$. Температурная зависимость энергии Урбаха образцов 0.5at%Er: YAG и 3at%Tm: YAG показана на рисунке 2.

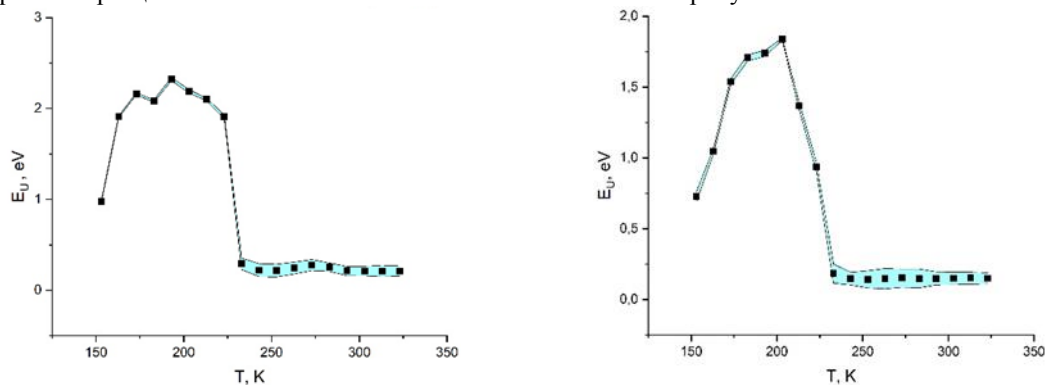


рис 2. Зависимость энергии Урбаха от температуры для образцов 0.5at%Er: YAG (слева) и 3at%Tm: YAG (справа).

Из полученных зависимостей следует, что в температурном диапазоне 150-230 К энергия Урбаха зависит от температуры, а следовательно, в данном материале имеется достаточно сильная энергия электрон-фононного взаимодействия, что может приводить к диссипации энергии, вызванной возбуждением колебаний решетки. В температурном диапазоне 230-320 К такой зависимости не наблюдается и поэтому энергией электрон-фононного взаимодействия можно пренебречь.

Список публикаций:

- [1] Qiang Liu et al. Solid-state reactive sintering of YAG transparent ceramics for optical applications // J. Alloy Compd.
- [2] Dhoble S. J. et al. (ed.). Spectroscopy of lanthanide doped oxide materials. – Woodhead Publishing, 2019.
- [3] Riungu G. G. et al. Optical band energy, Urbach energy and associated band tails of nano crystalline TiO2 films at different annealing rates // American Journal of Nanosciences. – 2021. – Т. 7. – №. 1. – С. 28-34.

Алгоритм “unfolding-synthesis” в некорректных задачах обработки мёссбауэровских спектров

Брущенко Альберт Игоревич

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Дулов Евгений Николаевич, к.ф.-м.н.

greatvalorlight@mail.ru

Аморфные металлические сплавы — сравнительно новый класс материалов, которые обладают неупорядоченной структурой и, в связи с этим, уникальными свойствами. Такие материалы представляют класс локально неоднородных систем и интерпретация мёссбауэровских спектров, по восстановленной функции плотности вероятности сверхтонких параметров, представляет собой некорректную задачу, которую решают методами, часто основанными на регуляризации Тихонова [1].

Один из вариантов метода Тихонова реализован Хёссе и Рубарчом в применении к мёссбауэровской спектроскопии. На данный момент есть усовершенствованные методы на основе метода Хёссе-Рубарча [2].

В 2016 был предложен метод “unfolding-synthesis”. Он используется для преобразования формы импульсов с детекторов ионизирующего излучения [3]. Отличительной чертой метода является преобразование сигналов с детекторов в короткие импульсы, за которым следует свёртка с желаемой формой импульса. Этот метод неявно содержит способ решения некорректно поставленной задачи, по результату схожий с методом регуляризации Тихонова.

В данной работе показано, что метод “unfolding-synthesis” имеет ряд преимуществ и может быть использован для восстановления функции плотности вероятности сверхтонкого магнитного поля аналогично методу Тихонова.

Список публикаций:

[1] Тихонов А. *Методы решения некорректных задач*. М., 1979. 283 с.

[2] Hesse J. *Model independent evaluation of overlapped Mossbauer spectra*. *J. Phys. E.*, 1974. P.526–532.

[3] Jordanov T. *Unfolding-synthesis technique for digital pulse processing.*, 2016. P. 63–71.

Симметрия потенциальных функций молекул XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v})

Войлошников Алексей Данилович

Томский политехнический университет

Уленков Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

adv10@tpu.ru

Проблема определения колебательной структуры многоатомных молекул является одной из наиболее актуальных проблем, поскольку такая информация является чрезвычайно востребованной для решения различных задач физики молекул и физической химии. Для разрешения отмеченной проблемы в физике молекул традиционно используются, как минимум, два типа колебательных координат. Это нормальные координаты, которые, как известно, являются массово-взвешенными, то есть различаются даже для различных изотопологов одной и той же молекулы (однако, они наиболее удобны при расчетах колебательных состояний молекулы). С другой стороны, традиционно используются так называемые «естественные» координаты (или же близко с ними связанные координаты симметрии), которые не зависят от масс атомов и являются универсальными для всех изотопологов молекулы. При этом, при решении реальных задач весьма важным является вопрос о корректной связи между всеми тремя типами координат.

В принципе координаты симметрии и естественные координаты легко могут быть определены для любой многоатомной молекулы. Однако, существует по меньшей мере один класс молекул, для которых определение координат симметрии и естественных координат является нетривиальной задачей. Это молекулы пространственной конфигурации XY_4 (T_d), XY_3Z (C_{3v}), XY_2Z_2 (C_{2v}) и молекулы подобного типа более низкой симметрии. Всех их объединяет так называемая проблема «redundancy», которая является следствием того факта, что число вводимых симметричных/естественных колебательных координат оказывается больше числа возможных независимых колебательных координат в молекуле. То есть естественные координаты/координаты симметрии оказываются зависимыми, а это в свою очередь проявляется в некорректности описания колебательной структуры молекул с использованием таких координат.

Данная проблема может быть решена путём установления связей между зависимыми координатами, и она была решена применительно к молекулам тетраэдрической симметрии XY_4 в работе [2]. В данном

исследовании проблема «redundancy» рассматривается применительно к молекулам более низкой симметрии – XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v}). Ключевым аспектом в установлении таких связей является использование так называемого условия «redundancy» [2]:

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos \alpha_{12} & \cos \alpha_{13} & \cos \alpha_{14} \\ \cos \alpha_{12} & 1 & \cos \alpha_{23} & \cos \alpha_{23} \\ \cos \alpha_{13} & \cos \alpha_{23} & 1 & \cos \alpha_{34} \\ \cos \alpha_{14} & \cos \alpha_{24} & \cos \alpha_{34} & 1 \end{bmatrix} = 0,$$

где α_{ij} – это углы между межатомными связями i и j . Результатом преобразования левой части условия является набор условий (уравнений) для молекул XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v}), зависящих от изменений угловых координат $\theta_{ij} = \alpha_{ij} - \alpha_{ij}^e$ (α_{ij}^e – значение угла между связями для равновесной конфигурации). Полученный набор разделен на степени величины θ_{ij} и в полной мере раскрывает связи между угловыми колебательными координатами в молекуле. Однако сам по себе этот набор не так полезен, как колебательная структура с его использованием.

Потому следующей задачей в работе становится построение потенциальной функции для молекул XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v}) в естественных колебательных координатах и координатах симметрии. Для этого был определен базис в обеих системах координат для молекул обоих типов симметрии. Далее на этом базисе разложена в ряд Тейлора часть гамильтониана молекулы, отвечающая за её потенциальную энергию – потенциальная функция. Для естественных колебательных координат группировка различных комбинаций проводилась на основании представлений о природе тех межатомных связей, с которыми они связаны. В случае координат симметрии в первую очередь был определён набор всевозможных полносимметричных комбинаций координат, поскольку лишь структуры симметрии A_1 возможны в гамильтониане реальной молекулы. Далее на этом наборе уже сконструирована потенциальная функция. Потенциальная функция молекулы в двух системах координат, связь между этими системами и условие «redundancy» позволяют согласовать количество параметров в потенциальной функции для обеих систем координат, что в конечном итоге даёт набор выражений, которые определяют связь параметров «симметричной» потенциальной функции и «естественной». Этот набор позволяет свободно работать с колебательной структурой молекулы.

Результатами работы являются 2 набора выражений связывающих «симметризованные» и «естественные» параметры» потенциальной функции молекул XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v}), соответственно. Наборы представлены в группах по степеням координат и оформлены в виде таблиц, где каждая строка является равенством f_{abc} и линейной комбинации F_{efg} . Здесь f_{abc} – «естественные» параметры потенциальной функции молекулы, а F_{efg} – «симметризованные» параметры для системы симметризованных координат.

Для общего представления о характере полученных результатов далее приведена небольшая часть из набора полученных соотношений для молекулы XY_3Z (C_{3v}):

Таблица 1 – связь симметричных и силовых параметров $V_{str-bend(R\ a)}^{2(3)}$

Естественные силовые параметры	Симметричные силовые параметры
$F_{RR'\alpha}$	$F_{223} + 4 F_{344} - 4 F_{445} - 2 F_{245} - 2 \frac{A_1}{A_2} F_{246} - 4 \frac{A_1}{A_2} F_{446}$
$F_{RR'\alpha'}$	$2F_{223} - 4 F_{344} - 8 F_{445} + 2 F_{245} + 2 \frac{A_1}{A_2} F_{246} - 8 \frac{A_1}{A_2} F_{446}$

В данной работе мы решили проблему «redundancy» для молекул XY_3Z (C_{3v}) и XY_2Z_2 (C_{2v}), получив тем самым набор соотношений, устанавливающий зависимости между избыточными естественными колебательными координатами. Определён базис в естественных колебательных и симметричных координатах, в этом базисе разложена в ряд Тейлора потенциальная функция для каждой молекулы, согласованы силовые параметры потенциальных функций обеих молекул вплоть до четвертых степеней колебательных координат.

Список публикаций:

[1] Макушкин Ю.С., Уленков О.Н., Чеглоков А.Е. // Симметрия и её применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии в 2ч.: монография. – Томск : ТГУ, 1990.

[2] Lauri Halonen // Internal coordinate Hamiltonian model for Fermi resonances and local modes in methane – Finland, University of Helsinki, 1996.

Исследование абсолютных интенсивностей спектра поглощения сероводорода H_2^MS ($M = 32, 33, 34$) в районе первой декады

Ганпель Екатерина Витальевна
Томский политехнический университет
Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.
Katya_gappel@mail.ru

Молекула H_2S представляет большой интерес для спектроскопических исследований, поскольку сероводород является одной из важных компонент Земной атмосферы. Он был обнаружен также в атмосферах других планет Солнечной системы и в межзвездном пространстве. Сера является ключевым элементом в химии некоторых планет-гигантов, поскольку предполагается, что газообразные соединения серы вступают в реакцию с NH_3 и конденсируются в виде кристаллов NH_4SH , которые образуют тропосферные облака этих планет [1-2]. Например, сероводород обнаружен в атмосферах Урана и Юпитера. Кроме того, молекула сероводорода, возможно, является индикатором биологической жизни [3-4].

Спектроскопические исследования молекулы H_2S , как и молекулы воды, проводятся активно уже много десятков лет. К настоящему времени, в литературе имеется много информации о поглощении сероводородом в микроволновом, инфракрасном и видимом диапазонах. Однако, имеется существенный недостаток в информации об абсолютных интенсивностях отдельных линий поглощения как в основной модификации сероводорода, так и в различных его изотопозамещенных разновидностях в высоковозбужденных колебательных состояниях.

