

Труды XXIX научной конференции по радиофизике

**СЕКЦИЯ  
«ОБЩАЯ ФИЗИКА»**

Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.

**БИМОЛЕКУЛЯРНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ  
CH<sub>4</sub>-CH<sub>4</sub>, CH<sub>4</sub>-N<sub>2</sub> И CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> В ММ ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН****А.О. Королева<sup>1</sup>, Т.А. Галанина<sup>1</sup>, И.С. Амерханов<sup>1,2</sup>, Е.А. Серов<sup>1</sup>,  
А.Ю. Секачева<sup>1,2</sup>, М.А. Кошелев<sup>1</sup>, М.Ю. Третьяков<sup>1</sup>**<sup>1</sup>) ИИФ РАН<sup>2</sup>) ННГУ им. Н. И. Лобачевского

Современные исследования [1, 2] указывают на необходимость прецизионных измерений континуального поглощения метана, которые бы соответствовали возрастающим требованиям к точности описания радиационных и климатических свойств атмосфер планет. Метан служит одним из основных биомаркеров в поиске обитаемых экзопланет, так как его спектральные сигналы могут указывать на потенциальную биологическую активность [1]. В то же время метан, как парниковый газ, способен стабилизировать температуру на поверхности планет, создавая условия для существования жидкой воды даже в системах с низкой инсоляцией [2].

Континуальное поглощение возникает из-за того, что молекулы в реальном газе могут взаимодействовать между собой. Так как для планетарных условий тройным и более взаимодействием молекул можно пренебречь, в континуальное поглощение  $\alpha_{cont}$  вносят вклад только парные взаимодействия. В частности, из-за этого возникают отклонения формы крыльев линий от теоретических профилей, рассчитанных в ударном приближении, а также образуются поглощающие излучение молекулярные пары (их спектр называют бимолекулярным поглощением). Изучение поглощения неполярных молекул в области рототрансляционной полосы позволяет выделить вклад бимолекулярного поглощения в континуум, что важно для построения его физически обоснованной модели.

Целью данной работы является экспериментальное исследование бимолекулярного поглощения метана и его смеси с другими неполярными молекулами (N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>) в частотном диапазоне от 70 до 350 ГГц при комнатной температуре на резонаторном спектрометре [3]. Измерения проводились в соответствии с подходом из нашей предыдущей работы [4]. Слабое поглощение чистого CH<sub>4</sub> оказалось измеримо только при максимально возможном давлении для имеющейся установки в 1500 Торр. Поглощение смесей газов было записано при разных относительных концентрациях компонент смеси для проверки зависимости наблюдаемого поглощения от давления (максимальное давление смеси 1227–1444 Торр).

Главным отличием спектра метана от спектров N<sub>2</sub> и CO<sub>2</sub> в исследуемом мм диапазоне является наличие резонансного спектра  $\alpha_{res}$ , возникающего из-за появления дипольного момента при несферической деформации молекулы и из-за специфических вырожденных колебаний [5]. Он моделировался с помощью профиля Ван-Флека–Хубера [6] с параметрами из базы данных HITRAN [7]. Этот профиль линии работает при отстройках частоты от центра линии, много меньшей, чем  $1/2\pi\tau_c$ , где  $\tau_c$  – длительность соударения, что составляет 5 см<sup>-1</sup> для молекул метана. Однако при исследованиях континуума, как правило, крылья линий обрезаются при отстройках частоты от центра линии в 25 см<sup>-1</sup> [8]. Континуум  $\alpha_{cont}$  определялся на основе экспериментальных данных  $\alpha_{total}$  следующим образом:

$$\alpha_{cont} = \alpha_{total} - \alpha_{res}. \quad (1)$$

Континуум складывается из поглощения, обусловленного взаимодействием молекул  $\text{CH}_4$  друг с другом  $\alpha_{\text{CH}_4-\text{CH}_4}$  и с молекулами буферного газа  $\alpha_{\text{CH}_4-Y}$  ( $Y - \text{N}_2$  или  $\text{CO}_2$ ), а также молекул буферного газа друг с другом  $\alpha_{Y-Y}$ :

$$\alpha_{cont}(f, n) = \alpha_{\text{CH}_4-\text{CH}_4}(f, n) + \alpha_{\text{CH}_4-Y}(f, n) + \alpha_{Y-Y}(f, n), \quad (2)$$

где  $f$  – частота источника излучения,  $n$  – концентрация взаимодействующих молекул. Данные о коэффициентах континуума  $\text{CO}_2$  и  $\text{N}_2$  взяты из [9, 4].

Полученные в эксперименте спектры поглощения  $\text{CH}_4-\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_4-\text{N}_2$  и  $\text{CH}_4-\text{CO}_2$  представлены на рис. 1 серым. Измерения в двух частотных диапазонах хорошо согласуются друг с другом. Красная линия – результат усреднения экспериментальных данных; сплошные линии соответствуют резонансному спектру метана (тёмно-зелёный) и поглощению неизбежной микропримеси воды (синий). Пунктирные линии показывают сравнение с поглощением  $\text{CH}_4$  (светло-зелёный),  $\text{N}_2$  (чёрный) [4] и  $\text{CO}_2$  (фиолетовый) [9].

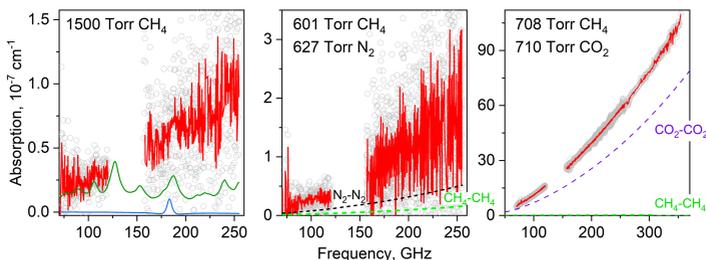


Рис. 1

Несмотря на то, что поглощение чистого метана мало, его взаимодействие с молекулами  $\text{CO}_2$  оказывается значительно более эффективным, а поглощение смеси существенно превышает поглощение чистого  $\text{CH}_4$  (рис. 2).

Величина континуального поглощения пропорциональна произведению концентраций взаимодействующих молекул:

$$\alpha_{X-Y}(f, n) = C_{X-Y}(f) n_X n_Y, \quad (3)$$

где  $X$  и  $Y$  – молекулы взаимодействующих газов,  $C$  – нормированный на концентрации коэффициент поглощения.

Для исследования частотной зависимости производится нормировка на общий для всех типов поглотителей в исследуемом диапазоне радиационный член  $f^2$ :

$$S_{X-Y}(f) = \frac{C_{X-Y}(f)}{f^2}. \quad (4)$$

Спектральные функции  $S_{\text{CH}_4-\text{CH}_4}$ ,  $S_{\text{CH}_4-\text{N}_2}$  и  $S_{\text{CH}_4-\text{CO}_2}$  представлены на рис. 2. Красные символы – результаты экспериментальных измерений. Серые сплошные линии – результаты теоретических расчётов квантовыми методами для чистого метана [10], методом классических траекторий для смеси метана с азотом [11] и результаты

упрощённого моделирования, основанного на нулевом спектральном моменте, для смеси  $\text{CH}_4\text{-CO}_2$  [2].

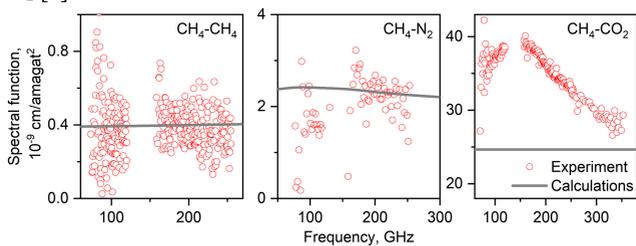


Рис. 2

Согласие спектральной функции измеренного континуума с расчетом бимолекулярного поглощения (в пределах уровня шума) говорит о том, что именно оно является доминирующим механизмом формирования поглощения чистого метана и его смеси с неполярными газами  $\text{N}_2$  и  $\text{CO}_2$ . Заметное отличие спектральной функции  $\text{CH}_4\text{-CO}_2$  от квадратичной может свидетельствовать о вкладе димеров в наблюдаемое поглощение аналогично случаю  $\text{CO}_2\text{-Ar}$  [9]. Хотя из-за отсутствия физически обоснованной модели дальнего крыла линии точная оценка вклада крыльев линий в континуум затруднительна, изменение отстройки, на которой обрезаются крылья линий, с 25 до  $5\text{ см}^{-1}$  изменяет его не более чем на 10%, то есть в пределах уровня экспериментального шума. Для смесей  $\text{CH}_4$  с азотом и углекислым газом вклад крыльев линий в континуум тем более будет пренебрежим из-за меньшей доли поглощения  $\text{CH}_4$  в полном поглощении.

Полученные в ходе данной работы спектры не только представляют практический интерес для задач дистанционного зондирования атмосфер планет с целью обнаружения возможной жизни, но также являются необходимым этапом на пути к теоретически обоснованной модели континуального поглощения и могут быть использованы для валидации расчётов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проекта FFUF-2024-0016).

- [1] Yasuto Watanabe and Kazumi Ozaki // *Astrophysical Journal*. 2024. Vol. 961. no. 1.
- [2] Wordsworth R., et al. // *Geophys. Res. Lett.* 2024. Vol. 44. P. 665.
- [3] Koshelev M.A., et al. // *IEEE Trans. Terahertz. Sci. Technol.* 2018. Vol. 8. I. 6. P. 773.
- [4] Serov E.A. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2024. Vol. 328. P. 109172.
- [5] Aliev M.R. and Watson J.K.G. // *Molecular Spectroscopy: Modern Research*. 1985. Vol. 3 / Ed. by K. N. RAO – New York, N.Y.: Academic Press.
- [6] Van Vleck J.H., Huber D.L. // *Rev. Mod. Phys.* 1977. Vol. 49, no. 4. P. 939.
- [7] Gordon I.E. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 2022. Vol. 277. P. 107949.
- [8] Mlawer E. J. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2023. Vol. 306. P. 108645.
- [9] Odintsova T. A., et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.* 2021. Vol. 258. P. 107400.
- [10] Borysow A., Frommhold L. // *Astrophysical Journal*. 1987. Vol. 318. P. 940.
- [11] Finenko A. et al // *Astrophysical Journal*. 2021. Vol. 258. P. 33.

## О ПОСТОЯННОЙ ВО ВРЕМЕНИ СИЛЕ РЕАКЦИИ ВОЛНОВОГО ПОЛЯ НА ГРАНИЦУ

В.В. Арабаджи

ИПФ РАН

Известно множество работ [1–4] о возможности переноса механического импульса волнами разной физической природы. Ниже этот вопрос рассматривается, но в более простой формулировке: в каких типах краевых задач возникает постоянная во времени сила, действующая на излучающую (рассеивающую) на частоте  $\omega = \omega_0 > 0$  границу  $S_0$  либо одного тела (рис. 1), либо двух тел **A**, **B** (рис. 2), либо плоскости (рис. 4–7)? Поэтому нужно найти какой-либо физический механизм переноса спектральной плотности мощности в  $\omega = 0$ , например: нелинейность среды [3], модуляция во времени граничных условий на излучающей (рассеивающей) поверхности [2], [4], действие падающей волны на сторонний ток той же частоты [5].

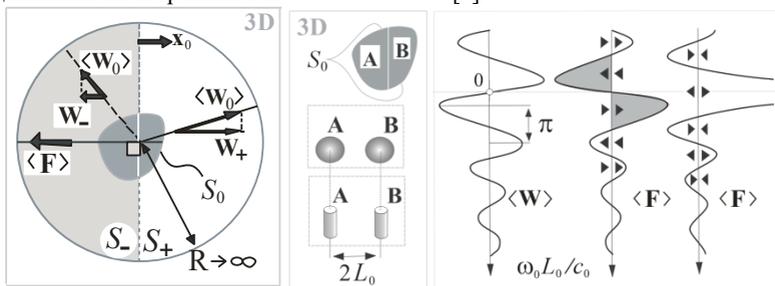


Рис. 1

Рис. 2

Рис. 3

Постоянную силу реакции поля на границу можно интерпретировать макроскопически (как следствие анизотропного излучения (рассеяния) в дальней зоне [1]) и микроскопически через подробное описание сил, действующих непосредственно на границу  $S_0$  (излучающую или рассеивающую). В [5] на примере двух пульсирующих (с начальными фазами  $\varphi_{A,B}$ ) сфер на частоте  $\omega_0$  и двух элементов электрического тока (рис. 2) показана одинаковая зависимость средней (на периоде  $2\pi/\omega_0$ ) силы волновой тяги  $\langle \mathbf{F} \rangle = (W_+ - W_-)\mathbf{x}_0$  ( $\ll, \gg$  при  $\varphi_A - \varphi_B = \pi/2$ , рис. 3) от средней разности потоков мощности вперед и назад  $W_{\pm} = \int \int \langle \mathbf{W}_0 \rangle \cdot \mathbf{n}_0 dS_{\pm}$  и от волнового расстояния  $\omega_0 L_0 / c_0$  между малыми антеннами **A** и **B** (на расстоянии  $2L_0$  друг от друга), где  $c_0$  – фазовая скорость волны,  $\langle \mathbf{W}_0 \rangle$  – средняя по времени поверхностная плотность потока мощности,  $\mathbf{n}_0$  – единичная нормаль к сфере  $S_R$  (разделенной на полусферы  $S_+$ ,  $S_-$ ) с радиусом  $R \rightarrow \infty$ , которая окружает границу  $S_0$ . При  $\varphi_A - \varphi_B = 0$  вместо силы тяги появляются силы притяжения-отталкивания ( $\langle >, \langle < \rangle$ ) между **A** и **B**. Сила  $\langle \mathbf{F} \rangle$  (как и потоки мощности падающей, излучаемой или рассеиваемой волн), т.е.  $F, \mathbf{W}_{in}, \mathbf{W}_{rad}, \mathbf{W}_{scat} \sim [\cos(\omega_0 t)]^2$  – это произведение двух видов поля на частоте  $\omega_0$ . Рисунок 3 представляет безразмерные зависимости силы волновой тяги и сил отталкивания (притяжения) пульсирующих сфер (линейных токов). Размерность силы этим графикам придают

коэффициенты  $q_a = 2\pi k_0^2 a_0^4 \rho_0 V_0^2$  (акустическая задача) и  $q_e = I_0^2 \ell_0^2 k_0^2 \mu_0 / 4\pi$  (электродинамическая задача). Здесь  $k_0$  – волновое число,  $a_0$  – радиус сферы,  $\rho_0$  – плотность массы среды,  $V_0$  – амплитуда скорости пульсаций сфер,  $I_0$  – амплитуда элемента электрического тока,  $\ell_0$  – длина элемента тока,  $\mu_0$  – магнитная постоянная вакуума.

