

Труды XXI научной конференции по радиофизике

**СЕКЦИЯ
«ОБЩАЯ ФИЗИКА»**

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

КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ НЕЙТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ В ЛОКАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ФОТОПОЛИМЕРИЗУЮЩЕГОСЯ СЛОЯ НЕСТАЦИОНАРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

М.А. Анохина^{1,2)}, С.Н. Менсов^{1,2)}, Ю.В. Полуштайцев²⁾

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского

²⁾Институт металлоорганической химии РАН

На основе неоднородно-структурированных по показателю преломления полимерных материалов в настоящее время создаются элементы градиентной и голографической оптики, планарные волноведущие структуры. Использование фотополимеризующихся композиций (ФПК) с нейтральной компонентой (НК) позволяет формировать такие структуры в плоских слоях оптическим излучением при инициировании процесса полимеризации светом с неоднородным распределением интенсивности [1]. В этом случае нейтральная компонента вытесняется из освещённых областей и накапливается в теневых участках за счёт диффузионных процессов, и тем самым при различии показателей преломления НК и полимера формируются градиенты оптической плотности вдоль полимерного слоя. Однако амплитуда концентрационных неоднородностей, образующихся под действием излучения с неизменным во времени распределением интенсивности, невелика. Это связано с тем, что размеры областей, в которых происходит перераспределение компонент композиции, не превышают нескольких диффузионных масштабов $\rho = (D_M \tau)^{0.5}$, где D_M – коэффициент самодиффузии мономера, τ – время молинизации композиции.

Для создания полимерных структур с большими по амплитуде неоднородностями исследована возможность использования нестационарных световых потоков – движущихся вдоль слоя ФПК границ освещённости. При воздействии на среду излучением с одной такой границей в переходной области формируется участок с повышенным содержанием нейтральной компоненты, который перемещается вместе с ней [2]. Двумя встречными границами света и тени (рис. 1) можно локально сформировать обогащённую область, остановив движение границ на требуемом расстоянии. Концентрация жидких компонент ФПК в ещё незаполимеризованном участке слоя будет выравниваться за счёт диффузионных процессов. Дальнейшую полимеризацию этой области следует проводить однородным излучением. При этом локальное содержание НК в полимере может в несколько раз превышать исходное значение.

Методом численного моделирования было установлено, что большее количество нейтральной компоненты вытесняется в теневую область при более медленном сближении границ освещённости. Тогда эффективное накопление НК будет достигаться при малых дистанциях, а в экспонированной области образующийся полимер будет содер-

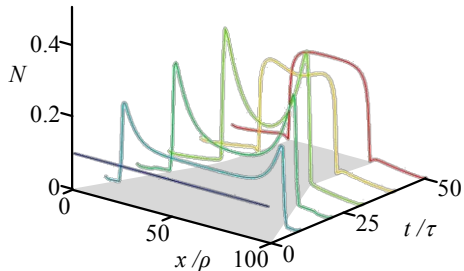


Рис. 1

жать меньшее количество НК по сравнению с исходным. За счёт того, что процесс вытеснения НК переходит установившийся режим по трассе перемещения световой границы (когда в светлых областях остаётся такое же количество нейтральной компоненты, что и до экспонирования), участок с накопленной НК можно транспортировать вдоль слоя на значительные расстояния. Это позволяет формировать обогащённые нейтральной компонентой локальные области, окружённые полимером с исходным содержанием НК.

Для экспериментальной реализации процесса локализации нейтральной компоненты под действием излучения с нестационарным распределением интенсивности применялась ФПК на основе ОКМ-2 с бутанолом в качестве нейтральной компоненты. Необходимое динамическое распределение интенсивности создавалось с помощью DLP проектора с дополнительной оптической системой, формирующей уменьшенное изображение в плоскости слоя ФПК. Полученные полимерные структуры анализировались с использованием интерференционного микроскопа. На рис. 2 участкам с большей разностью фаз соответствуют области с повышенным содержанием бутанола.

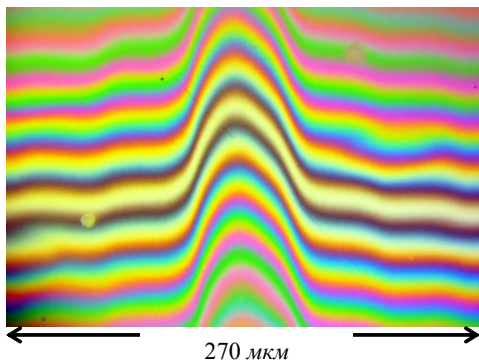


Рис. 2

Таким образом, при встречном движении двух границ света и тени вдоль слоя ФПК можно локализовать значительное количество нейтральной компоненты в заданном участке слоя. Результаты численного моделирования и экспериментального исследования показали, что локальное повышение концентрации НК в полимерном слое предложенным способом может достигнуть 60 масс.% при её начальном содержании 10 масс.%.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 15-13-00137).

- [1] Батенькин М.А., Менсов С.Н., Романов А.В. // Оптика и спектроскопия. 2008. Т. 104, № 1. С. 149.
- [2] Батенькин М.А., Менсов С.Н., Морозова М.А., Полуштайцев Ю.В. // В кн.: Тр. XVIII научн. конф. по радиофизике. 13-17 мая 2013 г. / Ред. А.В. Якимов. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2013. С. 34.