Экспериментальные спектры поглощения молекулы были зарегистрированы в Техническом университете Брауншвейга в широком спектральном диапазоне $3400\text{-}10400\text{ см}^{-1}$ с использованием Фурье-спектрометра Bruker 125HR (прототип ZP2001 IFS120 HR) при комнатной температуре 294.15 К , оптической длине пути 182 м и 163 м , давлениях 5 мбар и 20 мбар . (см. рис. 1)

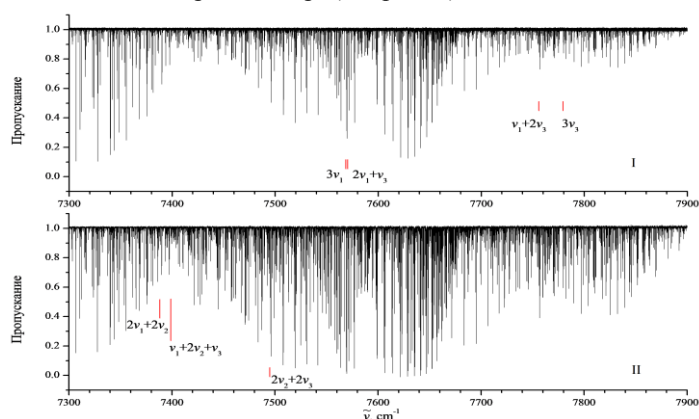


рис.1 Спектр молекулы H_2S

Молекула H_2S является молекулой типа ассиметричного волчка группа молекулярной симметрии которой изоморфна группе C_{2v} . Три колебательные координаты q_1 , q_2 и q_3 обладают симметрией A_1 , A_1 , и B_2 , соответственно и соответствующие гармонические частоты имеют значения $2614,44$, $1182,53$ и $2628,37\text{ см}^{-1}$ [5]. Соотношение частот $\omega_1 = \omega_3 = 2\omega_2$ определяет структуру колебательного спектра, характеризуемую полиадным числом $V = v_1 + v_2 / 2 + v_3$. В данной работе исследовалась полиада $V=3$, включающая десять состояний.

Два типа колебательно-вращательных полос возможно наблюдать в спектрах поглощения сероводорода:

- параллельные полосы – это полосы с четным v_3 ; правила отбора для них

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm(2n + 1); \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

- перпендикулярные полосы – это полосы с нечетным значением квантового числа v_3

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \pm 2n; \Delta K_c = \pm(2m + 1)$$

Для анализа переходов был использован метод комбинационных разностей, для чего использовалось основное состояние молекулы из работы [6]. В результате этого были определены энергии колебательно-вращательных состояний шести возбужденных колебательных состояний (300), (201), (102), (003), (121) и (220) с максимальными значениями квантовых чисел $J=20$ и $K_a=5$. Кроме этого для всех спектральных линий были определены абсолютные значения интенсивностей.

Всего проинтерпретировано и отнесено к исследуемым полосам 3787 переходов. Также, используя контур Артманна-Тран, были определены экспериментальные значения абсолютных интенсивностей этих 3787 переходов.

Список публикаций:

1. A. Castets, C. Ceccarelli, B. Lefloch, E. Caux and L. Pagani, *Sulphur-bearing species in the star forming region L1689N*//*AstronAstrophys*- 2004-V. 413-p.609–622.
2. Visscher C, Lodders K, Fegley JB, *Atmospheric Chemistry in Giant Planets, Brown Dwarfs, and Low-Mass Dwarf Stars II. Sulfur and Phosphorus* //*AstronAstrophys* 2006- V. 648-p.1181–95.
3. Aladro R, Martin S, Martin-Pintado J, Mauersberger R, Henkel C, $\lambda=1.3\text{mm}$ and 2 mm molecular line survey towards M82 //*AstronAstrophys*- 2011-V.535-A84.
4. Justanont K, Khouri T, Maercker M, Alcolea J, Decin L, Olofsson H, *The Herschel Exploitation of Local Galaxy Andromeda (HELGA): IV. Dust scaling relations at sub-kpc resolution*//*AstronAstrophys* 2012-V.537-A144.
5. O. N. Ulenikov, I. E. S. Bekhtereva, I. C. Leroy, 2 and O. V. Gromova. *On the determination of the intramolecular potential functions for a polyatomic molecule: H₂S*//*Russian Physics Journal*-Vol. 51- No. 1, 2008.
6. Flaud J-M, Camy-Peyret C, Johns JWC. *The far-infrared spectrum of hydrogen sulfide. The (000) rotational constants*//*CanJPhys* 1983- V.61-p. 1462–73.

Определение фокусного расстояния сфокусированного пучка с дислокацией волнового фронта по дифракции на прямоугольном экране

Ивченко Илья Дмитриевич^{1,2}

Бибикова Эвелина Анатольевна^{1,2}, Кундикова Наталья Дмитриевна^{1,2}, Мингажитдинов Эмиль Ильясович²

¹Институт электрофизики УрО РАН

²Южно-Уральский государственный университет

Бибикова Эвелина Анатольевна

ivchenkoid@susu.ru

Разработан способ определения положения перетяжки пучка с дислокацией волнового фронта по динамике дифракционной картины, получаемой с помощью непрозрачного прямоугольного экрана по аналогии со способами [1,2]. Для этого пучок с дислокацией волнового фронта перекрывался вертикально наполовину непрозрачным экраном и затем фокусировался линзой. Было проведено моделирование распространения при этих условиях пучка Гаусса, в который была введена дислокация волнового фронта, с помощью быстрого преобразования Фурье. На рис.1 представлено полученное в результате моделирования поперечное распределение интенсивности пучка с топологическим зарядом -6 для различных расстояний от перетяжки в обе стороны. Анализ динамики дифракционной картины показывает, что происходит ее поворот в том же направлении, в котором закручивается волновой фронт пучка. Однако в положении перетяжки (позиция 0,00 мм) картина симметрична относительно границы экрана, и это является критерием для метода определения места нахождения перетяжки.

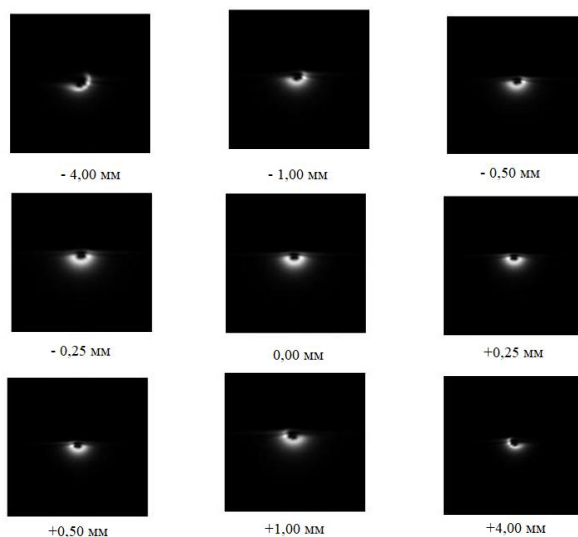


рис. 1. Поперечное распределение интенсивности сфокусированного пучка с дислокацией волнового фронта -6 , усеченного наполовину экраном слева до линзы с фокусным расстоянием 40 мм, на различном расстоянии от положения перетяжки. Наблюдение в направлении распространения пучка.

Результаты моделирования подтверждаются экспериментально. На рис.2 соответствующие экспериментально полученное поперечное распределение интенсивности сфокусированного пучка с дислокацией волнового фронта -6 , усеченного наполовину заслонкой *слева* до линзы с фокусным расстоянием 40 мм. Аналогично результатам моделирования дифракционная картина в положении перетяжки симметрична относительно края заслонки. При этом следует отметить, что пучок можно перекрывать лишь примерно наполовину (небольшие отклонения на характер дифракционной картины не влияют). Точность определения перетяжки при данном способе составляет 1%. Подобные результаты с той же точностью данный метод показывает для линзы с фокусным расстоянием 100 мм.

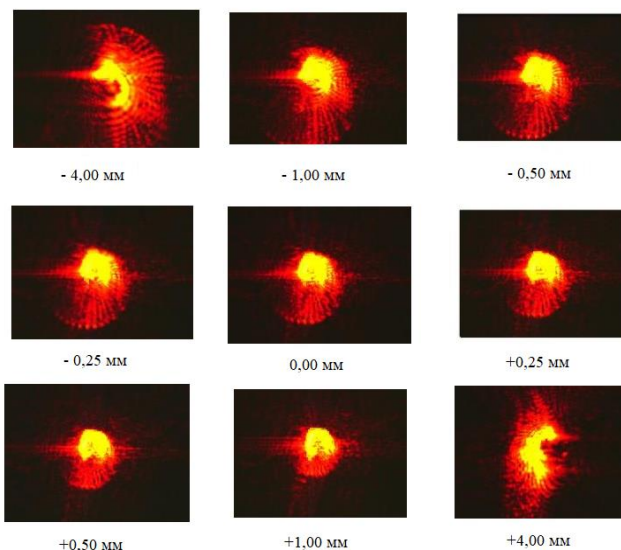


рис. 2. Поперечное распределение интенсивности сфокусированного пучка с дислокацией волнового фронта -6 , усеченного наполовину заслонкой *слева* до линзы с фокусным расстоянием 40 мм, на различном расстоянии от положения перетяжки. Наблюдение в направлении распространения пучка.

Список публикаций:

- [1] Bibikova, E. A., Al-wassiti, N. & Kundikova, N. D. Diffraction of a Gaussian beam near the beam waist. // *J. Eur. Opt. Soc. Publ.* 15, 17–20 (2019).
 [2] Bekshaev, A. & Mikhaylovskaya, L. Displacements of optical vortices in Laguerre–Gaussian beams diffracted by a soft-edge screen. // *Opt. Commun.* 447, 80–88 (2019).

Случайные резонансы в многоатомных молекулах: $\text{H}_2\text{C}=\text{CD}_2$, состояния $(\nu_2=1, A_1)/(\nu_7=2, A_1)/(\nu_8=2, A_1)$

Кузьминов Данила Андреевич

Глушков Петр

Томский политехнический университет

Бехтерева Елена Сергеевна, д.ф.-м.н.

dak97@tpu.ru

Молекула этилена важна для многочисленных научных и прикладных задач физики, химии, астрофизики, метеорологии, атмосферной оптики. Этилен - это природное ненасыщенное органическое соединение, содержащееся в окружающем воздухе и влияющее на химический состав атмосферы и глобальный климат. В результате реакции с гидроксильным (ОН) радикалом этилен играет значительную роль в химии тропосферы и образовании озона. Этилен является одним из наиболее важных веществ, изучаемых в астрофизике. Он был обнаружен в атмосферах внешних планет Юпитера, Сатурна, Нептуна. Поэтому в течение многих лет молекула этилена и ее различные изотопологи были предметом обширных исследований.

Исследуемый спектр высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ зарегистрирован в области $1300\text{--}2000\text{ см}^{-1}$, где расположены полосы ν_2 , $2\nu_7$ и $2\nu_8$. С помощью инфракрасного Фурье-спектрометра Bruker IFS-125HR были сняты два спектра, при общих экспериментальных условиях: температуре 294 К и разрешении 0.0025 см^{-1} . Различие заключается в длине оптического пути – 16 м и 24 м – и давлении – 0,3 мбар и 1,4 мбар, соответственно. Два спектра необходимы для проведения наиболее полного анализа серий переходов с

большими значениями квантовых чисел J, K_a , для которых линии становятся слабо интенсивными. На Рисунке 1 приведен обзорный спектр, зарегистрированный с меньшим давлением.