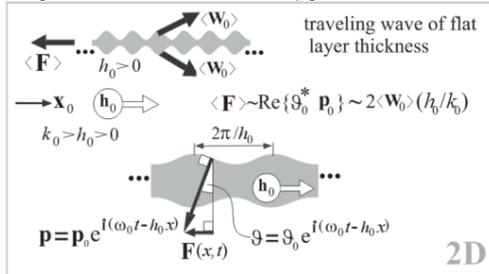


Рис. 4

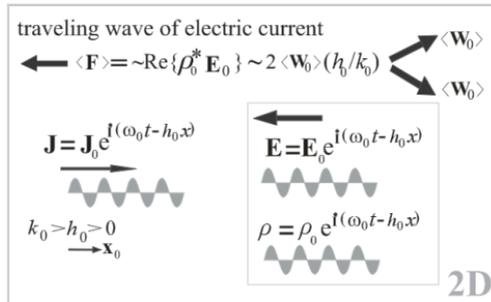


Рис. 5

В случае скользящих волн [6] бегущая волна толщины  $d(x, t) = d_0 \exp(i\omega_0 t - ih_0 x)$  (рис. 4) бесконечной плоской пластины и волна тока  $\mathbf{J}(x, t)$  (рис. 5) возбуждают волну локальных наклонов  $\vartheta(x, t)$  плоской поверхности и волну зарядов  $\rho(x, t) = \rho_0 \exp(i\omega_0 t - ih_0 x)$  (а также тангенциального электрического поля  $\mathbf{E}$ ) соответственно, порождая постоянную во времени тангенциальную силу  $\langle \mathbf{F} \rangle$ .

Для 1D электромагнитной задачи рассмотрим следующие три сценария для силы реакции поля:

(а) из области  $z < 0$  на плоскость  $z = 0$  падает (рис. 5) волна с электрическим  $\mathbf{E}_{in}$  и магнитным  $\mathbf{H}_{in}$  полями со средней плотностью потока мощности  $\langle \mathbf{W}_{in} \rangle$ . Электрический сторонний (прозрачный) плоский ток  $\mathbf{J}_e$  порождает электрическое  $\mathbf{E}_e$  (и магнитное  $\mathbf{H}_e$ ) поле. При токе  $\mathbf{J}_e = [\mathbf{z}_0 \times \mathbf{H}_{in}]$  имеем  $\mathbf{E}_{in} + \mathbf{E}_e = 0$ ,  $\mathbf{H}_{in} + \mathbf{H}_e = 0$  при  $z > 0$ , и стоячую волну при  $z < 0$  со средним потоком мощности  $\langle \mathbf{W}_{\Sigma} \rangle = 0$ . Падающая волна действует на ток  $\mathbf{J}_e$  силой Ампера  $\langle \mathbf{F}_e \rangle = 2 \langle \mathbf{W}_{in} \rangle (\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$  ( $\epsilon_0$ ,  $\mu_0$  – диэлектрическая и магнитная постоянные вакуума).

(б) **Односторонний излучатель** (источник Гюйгенса (ИГ), рис. 7) образован двумя взаимно перпендикулярными сторонними токами на плоскости  $z = 0$ : электрическим током  $\mathbf{J}_e$ , порождающим поля  $\mathbf{E}_e, \mathbf{H}_e$ , и магнитным током  $\mathbf{J}_m$ , порождающим поля  $\mathbf{E}_m, \mathbf{H}_m$ . При соотношении модулей  $J_m/J_e = (\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$  в области  $z > 0$  поля токов  $\mathbf{J}_e$  и  $\mathbf{J}_m$  складываются в фазе, а в области  $z < 0$  взаимно компенсируются ( $\mathbf{J}_{e,m} = |\mathbf{J}_{e,m}|$ ). Одновременно  $\mathbf{H}_m, \mathbf{E}_e$  действуют на токи  $\mathbf{J}_e, \mathbf{J}_m$  силами  $\mathbf{F}_{Ae} = \mu_0 [\mathbf{J}_e \times \mathbf{H}_m]$  и  $\mathbf{F}_{Am} = \epsilon_0 [\mathbf{E}_e \times \mathbf{J}_m]$  соответственно, что дает суммарную среднюю силу  $\langle \mathbf{F}_\Sigma \rangle = \langle \mathbf{F}_{Ae} + \mathbf{F}_{Am} \rangle = -\langle \mathbf{W}_\Sigma \rangle > (\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$ , где  $\langle \mathbf{W}_\Sigma \rangle$  – поток излучения ИГ.

(в) **Поглощение падающей волны ИГ.** При  $J_m/J_e = (\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$  токи ИГ создают при  $z < 0$  поле  $\mathbf{E} = 0, \mathbf{H} = 0$ , а при  $\mathbf{J}_m = \mathbf{E}_{in}/2, \mathbf{J}_e = \mathbf{H}_{in}/2$  эти токи создают при  $z > 0$  плоскую волну  $-\mathbf{E}_{in}, -\mathbf{H}_{in}$ , убегающую от  $z = 0$  (рис. 7). Складываясь с падающей волной  $\mathbf{E}_{in}, \mathbf{H}_{in}$ , поле ИГ создает нулевое поле при  $z > 0$ , т.е. ИГ поглощает падающую волну. Поле падающей волны действует на токи ИГ  $\mathbf{J}_m, \mathbf{J}_e$  силой Ампера  $\langle \mathbf{F}_2 \rangle = \langle \mathbf{W}_\Sigma \rangle > (\mu_0 \epsilon_0)^{1/2}$ , а полная сила действия полей ИГ и падающей волны на токи равна нулю:  $\langle \mathbf{F} \rangle = \langle \mathbf{F}_1 \rangle + \langle \mathbf{F}_2 \rangle = 0$ .

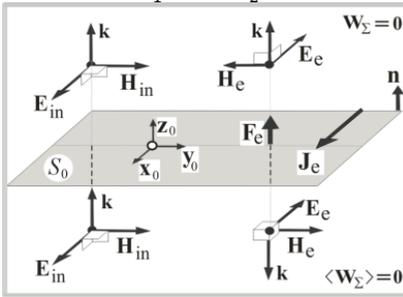


Рис. 6

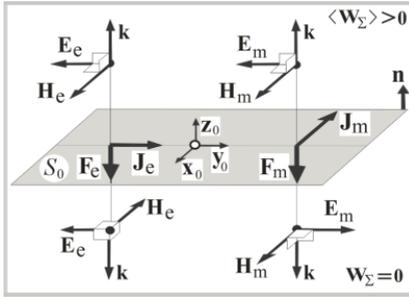


Рис. 7

Отметим, что в 1D задаче (без дифракции) для звуковых волн в невязкой сжимаемой среде постоянная во времени сила реакции не возникает даже для односторонне излучающего (безопорного на всех частотах, включая нулевую) ИГ [6].

Эксперимент с волнами на поверхности воды. Для экспериментального подтверждения постоянной во времени силы реакции волнового поля на границу была построена модель (см. рис. 8) из двух отдельных параллельных жестко скрепленных одинаковых поплавков А, В [5]. На них размещены одинаковые синхронные электроприводы, вращающие с заданной частотой  $f$  на осях одинаковые грузы так, что фазы  $\varphi_{A,B}$  вертикальных колебаний сил инерции, действующих на А, В, отличаются на  $\pi/2$ , а горизонтальные составляющие сил инерции взаимно компенсируются. Колебания глубины погружения поплавок одновременно генерируют волны и модулируют рассеяние волн соседнего поплавок, что при соответствующей разности фаз приводит к ненулевой средней силе действия поля на поплавок. Максимум  $\langle F \rangle \approx 0.02$  Н силы волновой тяги был обнаружен на частоте  $f \approx 1.14$  Гц вращения грузов при фиксации модели по

горизонтالي, а без фиксации модель достигала поступательной скорости  $V \approx 1.14$  м/с. При фиксации модели по горизонтали (при  $f \approx 1.14$  Гц) было обнаружено стационарное вихревое течение с максимальной скоростью  $U \approx 0.023$  м/с. При смене направления вращения грузов величины  $\langle F \rangle$ ,  $V$ ,  $U$  также меняли знак.

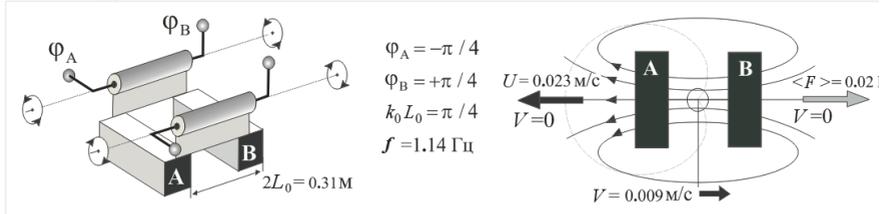


Рис. 8

Преобразование частоты излучения или рассеяния в нулевую частоту (постоянную силу) происходит во всех приведенных примерах краевых задач.

В акустических задачах для преобразования частоты необходима модуляция рассеяния, а в рассмотренных выше электромагнитных задачах рассеяние (на стороннем токе) не происходит вообще.

Кроме того, в задачах с волнами в жидкости или газе экспериментально обнаружена прямая связь постоянной силы волновой тяги с возникающим реактивным течением.

Показано, что в одномерной задаче поглощения падающей электромагнитной волны источником Гюйгенса полная постоянная сила реакции поля на ИГ равна нулю.

Работа выполнена в Институте прикладной физики РАН в соответствии с госзадачей **FFUF-2024-0035**.

- [1] Lebedew P. // Annalen der Physik. 1901. Vol. 4, no. 6. P. 433.
- [2] Bjerknæs C.A. Hydrodynamische Fernkräfte. — Leipzig: Verlag von Wilhelm Engelmann, 1915.
- [3] Denisov G.G. // Acoustical Physics. 2000. Vol. 46, no. 3. P. 340.
- [4] Doinikov A. // Phys Rev E. 64.026301. 2001. Jul 16.
- [5] Arabadzhi V. // London Journal of Engineering Research. 2024. Vol. 24, no. 8, P. 51.
- [6] Arabadzhi V. // Journal of Applied Mathematics Computation. 2023. Vol. 7, no. 4. P. 426.
- [7] Арабаджи В.В. // Акустический Журнал. 2009. Т. 55, № 1. С. 104.

## СРАВНЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ ДЛЯ ОПТИКО-ТЕРАГЕРЦОВОЙ КОНВЕРСИИ: LiTaO<sub>3</sub> И LiNbO<sub>3</sub>

С.Б. Бодров<sup>1,2)</sup>, М.В. Сарафанова<sup>1)</sup>, А.И. Шугуров<sup>1)</sup>, М.И. Бакунов<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИПФ РАН

### Введение

Кристаллы с большой квадратичной нелинейностью LiNbO<sub>3</sub> (LN) и LiTaO<sub>3</sub> (LT) широко применяются в нелинейной оптике, в том числе для генерации терагерцового излучения методом оптического выпрямления фемтосекундных лазерных импульсов. В современных схемах терагерцовой генерации – с накачкой скошенными лазерными импульсами [1] или на основе черенковского синхронизма [2] – в основном используется кристалл LN, а в качестве накачки – излучение титан-сапфирового лазера с длиной волны 800 нм. При этом одним из основных факторов, приводящих к насыщению эффективности оптико-терагерцовой конверсии при высоких интенсивностях накачки, является трехфотонное поглощение лазерного излучения в кристалле. Поскольку ширина запрещенной зоны у LT (4,9 эВ) больше, чем у LN (3,8 эВ), трехфотонное поглощение излучения на 800 нм в LT должно быть подавлено, и можно ожидать, что LT мог бы быть предпочтительнее LN в качестве кристалла-конвертора [3]. Недавно, однако, трехфотонное поглощение на длине волны 800 нм было экспериментально обнаружено и в LT, причем более сильное, чем в LN [4]. В связи с этим возникает вопрос о соотношении потенциальных возможностей LT и LN в качестве нелинейных кристаллов для оптико-терагерцовой конверсии.

В данной работе выполнено прямое экспериментальное сравнение терагерцовой генерации в LT и LN при двух длинах волн накачки: 800 нм и 1030 нм. Использовалась схема с черенковским излучением терагерцовых волн и их выводом через боковую грань кристалла, что позволило минимизировать влияние различного терагерцового поглощения в кристаллах на сравнение их нелинейных свойств.

### Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Использовались кристаллы с близкими размерами: толщиной 1 мм (LT) и 0,5 мм (LN) и длиной 9 и 8 мм соответственно. Ширина обоих кристаллов (размер в перпендикулярном к плоскости рис. 1 направлении) 15 мм. Луч накачки вводился в кристалл под небольшим углом  $\alpha$  к его боковой грани. Терагерцовое излучение выводилось в воздух через приклеенные к кристаллам кремниевые призмы с углом при основании, равным черенковскому углу. С помощью параболического зеркала (ПЗ)

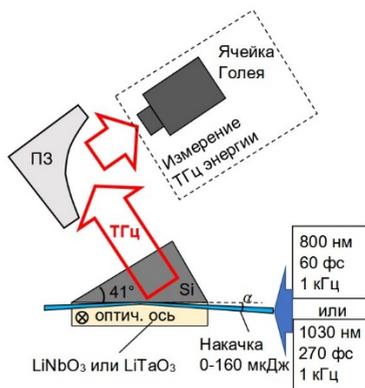


Рис. 1

терагерцовое излучение направлялось либо в ячейку Голя для измерения энергии излучения, либо на схему электрооптического стробирования волновой формы терагерцовых импульсов (не показана на рис. 1). Для накачки использовались как спектрально ограниченные, так и отрицательно chirпированные импульсы.

### Результаты

На рис. 2 и 3 представлены зависимости эффективности оптико-терагерцовой конверсии в LN и LT от энергии импульса накачки при длине волны накачки 800 и 1030 нм соответственно. Для всех зависимостей характерно наличие начального линейного участка и последующего насыщения, связанного с влиянием многофотонного поглощения. Большая энергия насыщения для LT по сравнению с LN на рис. 2 противоречит выводу работы [4] о более сильном трехфотонном поглощении в LT. Большую крутизну линейного участка для LN по сравнению с LT на рис. 2 можно объяснить влиянием кинематического фактора  $(n_{\text{THz}}^2 - n_g^2)^{-2}$ , который входит в выражение для энергии черенковского излучения [5]. При примерно одинаковом значении индекса группового запаздывания  $n_g \approx 2,2$  существенно различном показателе преломления терагерцовых волн  $n_{\text{THz}} \approx 6,4$  в LT и 4,9 в LN данный фактор примерно в 3 раза больше для LN. Крутизна линейных участков на рис. 3 больше, чем на рис. 2, что можно объяснить большей длительностью импульса накачки на 1030 нм [5].

Таким образом, LN предпочтительнее LT в качестве кристалла-конвертора как при накачке на длине волны 800 нм, так и на 1030 нм.

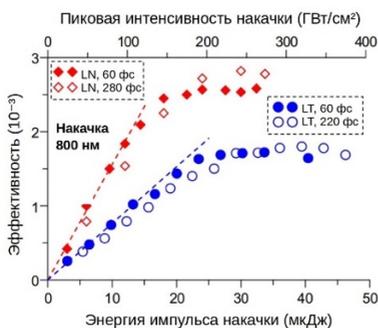


Рис. 2

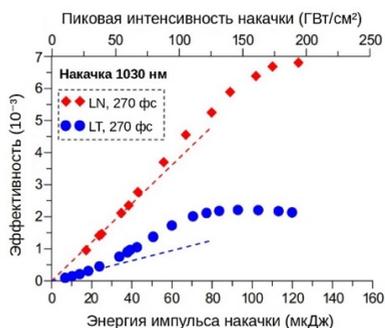


Рис. 3

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 22-19-00371).

- [1] Wang I. et al. // Laser Photonics Rev. 2020. Vol. 14. P. 2000021.
- [2] Bodrov S.B. et al. // Opt. Express. 2019. Vol. 27. P. 36059.
- [3] Krizsán G. et al. // Opt. Express. 2020. Vol. 28. P. 34320.
- [4] Benabdelghania I. et al. // Opt. Materials. 2024. Vol. 153. P. 115571.
- [5] Bodrov S.B., Bakunov M.I., Hangyo M. // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 104. P. 093105.

## МЕТОД КОМПЕНСАЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ЗАТУХАНИЯ НА ОКТ-СКАНАХ ДЛЯ КОРРЕКТНОГО ОЦЕНИВАНИЯ СПЕКЛ-КОНТРАСТА

П.А. Чижов<sup>1,2)</sup>, А.А. Советский<sup>2)</sup>, А.Л. Матвеев<sup>2)</sup>, Л.А. Матвеев<sup>2)</sup>, В.Ю. Зайцев<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИПФ РАН

Диагностическим признаком некоторых компонентов ткани на ОКТ-изображениях могут служить локальные неоднородности распределения рассеивателей или их сильно неравномерная яркость. Для выделения таких зон может быть использован параметр спекл-контраста, но его значения могут искажаться влиянием ослабления и вариациями уровня освещающего пучка.

На экспериментально наблюдаемый спекл-контраст при ОКТ-сканировании могут существенно влиять факторы, не имеющие прямого отношения к локальным характеристикам рассеивателей различных типов тканей, которые пытаются дифференцировать с помощью ОКТ-визуализации. В частности, яркость спекла зависит от интенсивности падающих и обратно рассеянных оптических волн, на которые влияет затухание света при прямом и обратном распространении, так что в реальных мутных тканях потери оптической энергии обычно сильно зависят от оптического рассеяния. Чтобы устранить искажающее влияние затухания, связанного с рассеянием и являющегося причиной артефактной пространственной неоднородности ОКТ-спеклов, на амплитуды, мы предлагаем усовершенствованный подход к анализу спекл-контраста и других параметров, характеризующих локальные свойства мутных сред, визуализируемых с использованием ОКТ [1].

В предположении о сильном преобладании рассеяния в общем оптическом затухании интенсивность принимаемого сигнала можно представить как:

$$I_0(z) = J_0 \mu_s(z) \cdot \exp \left[ -2 \int_0^z \mu_s(z') dz' \right]. \quad (1)$$

Здесь  $J_0$  — это интенсивность падающего луча. Коэффициент рассеяния  $\mu_s(z)$  определяет начальную амплитуду обратно рассеянного сигнала. Интеграл  $2 \int_0^z \mu_s(z') dz'$  в экспоненциальной функции определяет затухание сигнала при его распространении. Следует также отметить, что в уравнении (1) интенсивность ОКТ-сигнала зависит исключительно от затухания. Это означает, что другие факторы (такие как влияние фокусировки, эффект Roll-off, типичный для спектральной ОКТ и другие аппаратные факторы) компенсируются, что может быть сделано, например, как описано в [2].

Далее с учетом вспомогательного интеграла  $\int_z^\infty I_0(z') dz'$  и уравнения (1) после некоторых преобразований получаем искомую форму для скорректированных интенсивностей пикселей:

$$I(z_q) = J_0 \frac{I_0(z_q)}{2 \int_z^\infty I_0(z') dz'} \quad (2)$$

Коэффициент  $I(z_q)/J_0$  в уравнении (2) совпадает с выражением, полученным в [3] для пространственно-разрешенных значений коэффициента рассеяния  $\mu_s(z)$ :

$$\frac{I(z_q)}{J_0} = \frac{I_0(z_q)}{2 \int_z^\infty I_0(z') dz'} = \mu_s(z). \quad (3)$$

Полученное уравнение (3) дает искомое скорректированное выражение для интенсивностей пикселей, в которых устраняются искажения, связанные с затуханием.

В дискретной форме, соответствующей пиксельной структуре ОКТ-скана, уравнение (2) может быть записано как:

$$I_q = \frac{1}{2\Delta z_{px}} \frac{I_{0q}}{(\sum_{j=1}^{N-1} I_{0j}) + \frac{1}{2}(I_{0q} + I_{0N})}, \quad (4)$$

где  $q$  – индекс пикселя, соответствующий текущей глубине  $z_q$ ;  $\Delta z_{px}$  – осевое расстояние между соседними центрами пикселей, а индекс  $N$  соответствует максимальным глубинам, визуализируемым в ОКТ-сканах.

Далее мы покажем, как коррекция амплитуд пикселей влияет на такой полезный и часто вычисляемый параметр спекл-контраста (СК), определенный в [4] как:

$$\sigma_i = \frac{\sigma}{\langle I \rangle} = \frac{\sqrt{\langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2}}{\langle I \rangle}. \quad (5)$$

Здесь  $I$  — интенсивность сигнала ОКТ в каждом пикселе в выбранной локальной области обработки; оператор  $\langle \rangle$  обозначает процедуру усреднения интенсивности пикселей в пределах выбранного окна сканирования;  $\sigma$  — стандартное отклонение интенсивности в пределах скользящего окна обработки.

На рисунке 1 на панели (а) показаны структурные ОКТ-сканирования с различной степенью оптического затухания, где коэффициент обратного рассеяния составляет 0,25%, 0,5%, 0,75% и 1% для (а-1) – (а-4) соответственно. На панели (б) показана зависимость интенсивности спекл-контраста от аксиального размера окна сканирования для этих четырех случаев.

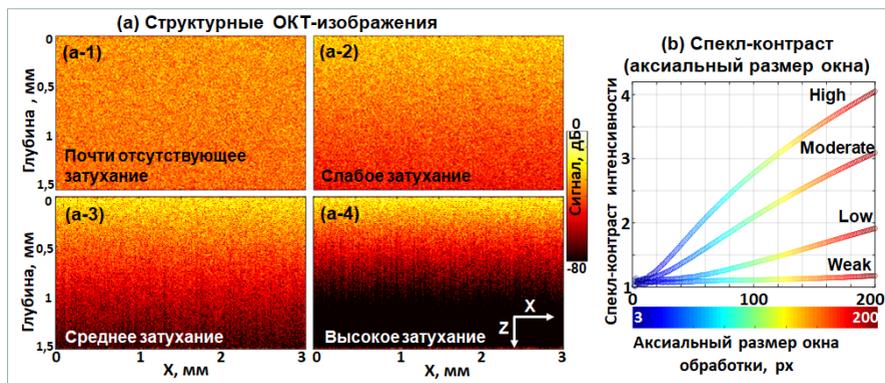


Рис. 1

Из рисунка 1(b) видно, что только при самом слабом затухании параметр спекл-контраста остается неизменным и близким к значению единицы, ожидаемому при рассеянии равномерно и достаточно плотно распределенными рассеивателями с одинаковыми значениями параметра силы рассеяния (т.е. при отсутствии очень слабых и очень сильных рассеивающих частиц). При более высоком затухании параметр спекл-контраста линейно увеличивается с увеличением окна сканирования.

Чтобы смягчить искажающие эффекты затухания и восстановить значение СК без затухания, ослабление может быть компенсировано с помощью уравнения (2) или его дискретизированной формы, уравнения (4).

На рисунке 2 показан результат компенсации оптического коэффициента затухания для ОКТ-скана, (a) – ОКТ-скан, смоделированный путем полного пренебрежения затуханием ОКТ-сигнала, связанным с рассеянием; (a-1) и (a-2) – СК-карты, полученные для ОКТ-скана на панели (a); (b) – смоделированный скан аналогично (a), но с учетом оптического затухания; (b-1) и (b-2) карты СК, полученные для скана (b), демонстрирующие, что разница значений СК между левой и правой половинами сканирования сильно искажается эффектами, связанными с ослаблением сигнала. (c) – скорректированная карта интенсивности рассеяния, полученная из (b) с использованием уравнения (2); (c-1) и (c-2) являются уточненной картой СК для окон обработки  $10 \times 10$  пикселей и  $30 \times 30$  пикселей и демонстрируют восстановление разницы между левой и правой половинами сканирования с точки зрения значения СК в отсутствие ослабления сигнала.

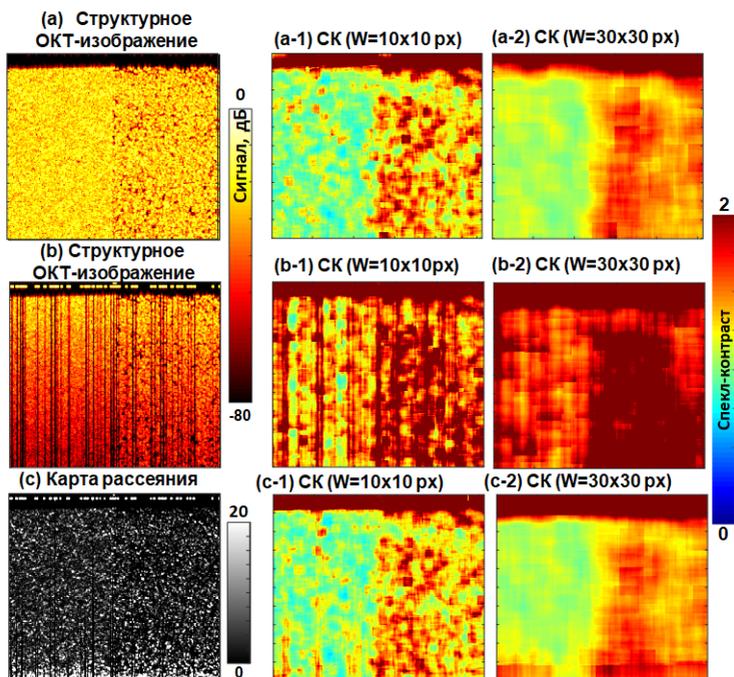


Рис. 2

В работе представлен простой метод улучшенной оценки локальных характеристик статистики спеклов с помощью определения уточненного спекл-контраста. Такой уточненный параметр спекл-контраста определяется локальными параметрами рассеивателей и не подвержен влиянию градиентов оптического сигнала, вызванных затуханием, связанным с рассеянием (затуханием сигнала в осевом направлении), а также эффектом затенения, вызванным наличием локализованных сильных рассеивателей (которые могут приводить к выраженной латеральной неоднородности оптического сигнала лежащих ниже областей скана).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-12-00295.

- [1] Matveev L.A. et al. // *Laser Phys.* 2024. Vol. 22, no. 1. P. 015601.
- [2] Sovetsky A.A., Matveyev A.L., Matveev L.A., // *Journal of Biomedical Photonics & Engineering.* 2024. P. 020302.
- [3] Vermeer K.A., Mo J., Weda J.J.A., // *Biomedical Optics Express.* 2014. Vol. 5, no. 1. P. 322.
- [4] Weatherbee A. et al. // *Opt. Lett.* 2016. Vol. 41, no. 12. P. 2727.

## КОНТИНУАЛЬНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ CO-AR: ОТ ЭКСПЕРИМЕНТА К ИНТЕРПРЕТАЦИИ

А.О. Королева, Т.А. Галанина, М.А. Кошелев, М.Ю. Третьяков

ИПФ РАН

Для атмосферных приложений требуется высокоточная модель поглощения реального газа. Спектр идеального газа с высокой точностью можно представить в виде суммы резонансных линий с известными профилями. Однако учет нерезонансной части поглощения (континуума), обусловленной межмолекулярными взаимодействиями, до сих пор затруднителен, так как природа континуума до конца не ясна. Исторически первой гипотезой о формировании континуума стал кумулятивный эффект дальних крыльев линий молекул-мономеров, возникающий из-за немгновенности межмолекулярных взаимодействий. Современная отсылка к этой гипотезе представлена в работе [1]: высокоточные спектроскопические измерения выявили уменьшение интегральной интенсивности резонансных линий с ростом давления, сопровождающееся одновременным (и в точности соответствующим по величине этому уменьшению) ростом интегральной интенсивности континуума под резонансными линиями. Авторы [1] интерпретируют наблюдаемый эффект как проявление «суперлоренцевых» крыльев линий мономеров.

Однако гипотеза, связывающая континуальное поглощение с крыльями линий, не объясняет спектральные особенности, которые возникают вследствие образования в результате соударений молекулярных пар, включая стабильные димеры. Для неполярных молекул, таких как  $N_2$  и  $CO_2$ , преимущественно именно бимолекулярное поглощение отвечает за возникновение континуума [2, 3]. Для более сложных молекул, таких как  $H_2O$ , было показано, что построенная на строгом физическом подходе модель континуума должна учитывать оба эти механизма [4]. Теоретические расчеты для полярных несимметричных молекул на сегодняшний день очень трудоемки, поэтому для первых шагов в этом направлении наиболее перспективной представляется молекулярная система типа «линейная молекула – атом», например, CO-Ar. Высокоточные экспериментальные данные необходимы для верификации последующих теоретических расчетов. В данной работе представлены результаты измерения континуума CO-Ar в области вращательной полосы CO в дальнем ИК-диапазоне ( $50\text{--}160\text{ см}^{-1}$ ), а также их анализ с точки зрения бимолекулярной природы континуума.

Спектры регистрировались с помощью фурье-спектрометра, оснащенного многоходовой ячейкой с эффективной длиной оптического пути около 151 м. Излучение используемого в работе источника, синхротрона SOLEIL, в рассматриваемом спектральном диапазоне на порядок интенсивнее, чем у традиционных тепловых источников, таких как Глобар. Это позволило получить достоверные данные о слабом континуальном поглощении на фоне интенсивного резонансного спектра. Спектры регистрировались при давлении CO  $50\text{--}150$  мбар и полном давлении смеси  $50\text{--}1000$  мбар.

Континуальное поглощение  $a_{cont}$  определялось как разность между наблюдаемым в эксперименте поглощением и расчетным резонансным спектром. В последний вносили вклад линии CO и  $H_2O$ , присутствующего в ячейке как неизбежная микропримесь с давлением  $0.2\pm 0.1$  мбар. Форма линий  $\alpha_{Line}$  моделировалась профилем Ван Флека–

Хубера [5], дополненного для линий СО коэффициентами интерференции первого порядка  $Y$  аналогично профилю Розенкранца [6]:

$$\alpha_{Line} = n \frac{S v \tanh(hv/2k_B T)}{\pi v_0 \tanh(hv_0/2k_B T)} \left( \frac{\Delta v_c + Y(v - v_0)}{(v - v_0)^2 + \Delta v_c^2} + \frac{\Delta v_c + Y(v + v_0)}{(v + v_0)^2 + \Delta v_c^2} \right), \quad (1)$$

где  $n$  – концентрация поглощающих молекул-мономеров,  $v$  – частота,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $h$  – постоянная Планка,  $T$  – температура газа. Значения центральных частот линий  $v_0$ , интегральных интенсивностей  $S$ , а также коэффициентов самоуширения, вносящие вклад в столкновительные ширины линий  $\Delta v_c$ , были взяты из базы данных HITRAN [7]. Коэффициенты уширения линий СО давлением аргона для переходов с вращательным квантовым числом  $J < 15$  были взяты из работы [8], а для более высоких вращательных состояний – определены из имеющихся экспериментальных записей так же, как и коэффициенты уширения линий водяного пара давлением СО и аргона. Крылья линий традиционно обрезались на отстройках частоты от центра линии в  $25 \text{ см}^{-1}$  [9].