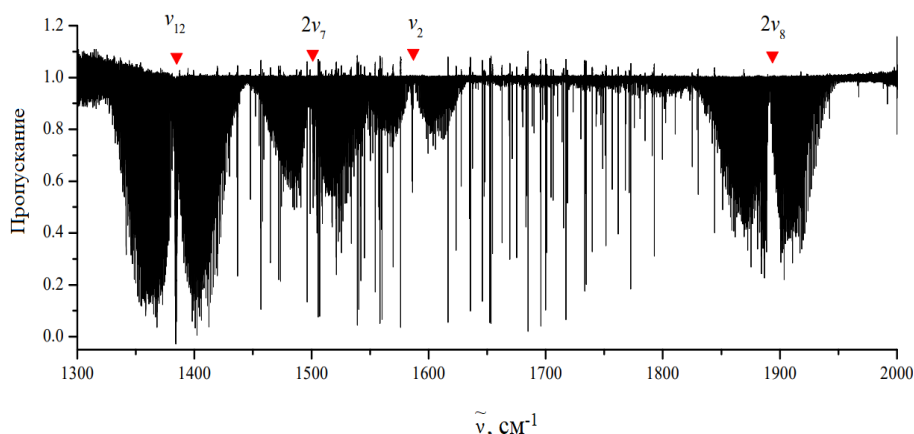


рис. 1. Обзорный спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, зарегистрированный с давлением 0,3 мбар и длиной пути 16 м при комнатной температуре.

Рассматриваемые полосы в заданном диапазоне ν_2 (растяжение $\text{C}=\text{C}$) и $2\nu_7$ (первый обертоном внеплоскостного колебания $\text{CH}_2=\text{CD}_2$) являются полосами a -типа [2]. Правила отбора для таких полос

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = 2n; \Delta K_c = 2n + 1;$$

В дальнейшем будет решена обратная спектроскопическая задача: определены вращательные, центробежные и резонансные параметры, которые входят в систему резонирующих состояний. Эффективный гамильтониан (1) изолированного состояния, в таком подходе, будет использоваться как оператор диагонального блока, [1]:

$$\begin{aligned} H_{vv} = E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \\ \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + \\ H_{KJ}^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J^2 J_z^2 + h_J^v J^4] + \\ L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] \\ + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8] \quad \#(1) \end{aligned}$$

A^v, B^v, C^v – эффективные вращательные параметры с колебательным состоянием v , а другие параметры представляют собой коэффициенты центробежных искажений разного порядка.

В данном диапазоне присутствуют полосы $\nu_{12}(A_1)$, $2\nu_{10}(A_1)$, $\nu_7+\nu_{10}(A_2)$, $\nu_4+\nu_{10}(B_2)$, $\nu_4+\nu_7(B_1)$ соответствующие состояния которых резонируют по типам Ферми, Дарлинг-Денниссона и Кориолиса [1], которые образуют систему резонирующих состояний. В рассматриваемом диапазоне энергий расположено 16 таких полос, из которых ν_2 , $2\nu_7$ и $2\nu_8$ являются одними из самых ярких и интенсивных. Энергии верхних состояний полос ν_2 и $2\nu_7$ уже рассчитаны, производится расчёт энергий нового состояния, которое также важно, так как даст большой вклад в расчёт гамильтониана - $2\nu_8$, центр полосы для которой рассчитан на основе параметров из работы [2].

Метод эффективных операторов, используемый для теоретического анализа, включая описание резонансных взаимодействий построен для 8 состояний. Матрица эффективного оператора, при этом, имеет вид, приведенный на рис 2.

Анализ спектра молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ полос ν_2 , $2\nu_7$ и $2\nu_8$ выполнен с использованием метода комбинационных разностей до максимального значения квантового числа $K_a = 12$, квантовое число в некоторых сериях достигает значений $J^{\max} = 41$. Параметры основного состояния и его структура были взяты из работы [1].

Проведен анализ колебательно-вращательных переходов в полосах ν_2 , $2\nu_7$ и $2\nu_8$. Всего найдено 4358 переходов. Количество экспериментально определенных колебательно-вращательных уровней составило 952.

		A ₁				A ₂		B ₁	B ₂
		2ν ₁₀	ν ₁₂	2ν ₇	ν ₂	ν ₇ +ν ₁₀	ν ₈ +ν ₁₀	ν ₄ +ν ₇	ν ₄ +ν ₁₀
A ₁	2ν ₁₀	W	DD		F	ξ _{7,10} ^z	ξ _{8,10} ^z	ξ _{4,10} ^y	ξ _{4,10} ^x
	ν ₁₂	W							
	2ν ₇		W	F					
	ν ₂			W					
A ₂	ν ₇ +ν ₁₀					W		ξ _{4,10} ^x	ξ _{4,7} ^y
	ν ₈ +ν ₁₀						W		ξ _{4,8} ^y
B ₁	ν ₄ +ν ₇							W	ξ _{10,7} ^z
B ₂	ν ₄ +ν ₁₀								W

рис. 2. Матрица эффективного оператора

Список публикаций:

- [1] Ulenikov ON, GromovaOV, BekhterevaES, BerezkinKB, Sklyarova EA, Maul C, et al. Study of the High Resolution FTIR Spectrum of CH₂=CD₂ in the Region of 1300-1450 cm⁻¹: the ν₁₂ (A₁) and 2ν₁₀ (A₁) Bands. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2015; 161:180–96;
- [2] Martin, Jan ML, et al. "The anharmonic force field of ethylene, C₂H₄, by means of accurate ab initio calculations." The Journal of chemical physics 103.7 (1995): 2589-2602.

Программные пакеты для расчёта и анализа XAFS-спектров

Макаров Павел Андреевич

Некипелов Сергей Вячеславович, Сивков Виктор Николаевич

Федеральный исследовательский центр «Коми научный центр» УрО РАН

makarova@ipm.komisc.ru

В настоящее время спектроскопические исследования в рентгеновской области чаще всего проводятся на синхротронах [1]. Результаты этой работы широко используются для анализа всех классов материалов [2]. В рентгеновском спектральном диапазоне свет в основном поглощается веществом в ходе фотоэлектрического эффекта, однако могут происходить и другие явления (в частности, образование электрон-позитронных пар). Все последствия фотопоглощения в применении к молекулам, жидкостям и твёрдым телам приводят к тем или иным методам XAFS - X-ray Absorption Fine Structure spectroscopy [3].

Как известно [1-3], уравнение XAFS может быть записано в виде

$$\chi(k) = \sum_j \frac{N_j f_j(k) e^{-2k^2 \sigma_j^2 - 2R_j/\lambda(k)}}{k R_j^2} \sin [2k R_j + \delta_j(k)]$$

Это уравнение с математической точки зрения отражает несколько важнейших физических идей, лежащих в основе XAFS.

Из-за членов $\lambda(k)$ и R_j XAFS является локальным методом зондирования, не способным “видеть дальше примерно 5 Å от поглощающего атома”.

1. Колебания XAFS определяются набором различных частот, соответствующих различным расстояниям для каждой координационной оболочки. Это приводит к необходимости использования в анализе преобразования Фурье.
2. Для извлечения из результатов эксперимента данных о расстояниях и координационных числах необходимо знать точный вид функций амплитуды рассеяния $f(k)$ и фазового сдвига $\delta(k)$.

Последний пункт - необходимость точного определения амплитуды рассеяния и фазового сдвига рассеяния - является одним из важнейших вопросов в области XAFS. Хотя первые попытки вычислить эти функции были успешными на качественном уровне, они, как правило, не были достаточно точными для использования в анализе. В самых первых XAFS-анализах функции $f(k)$ и $\delta(k)$ могли быть определены только из экспериментальных спектров, для которых были известны точные расстояния между ближними соседями и их типами (как правило, из измерений кристаллов с очень хорошо известной структурой). Такие экспериментальные стандарты могут быть достаточно точными, но, как правило, ограничиваются оболочкой первых соседей. Вплоть до начала 1990-х годов использование таких стандартов было достаточно распространённым. За последние десятилетия расчеты $f(k)$ и $\delta(k)$ стали более точными и доступными, и использование экспериментальных стандартов в XAFS-анализе стало редкостью. Расчётные функции рассеяния (вычисленные, например, с помощью программ FEF, GNXAS и EXCURVE) не лишены проблем, но, как неоднократно было показано, достаточно точны для использования в реальном анализе, а в некоторых случаях даже точнее, чем экспериментально полученные коэффициенты рассеяния. Кроме того, рассчитанные коэффициенты не ограничиваются первой оболочкой и могут учитывать многократное рассеяние фотоэлектрона.

В данной работе обсуждается практика применения актуальных современных языков программирования, систем компьютерной математики, программных библиотек и пакетов, а также специализированных профессиональных баз данных и средств создания высококачественного контента, применимых в XAFS-спектроскопии.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351

Список публикаций:

- [1] Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 672 С.
 [2] van Bokhoven J.A., Lamberti C. X-ray absorption and X-ray emission spectroscopy: theory and applications. Wiley, 2016. 900 P.
 [3] Newville M. Fundamentals of XAFS. 2008, 41 P.

Связанные состояния в континууме в цепочке из керамических дисков со структурным беспорядком

Назаров Равшанжон Холикбердиевич

Ханабиев Денис Маратович, Маслова Екатерина Эдуардовна

Кондратенко Зарина Фаильевна

Университет ИТМО

Кондратенко Зарина Фаильевна

z.sadrieva@metalab.ifmo.ru

Связанные состояния в континууме (ССК) — это локализованные состояния, энергия которых находится в непрерывном спектре [1]. ССК могут возникать как в открытой системе (резонаторе), за счет деструктивной интерференции утекающих мод с близкими или даже одинаковыми собственными частотами, так и одномерных или двумерных периодических фотонных структурах [1]. Например, в работах [2,3] авторы сообщают о реализации ССК в одномерной периодической структуре с аксиальной симметрией.

Механизм возникновения ССК в осесимметричных структурах можно объяснить следующим образом. Благодаря аксиальной симметрии вдоль оси периодичности электрическое поле \mathbf{E} может быть записана в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}(r, z) e^{\pm i k_z z \pm i m \varphi} \quad (1)$$

где z — направление периодичности, φ — азимутальная переменная, от которой зависимость поля задается как функция синуса или косинуса в силу наличия оси вращения диска z , и m — проекция орбитального углового момента. Знаки перед z описывают вырождение мод вдоль направления распространения, в то время как знаки перед азимутальным номером показывает вырождение мод относительно вращения вокруг оси периодичности. В силу периодичности структуры амплитуду $\mathbf{A}(r, z)$ можно разложить в ряд Фурье, где коэффициенты разложения описывают количество утекающей энергии из системы. При

открытии нулевого дифракционного канала коэффициент разложения будет равняться среднему значению поля по элементарной ячейке. При нечетности распределения поля относительно отражения в вертикальной плоскости, среднее значение поля по периоду будет равняться нулю, что говорит об отсутствии поля в дальней зоне. Это достигается лишь у мод с $m=0$, и соответствует ССК [2]. Такие ССК называют защищенными симметрией, и являются устойчивыми по отношению к возмущениям, которые не нарушают симметрию структуры [1]. В силу ряда ограничений реальных физических систем, таких как конечность размера системы, присутствие материальных потерь и появлении структурных нарушений при изготовлении, связанные состояния превращаются в квази-ССК с конечной времени жизни. Следовательно, исследование влияния вышеуказанных факторов на устойчивость квази-ССК является актуальной задачей.