Континуальное поглощение в смеси СО-Аг может быть разделено на две части,  $\alpha_{\text{СО-СО}}$  и  $\alpha_{\text{СО-Аг}}$ , появляющиеся из-за взаимодействия молекул СО между собой и с молекулами аргона, соответственно. Каждая из них обладает характерной зависимостью от давления (из-за малого давления водяного пара его вкладом в континуум можно пренебречь):

$$\alpha_{cont}(v, P_{\text{СО}}, P_{\text{Аг}}) = \alpha_{\text{СО-СО}}(v, P_{\text{СО}}, P_{\text{Аг}}) + \alpha_{\text{СО-Аг}}(v, P_{\text{СО}}, P_{\text{Аг}}) \quad (2)$$

$$= C_{\text{СО-СО}}(v) P_{\text{СО}}^2 + C_{\text{СО-Аг}}(v) P_{\text{СО}} P_{\text{Аг}},$$

где  $P_{\text{СО}}$  и  $P_{\text{Аг}}$  – давления СО и Аг,  $C_{\text{СО-СО}}$  – сечение собственного континуума СО,  $C_{\text{СО-Аг}}$  – сечение континуума СО-Аг. Наличие записей спектров при нескольких значениях давлений СО и Аг позволило разделить их вклады, а также подтвердить достоверность полученных данных. Результат определения  $C_{\text{СО-Аг}}$  показан на рисунке.

Чем выше давление, тем больше молекул-мономеров переходят в бимолекулярные состояния. С учетом того, что их не слишком много, а тримолекулярные состояния не образуются вовсе, вириальное уравнение может быть записано следующим образом:

$$P = nk_B T + B(T) \frac{n^2 k_B T}{N_a}, \quad (3)$$

где  $B(T)$  – второй вириальный коэффициент, величина которого для рассматриваемой смеси газов может быть найдена в [10].  $N_a$  – число Авогадро. Решая квадратное уравнение (3), легко показать, что изменение концентрации молекул-мономеров идеального газа за счет образования димеров составляет  $2K_2 n^2 k_B T$ , где  $K_2$  – константа равновесия. Это объясняет наблюдаемое в [1] уменьшение интегральной интенсивности линий СО. Отметим, что такая оценка не учитывает зависимости от вращательного состояния и позволяет получить только эффективную оценку относительного изменения концентрации. Тем не менее, для смеси СО с азотом, рассматриваемой в [1], это изменение составляет  $4\% \text{ МПа}^{-1}$ , что согласуется с относительной коррекцией интенсивности для линии R1 ( $2.9(3)\% \text{ МПа}^{-1}$ ).

Результаты работы [11], в которой было показано, что интегральная интенсивность линий и континуума  $\text{CO}_2$  меняются с ростом давления на одну и ту же величину, позволяют предположить, что молекулы взаимодействуют с электромагнитным полем одинаково эффективно вне зависимости от того, находятся они в мономолекулярном состоянии или в бимолекулярном, а также что континуум в этом случае возникает преимущественно из-за постоянного дипольного момента. Спектры парных состояний напоминают по форме огибающую резонансного спектра мономера, а ее нормировка с учетом концентрации образовавшихся бимолекулярных состояний позволяет определить величину поглощения парных состояний  $\text{CO-Ar}$  (синяя линия на графике). Такая модель хорошо согласуется с результатами эксперимента, и достигнутое согласие не нарушается при использовании полуэмпирической модели крыла линии, учитывающей негмонвенность соударений молекул [12]. (Длительность соударения молекул  $\text{CO}$  с  $\text{Ar}$  составляет приблизительно 0.9–1.7 пс.) Это позволяет сделать вывод о доминирующем вкладе бимолекулярного поглощения в наблюдаемый континуум  $\text{CO-Ar}$ .

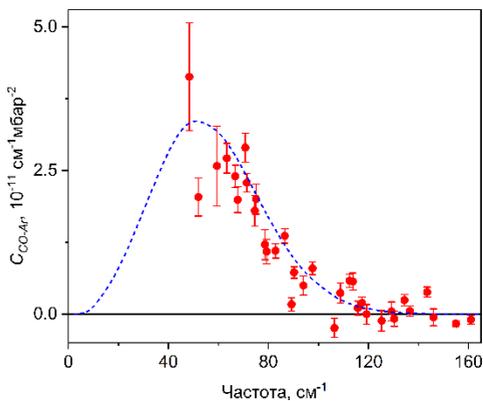


Рис.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (проект FFUF-2024-0016).

- [1] Reed Z.D. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2023. Vol. 130. P. 143001.
- [2] Galanina T.A. et al. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2024. Vol. 26. P. 15032.
- [3] Serov E.A. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2024. Vol. 328. P. 109172.
- [4] Tretyakov M.Yu. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2025. Vol. 333. P. 109319.
- [5] Van Wleck J.H., Huber D.L. // *Rev. Mod. Phys.* 1977. Vol. 49, no. 4. P. 939.
- [6] Rosenkranz P.W. // *IEEE Trans. Anten. Propagat.* 1975. Vol. 23, no. 4. P. 498.
- [7] Gordon I.E. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.* 2022. Vol. 277. P. 107949.
- [8] Luo C. et al. // *J. Chem. Phys.* 2001. Vol. 115, no. 5. P. 2198.
- [9] Mlawer E.J. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2023. Vol. 306. P. 108645.
- [10] Dymond J.H. et al. *Virial coefficients of pure gases and mixtures.* – London: Springer, 2002, Vol. 21(A, B).
- [11] Birk M. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2024. Vol. 324. P. 109055.
- [12] Serov E.A. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2017. Vol. 193. P. 1.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИОЛОКАЦИОННЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ МОРСКОГО ЛЬДА И ПОВЕРХНОСТИ ДЛЯ СЛУЧАЯ ВБЛИЗИНАДИРНОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

Я.А. Кузнецов<sup>1)</sup>, Ю.А. Титченко<sup>2)</sup>,  
В.Ю. Караев<sup>2)</sup>, М.А. Панфилова<sup>2)</sup>, К.А. Понур<sup>2)</sup>, Е.М. Мешков<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИПФ РАН

Помимо привычного метода дистанционного определения льда и его характеристик с помощью радиолокаторов, зондирующих при углах падения  $20^\circ$ – $60^\circ$ , с появлением новых космических радиолокаторов, работающих в области углов падения  $0^\circ$ – $15^\circ$ , например, DPR на спутнике миссии GPM [4], стали исследовать [1–3] область вблизинадирного зондирования. В работе обсуждается способ численного моделирования сигнала, отраженного морской поверхностью с заданным распределением сплоченности морского льда при малых углах падения излучения. Также приводится метод восстановления сплоченности морского льда, наблюдаемой в рамках численного моделирования [5, 6].

Численное моделирование работы радиолокатора выполняется в три шага: моделирование отражающей поверхности, моделирование схемы измерения и нахождение параметров сигнала, отраженного от элементарной рассеивающей площадки на поверхности. Предлагаемый подход предусматривает задание в полосе обзора как сплошного льда, так и любого распределения морского льда на поверхности воды. Например, можно смоделировать отраженное излучение от крупных айсбергов.

Для моделирования отражения от морского льда [6] используется аппроксимация зависимостей сечения обратного рассеяния от угла падения, полученная ранее [1]. Для построения аппроксимации использовались данные измерений радиолокатора DPR при наблюдении Охотского моря в феврале 2020 г. при отрицательной температуре воздуха. Полученная в работе [1] зависимость для нормированного сечения обратного рассеяния морским льдом в дБ от угла падения излучения  $\theta$  приводится далее:

$$RCS_{ice}(\theta) = a_{ice} + b_{ice}|\theta| + c_{ice}\theta^2 + d_{ice}e^{-e_{ice}|\theta|}, \quad (1)$$

где  $a_{ice} = -3,15 \pm 0,1$ ,  $b_{ice} = -(9 \pm 3) \cdot 10^{-3}$ ,  $c_{ice} = -(169 \pm 5) \cdot 10^{-4}$ ,  $d_{ice} = 26 \pm 0,3$ ,  $e_{ice} = (53 \pm 2) \cdot 10^{-2}$ ,  $\sigma_{ice}(\theta) = 10^{RCS_{ice}(\theta)/10}$ .

Считаем, что характеристики льда не меняются и отражение всегда описывается формулой (1). При этом учтём, что волнение на морской поверхности может сформироваться под действием разных скоростей и направлений ветра и в общем виде зависимость сечения обратного рассеяния от угла падения будет описываться следующей формулой [8]:

$$\sigma_0(\theta) = \frac{|R_{eff}(\theta)|^2}{2 \cos^4 \theta \sqrt{mss_{xx} mss_{yy} - mss_{xy}^2}} e^{-\frac{tg^2 \theta}{2(mss_{xx} mss_{yy} - mss_{xy}^2)} mss_{yy}}, \quad (2)$$

где  $mss_{xx}$  и  $mss_{yy}$  – дисперсия уклонов шероховатостей. Ось Y ориентирована вдоль направления изменения угла падения, а ось X перпендикулярна ей;  $mss_{xy}$  –

ненормированный коэффициент корреляции между уклонами вдоль осей X и Y;  $R_{eff}$  – эффективный коэффициент отражения.

Параметры морского ветрового волнения, входящие в формулу (2), рассчитываются с использованием модели спектра волнения [7], в которой входными параметрами являются скорость приводного ветра, длина ветрового разгона и направление ветра.

Случайное распределение льда на отражающей поверхности приведено на рис. 1, где белые точки – лёд, чёрные – вода. Отражающая поверхность разбита на 10 участков со сплочённостью от 0 до 1 с шагом 0,1.

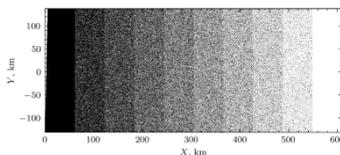


Рис. 1

Далее необходимо смоделировать схему измерений [6]. Моделируем схему радиолокатора DPR, приведенную на рис. 2а. Радиолока-



Рис. 2а

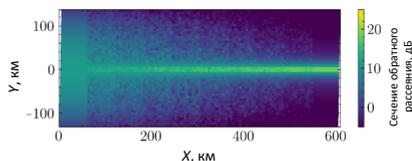


Рис. 2б

антенны, равен 5 км. Сечение обратного рассеяния в каждом элементе разрешения рассчитывается как взвешенная сумма сечений обратного рассеяния по формуле (1) и (2), где в качестве веса используется сплочённость льда в каждом элементе разрешения [6]. Пример смоделированного радиолокационного изображения заданной отражающей поверхности представлен на рис. 2б.

Поперечное и продольное сечение радиолокационного изображения приводится на рис. 3а и рис. 3б соответственно. Считаем, что скорость ветра 15 м/с, направление ветра вдоль оси X. В элемент разрешения радиолокатора (50×50 точек) попадают морской лед и морское волнение. Сечение обратного рассеяния вычисляется как

$$\sigma_m(\theta) = \sigma_{ice}(\theta) \cdot S_{ice} + \sigma_0(\theta) \cdot (1 - S_{ice}), \quad (3)$$

где  $S_{ice}$  – сплочённость льда в элементе разрешения.

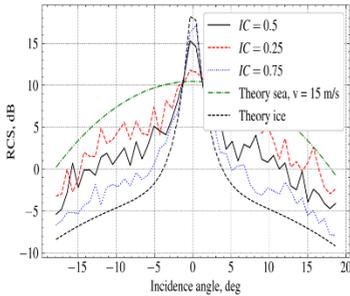


Рис. 3а

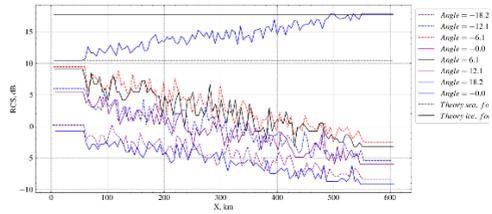


Рис. 3б

Для решения обратной задачи нам требуется знать  $\sigma_{ice}(\theta)$  и  $\sigma_{sea}(\theta)$  с учетом конкретных условий формирования. Для льда используется формула (1). Будем считать, что условия формирования морского волнения неизвестны. Поэтому для решения обратной задачи для морского волнения воспользуемся аппроксимацией экспериментальных данных, полученных в Охотском море [5]:

$$RCS_{sea}(\theta) = a_{sea} + b_{sea}\theta + c_{sea}\theta^2 + d_{sea}\theta^3 + e_{sea}\theta^4 + f_{sea}\theta^5, \quad (4)$$

где  $a_{sea} = 11,29 \pm 0,02$ ,  $b_{sea} = (6 \pm 4) \cdot 10^{-3}$ ,  $c_{sea} = -(407 \pm 4) \cdot 10^{-4}$ ,  $d_{sea} = -(10 \pm 5) \cdot 10^{-5}$ ,  $e_{sea} = (14 \pm 1) \cdot 10^{-6}$ ,  $f_{sea} = (8 \pm 13) \cdot 10^{-8}$ .

Для вычисления сплочённости морского льда в каждом элементе разрешения воспользуемся формулой:

$$S_{ice}(\theta) = \frac{\sigma_m(\theta) - \sigma_{sea}(\theta)}{\sigma_{ice}(\theta) - \sigma_{sea}(\theta)} \quad (5)$$

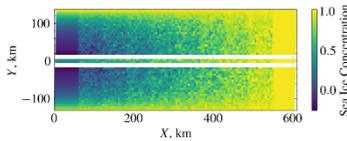


Рис. 4а

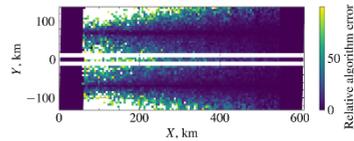


Рис. 4б

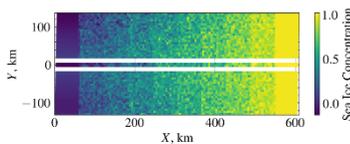


Рис. 4в

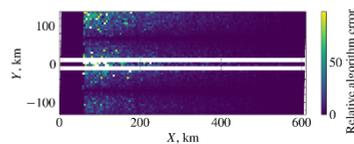


Рис. 4г

При несовпадении скорости ветра и направления с заданной при моделировании получается очень большая ошибка (белым цветом), как на рис. 4а, б (5 м/с, 0°). В случае правильно подобранных значений наблюдаем восстановление с малой ошибкой, как на рис. 4в, г (15 м/с, 0°).

В результате работы продемонстрирована возможность измерения сплочённости морского льда при малых углах падения. Для численного моделирования прямой и обратной задач был разработан программный комплекс. Проведено моделирование схемы измерений DPR для заданных условий волнения и льда разной сплочённости. В случаях отсутствия льда и большой его сплочённости ошибка алгоритма решения обратной задачи равна нулю, при этом в случае промежуточных значений ошибка растёт по мере уменьшения сплочённости. Необходимо знать конкретные зависимости сечения обратного рассеяния от угла падения как для льда, так и для воды в конкретных условиях наблюдения.

- [1] Караев В.Ю., Панфилова М.А., Митник Л.М., Рябкова М.С., Титченко Ю.А., Мешков Е.М. // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2021. Т. 18, № 3. С. 229.
- [2] Peureux, C., Longépé, N., Mouche, A., Tison, C., Tourain, C., Lachiver, J.-M., & Hauser D. // *Earth and Space Science*. 2022. Vol. 9, no. 6. <https://doi.org/10.1029/2021EA002046>.
- [3] Panfilova M., Karaev V. // *Recent Advances in Sea Ice Research Using Satellite Data. A special issue of Remote Sensing*. 2024. <https://doi.org/10.3390/rs16050859>.
- [4] GPM Data Utilization Handbook. First Edition, JAXA. 2014. 92 p.
- [5] Karaev V., Ponur K., Panfilova M., Titchenko Y., Ryabkova M., Meshkov E. // In book: *IGARSS 2022 – 2022 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. 17 July 2022. Kuala Lumpur, Malaysia, 2022. P. 3818. doi: 10.1109/IGARSS46834.2022.9883231.
- [6] Титченко Ю.А., Караев В.Ю., Панфилова М.А., Понур К.А., Кузнецов Я.А., Мешков Е.М. // *Russian Journal of Earth Sciences*. 2025. Vol. 25, No. 3.
- [7] Ryabkova M., Karaev V., Guo J., Titchenko Y.A. // *Journal of Geophysical Research: Oceans*. 2019. Vol. 124, no. 10. P. 7104.
- [8] Басс Ф., Фукс И. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. – М: Наука, 1972, 424 с.

## ОПТИЧЕСКОЕ ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ТОЛСТОМ ФОТОПОЛИМЕРИЗУЮЩЕМСЯ СЛОЕ

С.Н. Менсов<sup>1,2)</sup>, Ю.В. Полуштайцев<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИМХ РАН

Периодические рельефно-фазовые плоские структуры, морфология которых перпендикулярна поверхности, составляют основу целого ряда современных компонентов и устройств, находящихся широкое применение в самых разных областях: от оптоэлектронных датчиков и структурированных световодов до биомедицинских микрореакторов, скаффолдов и элементов микрофлюидики. Отличительной чертой таких структур является то, что их толщина в десятки-сотни раз превышает период (или элементарный поперечный размер). В микроканальной оптике это соотношение может достигать тысяч. Поэтому традиционные способы создания тонкослойных структур – травление, прямая лазерная запись, послыйный синтез – здесь неэффективны, впрочем, как и проекционные методы, в которых толщина структурирования материала ограничена глубиной резкости оптической системы. В данной работе численно и экспериментально исследована возможность создания периодической структуры в слое слабопоглощающей фотополимеризующейся среды, толщина которого значительно превышает глубину резкости используемой проекционной установки.

### *Формирование протяжённых полимерных треков*

Использование прозрачных фотополимеризующихся композиций, в которых показатель преломления возрастает при модификации среды светом, позволяет создавать достаточно протяжённые отдельные полимерные треки. Неоднородная добавка к показателю преломления  $\Delta n(x) = n(x) - n_M$  пропорциональна распределению массовой доли образующегося полимера  $P(x)$  в соответствии с экспозиционной характеристикой фоточувствительной среды:

$$\Delta n'(x) = \Delta n(x) / \Delta n_{max} = 1 - \exp\{- (H/H_0)^\gamma\}, \quad (1)$$

где  $\Delta n_{max} = n_P - n_M$  – максимальное изменение показателя преломления среды при переходе от жидкого мономера ( $n_M$ ) к твёрдому полимеру ( $n_P$ ), которое может достигать нескольких процентов,  $H(x, t) = \int_0^t I(x, t') dt'$  – экспозиция,  $H_0$  и  $\gamma$  – параметры контраста.

Инициирование неоднородной полимеризации, формирующее профиль показателя преломления  $\Delta n(r, z, H)$ , изменяет и распределение воздействующего света  $E(r, z, H)$ , распространяющегося в среде, оказывая на него фокусирующее влияние:

$$2ik \frac{\partial E(r, z, H)}{\partial z} = \Delta E(r, z, H) + 2k \frac{\Delta n(r, z, H)}{n_M} E(r, z, H). \quad (2)$$

Здесь  $k = 2\pi/\lambda$  – волновое число,  $\lambda$  – длина волны,  $r = (x^2 + y^2)^{0.5}$  – поперечные координаты;  $\Delta = \partial^2 / \partial r^2 + \partial / r \partial r$  – оператор Лапласа.

За счёт самофокусировки излучения в таких слабопоглощающих фоторефрактивных средах режимы устойчивого самоформирования волноведущего канала

реализуются на трассах, многократно превосходящих дифракционную длину  $l_d = ka^2$  воздействующего лазерного пучка с входным гауссовым профилем интенсивности  $I_G(r, 0) = I_0 \cdot \exp\{-r^2/a^2\}$ ,  $a$  – полуширина пучка при  $z = 0$  (см. рис. 1). С помощью линзовой модели этого процесса было детально показано, что канал может формироваться вглубь полимеризующейся среды последовательно участками порядка  $l_d/2$ . При этом волноводное распространение света возможно и в случае одномерной задачи (когда нет зависимости от второй поперечной координаты  $y$ ), если параметр  $G = ka \cdot (2 \Delta n_{\max}/n_M)^{0.5}$  существенно больше значения 2.4 (неодномодовый режим).

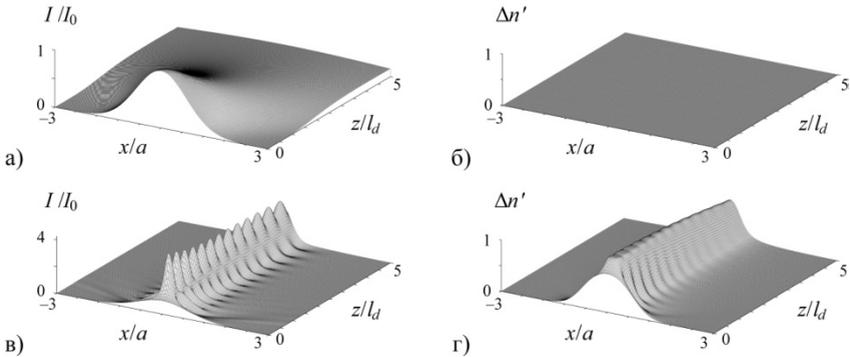


Рис. 1

### Запись периодической структуры в толстом слое ФПК

Следствием дифракции в ближней зоне для направленного света, прошедшего сквозь маску с периодической функцией пропускания  $T(x) = 0.5 \cdot [1 + \cos(2\pi \cdot x/d)]$ , является саморепродукция – эффект Тальбота (см. рис. 2а). Он заключается в том, что в области перекрытия продифрагировавших волн на дистанциях от экрана, кратных  $z_R = 2d^2/\lambda$ , распределение интенсивности излучения за решёткой повторяет  $T(x)$  с тем же периодом  $d$ , при этом на половине расстояния  $z_R$  контраст света инвертируется.

На одном периоде  $d$  распределение интенсивности света с хорошей точностью аппроксимируется гауссовым профилем  $I_G(x, 0)$ , полуширина которого связана с периодом:  $a \approx d \cdot (2e^{-0.5} - 1)$ . Соответственно, воздействуя периодическим световым распределением, можно создать упорядоченную структуру из параллельных треков, растущих вглубь слоя за счёт самоканализирования излучения (см. рис. 2б). Отличие от процесса роста уединённого волноводного канала заключается в том, что локальная полимеризация начинается и происходит быстрее на всех участках, где интенсивность воздействия выше, а не только в области входа излучения в среду.

Так, если по достижении экспозиции  $H_0$  не возникает волноводного распространения света вследствие недостаточного возрастания показателя преломления (при  $G < 3$ ), то мономер будет модифицироваться и в окрестностях максимумов инвертированного распределения интенсивности, образуя промежуточные «островки» из полимера. При больших значениях параметра  $G$  (порядка 10) стремительный рост каналов замедляет развитие этого побочного процесса, поскольку излучение в значительной степени

концентрируется в треке. Однако если самоканализирование света наступает при слишком малых конверсиях (т.е. при экспозиции существенно меньше  $H_0$ ), когда полимерная сетка ещё не набрала механической прочности, каналы получаются тонкими и формируются неустойчиво (при  $G > 20$ ).

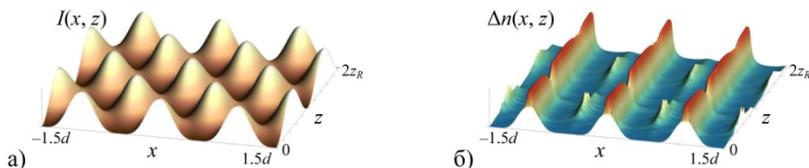


Рис. 2

Для некогерентного света распределения интенсивности и получаемые профили показателя преломления на рассмотренных трассах будут чуть более плавными.

### Эксперимент

Была использована композиция на основе олиго(карбонатдиметаакрилата) ОКМ-2 с хинонным фотоиницирующим комплексом, позволяющая видимым светом осуществлять неоднородную полимеризацию в объёме и реализовывать нелинейные основные процессы на достаточно протяжённых трассах. Слой ФПК (3) создавался между двух горизонтально расположенных силикатных стёкол (1) и (2), разделённых прокладками (толщиной 1.2 мм). Пространственное распределение интенсивности света в слое ФПК формировалось с помощью установки (см. рис. 3) на основе DLP-проектора (4), оснащённого оптической уменьшающей схемой (5), (6) и зеркалом (7). Проекционная установка была настроена на получение изображения с размером пикселя 5 мкм и глубиной резкости около 80 мкм. Оно было сфокусировано сквозь покровное стекло (1) на ближнюю по отношению к проектору поверхность слоя ФПК. С помощью цифровой камеры микроскопа (8), расположенного позади реактора с композицией, осуществлялся контроль настройки резкости оптической системы перед началом экспонирования, а также регистрировалось изменяющееся в ходе формирования треков распределение интенсивности света на поверхности слоя ФПК, дальней от проектора.

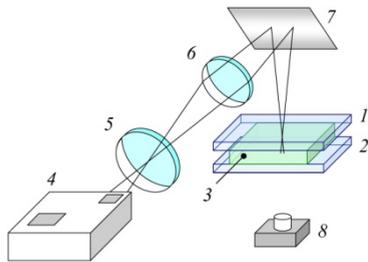


Рис. 3

До начала полимеризации формирующий изображение свет, прошедший сквозь пока однородную среду, существенно дефокусирован и характеризуется почти равномерным распределением интенсивности (см. рис. 4а). Однако с ростом экспозиции текстура рисунка постепенно начинает прорисовываться и на дальней от проектора поверхности слоя ФПК (см. рис. 4б), т.е. вне глубины резкости оптической системы. На примере проецирования текстуры в виде полос или точек разного цвета на поверхность созданной решётки можно увидеть, что излучение сконцентрировано и распространяется в полимерных каналах без

перемешивания – с противоположной стороны слоя наблюдается свечение соответствующим цветом из торцов созданных световодов (см. рис. 4в).

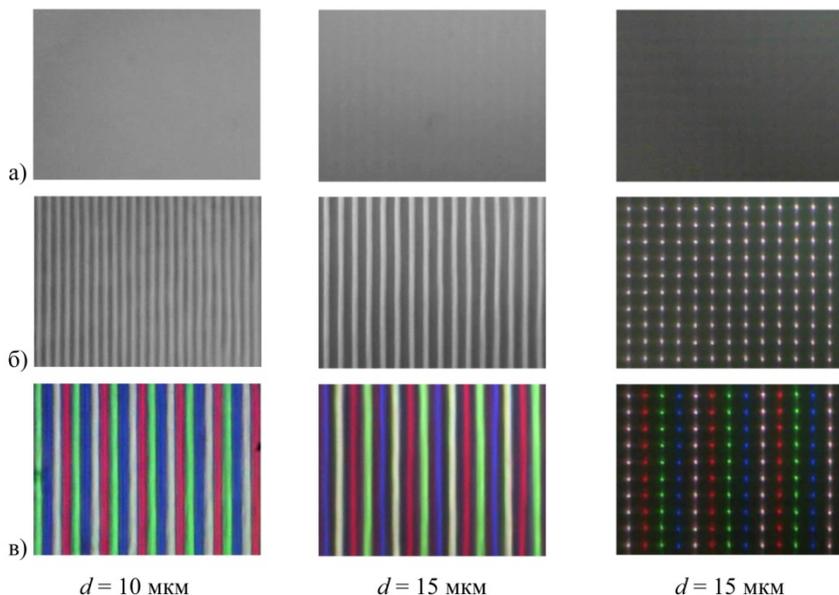


Рис. 4

Иными словами, такая структура, записанная в толстом полимеризующемся слое, может выполнять функции микроканальной пластины (оптической планшайбы) для согласования элементов, имеющих не плоскую поверхность. С учётом того, что самоканализирование излучения в ФПК реализуется в устойчивом режиме на протяжённых трассах, кривизна поверхности согласуемых интерфейсов может достигать нескольких миллиметров.

### **Выводы**

Таким образом, в слабопоглощающих фотополимеризующихся композициях самоканализирование излучения реализуется не только для уединённых лазерных пучков, но и для периодических распределений интенсивности некогерентного света. Это позволяет проекционным способом создавать в слое ФПК полимерные структуры, толщина которых превышает глубину резкости используемой стандартной оптической системы. Рассмотренный подход к формированию протяжённых периодических треков может расширить технические возможности существующих DLP-систем 3D-печати и улучшить оперативность изготовления изделия за счёт увеличения толщины слоёв, а также путём формирования толстых микроструктурированных слоёв.

## СТИМУЛИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ДИАПАЗОНА 10–14 МКМ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КЯ HgCdTe/CdHgTe

Я.Н. Паулкина<sup>1)</sup>, В.В. Уточкин<sup>2)</sup>, М.А. Фадеев<sup>2)</sup>, А.А. Разова<sup>2)</sup>, А.А. Янцер<sup>2)</sup>,  
К.А. Мажукина<sup>2)</sup>, В.В. Румянцев<sup>2)</sup>, С.В. Морозов<sup>2)</sup>, Д.В. Шенгуров<sup>2)</sup>,  
Н.Н. Михайлов<sup>3)</sup>, В.Р. Барышев<sup>4)</sup>, Н.С. Гинзбург<sup>4)</sup>

<sup>1)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>2)</sup> ИФМ РАН

<sup>3)</sup> ИФП СО РАН

<sup>4)</sup> ИПФ РАН

### *Введение*

Данная работа посвящена исследованию стимулированного излучения и лазерной генерации в среднем инфракрасном диапазоне (в частности – в окне прозрачности атмосферы 10–14 мкм) в гетероструктурах с квантовыми ямами (КЯ) HgCdTe/CdHgTe. Актуальность исследования обусловлена потребностью в компактных источниках когерентного излучения среднего ИК-диапазона для прикладных задач, таких как спектроскопия газовых смесей и экологический мониторинг. В среднем ИК-диапазоне к настоящему моменту продемонстрирована лазерная генерация в квантово-каскадных лазерах, в том числе в непрерывном режиме с мощностями до единиц Вт. Несмотря на успехи каскадных лазеров, их производство остается сложным из-за необходимости точного роста сверхрешёток из сотен КЯ, что препятствует их широкому распространению.