В данной работе мы изучили влияния беспорядка на добротность квази-ССК моды с нулевым орбитальным угловым моментом. На первом этапе была реализована модель в пакете COMSOL Multiphysics для расчета собственных мод периодической структуры. В результате была получена зонная диаграмма и распределение моды, которые приведены на рис. 1.

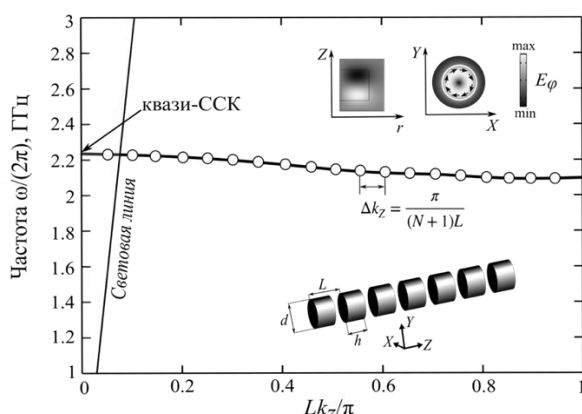


рис.1. Зонная диаграмма и геометрия рассматриваемой структуры с периодом $L = 34$ мм, радиусом дисков $R = 15$ мм и их высотой $h = 20$ мм. Точки в дисперсионной кривой отображают квантования зоны при, где N количество дисков. В ставках показано распределение поля в двух разных проекциях. Диэлектрическая проницаемость диска и тангенс угла потерь равны 44 и 10^{-4} соответственно

Далее мы исследовали влияния структурного беспорядка на добротность квази-ССК. Структурный беспорядок был задан с помощью выражения:

$$z_i = \frac{3L-h}{2} + L((i-1) + \sigma \cdot rand), \quad (2)$$

где σ — параметр беспорядка, который меняется от 0 до 0.2; i — порядковый номер диска; $rand$ — случайное число от -1 до 1. Случайные значения с равномерным распределением были сгенерированы с помощью встроенной функции программного пакета MATLAB.

В результате мы получили, что для структуры с большой диэлектрической проницаемостью квази-ССК является более стабильным по отношению к беспорядку, чем для структур, имеющие малый оптический контраст [4]. В частности, среднее значение добротности квази-ССК уменьшается как σ^{-1} с увеличением параметра беспорядка, что отличается от квадратичного закона, приведенного в работе [4]. Полученные нами результаты имеют важное значение для экспериментальной реализации ССК в естественных фотонных структурах, где структурное нарушение играет решающую роль.

Список публикаций:

- [1] Кошелев К. Л., Садриева З. Ф., Щербаков А. А., Кившарь Ю. С., Богданов А. А // УФН. 2023. Т. 193. № 5. С. 528–553.
- [2] Bulgakov E. N., Sadreev A. F. //Physical Review A. 2017. Vol. 96. №. 1. p. 013841.
- [3] Sadrieva Z. F. et al. //Physical Review A. 2019. Vol. 99. №. 5. p. 053804.
- [4] Maslova E. E. et al. //Nanophotonics. 2021. Vol. 10. №. 17. p. 4313-4321.

Синхротронное излучение: ультрамягкая спектроскопия поглощения биологических объектов и композитов на их основе

Петрова Ольга Викторовна

Бакина Ксения Андреевна, Скандаков Роман Николаевич, Некипелов Сергей Вячеславович

Сивков Виктор Николаевич

Федеральный исследовательский центр Коми научный центр УрО РАН

teiou@mail.ru

Синхротронное излучение (СИ) – это электромагнитное излучение ультрарелятивистских электронов, ускоряемых в циклических ускорителях [1]. Особый интерес к изучению ускоряемых заряженных частиц появился в сороковых годах нашего века из-за предельной энергии электронов, достижимой в бетатронах. В 1944 году Д. Иваненко и И. Померанчук опубликовали статью, в которой показали, что потери на магнитотормозное излучение в бетатроне пропорциональны четвертой степени энергии ускоренных электронов. Такое явление было названо "светящийся электрон". Однако первые попытки экспериментального обнаружения синхротронного излучения не привели к успеху, поскольку его поиски велись в СВЧ-диапазоне. В 1947 году на синхротроне американской компании "Дженерал Электрик" Ф. Хаббер аспирант профессора Х. Поллака при проведении профилактических работ случайно обнаружили яркий голубоватый свет с орбиты электрона, поэтому это излучение получило название синхротронного излучения. Позднее теоретически было показано, что максимум СИ смещен в область высоких частот, по отношению к частоте вращения электрона по орбите, $\omega_0 = c/(2\pi R)$, где c – скорость света, R – радиус орбиты электрона, и даже для ускорителей, работающих на 80 МэВ, уже смещается в область вакуумного ультрафиолета, а для современных синхротронов с большей энергией электрона – в рентгеновскую область. В 1948 году А. Соколов и Д. Иваненко опубликовали работу, представляющую формулу для расчета спектральных и угловых характеристик синхротронного излучения. Развитие теории СИ в дальнейшем было дополнено исследованиями его поляризационных свойств проведенными сотрудниками физического факультета МГУ на синхротроне ФИАН. В 1960-х годах началось использование СИ в эксперименте, сначала в атомной спектроскопии, а затем и в физике твердого тела. С 1967 года СИ начали применять в спектроскопии твердого тела и для исследования высокоэнергетического возбуждения люминесценции. Первоначально для исследований использовалось излучение циклических ускорителей электронов (синхротроны первого поколения), затем были созданы специализированные источники СИ (синхротроны 2-го поколения). В настоящее время использование виглеров и ондуляторов позволило на порядки увеличить интенсивность СИ (синхротроны 3-го поколения) и стимулировало создание лазера на свободных электронах (синхротроны 4-го поколения).

СИ обладает рядом уникальных свойств определяющих его большое практическое значение для изучения структуры и строения материи: непрерывный спектр излучения от инфракрасного до рентгеновского; малая угловая расходимость испускаемого излучения; линейная поляризация СИ в плоскости орбиты; круговая поляризация выше и ниже плоскости орбиты; возможность точного расчета всех параметров излучения, высокая яркость источника во всем спектральном диапазоне.

В настоящее время благодаря появлению мощных источников СИ и спектральной аппаратуры высокого разрешения широкое применение для исследования неорганических и органических материалов на наноуровне получил метод ультрамягкой рентгеновской (УМР) абсорбционной спектроскопии (Near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS) [2], которая характеризуется атомной селективностью, дипольными правилами отбора, высокой чувствительностью к атомному составу и параметрам ближайшего окружения поглотившего рентгеновский квант атома. Структура спектров NEXAFS содержит уникальную информацию об атомном и химическом составе вещества, длине и углах атомных связей, а также энергии, составе и симметрии свободных электронных состояний. Источником такой информации являются спектральные зависимости сечения поглощения в области NEXAFS. В УМР области спектра 40-1500 эВ располагаются края поглощения внутренних $1s$ уровней атомов Li, C, N, O, F, Na, Mg, Al и $2p$ уровней атомов Si, P, Cl, K, Ca и $3d$ – переходных металлов, которые являются основой белковых структур и графитизированных биоматериалов (N, C и O), а также входят в состав обширного перечня нанокompозитных материалов.

В работе обсуждаются принципы генерации СИ и применение методов NEXAFS-спектроскопии с использованием СИ для исследования химического состава и нанокристаллической структуры костной ткани рыб и млекопитающих [3]; а также процесса графитизации биоматериалов в инертной атмосфере аргона [4-5].

Список публикаций:

[1] Тернов И.М. // УФН, 1995, Т 165(4), стр.429

[2] Stöhr J. // NEXAFS Spectroscopy: Springer, Berlin, 1992.

[3] Petrova O.V. et al. // J. Phys. Conf. Ser. 2017. V. 917(4). P. 042001.

[4] Petrenko, I. et al // Science Advances. 2019. V. 5(10). P. eaax2805(12).

[5] Petrova, O. V. et al // Appl. Sci. 2023. V. 13(1). P. 128(13)

Определение оптических констант фуллеренов в области аномальной дисперсии методом Крамерса Кронига

Рутковский Валерий Олегович

Сыктывкарский государственный университет им. Питирима Сорокина
Федеральный исследовательский центр «Коми научный центр» УрО РАН

В.Н.Сивков, д.ф.-м.н.
valeriy.rutkovskiy@mail.ru

Определение спектральных зависимостей оптических констант (коэффициентов поглощения, преломления и отражения, атомного форм-фактора) для широкого спектра материалов и химических соединений является актуальной задачей современного материаловедения. Особенно эти данные востребованы для области резонансного фотопоглощения, где спектральные зависимости оптических характеристик немонокотонно и представляют собой совокупность максимумов и минимумов. Современные теоретические модели не позволяют проводить расчеты этих зависимостей, поэтому для их определения востребованы экспериментальные методы их определения. Однако в рентгеновской области спектра прямые измерения коэффициентов отражения и преломления очень неточны из-за скользящих углов отражения, поэтому эти данные определяются косвенными методами. Один из таких методов основан на использование соотношений Крамерса Кронига (ККР) [1,2]. Интегральные соотношения ККР связывают коэффициенты поглощения и преломления (мнимую и вещественную части комплексного коэффициента преломления) и позволяют рассчитать спектральные зависимости коэффициента преломления через измеренные в широком спектральном интервале коэффициенты поглощения или сечения поглощения. Соотношения ККР также связывают действительную и мнимую части комплексных значений диэлектрической постоянной, коэффициентов отражения и преломления и атомный форм-фактор, поэтому из данных по сечениям поглощения можно определить все оптические постоянные в области резонансного поведения. Основной задачей настоящей работы является построение по литературным источникам и данным экспериментальных измерений спектральной зависимости сечений поглощения фуллерита C₆₀ в интервале энергий от 0 до 100000эВ, интерполяция этих зависимостей набором функций и проведение модельных расчетов спектральной зависимости коэффициента преломления фуллерита C₆₀ в области ближней тонкой структуры C1s – края поглощения атома углерода и в широком спектральном интервале.

Спектральные зависимости сечения поглощения в диапазоне энергий края поглощения C1s (280–320 эВ) были измерены в режиме полного выхода электронов (TEY) с использованием тонкого Ti-пленочного фильтра на российско-немецком канале выхода и монохроматизации синхротронного излучения на синхротронном источнике BESSY II (Гельмгольца-Zentrum Берлин, Германия) и на канале НаноФЭС Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ) (г. Москва, Россия). Данные о сечениях поглощения в диапазоне энергий 10–30000 эВ были взяты из таблиц Хенке [3] и в длинноволновой области спектра из работ [4–8].

Компоненты комплексного коэффициента преломления для фуллерена C₆₀ были получены и визуализированы с помощью языка программирования Python с использованием библиотек Scipy для расчетов и Matplotlib для вывода графиков. Расчет действительной части комплексного коэффициента преломления был осуществлен с использованием соотношений ККР. На графике (рис 1.) представлены полученные зависимости компонент коэффициента преломления от энергии, рассчитанные для всего диапазона.