В качестве альтернативы рассматриваются межзонные полупроводниковые лазеры на основе узкозонных материалов, таких как HgCdTe, которые обладают более простым дизайном активной области. Однако ключевой проблемой для длинноволновой генерации является безызлучательная оже-рекомбинация, интенсивность которой возрастает с уменьшением ширины запрещенной зоны, в противоположность излучательной рекомбинации, вероятность которой падает вслед за шириной запрещенной зоны (Е<sub>g</sub>). Стоит отметить, что оже-рекомбинация является пороговым процессом: носителям, участвующим в ней, необходимо обладать некоторым суммарным значением кинетической энергии для выполнения законов сохранения. Квазигиперболические законы дисперсии носителей вблизи Г-точки, характерные для КЯ на основе HgCdTe с толщиной, близкой к критической (при которой законы дисперсии становятся линейными, как в графене), существенно повышают энергетический порог E<sub>th</sub> оже-процессов. Таким образом, в КЯ на основе HgCdTe можно добиться доминирования излучательной рекомбинации над оже-процессами и достичь инверсии населённостей, что делает их перспективным кандидатом для реализации межзонных лазеров ИК-диапазона.

В работе исследования велись в двух направлениях: оптимизация активной среды (КЯ) для генерации излучения в непрерывном режиме и поиск методики формирования в HgCdTe-структурах лазерных резонаторов с высокой добротностью.

### *Методика эксперимента и исследованные образцы*

Исследованная структура была выращена методом молекулярно-пучковой эпитаксии на полуизолирующей GaAs (013) подложке с буферами из ZnTe (~50 нм) и CdTe

(~10 мкм) с *in situ* эллипсометрическим контролем состава и толщины слоев. *Ex situ* характеристика структур проводилась при помощи экспресс-методики на основе спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ).

Были выращены три волноводные структуры на основе твёрдых растворов HgCdTe (см. табл.). Две из этих структур (с номерами 1 и 2) были разработаны для генерации стимулированного излучения с близкими длинами волн, приблизительно 10 мкм, но отличались по содержанию кадмия в квантовых ямах (0% против ~11%). Третья структура (3) была спроектирована для генерации на большей длине волны, около 14 мкм.

Табл.

№ Структуры	Толщина ямы, нм	Содержание Cd в барьерах $x_{\text{bar}}$	Содержание Cd в ямах $x_{\text{QW}}$
1	3.2	0.57	0
2	6.1	0.63	0.108
3	7.4	0.66	0.105

Для анализа ФЛ и стимулированного излучения (СИ) структур использовалась фурье-спектроскопия. Образец устанавливался на холодный палец оптического гелиевого криостата замкнутого цикла (Advanced Research Systems DE-202,  $T = 8\text{--}300$  К). Оптическое возбуждение структур обеспечивалось непрерывным титан-сапфировым лазером (730–900 нм), импульсным параметрическим генератором света ближнего ИК-диапазона (1.94–2.36 мкм) и импульсным CO<sub>2</sub>-лазером Infralight-100 (10.6 мкм). Интенсивность оптического возбуждения варьировалась при помощи набора оптических аттенуаторов из стекла или тефлона. Пятно лазера возбуждения полностью покрывало образец, при этом геометрия эксперимента оптимизировалась для сбора излучения, распространяющегося вдоль плоскости КЯ. Излучение от образца заводилось при помощи эллиптического зеркала в ИК фурье-спектрометр Bruker Vertex 80v, работавший в режиме пошагового сканирования. Методика пошагового сканирования позволила регистрировать временную эволюцию спектров стимулированного излучения с высоким временным разрешением, а модуляционная методика — подавлять фоновое тепловое излучение при спектроскопии фотолюминесценции.

### Результаты и обсуждение

Для генерации стимулированного излучения в непрерывном режиме необходимы два условия: исследуемые структуры должны обеспечивать достаточный коэффициент усиления при работе выше порога генерации, и время жизни носителей заряда в них должно быть достаточно продолжительным для достижения устойчивой инверсии населенностей при стационарном возбуждении. На рис. 1 показаны спектры структуры 2 при 8 К и накачке непрерывным лазером на длине волны 900 нм. При низкой интенсивности возбуждения наблюдалась спонтанная ФЛ с полной шириной линии на половине высоты (FWHM) спектра 4–5 мэВ. Однако уже при интенсивности накачки 2 Вт/см<sup>2</sup> в структуре наблюдалось стимулированное излучение. Возникновение СИ подтверждалось по сверхлинейному росту сигнала с увеличением возбуждения и резкому обужению спектра с 4 до 0.37 мэВ (что меньше теоретического предела FWHM для ФЛ двумерного газа при 8 К – 0.5 мэВ).

При этом в структурах без кадмия в ямах (образец 1) генерация в непрерывном режиме отсутствовала из-за сильного неоднородного уширения спектра усиления [1]. Экспериментально установлено, что использование широких КЯ с содержанием кадмия  $\sim 11\%$  снижало неоднородное уширение спектров из-за меньшей чувствительности  $E_g$  к флуктуациям толщины ям. Например, изменение толщины на один монослой (0.6 нм) в широкой яме (6.1 нм) вызывало изменение запрещенной зоны на  $\pm 17$  мэВ, тогда как в узкой яме (3.2 нм) – на  $\pm 51$  мэВ.

Вторым важным вопросом, исследованным в работе, являлось исследование альтернативных подходов к формированию резонатора в HgCdTe-лазерах. Достигнутый в ростовой технологии молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) прогресс позволил выращивать структуры на основе HgCdTe с экстремально узкими квантовыми ямами высокого оптического качества на альтернативных GaAs и Si подложках. Но в то же время рост на альтернативных подложках структур с толстыми буферными и волноводными слоями требует высоких скоростей роста, т.е. роста на подложках вицинальных ориентаций (211) или (013). Такие ориентации, хоть и обеспечивают относительно быстрый рост толстых структур, приводят к невозможности формирования резонатора Фабри–Перо в структуре простым выкалыванием, поскольку получающиеся грани не являются плоскопараллельными. Таким образом, для реализации HgCdTe-лазеров важной проблемой является изготовление резонатора типа Фабри–Перо или на модах шепчущей галереи.

В данной работе исследовался резонатор, сформированный одномерной диэлектрической брэгговской решёткой с периодом 7.5 мкм, изготовленной на поверхности структуры 170127 методом ионного травления. Латеральные размеры решётки составляли  $10 \times 2$  мм<sup>2</sup>, образец был окружён двухмиллиметровой «рамкой» из стравленного на глубину решётки волноведущего слоя структуры. Наблюдалась узкополосная генерация с  $\text{FWHM} < 0.15$  см<sup>-1</sup> (4.5 ГГц) на длине волны  $\sim 13.5$  мкм при температуре 8 К (см. рис. 2). При этом на рис. 3 изображена температурная эволюция спектра излучения лазера с распределённой обратной связью (РОС). В отличие от типичного HgCdTe-лазера с квантовыми ямами и полосковым или микродисковым резонатором, для РОС-лазера отсутствует какая-либо динамика положения линии. Параметры решётки задают очень узкий диапазон, в котором возможна работа РОС — на уровне одной тысячной от частоты излучения, т.е. менее одного обратного сантиметра.

Поэтому уже при повышении температуры до 20 К интенсивность излучения снижалась до нуля из-за сдвига спектра усиления (характерная скорость температурного сдвига  $\sim 2$  см<sup>-1</sup>К<sup>-1</sup>), что выводило его за пределы резонанса брэгговской решётки [2]. Это ограничение указывает на необходимость разработки решеток с адаптивными параметрами или использования альтернативных подходов, таких как металлические брэгговские решётки, для расширения температурного диапазона.

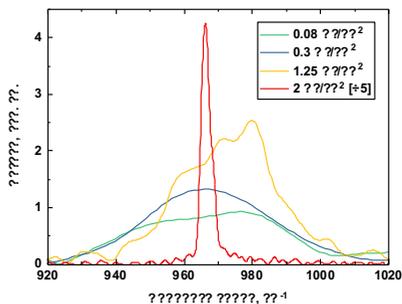


Рис.1

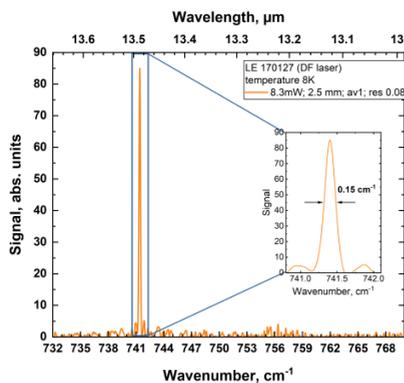


Рис. 2

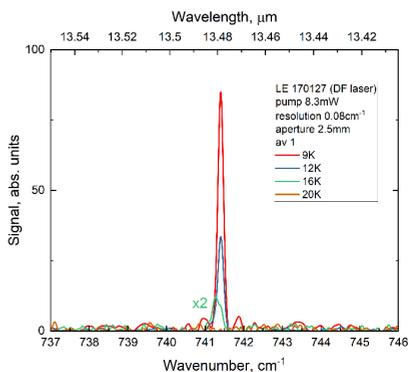


Рис. 3

### Заключение

В данной работе было продемонстрировано стимулированное излучение в гетероструктурах HgCdTe в непрерывном режиме в диапазоне длин волн 10–14 мкм при оптической накачке. Установлено, что использование широких квантовых ям с ненулевым содержанием кадмия (~10%) позволяет снизить неоднородное уширение спектра усиления, вызванное флуктуациями толщины ям, и приводит к снижению пороговой интенсивности генерации, обеспечивая реализацию непрерывного режима генерации.

В работе продемонстрирован РОС-лазер на основе HgCdTe с выводом излучения под углом к поверхности. В РОС-лазере получена узкополосная генерация (<4.5 ГГц) на длине волны ~13.5 мкм при криогенных температурах. Таким образом, проведённые исследования подтвердили перспективность гетероструктур с КЯ HgCdTe/CdHgTe для создания компактных лазеров среднего ИК-диапазона. Планируется дальнейшая оптимизация параметров квантовых ям и разработка новых конструкций резонаторов для повышения рабочих температур и уменьшения порогов генерации.

- [1] Morozov S.V., Rumyantsev V.V., Fadeev M.A., et al. // Applied Physics Letters. 2017. Vol. 111, no. 19. P. 192101.  
 [2] Morozov S.V., Rumyantsev V.V., Kadykov A.M. // Applied Physics Letters. 2016. Vol. 108, no. 9. P. 092104.

## СТИМУЛИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПРИ НЕПРЕРЫВНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКЕ И ЛАЗЕРНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ HgCdTe/CdHgTe В ОБЛАСТИ ДЛИН ВОЛН 20–25 МКМ

А.А. Разова<sup>1,2)</sup>, В.В. Румянцев<sup>1,2)</sup>, А.А. Дубинов<sup>1,2)</sup>, Н.Н. Михайлов<sup>3)</sup>,  
Д.В. Шенгуров<sup>1)</sup>, С.В. Морозов<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup> ИФМ РАН

<sup>2)</sup> ННГУ им. Н.И. Лобачевского

<sup>3)</sup> ИФП СО РАН

### Введение

Гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) на основе HgCdTe являются перспективным материалом для межзонных лазеров среднего инфракрасного диапазона благодаря вариабельности от параметров структуры ширины запрещенной зоны от 2 до 60 мкм. Диапазон длин волн 25–60 мкм наиболее интересен из-за отсутствия в этой области спектра как таковых источников излучения, в том числе квантовых каскадных лазеров (ККЛ). Совсем недавно в гетероструктурах с HgCdTe КЯ было продемонстрировано стимулированное излучение (СИ) на длине волны 31 мкм, недоступной ККЛ [1]. Однако данное длинноволновое СИ было получено при импульсной оптической накачке и являлось однопроходовым усиленным излучением. В данной работе демонстрируется СИ структур с КЯ HgCdTe/CdHgTe на длине волны 24 мкм при непрерывной оптической накачке и лазерное излучение (ЛИ) микродисковых резонаторов на основе данных гетероструктур в области длин волн 20–25 мкм, что является рекордным значением для данных структур. Также обсуждаются факторы, ограничивающие возможность генерации СИ при непрерывной оптической накачке.

### Объект и методы исследования

Все исследуемые структуры были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии в Новосибирске в ИФП СО РАН в направлении роста (013) [2]. В таблице приведены параметры структур:  $D$  – толщина буферного слоя CdTe,  $y$  – концентрация кадмия в барьере,  $x$  – концентрация кадмия в квантовой яме,  $d$  – толщина квантовой ямы,  $P_{пор}$  – пороговая плотность мощности оптической накачки,  $\tau_{экс}$  – эффективное время жизни носителей,  $\tau_{изл}$  – расчетное время жизни носителей при излучательной рекомбинации, образец: А – нелегированная GaAs-подложка с 10 мкм CdTe-буфером, В – нелегированная GaAs-подложка с 15 мкм CdTe-буфером, N – легированная до концентрации носителей  $10^{18}$  см<sup>-3</sup> GaAs-подложка с 10 мкм CdTe-буфером; цифра – длина волны стимулированного излучения при 8 К.

Табл.

Образец	$y$ , %	$x$ , %	$d$ , нм	$P_{пор}$ , Вт/см <sup>2</sup>	$\tau_{экс}$ , нс	$\tau_{изл}$ , нс
A22	69	6.7	6.8	12	5	45
B24	65	7.7	7.8	2	30	35
N21	62	2.8	5.2	8	8	70

Микродисковые резонаторы на основе гетероструктур с HgCdTe КЯ диаметром 200 мкм формировались с помощью ионного травления и фотолитографии.

Полученные с помощью растрового электронного микроскопа снимки микродиска приведены на рисунке 1: а – вид сверху, б – вид сбоку. В качестве маски использовался алюминий. Высота микродисков составляла 3.4–4.1 мкм.

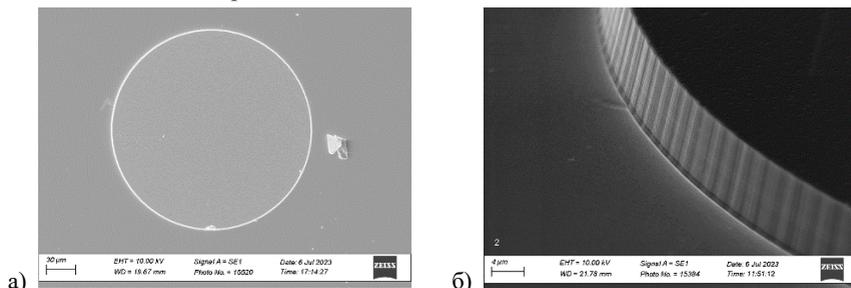


Рис. 1

Спектры ЛИ и СИ были получены с помощью фурье-спектрометра Bruker Vertex 80v. Образец устанавливался на холодный палец гелиевого криостата так, что излучение выходило под углом 2–5 градусов к выходному окну. Далее излучение собиралось с помощью эллиптического зеркала, оптически сопряженного с криостатом и одним из входов спектрометра. В качестве накачки использовался  $\text{CO}_2$ -лазер, работающий на длине волны 10.6 мкм (длительность лазерного импульса изменялась от 10 мс до 20 мкс, что соответствует квазинепрерывному режиму). В качестве детектора использовался HgCdTe-приемник Kolmar Technologies D317.

### Результаты

На рисунке 2 приведены зависимости отношения потерь  $\alpha$  к фактору оптического ограничения  $\Gamma$  от длины волны (ширины запрещенной зоны) для структур с дизайнами А (красная сплошная линия), В (зеленая штрих-пунктирная линия), N (синяя пунктирная линия) и указаны звездами точные значения  $\alpha/\Gamma$  трех исследуемых структур. Видно, что в структуре А-типа модовые потери на порядок больше, чем в структурах В- и N-типа, что связано с утеканием моды в подложку [1]. Уменьшение модовых потерь приводит к уменьшению пороговой плотности мощности накачки, необходимой для получения СИ (табл.). Однако этого недостаточно для повышения максимальной температуры наблюдения СИ и получения генерации при непрерывной оптической накачке. Также необходимо подавить ограничивающую усиление оже-рекомбинацию с участием двух электронов и дырки. Для этого параметры исследуемых структур были оптимизированы со стороны значения пороговой энергии оже-рекомбинации, а накачка структур имела длину волны, близкую к ширине запрещенной зоны, что позволяло избежать разогрева носителей, который также приводит к «включению» оже-процесса при генерации СИ.

В результате при непрерывной оптической накачке спектры СИ были получены только в структуре В24. При этом максимальная температура составила 19 К. На рисунке 3 приведены спектры СИ структуры В24 при разной температуре, на которых видно, что при 20 К спектр уширяется из-за гашения СИ и наблюдается фотолюминесценция.

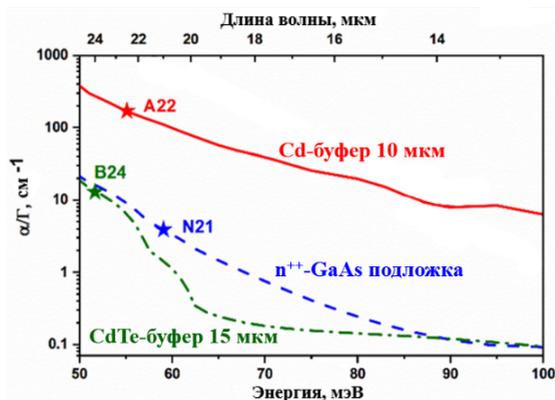


Рис. 2

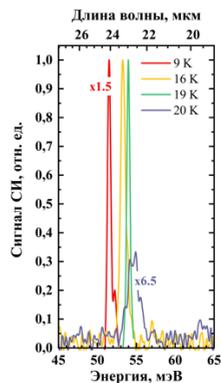


Рис. 3

При этом пороговая плотность мощности накачки оказывается меньше для структуры B24, чем для структуры N21, где пороговая энергия оже-рекомбинации больше, а модовые потери меньше (табл., рис. 2). Используя экспериментальные данные, рассчитаем эффективное время жизни носителей при условии, что время жизни носителей меньше, чем время действия импульса, тогда из уравнения динамики носителей следует, что

$$\tau_{\text{экс}} = \frac{n_{\text{пор}} \cdot h \cdot c}{\alpha \cdot P_{\text{пор}} \cdot \lambda},$$

где  $h$  – постоянная Планка,  $c$  – скорость света,  $\alpha$  – коэффициент поглощения, равный 0.005,  $\lambda$  – длина волны накачки 10.6 мкм,  $P_{\text{пор}}$  – пороговая плотность мощности накачки,  $n_{\text{пор}}$  – пороговая концентрация носителей [3]. Сравнивая эффективное время жизни носителей с временем жизни носителей при излучательной рекомбинации (табл.), видим, что только для структуры B24 теоретическое и экспериментальное значения времен совпадают, в то время как для двух других исследуемых структур полученные из экспериментальных данных времена жизни носителей оказываются меньше. Такое уменьшение времени жизни можно объяснить различной скоростью безызлучательной рекомбинации Шокли–Рида–Холла из-за различной концентрации остаточных дефектов, играющих роль центров рекомбинации [4].

На основе структуры с КЯ HgCdTe/CdHgTe с легированной GaAs-подложкой методом ионного травления и литографии также были сформированы микродисковые резонаторы. Спектры ЛИ микродиска при разных температурах представлены на рисунке 4. На спектрах видны моды шепчущей галереи, спектральная ширина линий которых составляет 0.1–0.5 мэВ, что на порядок ниже, чем ширина линии СИ.

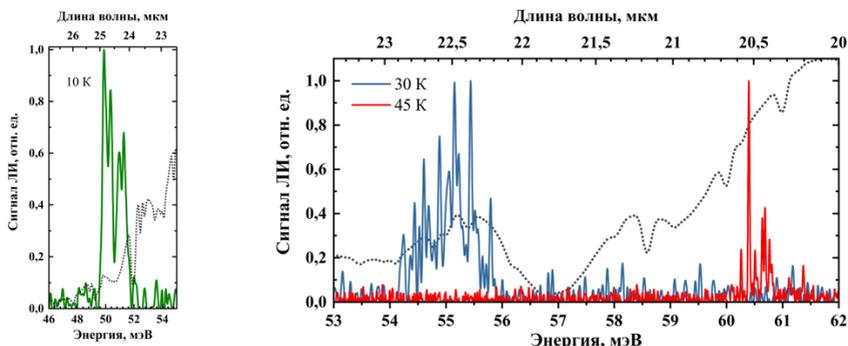


Рис. 4

Таким образом, в работе представлены спектры стимулированного излучения гетероструктуры с квантовыми ямами  $\text{HgCdTe}/\text{HgCdTe}$ , выращенной на легированной  $n^+$ - $\text{GaAs}$  подложке с концентрацией носителей  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ , при непрерывной оптической накачке с плотностью мощности  $2 \text{ Вт/см}^2$ . Показано, что ввиду отсутствия корреляции порогов возникновения СИ с величиной модовых потерь наблюдаемый разброс пороговых значений интенсивности накачки связывается с различной скоростью рекомбинации Шокли–Рида–Холла в рамках исследованной серии структур из-за различной концентрации остаточных дефектов, играющих роль центров рекомбинации. Также в работе впервые продемонстрировано лазерное излучение микродисковых резонаторов на основе структур с  $\text{HgCdTe}$  КЯ в диапазоне длин вол  $20\text{--}25 \text{ мкм}$  при криогенных температурах. Это показывает возможности создания полноценных межзонных лазеров на основе исследуемых структур, работающих в области терагерцовой «дыры» ( $25\text{--}60 \text{ мкм}$ ) при различной оптической накачке.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (грант FSWR-2020-0035).

- [1] Rumyantsev V.V., Dubinov A.A., Utochkin V.V., Fadeev M.A., Aleshkin V.Ya., Razova A.A., Mikhailov N.N., Dvoretzky S.A., Gavrilenko V.I., Morozov S.V. // *Applied Physics Letters*. 2022. Vol. 121, no. 18. P. 182103.
- [2] Dvoretzky S., Mikhailov N., Sidorov Yu., Shvets V., Danilov S., Wittman B., Ganichev S. // *Journal of Electronic Materials*. 2010. Vol. 39, no. 7. P. 918.
- [3] Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясневич И.Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. – СПб: Изд-во ПИЯФ, 1997. С. 376.
- [4] Rumyantsev V.V., Mazhukina K.A., Utochkin V.V., Kudryavtsev K.E., Aleshkin V.Ya., Razova A.A., Kuritsin D.I., Fadeev M.A., Antonov A.V., Mikhailov N.N., Dvoretzky S.A., Gavrilenko V.I., Teppe F., Morozov S.V. // *Applied Physics Letters*. 2024. Vol. 124, no. 16. P. 161111.

## РОЛЬ ИНДУЦИРОВАННОГО ДИПОЛЯ В ПОГЛОЩЕНИИ СМЕСИ МОЛЕКУЛ CO И AR В ДАЛЬНОМ ИК-ДИАПАЗОНЕ

А.Ю. Секачева<sup>1)</sup>, А.А. Финенко<sup>2)</sup>, Д.Н. Чистиков<sup>2)</sup>, А.А. Вигасин<sup>2)</sup>,  
Т.А. Галанина<sup>1)</sup>, А.О. Королева<sup>1)</sup>, М.А. Кошелев<sup>1)</sup>, М.Ю. Третьяков<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> ИИФ РАН

<sup>2)</sup> ИФА им. А.М. Обухова РАН

В последние годы достигнут значительный прогресс в теоретическом описании спектров поглощения молекул, не имеющих собственного дипольного момента. Среди теоретических подходов к моделированию индуцированных спектров выделяется метод классических траекторий, основанный на анализе динамики слабосвязанных систем в рамках классической механики [1]. Данный метод демонстрирует хорошее согласие с экспериментальными данными [2, 3]. Особый интерес представляет применение данного метода к дипольным системам, поскольку их поглощение формируется как за счёт резонансного вклада постоянного дипольного момента, так и благодаря столкновительно-индуцированному вкладу наведённого диполя. Очевидно, что поглощение в области дальних крыльев резонансных линий мономеров обусловлено эффектами межмолекулярного взаимодействия, для учета которых ударного приближения недостаточно. Вместе с тем детальная роль межмолекулярных пар, ответственных за возникновение индуцированного диполя, в формировании этих крыльев остаётся невыясненной.

Настоящая работа посвящена траекторному моделированию компоненты поглощения, обусловленной наведенным диполем, в системе CO-Ar, в которой линейная молекула обладает собственным дипольным моментом. Влияние взаимодействия между постоянным и наведенным диполями на спектральные характеристики будет рассмотрено на следующей стадии нашего исследования.

Применение метода классических траекторий для моделирования спектров столкновительно-индуцированного поглощения включает в себя три этапа. Первый этап предполагает построение гладких аппроксимаций поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и индуцированного дипольного момента (ПИДМ). Благодаря относительной вычислительной простоте траекторного подхода в отличие, например, от метода молекулярной динамики, становится возможным использование поверхностей, полученных с помощью *ab initio* методов квантовой химии. В частности, ППЭ и ПИДМ системы CO-Ar были рассчитаны с использованием метода связанных кластеров CCSD(T) в работах [4,5]. Точность используемой ППЭ подтверждается хорошим согласием рассчитанных с ее помощью величин второго вириального коэффициента с экспериментально измеренными значениями.

На втором этапе осуществляется построение ансамбля траекторий столкновения молекул, характеризующихся распределением начальных условий, соответствующим распределению Больцмана  $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; T) \propto \exp\left(-\frac{H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{k_B T}\right)$ . Для описания временной динамики столкновения используются уравнения движения в форме Гамильтона. Для пары CO-Ar система уравнений движения в сферической системе координат принимает следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{R} = \frac{p_R}{M} \\ \dot{\Theta} = \frac{p_\Theta}{\mu_3 R^2} \\ \dot{\Phi} = \frac{p_\Phi}{\mu_3 R^2 \sin^2 \Theta} \\ \dot{\theta}_1^t = \frac{p_\Theta}{\mu_2 l^2} \\ \dot{\varphi}_1^t = \frac{p_{\varphi_1^t}}{\mu_2 l^2 \sin^2 \theta_1^t} \\ \dot{p}_R = \frac{p_\Theta^2}{\mu_3 R^3} + \frac{p_\Phi^2}{\mu_3 R^3 \sin^2 \Theta} - \frac{\partial U}{\partial R} \\ \dot{p}_\Theta = \frac{p_\Theta^2 \cos \Theta}{\mu_3 R^2 \sin^3 \Theta} - \frac{\partial U}{\partial \Theta} \\ \dot{p}_\Phi = -\frac{\partial U}{\partial \Phi} \\ \dot{p}_{\theta_1^t} = \frac{p_{\varphi_1^t}^2 \cos \theta_1^t}{\mu_2 l^2 \sin^3 \theta_1^t} - \frac{\partial U}{\partial \theta_1^t} \\ \dot{p}_{\varphi_1^t} = -\frac{\partial U}{\partial \varphi_1^t} \end{array} \right. \quad (1)$$

Для нахождения траекторий столкновения необходимо численно проинтегрировать систему уравнений (1). Для этого использовалась процедура CVODE из пакета для решения дифференциальных уравнений SUNDIALS [6]. Использовался вариант процедуры, реализующий BDF-формулы переменного порядка. Для решения нелинейных уравнений, возникающих в результате применения BDF-формул, применялся стандартный метод Ньютона. Вычисления производились с двойной точностью со значением параметра, определяющего относительную ошибку решения, равным  $10^{-15}$ .

Третий этап метода траекторных расчетов – это получение коэффициента поглощения  $\alpha(\nu)$ , который может быть записан в следующем виде:

$$\alpha(\nu) = \frac{(2\pi)^4 N_L^2}{3h} \nu \left[ 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \right] J(\nu), \quad (2)$$

где  $N_L$  – число Лошмидта,  $\nu$  – частота,  $J(\nu)$  – спектральная функция, которая может быть получена как Фурье-образ функции автокорреляции суммарного дипольного момента  $\boldsymbol{\mu}$  системы, вычисленной вдоль траектории столкновения:

$$C(t) = \frac{\nu}{4\pi\epsilon_0} \langle \boldsymbol{\mu}(\mathbf{0}) \cdot \boldsymbol{\mu}(t) \rangle. \quad (3)$$

Результаты расчета коэффициента поглощения, связанного с индуцированным диполем в системе CO-Ag, приведены на рис. 1.

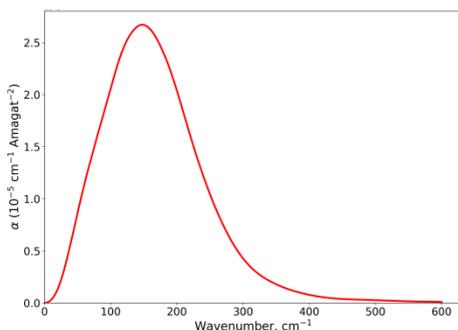


Рис. 1

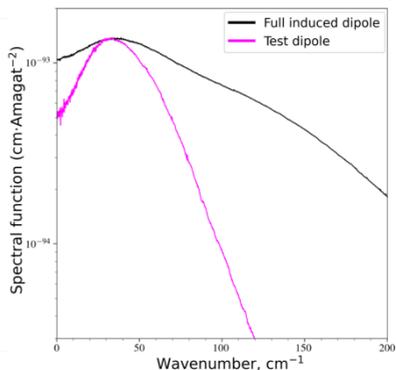


Рис. 2

Полученный спектр поглощения по своей форме аналогичен спектрам индуцированного поглощения для неполярных молекулярных систем. Вместе с тем, нормированная на квадрат частоты спектральная функция демонстрирует особенность вблизи  $40 \text{ см}^{-1}$ , отсутствующую в случае бездипольных молекул (рис. 2). Как правило, для аппроксимации поверхности индуцированного диполя используют разложение по сферическим функциям. В симметричных неполярных системах молекул присутствуют только четные члены разложения, однако для несимметричной молекулы CO в разложении будут присутствовать как четные, так и нечетные слагаемые. Расчеты показали, что «четная» и «нечетная» компоненты диполя проявляются на разных частотах. Использование тестового диполя вида  $\mu = \frac{\sin\theta}{R^3}$  подтвердило (рис. 2, розовая кривая), что «нечетная» часть формирует спектр с пиком в R-полосе, а четная – во вращательной S-полосе, что соответствует системе с симметричной линейной молекулой.