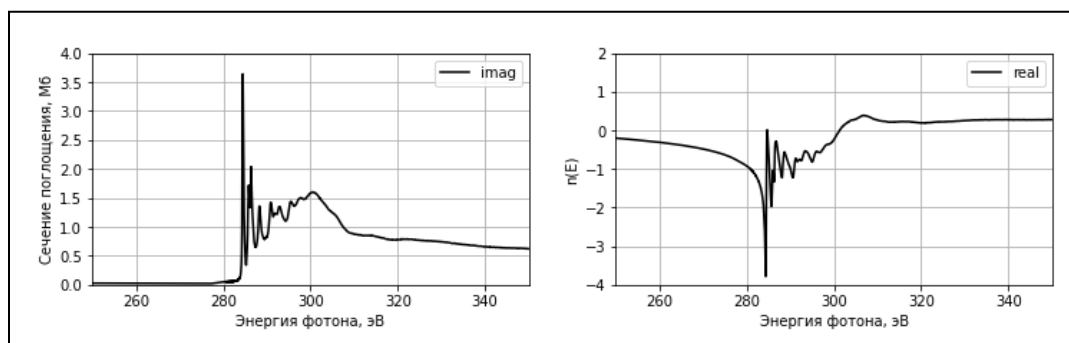


рис.1. Спектр фуллерена C₆₀ и полученная на его основе зависимость действительной части коэффициента поглощения от энергии в ближней области края поглощения

Список публикаций:

- [1] R. d. L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. 1926. V.12(6). pp. 547 – 557.;
- [2] H. A. Kramers, Atti. Congr. Intern. Fisici. Como. 1927. V.2. p. 545.;
- [3] B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables. 1993. V.54. pp. 181 – 343.;
- [4] B.L. Henke, J.P. Knauer, K. Premarate // J. Appl. Phys., 1981. V.52. P.1509-1520.;

- [5] A.J. Maxwell, P.A. Bruhwiler, D. Arvanitis, J. Hasselstrom, N. Martensson // *Chem. Phys. Lett.*, 1990, V.71, p.260.;
- [6] Г.В.Фетисов. *Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ (под редакцией Л.А.Асланова)* Издательство М.: Физматлит -2007 - 672 с. - ISBN 978-5-9221-0805-8.
- [7] Yasumatsu, Hisato; Kondow, Tamotsu; Kitagawa, Hiroshi; Tabayashi, Kiyohiko; Shobatake, Kosuke (1996). *Absorption spectrum of C60 in the gas phase: Autoionization via core-excited Rydberg states. The Journal of Chemical Physics*, 104(3), 899–. doi:10.1063/1.470813

Новая модель эффективного дипольного момента молекул типа аксиальной симметрии C_{3v} : приложения к исследованию абсолютных интенсивностей в полосе ν_6 молекулы $CH_3^{35}Cl$

Сидько Сергей Сергеевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Уленков Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

sss60@tpu.ru

В последние годы возрос интерес к изучению метилхлорида как одного из хлорорганических соединений, оказывающих негативное влияние на процессы промышленной транспортировки и переработки нефтепродуктов [1]. Также проводятся теоретические исследования, включающие анализ поверхностей потенциальной энергии, вычисление уровней колебательной энергии и другие аспекты колебательно-вращательной теории для молекул аксиальной симметрии, в том числе CH_3Cl [2].

Изучение спектров дает возможность получить обширную информацию о веществах, содержащихся в газовой смеси, в которой был проведен анализ спектра. Положение линий спектра позволяет определить состав газовой смеси, а интенсивность линий – концентрацию веществ, парциальное давление, температуру и другие параметры. В общем случае, интенсивность колебательно-вращательных линий, обусловленная переходами из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$, определяется выражением [3]:

$$S_{\nu_0} = \frac{8\pi^3\nu_0}{4\pi\epsilon_0 3hc} \left[1 - \exp\left(-\frac{hc\nu_0}{k_B T}\right) \right] N \frac{g_i}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \mathcal{R}_i^f, \quad (1)$$

где $\nu_0 = (E_f - E_i)/hc$ – волновое число перехода; E_f и E_i – верхняя и нижняя энергии колебательно-вращательного перехода; g_i – статистический вес обусловленный ядерным спином; N – количество поглощающих молекул на единицу объема; $Z(T)$ – статистическая сумма; T – температура; \mathcal{R}_i^f – квадрат матричного элемента оператора дипольного момента. Использование этой формулы для расчета выше перечисленных параметров газа невозможно без знания матричных элементов оператора дипольного момента.

Модель эффективного дипольного момента для молекул с осевой симметрией C_{3v} получена на основе свойств симметрии молекулы. Эта модель учитывает поправки четвертого порядка к основному параметру дипольного момента. Полученный оператор оказался намного более простым и понятным для использования в приложениях по сравнению с существующими моделями.

Благодаря усовершенствованной модели и значительно лучшими экспериментальными данными по сравнению с теми, что были выполнены ранее, нам удалось проинтерпретировать в полосе ν_6 молекулы $CH_3^{35}Cl$ более 5100 переходов с максимальными значениями квантовых чисел $J = 68$ и $k = 21$, что более чем в 1,5 раза больше по сравнению с тем, чем было до того известно в мировой литературе. Выполненный методом наименьших квадратов анализ позволил воспроизвести весь объем экспериментальных данных со среднеквадратичным отклонением $4,7 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, что в 2 раза лучше, чем было известно до сих пор.

Абсолютные интенсивности более 2080 переходов были получены из соответствия их форм профилю Армана-Тран, а параметры эффективного дипольного момента полосы ν_6 молекулы $CH_3^{35}Cl$ были определены с помощью компьютерной программы, созданной на основе теоретической модели. Средняя воспроизводимость экспериментальных данных составила порядка 3,4 %, что в несколько раз лучше, чем было ранее известно в литературе.

Список публикаций:

- [1] Gutzeit, *Effect of organic chloride contamination of crude oil on refinery corrosion, NACE-International corrosion conference series, Corrosion 2000 (2000) 135866. ISSN 03614409*
- [2] A.S. Grossman, K.E. Grant, W.E. Blass, D.J. Wuebbles, *Radiative forcing calculations for CH3Cl and CH3Br, J. Geophys. Res. 102 (1997) 13651–13656.*
- [3] Flaud, J.; Camy-Peyret, C. *Vibration-rotation intensities in H2O-type molecules application to the 2ν2, ν1, ν3 band of H2 16O. J. Mol. Spectrosc. 1975, 55, 278–310. [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(75\)90270-2](https://doi.org/10.1016/0022-2852(75)90270-2).*

Комплексные исследования нанопористого кремния, полученного путём травления с добавлением 5 % раствора йода

Скандаков Роман Николаевич

Бакина Ксения Андреевна¹, Петрова Ольга Викторовна^{1,2}, Макаров Павел Андреевич¹, Некипелов Сергей Вячеславович¹, Сивков Виктор Николаевич¹

¹*Физико-математический институт Федерального исследовательского центра «Коми научный центр» Уральского отделения Российской академии наук*

²*Санкт-Петербургский государственный университет*

Сивков Виктор Николаевич

scanick@yandex.ru

В работе исследованы образцы нанопористого кремния, приготовленные методом электрохимического травления. Что бы узнать детали структуры нанопористого кремния был проведён комплексный анализ результатов ультрамягкой рентгеновской спектроскопии (NEXAFS и XPS), растровой электронной микроскопии (РЭМ), методом полного внешнего отражения (ПВО), двухкристалльных кривых дифракционного отражения (КДО).

Для приготовления образцов использовался метод электрохимического травления (ЭХТ) в режиме анодирования в одинаковых условиях в виде слоев пористого кремния p^+ -типа проводимости на подложках Si(111)(Sb) (удельное сопротивление подложек $\rho \approx 0.01$ Ом·см) и p^+ -типа проводимости на подложках Si(111)(В) ($\rho \approx 0.005$ Ом·см). Анодирование осуществлялось в течение $t = 1$ мин при постоянном токе $J = 50$ мА/см² во фторопластовой двухкамерной ячейке с платиновыми электродами. Травление поверхности подложки кремния происходило через диафрагму диаметром 10 мм. Электролитом служил раствор на основе этанола и плавиковой кислоты: $C_2H_5OH : HF(49\%) = 1 : 1$, как с добавлением 5 % раствора йода, так и без него [1].

Полученные методами ультрамягкой рентгеновской спектроскопии (NEXAFS и XPS) результаты в сопоставлении с данными электронной микроскопии, а также ПВО и КДО, позволяют сделать следующие выводы: 1) добавление йода в раствор значительно влияет на структурные параметры нанопористого кремния, 2) добавление йода в электролит способствует получению слоев ПК с пористостью 60 % и более для подложек как p^+ -, так и p^+ -типа проводимости, 3) Анодирование в стандартном электролите формируют на подложках p^+ -типа слои с более высокой пористостью 4) пористость имеет величину около 50 %. Поры диаметром 315 нм и длиной $l \approx 30$ нм ветвятся вдоль направлений (111), При этом линейные размеры структурных элементов нанопористого кремния ограничены соседними порами, а их значения варьируются в широких пределах 5-50 нм. 5) Анализ интерфейса между кремниевым скелетом и оксидом (Si^{4+}) показал, что в нем присутствуют монослои оксидов кремния с промежуточными зарядовыми состояниями $Si^+(0.1$ нм), Si^{2+} (0.05 нм), Si^{3+} (0.25 нм).

Оценка величины пористости (таблица 1) слоев Р проводилась согласно подходу [4].

Список публикаций:

[1] Brown F.C. *Extreme ultraviolet transmission of crystalline and amorphous silicon* / F.C. Brown, O.P. Rustgi // *Phys. Rev. Lett.* 1972. No. 28. P. 497.

[2] *X-ray fluorescence measurements of x-ray absorption near edge structure at the Si, P, and S L edges* / M. Kasrai, Z. Yin, G. Bancroft, K.H. Tan. // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 1993. No. 11. P. 2694.

Спектральная зависимость фототока в МДП-структурах на основе нестехиометрических германосиликатных плёнок

Хамуд Гайсаа Аббас

Камаев Геннадий Николаевич, Vergnat Michel, Володин Владимир Алексеевич

Новосибирский государственный университет

Володин Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н.

k.gaisaa@g.nsu.ru

Структуры металл-диэлектрик-полупроводник (МДП-структуры) привлекают внимание для использования в фотовольтаике, причем в последнее время не только в качестве приборов с зарядовой связью. Например, предпринимаются попытки внедрить в диэлектрик светопоглощающие квантовые точки, чтобы улучшить чувствительность фотодиодов на основе барьера Шоттки [1]. Толстые слои SiO_x также используются в качестве хорошо поглощающего свет диэлектрического слоя, поскольку их оптические и транспортные

свойства можно модифицировать путём увеличения содержания избыточного кремния [2]. Для повышения фоточувствительности МДП-структуры с диодом Шоттки диэлектрик с одной стороны должен ограничивать темновой ток, с другой стороны не препятствовать прохождению фототока. Возможно, что германосиликатные плёнки (GeSi_xO_y) будут превосходить плёнки SiO_x по этим качествам. Целью данной работы являлось исследование спектральной зависимости фототока в МДП-структурах на основе GeSi_xO_y , в том числе в структурах с включением нанослоя аморфного германия в слой диэлектрика.

Плёнки и многослойные структуры GeSi_xO_y были осаждены на подложку n-Si(001) с удельным сопротивлением $\rho=5,5\pm 1$ Ом·см методом высоковакуумного электронно-лучевого осаждения. Были осаждены следующие структуры: S1 - n-Si/SiO₂(2нм)/GeSi_{0,9}O_{2,8}(30нм) и S2 - n-Si/SiO₂(5нм)/Ge(3нм)/GeSi_{0,9}O_{2,8}(25нм) (в качестве образца-спутника со слоем Ge). Верхние прозрачные контакты ITO (indium-tin-oxide) были нанесены методом магнетронного распыления с размером 0,7x0,7 мм. Образцы отжигались в течение 30 мин при температуре 500 °С в воздушной атмосфере. Вольтамперные характеристики (ВАХ) структур до и после отжига исследовались в темноте и при освещении галогенной лампой. Для измерений спектральной зависимости фототока в диапазоне 250-1150 нм использовался источник света на основе галогенной лампы с монохроматором разработки ООО НПК «Центр нанотехнологий» (Новосибирск). Целью отжига была модификация структурных свойств плёнок GeSi_xO_y , так как отжиг приводил к образованию нанокластеров аморфного германия, которые являются центрами формирования проводящих филаментов в плёнках [3].

При освещении образца светом галогенной лампы в нулевом порядке монохроматора (весь спектр излучения) на образец попадало около 500 микроватт световой мощности. Темновые ВАХ и с такой подсветкой показаны на рис. 1 для исходного образца S1. Видно, что при обратном смещении фототок превышает темновой ток на три порядка (рис. 1). Также видно, что при освещении на диоде возникала фото-ЭДС.

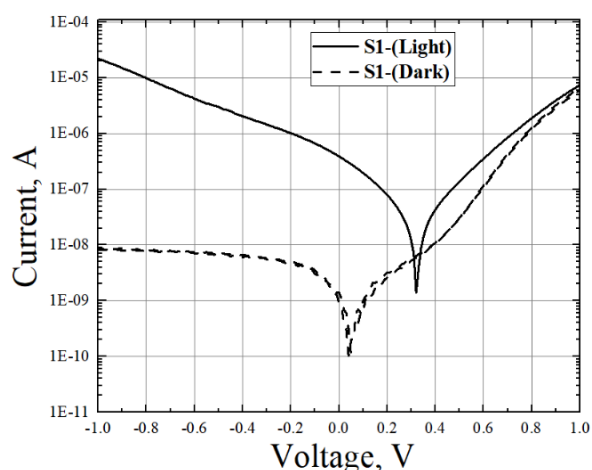


рис.1. ВАХ образца S1 в темноте и при освещении.

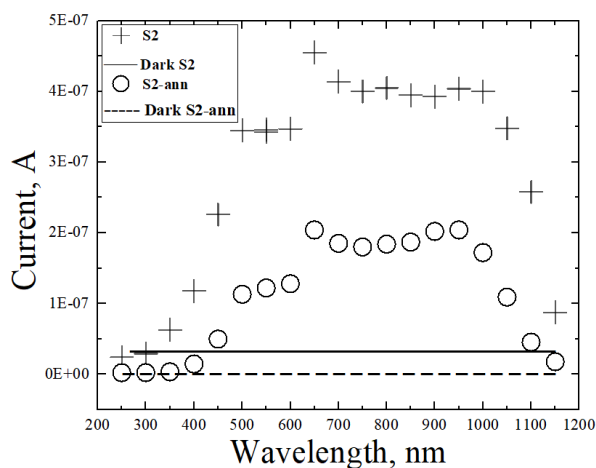


рис.2. Спектральная зависимость фототока образца S2 при -1В до и после отжига в спектральном диапазоне 250-1150 нм.

На рис. 2 показана спектральная зависимость фототока для образца S2 (исходного и отожжённого) и темновой ток (сплошной и штрихованной линиями для исходного и отожжённого соответственно) при напряжении -1 В. Видно, что в результате отжига темновой ток в образце S2, содержащем слой германия, значительно уменьшился. В образце S1 без слоя германия темновой ток после отжига наоборот немного увеличился (результаты не показаны здесь). На рисунке 2 видно, что фототок возникал начиная с 350 нм, а затем достигал максимального значения при 650 нм, что отражало спектральную мощность источника света. Снижение фототока в области длинных волн связано с уменьшением поглощения света в области пространственного заряда (обеднения) в подложке кремния. Хотя основная часть светового потока и поглощается в этой области, обсуждаются также эффекты поглощения света как в слое ITO, так и в слое диэлектрика, особенно в случае образца S2, содержащего нанометровый слой германия. Также видно, что после отжига фоточувствительность снижается во всей области спектра, но при этом темновой ток снижается ещё сильнее, так что фоточувствительность сохраняется.

Если оценить ампер-ваттные характеристики наших образцов, то можно сделать вывод, что фоточувствительность МДП-структур с диодом Шоттки на основе GeSi_xO_y значительно превышает фоточувствительность, которая была получена при добавлении квантовых точек германия в слой диоксида кремния [1]. Вполне возможно, что наш подход можно использовать для создания недорогих фотодиодов, не содержащих p-n переходов.

Работа выполнена при поддержке Министерства Образования и Науки РФ, проект FSUS-2024-0020.

Список публикаций:

- [1] Aouassa M. et al. *Highly Improved Mis Photodetector Sensitivity Using Ge Nanocrystals*. – 2021. DOI: <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-217720/v1>
- [2] Mendoza Conde G. O. et al. *MIS-like structures with silicon-rich oxide films obtained by HFCVD: Their response as photodetectors* // *Sensors*. – 2022. – Т. 22. – №. 10. – С. 3904.
- [3] Volodin V. A., Kamaev G. N., Vergnat M. *Negative and positive photoconductivity and memristor effect in alloyed GeO [SiO] films containing Ge nanoclusters* // *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters*. – 2020. – Т. 14. – №. 7. – С. 2000165.

Исследование субмиллиметрового спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2^{35}\text{Cl}_2$

Худякова Юлия Вадимовна

Томский политехнический университет

Громова Ольга Васильевна, д.ф.-м.н.

yvh7@tpu.ru

Метиленхлорид (дихлорметан) CH_2Cl_2 относится к хлорорганическим соединениям, это летучее, токсичное вещество. Дихлорметан широко применяется в промышленности в качестве растворителя, его попадание в окружающую среду с газоздушными выбросами – один из факторов, приводящих к образованию озоновых дыр [1]. Актуальной задачей в настоящее время является оперативный контроль содержания дихлорметана в нефти, нефтепродуктах, т.к. наличие в них хлорорганических соединений приводит к коррозии оборудования, его износу и, как следствие, - к значительным расходам на ремонт, к авариям [2]. Разработки в этой области представляют большой практический интерес для нефтегазодобывающей и нефтегазоперерабатывающей промышленности. Спектроскопические исследования закладывают фундаментальные основы таких методик и приборов контроля.

Выбор для анализа молекулы CH_2Cl_2 обусловлен ее недостаточной изученностью по сравнению с другими соединениями из класса хлороалканов. Ранее изучались спектры дихлорметана в среднем и дальнем инфракрасном (ИК), микроволновом диапазоне [3–5]. Интерпретация вращательных переходов в терагерцовой области для молекулы метиленхлорида до настоящего момента не проводилась. Использование для анализа спектров субмиллиметрового (терагерцового) диапазона позволяет получить результаты с существенно большей точностью, чем ИК-исследования. Положения линий в таком эксперименте могут быть определены с погрешностью 0,02 МГц, или $7 \cdot 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, в то время как для ИК-области характерны значения порядка 10^{-4} см^{-1} [6]. В настоящей работе впервые проанализированы данные такой высокой точности для состояния $\nu_4 = 1$ молекулы CH_2Cl_2 .

Экспериментальные спектры были зарегистрированы в Кёльнском университете (Германия) и Университете Лилль (Франция) в диапазоне 0,075 – 1,090 ТГц. Измерения проводились при комнатной температуре, при давлениях 1,5-10 Па, с использованием генератора сигнала R&S@SMF100A в качестве источника излучения и, в зависимости от спектральной области, диода Шоттки либо охлаждаемого жидким гелием InSb (QMC Instruments Ltd) в качестве приемника. Фрагмент одного из спектров приведен на *рис. 1*.

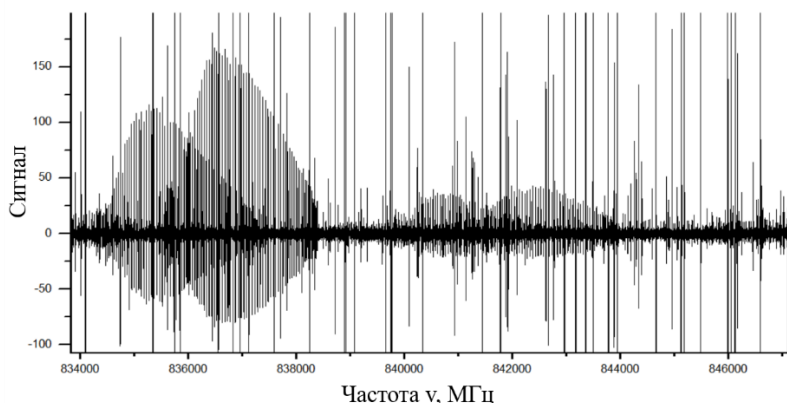


рис.1. Фрагмент спектра полосы ν_4 молекулы $\text{CH}_2^{35}\text{Cl}_2$

Дихлорметан CH_2Cl_2 относится к молекулам типа асимметричного волчка с группой симметрии, изоморфной точечной группе C_{2v} . Исследовалась вращательная структура колебательной полосы $\nu_4 = 1$ (полносимметричное ножничное колебание Cl-C-Cl, первое возбужденное состояние) изотополога $\text{CH}_2^{35}\text{Cl}_2$. Для искомым переходов в Q-ветви выполнялись правила отбора $\Delta J = 0, \Delta K_a = \pm 1$. Интерпретация проводилась

вплоть до значений $J_{\max} = 101$ и $K_{a \max} = 19$, т.к. только линии, отвечающие переходам на данные K_a , присутствовали в зарегистрированном диапазоне.

Для решения обратной спектроскопической задачи требуется провести расчет параметров эффективного гамильтониана Уотсона, имеющего следующий вид [7]:

$$H^v = E^v + \left[A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v) \right] J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v) J^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v) J_{xy}^2 - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z^2 J^2 - \Delta_J^v J^4 - \delta_K^v [J_z^2, J_{xy}^2] - 2\delta_J^v J^2 J_{xy}^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 J^4 + H_J^v J^6 + [J_{xy}^2, h_K^v J_z^4 + h_{JK}^v J_z^2 J^2 + h_J^v J^4] + L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 J^4 + L_{JJK}^v J_z^2 J^6 + L_J^v J^6 + [J_{xy}^2, l_K^v J_z^6 + l_{KJ}^v J_z^4 J^2 + l_{JK}^v J_z^2 J^4 + l_J^v J^6] + P_K^v J_z^{10} + [J_{xy}^2, p_K^v J_z^8], \quad (1)$$

где A^v, B^v, C^v - вращательные постоянные, связанные с колебательными состояниями v ; остальные параметры являются параметрами центробежного искажения различных порядков.

Исследуемый спектр дихлорметана также позволяет наблюдать сверхтонкую структуру спектральных линий, обусловленную эффектом квадрупольного расщепления. Данный эффект характерен для молекул, в состав которых входят ядра со значением спина больше, чем 1/2 (для Cl ядерный спин равен 3/2) [8, 9]. В настоящей работе определялись положения только центров мультиплетов, сверхтонкая структура будет проанализирована в дальнейшем.

В результате анализа проведена интерпретация вращательного спектра высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2^{35}\text{Cl}_2$ в диапазоне 0,075 – 1,090 ТГц, определены положения 1466 вращательных переходов, отнесенных к полосе ν_4 . Полученные данные необходимы для решения обратной спектроскопической задачи на основе модели эффективных операторов.