На рис. 3 представлено сравнение экспериментальных и расчётных значений коэффициента поглощения для смеси CO-Ar. Точками представлены экспериментальные значения, полученные в работе [7] в смеси газов при высоких давлениях. Пунктирные линии показывают результат разложения экспериментального спектра на два пика с использованием формы линии K2 [8]:

$$\alpha = \frac{4\pi^2}{3nc} \omega \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \right] \sum_n \Gamma_n G_n(\omega, T),$$

$$G(\omega, T) = \frac{2}{3\pi\eta} \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)} \left(\frac{\omega}{\eta}\right)^2 K_2\left(\frac{\omega}{\eta}\right), \quad (4)$$

где  $K_2$  – это модифицированная функция Бесселя 2-го порядка. Спектр, полученный в результате траекторного расчета и представленный розовой кривой, демонстрирует качественное согласие со вторым пиком, имеющим максимум примерно при  $100\text{--}110 \text{ см}^{-1}$ .

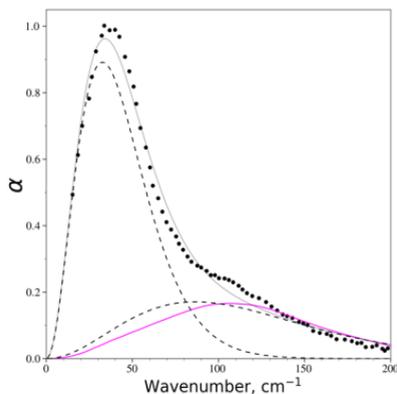


Рис. 3

Методом классических траекторий проведен расчет спектрального вклада, обусловленного автокорреляцией индуцированного диполя в системе CO-Ag. Было показано качественное согласие рассчитанного спектра с одной из компонент экспериментально измеренного спектра смеси CO-Ag при высоких давлениях. Этот результат открывает перспективы для дальнейшего анализа детальной структуры спектра поглощения полярных молекул, возмущенных партнерами по столкновениям. Выяснение природы формирования столкновительно-уширенных спектров – необходимый этап развития теории континуального поглощения, который в конечном итоге должен позволить уточнить модели радиометрического мониторинга и спутниковой связи.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (проект FFUF-2024-0016).

- [1] Chistikov D.N. et al. // *J. Chem. Phys.* 2019. Vol. 151. P. 194106.
- [2] Galanina T.A. et al. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2024. Vol. 26. P. 15032.
- [3] Serov E.A. et al. // *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* 2024. Vol. 328. P. 109172.
- [4] Pederson T.B. et al. // *Journal of chemical physics.* 2002. Vol. 117, no. 14.
- [5] Rizzo A. et al. // *Molecular Physics.* 2008. Vol. 106, No. 07. P. 881.
- [6] Hindmarsh A. C., Brown P. N., Grant K. E. et al. // *ACM Transactions on Mathematical Software.* 2005. Vol. 31, no. 3. P. 363.
- [7] Buontempo U., Cunsolo S., Jacucci G. // *The Journal of Chemical Physics.* 1973. Vol. 59. P. 3750.
- [8] Hunt J.L., Poll J.D. // *Can. J. Phys.* 1978. Vol. 56. P. 950.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРОВ И ПРОДУКТОВ ТЕРМОЛИЗА МОЧИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РЕЖИМА ПИТАНИЯ МЕТОДАМИ ТГЦ СПЕКТРОСКОПИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ**

**Е.В. Виноградова<sup>1)</sup>, В.Л. Вакс<sup>2)</sup>**

<sup>1)</sup> *ННГУ им. Н.И. Лобачевского*

<sup>2)</sup> *ИФМ РАН*

### ***Введение***

Потребности современной промышленности в обнаружении микропримесей высокочистых веществ, а также необходимость разработки методов неинвазивной диагностики в медицине и создания приборов непрерывного мониторинга атмосферы для экологических исследований и с целью обнаружения опасных веществ, уже несколько десятилетий остаются актуальными задачами в области спектроскопии. Для решения большинства этих задач требуются высокие чувствительность и разрешающая способность, реализуемые одновременно. Одной из актуальных задач является выявление зависимости химического состава метаболитов от режима питания.

Хорошие перспективы решения проблемы имеет спектроскопия ТГц-диапазона, т.к. ТГц-излучение не является ионизирующим, что позволяет использовать его в работе с биологическими тканями и жидкостями. В этом диапазоне лежат высокоинтенсивные линии поглощения многих веществ, наиболее важных для решения указанных ранее задач.

### ***Экспериментальная установка***

Работа была выполнена на ТГц-спектрометре с быстрым свипированием по частоте, схема которого представлена на рис. 1. Спектрометр предназначен для регистрации спектра поглощения многокомпонентной газовой смеси во всём рабочем диапазоне спектрометра (115– 170 ГГц) [1].

Время регистрации составляет порядка нескольких секунд, что позволяет детектировать исходные, промежуточные и конечные продукты быстропротекающих химических реакций. В качестве источника воздействующего на газ излучения используется лампа обратной волны (ЛОВ) двухмиллиметрового диапазона длин волн. Питание ЛОВ осуществляется при помощи высоковольтного (0,3– 1,6 кВ) источника напряжения, ЛОВ работает в петле фазовой автоподстройки частоты (ФАПЧ) для обеспечения требований спектроскопии высокого разрешения, где задающим частоту является генератор линейно частотно модулированного сигнала (ЛЧМ). Приёмная часть спектрометра включает в себя детекторный модуль и цифровой приёмный блок. Детекторный модуль содержит детекторную головку с диодом Шоттки. Управление и контроль основных узлов спектрометра, а также обработку спектроскопических сигналов осуществляет встроенный компьютерный модуль. Обмен данными между компьютером и узлами спектрометра производится по ISA-шине через соответствующие контроллеры. Использование субТГц- и ТГц-спектроскопии на основе эффекта быстрого прохождения частоты излучения через линию молекулярного резонанса позволяет получить высокую чувствительность и широкую спектроскопическую информацию при

аналитических исследованиях многокомпонентных газовых смесей, спектральных исследованиях в молекулярных пучках, исследованиях быстропротекающих процессов [2].

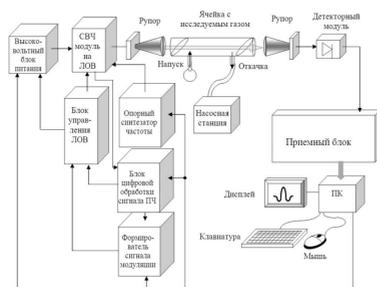


Рис. 1

звона линии и линейно модулированного по частоте сигнала источника, который просто проходит через ячейку [1].

### *Пробоподготовка*

В качестве участников эксперимента по исследованию паров и продуктов термоллиза мочи в зависимости от режима питания выступили два относительно здоровых добровольца, каждый из которых сдал по 3 анализа: первый на голодный желудок с утра, второй после употребления в пищу сладкого, третий после употребления алкоголя и жирной пищи.

В лаборатории образец помещался в колбу, подсоединенную к азотной ловушке, которая соединена с вакуумированной до давления  $5 \cdot 10^{-4}$  мбар измерительной ячейке. Проводилось вымораживание образца для его обезвоживания. Затем ловушка отсоединялась, и колба с образцом напрямую подсоединялась к ячейке, осуществлялась вакуумная сушка и нагрев колбы до 200–250°C, а затем напуч смеси паров и продуктов термического разложения образца в ячейку. Далее были зарегистрированы спектры поглощения паров и продуктов термического разложения биологических образцов во всем рабочем диапазоне спектрометра. Последовательно записывались спектры поглощения в относительно чистой и в наполненной многокомпонентной газовой смеси ячейке. Для определения центральных частот линий поглощения использовалась специальная программа. Идентификация веществ по линиям поглощения осуществлялась при помощи программы на основе баз данных NASA и CDMS [4, 5].

### *Результаты исследования паров и продуктов термоллиза мочи в зависимости от пищевого поведения*

На сводной диаграмме линий поглощения паров и продуктов термоллиза биологической жидкости первого добровольца (рис. 2) можно проследить следующие зависимости: во всех трех образцах в примерно равном количестве присутствуют изоциановая кислота, аланин, мочевины, этиленгликоль и др.

Разработанный и реализованный в ИФМ РАН спектрометр с быстрым свипированием позволяет проходить весь рабочий диапазон в 60 ГГц за время около 30 с. Это позволяет зарегистрировать все линии поглощения веществ, которые находятся в исследуемой ячейке, лежащие в данном диапазоне и имеющие при содержании веществ в смеси интенсивность, достаточную, чтобы зарегистрировать их над уровнем шумов [3].

Форма линии определяется биением двух сигналов: спадающего по экспоненте

При употреблении алкоголя в спектре отсутствует этилформиат, наблюдается снижение количества пентаннитрила, аминопропонирилла, и возрастает количество дигидроксиацетона, муравьиной кислоты и др., характерно наличие пропанала и гликольальдегида, а при употреблении сладкого в спектре отсутствуют муравьиная кислота, сероокись углерода, возрастает количество моноэтаноламина.

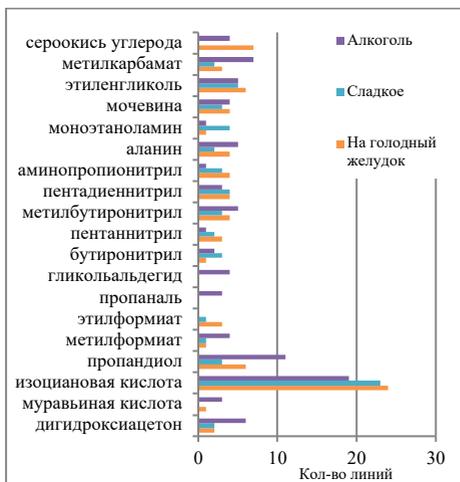


Рис. 2

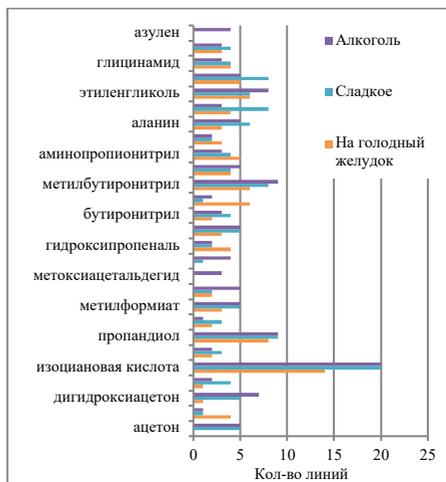


Рис. 3

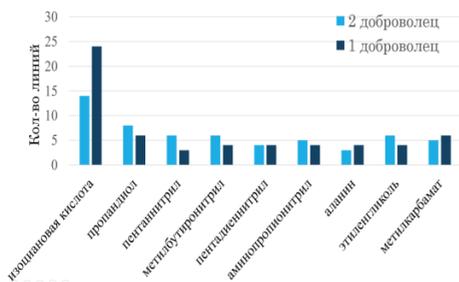


Рис. 4

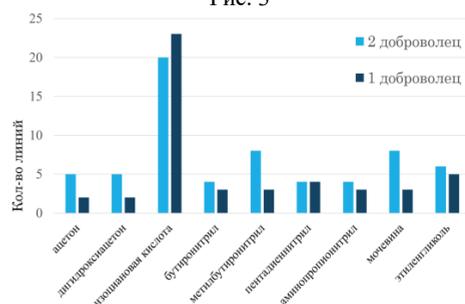


Рис. 5

На сводной диаграмме линий поглощения паров и продуктов термолитиза биологической жидкости второго добровольца (рис. 3) отметим следующее: ацетон присутствует только после употребления какой-либо пищи, а также возрастает количество дигидроксиацетона, метилбутиронитрила, аланина. В примерно равных количествах присутствуют: этиленгликоль, глицинамид и др. После употребления алкоголя характерно наличие метоксиацетальдегида, азулена и увеличено количество ацетальдегида, гликольальдегида, этиленгликоля. После употребления в пищу сахара виден рост количества линий фенола, аланина, мочевины и др.

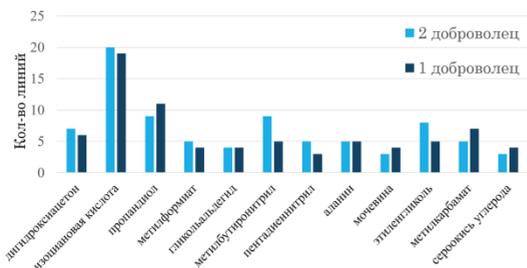


Рис. 6

При сравнении соответствующих образцов как на голодный желудок, так и после употребления сладкого и алкоголя выявлен ряд веществ, характерных для одного и другого образца, см. рис. 4–6 соответственно. Из этих диаграмм видно, что есть совпадающие вещества, а количество линий для двух добровольцев примерно одинаково.

### Заключение

Таким образом, в результате исследований выявлена зависимость состава паров и продуктов термолитиза биологической жидкости человека от режима питания. Были выявлены как общие, так и различные вещества, присутствующие при всех режимах. Это подтверждает возможность использования ТГц-спектрометра с быстрым свипированием по частоте для неинвазивной диагностики и мониторинга состояния здоровья.

- [1] Вакс В.Л., Анфертьев В.А., Балакирев В.Ю., Басов С.А., Домрачева Е.Г., Иллюк А.В., Куприянов П.В., Приползин С.И., Черняева М.Б. Спектроскопия высокого разрешения терагерцевого частотного диапазона для аналитических приложений // УФН. 2020. Т. 190. С. 765.
- [2] Вакс В.Л., Анфертьев В.А., Черняева М.Б., Домрачева Е.Г., Приползин С.И., Баранов А.Н., Тессье Р., Айзенштадт А.А., Гаврилова К.А. О возможности продвижения метода нестационарной газовой спектроскопии, реализованного путём быстрого свипирования частоты, вверх по терагерцевому диапазону // Изв. вузов. Радиофизика. 2022. Т. 65, № 10. С. 835.
- [3] Вакс В.Л., Домрачева Е.Г., Черняева М.Б., Анфертьев В.А., Яблоков А.А. Терагерцевая нестационарная спектроскопия высокого разрешения: современное состояние и направления развития // Оптический журнал. 2024. Т. 91, № 1. С. 39.
- [4] Pickett H.M. et al. Submillimeter, millimeter, and microwave spectral line catalog // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1998. Vol. 60, no. 5. P. 883.
- [5] Endres C.P. et al. The cologne database for molecular spectroscopy, CDMS, in the virtual atomic and molecular data centre, VAMDC // Journal of Molecular Spectroscopy. 2016. Vol. 327. P. 95.

Секция «Общая физика»

Заседание секции проводилось 16 мая 2025 г.  
Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова.  
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.