Список публикаций:

- [1] Sun, X. Removal of gaseous volatile organic compounds via vacuum ultraviolet photodegradation: Review and prospect // *Journal of Environmental Sciences*. 2023. Vol. 125. – P. 427-442.
- [2] Mitra, S. Organic Chlorides in Petroleum Crude Oil: Challenges for Refinery and Mitigations // *ChemBioEng Reviews*. 2022. Vol. 9. № 3. – P. 319-332.
- [3] Duncan, J. L. Methylene chloride: The mid-infrared spectrum of an almost vibrationally unperturbed molecule / J.L. Duncan, G.D. Nivellini, F. Tullini – Text : direct // *Journal of Molecular Spectroscopy*. 1986. Vol. 118. Methylene chloride. № 1. – P. 145-162.
- [4] Myers, R. J. The Microwave Spectra, Structure, Dipole Moment, and Chlorine Nuclear Quadrupole Coupling Constants of Methylene Chloride / R.J. Myers, W.D. Gwinn – Text : direct // *The Journal of Chemical Physics*. 2004. Vol. 120. № 9. – P. 1420-1427.
- [5] Tullini, F. The far-infrared spectrum of methylene chloride // *Journal of Molecular Spectroscopy*. 1989. Vol. 138. № 2. – P. 355-374.
- [6] Ulenikov, O. High-resolution spectroscopy of $\text{C}_2\text{H}_3\text{D}$: Line positions and energy structure of the strongly interacting $\nu_{10}, \nu_7, \nu_8, \nu_4$ and ν_6 bands // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2022. Vol. 279. – P. 121401
- [7] Watson, J. K. G. Determination of Centrifugal Distortion Coefficients of Asymmetric-Top Molecules / J.K.G. Watson – Text : direct // *The Journal of Chemical Physics*. 1967. Vol. 46. № 5. – P. 1935-1949.
- [8] Kisiel, Z. Nuclear quadrupole coupling in $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CHCl}$ and $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CH}_2$: Evidence for systematic differences in orientations between internuclear and field gradient axes for terminal quadrupolar nuclei / Z. Kisiel, E. Bialkowska-Jaworska, L. Pyszczkowski – Text : direct // *The Journal of Chemical Physics*. 1998. Vol. 109. № 23. – P. 10263-10272.
- [9] Mallick, P. K. Rotational Spectra / P.K. Mallick // *Fundamentals of Molecular Spectroscopy* / ed. P.K. Mallick. – Singapore: Springer Nature Singapore, 2023. – P. 13-53.

Фототок в PIN структурах на основе аморфного гидрогенизированного кремния с включениями нанослоёв германия

Чэн Юйчжу

Камаев Геннадий Николаевич, Попов Александр Афанасьевич, Володин Владимир Алексеевич
Новосибирский государственный университет

Володин Владимир Алексеевич, д.ф.-м.н.

chengyuzhu9@gmail.com

В настоящее время одним из эффективных способов реализации недорогих солнечных элементов и фотодетекторов на основе a-Si:H является использование PIN и NIP-структур с нановключениями из узкозонных полупроводников в нелегированный слой (I-слой). Например, в работе [1] была приготовлена периодическая многослойная структура nc-Ge:H (20 nm)/nc-Si:H (10 nm), содержащая нанокристаллы Ge размером около 5 нм. Благодаря экситонному поглощению света в нанокристаллах Ge, в NIP солнечном элементе на основе nc-Ge:H значительно усилился фотоотклик в диапазоне длин волн 1200–1450 нм. Недавно коллеги из Чехии создали PIN-диоды на основе a-Si:H с наночастицами германия и олова в I-слое и повысили

эффективность солнечных элементов [2]. Целью данной работы является исследование вольтамперных характеристик (ВАХ) PIN структур на основе аморфного гидрогенизированного кремния с включениями нанослоёв германия в темноте и при освещении видимым и инфракрасным (ИК) светом.

Образцы были получены методом плазмохимического осаждения (ПХО - PECVD). В качестве прекурсоров использовались газы SiH_4 , GeH_4 и H_2 , температура подложки составляла 220°C . Были выращены PIN структуры на основе аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) на подложках из стекла, покрытого прозрачным электродом (ITO). Всего было изготовлено три типа образцов – первый образец без включения германия, второй с включением трёх слоёв германия (рис. 1) и третий с включением толстого слоя германия (32 нм). Для изучения структурных свойств образцов использовалась спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Использовался спектрометр КРС T64000 (Horiba Jobin Yvon) с микро-рамановской установкой и твердотельным волоконным лазером (514,5 нм) в качестве источника возбуждения. Из спектра КРС образцов 2 и 3 было определено, что они содержат слои аморфного кремния и аморфного германия, кристаллических включений не наблюдалось. Из анализа спектров КРС также было определено, что содержание водорода составляло примерно 18-20 атомарных %. Для исследования ВАХ на образцы были нанесены верхние электроды из алюминия (рис. 1). ВАХ структур исследовались как в темноте, так и при освещении красным светодиодом, и при инфракрасным светодиодом (длина волны 940 нм) со стороны контакта ITO.

На рис.2 сравниваются темновой ток и фототок образцов, не содержащих (образец 1 - квадратики) и содержащих германий (образец 2 - треугольники). Во всех случаях ток регистрировался при обратном смещении 2 Вольта. Сначала измерялся темновой ток, потом инфракрасный светодиод включался на 25 секунд, затем цикл повторялся. Видно, что в обоих образцах фототок превышал темновой ток почти на порядок. Темновой ток в образце 2 с включениями германия почти на порядок больше чем в образце без германия (образец 1). Однако, фототок при освещении ИК-светом образца 2 с включениями германия почти на порядок больше чем в образце 1 без германия. Для образца 3 фототок при освещении ИК-светом также был больше чем для образца 1 (без германия).

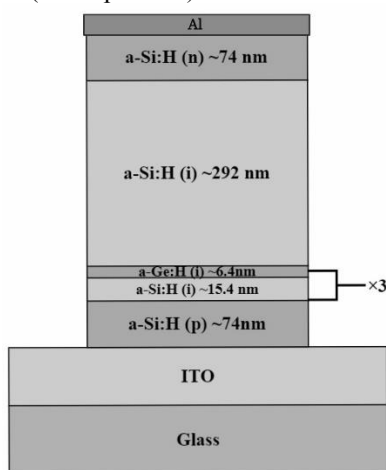


рис.1. Структура образца 2 - многослойная структура a-Ge/a-Si на подложке из стекла

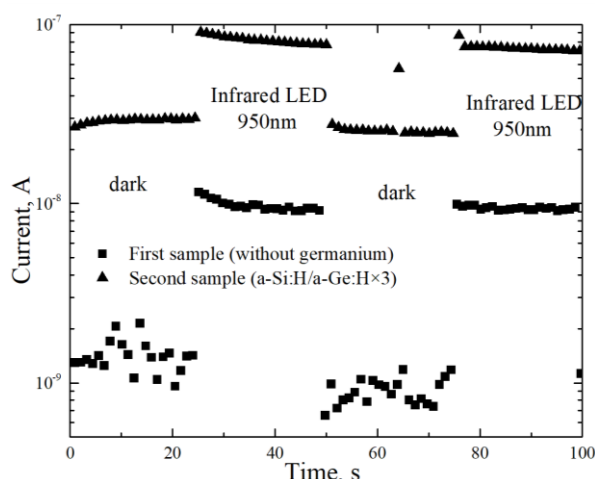


рис.2. Фототок (при освещении инфракрасным светодиодом (940 нм) со стороны ITO) и темновой ток в образцах 1 и 2

Стоит отметить, что во всех образцах при освещении возникала фото-ЭДС.

Итак, исследование фототока в PIN-структурах на основе аморфного гидрогенизированного кремния показало, что при освещении красным светом (поглощается в аморфном кремнии) фотоотклик больше для PIN-структуры, не содержащей слои германия. Однако, при освещении инфракрасным светом (940 нм – почти не поглощается в слоях аморфного кремния, но поглощается в слоях аморфного германия) фототок (при обратном смещении) больше для PIN-структур, содержащих слои германия. Таким образом, введение германия может расширить диапазон чувствительности фотодиодов в длинноволновую область. Возможно, что введение не сплошного слоя германия, а квантовых точек германия позволит увеличить чувствительность фотодиодов.

Работа выполнена при поддержке Министерства Образования и Науки РФ, проект FSUS-2024-0020.

Список публикаций:

- [1] Li C, Ni J, Sun X et al. // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017. № 50(4) P. 045108.
 [2] The Ha Stuchlikova, Zdenek REMES, Jiri STUCHLIK // *Nanocon*. 2018. P. 226-229.

Исследование структуры основанной на переходе металл-диэлектрик

в диоксиде ванадия

Яковлев Лев Алексеевич

Южный федеральный университет

Иванова Ирина Николаевна, к.ф.-м.н.

e-mail: liakovlev@sfedu.ru

Гибридные метаматериалы, которые демонстрируют реконфигурируемые реакции при воздействии внешних раздражителей, таких как электрические поля и световое излучение, были продемонстрированы только недавно путем сочетания активных сред с узорчатыми металлическими структурами. Тем не менее, гибридные терагерцовые (ТГц) метаматериалы, спектральные характеристики которых можно динамически настраивать в больших масштабах, остаются редкостью. По сравнению с большинством активных сред (например, кремнием), которые обладают ограниченной активностью, диоксид ванадия (VO₂), который проявляет переход диэлектрик-металл, недавно был исследован для создания динамически настраиваемых метаматериалов. Что еще более важно, фазовый переход приводит к увеличению ТГц электропроводности на три порядка, что говорит о потенциале создания гибридных резонаторов на основе VO₂, работающих на ТГц частотах.

Диоксид ванадия обладает свойством фазового перехода из полупроводника в металл при температуре 67 градусов Цельсия, это происходит из-за изменения структуры кристаллической решетки. Именно из-за этого свойства его применимость в электронике достаточно велика. В связи с тем, что свойство перехода диоксида ванадия из полупроводящего состояния в проводящее было объяснено только в 2018 году, данное направление исследований является достаточно новым и потенциально применимым в связи с тем, что обработка диоксида ванадия возможна на очень точном уровне, что позволит сделать электронные устройства ещё более компактными и энергоэффективными.

В данной работе исследуется возможность использования диоксида ванадия в дифракционных решётках (ДР) для управления ЭМ лучом. Были рассмотрены горячее и холодное состояние диоксида ванадия и исследованы отражающие и пропускающие свойства такой ДР в диапазоне частот от 0,1 до 3 ТГц.

В качестве метода исследования было использовано численно-аналитическое решение объемных интегральных уравнений для задач дифракции электромагнитных волн на диэлектрических телах. Для анализа полученных данных и построения графиков была использована программа Origin.

На полученных графиках можно отчетливо увидеть, что структура в холодном состоянии проявляет малоотражающие свойства, при этом с увеличением угла падения ЭМ луча коэффициент отражения увеличивается. Пик коэффициента пропускания приходится на частоту около 2,5 ТГц.

В горячем состоянии на малых частотах структура является проводящей, с увеличением частоты дифракционная решётка становится отражающей с коэффициентом отражения достигающим приблизительно 0,8.

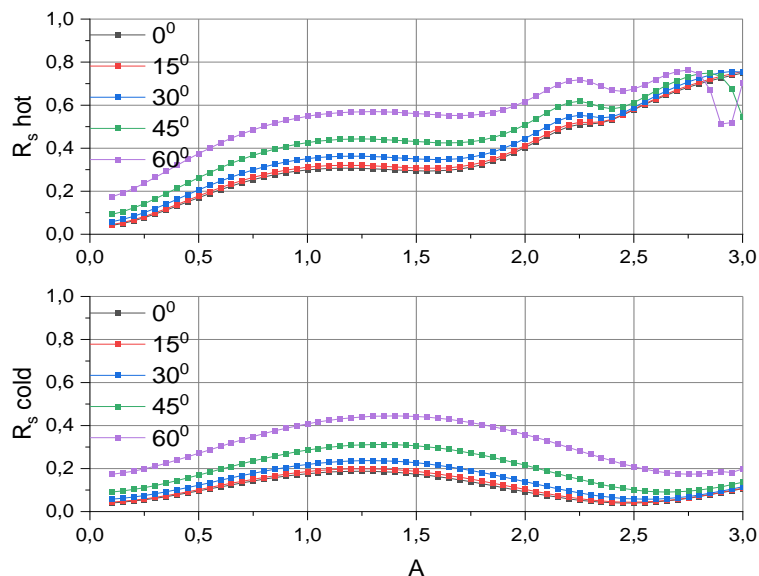


рис. 1 Зависимость коэффициента отражения от частоты

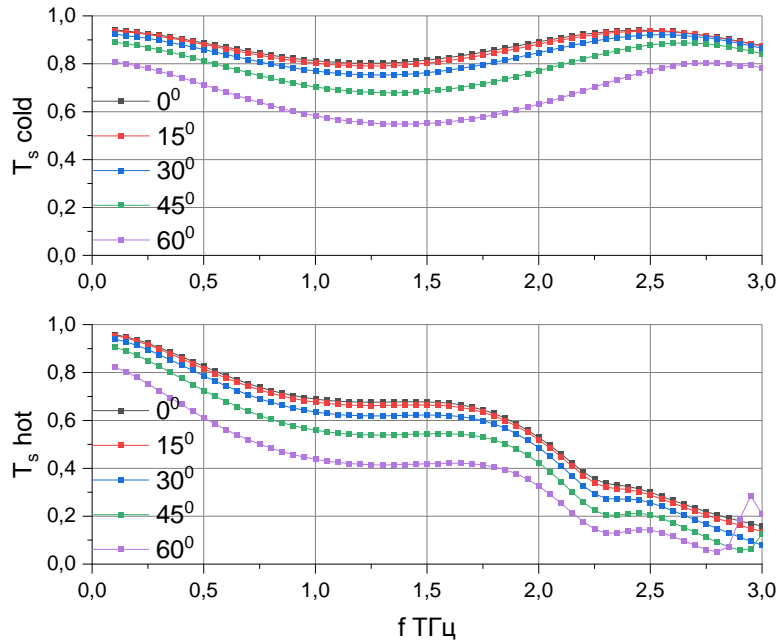


рис. 2 зависимость коэффициента пропускания от частоты

Таким образом, в проанализированной структуре можно получать отражающие или пропускающие свойства для определённого спектра частот, однако если изменить линейную структуру ДР можно получить подобный эффект для другого частотного спектра что позволяет индивидуальным образом настраивать полосу пропускания и отражения для определённых задач. Также необходимо отметить, что в связи с тем, что угол падения не может быть идеально равен запланированному значению, то могут возникать дополнительные потери при отражении или пропускании сигнала.

Список публикаций:

- [1] Shao, Z. W., Cao, X., Luo, H. & Jin, J. P. Recent progress in the phase-transition mechanism and modulation of vanadium dioxide materials. *NPG Asia Mater.* 10, 581–605 (2018).
 [2] Yang, J. J., Strukov, D. B. & Stewart, D. R. Memristive devices for computing. *Nat. Nanotechnol.* 8, 13–24 (2013).

Зависимость дозы введения апконверсионных наночастиц с изменениями оптических параметров опухоли

Янина Ирина Юрьевна

Дарья Кирилловна Тучина, Екатерина Николаевна Лазарева, Роман Андреевич Анисимов, Мария Владимировна Ломова, Анна Алексеевна Доронкина, Артем Михайлович Мыльников, Никита Александрович Наволокин, Вячеслав Иванович Кочубей

Саратовский национальный исследовательский государственный университет

имени Н.Г. Чернышевского

Янина Ирина Юрьевна

irina-yanina@yandex.ru

В настоящее время традиционные методы лечения онкологических больных, несмотря на достижения в хирургии, использование совершенной техники для лучевой терапии, а также наличия множества средств и способов лекарственной терапии, не могут полностью удовлетворить требования клинической практики, поскольку близки к пределу своих возможностей. Каждому методу свойственны свои достоинства, недостатки и ограничения. Все это заставляет специалистов всего мира искать другие пути в диагностике и лечении онкологических больных. Одним из таких новых методов, показавшим свою перспективность в последние годы является фотодинамическая терапия.

Одним из перспективных материалов для развития методов фотодинамической терапии являются функционализированные апконверсионные наночастицы (АКНЧ), которые позволяют не только повысить эффективность терапии, но и расширить диагностический инструментарий. Сшивка фотодинамического красителя с оболочкой наночастиц требует дополнительного покрытия их поверхности. Покрытия частиц

сывороточным альбумином (СА) биосовместимы со многими типами клеток в широком диапазоне концентраций [1], легко усваиваются клетками [1, 2], неиммуногенны и имеют длительный период полураспада в кровотоке [3, 4]. Одним из этапов клинических исследований новых препаратов является, в частности, определение наиболее эффективной дозы, кратности введения [5].

Существуют некоторые проблемы при использовании фотосенсибилизатора (ФС), такие, как неспецифичное распределение их в организме и гидрофобность некоторых препаратов. Также к поверхности наночастиц могут быть присоединены нацеливающие агенты, позволяющие избирательно направлять их к определенным клеткам. В качестве нацеливающего агента может использоваться фолиевая кислота (ФК) [6-8]. В результате создается лекарственный препарат, специфичный для раковых тканей. Наряду с различием проницаемости кровеносных сосудов нормальных тканей и опухолей, создающим возможность пассивного накопления наночастиц в опухоли, создание функционализированных наночастиц позволяет повысить эффективность терапии [9].

Интерес представляет разработка методики получения наноконтейнеров, содержащих как фотосенсибилизатор, так и, например, АКНЧ [10, 11]. Применение АКНЧ позволит расширить область применения фотосенсибилизатора, за счет увеличения глубины проникновения света в биологические ткани.

Целью данного исследования было проведение сравнительного исследования влияния введения АКНЧ+ЧСА, и АКНЧ+ЧСА+ФК, на оптические параметры биологических тканей в области развития опухоли в зависимости от кратности введения

Измерения спектров полного и коллимированного пропускания, а также диффузного отражения биологических тканей крысы в области привития опухоли проводилось в спектральном диапазоне 380-2000 нм на спектрофотометре Lambda Perkin (Япония). Для обработки результатов экспериментов и определения оптических параметров использовался инверсный метод Монте-Карло [12, 13].

На рис. 1 представлено СЭМ-изображения синтезированных нами АКНЧ $\text{NaYF}_4: \text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}$.

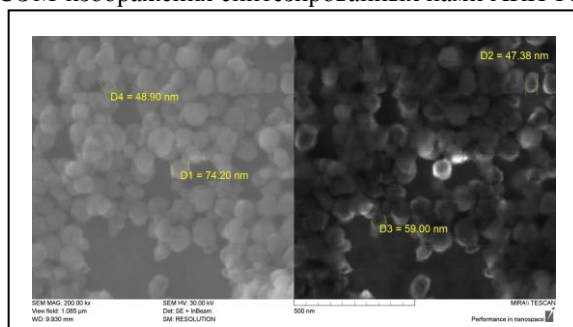


рис.1. СЭМ-изображения частиц $\text{NaYF}_4: \text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}$

Данные об оптических свойствах тканей дают информацию о структурных изменениях, происходящих с биотканями и их компонентами, что необходимо учитывать при выборе терапии, дозе облучения, кратности введения препарата.

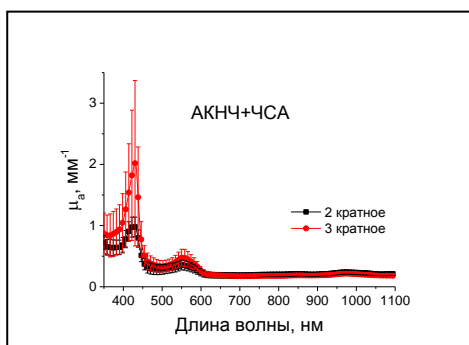


рис.2. Спектры поглощения опухолевой ткани для группы животных, которым вводились АКНЧ+ЧСА при 2х и 3х кратном внутривенном введении.

В спектрах поглощения опухолевой ткани наблюдается рост полос поглощения дезоксигемоглобина на 423 и 553 нм при увеличении кратности введения АКНЧ+ЧСА.

В данном исследовании показано изменение оптических параметров, таких как коэффициент поглощения, коэффициент рассеяния, коэффициент анизотропии, биологических тканей до и после введения АКНЧ, взятых из зоны развития опухоли в зависимости от кратности введения. При введении АКНЧ+ЧСА

частиц наблюдался рост кровенаполнения тканей опухоли, в отличие от АКНЧ+ЧСА+ФК частиц, с ростом кратности введения. С ростом поглощения в полосах воды рассеяние уменьшается. Также с учетом токсического эффекта на органы и развития обратимых изменений в органах от введения частиц, наиболее целесообразным можно считать двукратное введение.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-10057, <https://rscf.ru/project/21-72-10057/>

Список публикаций:

- [1] Michaelis K., Hoffmann M. M., et al. // *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 2006. V.31.P.1246.
- [2] Irache J. M., Merodio M., et al. // *Mini Rev. Med. Chem.* 2005. V.5. P. 293.
- [3] Loureiro A., Azoia N. G., et al. // *Curr. Pharm. Des.* 2016. V. 22. 1371.
- [4] An F. F., Zhang X. H. // *Theranostics.* 2017. V. 7.P. 3667.
- [5] *Качественная клиническая практика с основами доказательной медицины. Учебное пособие для системы послевузовского и дополнительного профессионального образования врачей / Под общей редакцией академика РАМН, профессора Р.Г.Оганова.– М.: СилуцияПолиграф, 2011. – 136 с.*
- [6] Zhang F. / *Springer.* 2016. 428 p.
- [7] Stella V., Arpicco S., et al. // *J. Pharm. Sci.* 2000. V. 89.No 11. P. 1452.
- [8] Сагайдачная Е. А., Янина И. Ю., Кочубей В. И. // *Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика.* 2018. Т. 18. вып. 4. С. 253.
- [9] Obaid G., Russell D. A. / in *Handbook of Photomedicine*, ed. M. R. Hamblin and Y.-Y. Huang, Taylor & Francis, CRC Press, Boca Raton, FL. 2013. P. 367.
- [10] Wang C., Cheng L., Liu Z. // *Theranostics.* 2013. V. 3. P. 317.
- [11] Lee S. Y., Lee R., et al., *Front Bioeng Biotechnol.* 8, 275 (2020).
- [12] Башкатов А.Н., Генина Э.А., Кочубей В.И., Рубцов В.С., Колесникова Е.А., Тучин В.В. // *Кв. Элек.* 2014. Т. 44. № 8. С. 779.
- [13] Башкатов А.Н., Генина Э.А., Козинцева М.Д., Кочубей В.И., Городков С.Ю., Тучин В.В. // *Опт. спектр.* 2016. Т. 120. № 1. С. 6.