ПРЕЦИЗИОННАЯ ЮСТИРОВКА ПРОДОЛЬНОЙ СТЕПЕНИ СВОБОДЫ СОСТАВНЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК

Е.А. Бурова¹⁾, И.В. Яковлев^{1,2)}

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского

²⁾Институт прикладной физики РАН

Дифракционные решетки широко применяются в спектроскопических приборах, в астрономических телескопах, а также в стретчерах и компрессорах сверхмощных лазерных систем, основанных на принципе усиления chirпированных импульсов (chirped pulse amplification, CPA): усилении предварительно растянутых во времени сверхкоротких импульсов с последующим их сжатием в компрессоре до исходных длительностей. Предельные значения энергии импульсов в таких системах определяются размером дифракционных решеток компрессора. Эффективное увеличение размера решеток возможно за счет использования составных дифракционных решеток, состоящих из двух или более частей. Для того чтобы составная дифракционная решетка работала как цельная, необходима юстировка ее составных частей с прецизионной точностью [1–3].

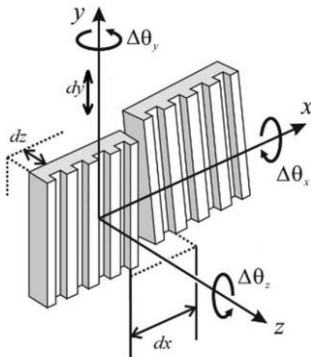


Рис. 1

В общем случае составная дифракционная решетка имеет 6 степеней свободы: три поступательных и три вращательных (рис.1). Легко показать, что существенными для задачи юстировки являются лишь пять из них: смещение dz перпендикулярно к рабочей поверхности; смещение dx , отвечающее за непрерывность периода; повороты $\Delta\theta_x$ и $\Delta\theta_y$, отвечающие за непрерывность рабочей поверхности и $\Delta\theta_z$ – за параллельность штрихов. Поскольку в традиционных CPA системах период штрихов решетки сравним с длиной волны используемого излучения (плотность штрихов решеток 1200–1800 линий/мм; $\lambda \sim 800\text{--}1000$ нм), то точности настройки про-

дольного и поперечного сдвигов dz и dx должны быть не хуже $\sim \lambda/20$.

Настоящая работа посвящена исследованию методов юстировки продольного сдвига dz составных дифракционных решеток.

Одним из известных методов настройки составных решеток является интерференционный метод [4–6]. В его основе лежит интерференционная схема Майкельсона (рис. 2): пучок когерентного излучения после выхода из расширяющего телескопа с помощью клина разделяется на два. Отраженный клином пучок отражается от плоского опорного зеркала и через клин идет на систему регистрации. Прошедший через клин пучок падает на составную решетку (в модельном эксперименте – составное зеркало) таким образом, чтобы примерно равные части пучка попали на разные настраиваемые зеркала. Пучок отражается от составного зеркала и после отражения от клина идет на систему регистрации, основными элементами которой являются CCD-камера и линза,

переносящая изображение из плоскости составного зеркала на камеру. В плоскости камеры наблюдается интерференция пучков, отраженных разными плечами интерферометра. При этом в процессе настройки интерферометра также юстируются угловые степени свободы $\Delta\theta_x$ и $\Delta\theta_y$.

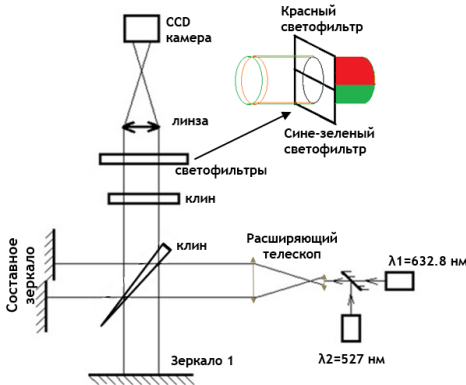


Рис. 2

половине длины волны: $m\lambda/2$, где m – целое число. Для точной однозначной настройки сдвига зеркал можно использовать два источника излучения с различными длинами волн, не кратными друг другу. Например, в проведенном нами эксперименте (рис. 2) мы использовали излучение He-Ne лазера с длиной волны $\lambda_1=632.8$ нм (красный цвет) и излучение лазера-указки с $\lambda_2=527$ нм (зеленый цвет). При этом одновременное совпадение интерференционных картин на обеих длинах волн означает точную настройку взаимного расположения зеркал (решеток).

Заметим, что ближайшее (не точное) положение частей составного зеркала, при котором также будут наблюдаться совпадающие интерференционные полосы, будет при $\Delta z=0.8337$ мм, что легко различимо глазом. Таким образом, точной настройки сдвига dz можно добиться с помощью двухчастотного интерференционного метода юстировки составных решеток.

Ввод излучения на двух длинах волн осуществлялся с помощью расположенного перед телескопом полупрозрачного зеркала (рис. 2). Для одновременного наблюдения на камере интерференционных картин на λ_1 и λ_2 использовался набор светофильтров, а также клин, позволивший уменьшить зазор между верхней и нижней частями изображения. Таким образом, верхняя половина полученной картинке (рис. 3) соответствует интерференции зеленого излучения лазера-указки, а нижняя – He-Ne-лазера. Правая и левая половины отвечают за части составного зеркала.

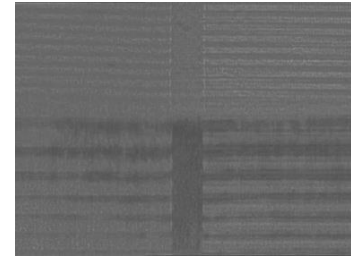


Рис. 3

Следует заметить, что использование в работе составного зеркала вместо составной дифракционной решетки вполне оправданно, поскольку при нормальном падении излучения на решетку отражение в нулевой порядок дифракции полностью соответствует отражению излучения от плоского зеркала.

С помощью интерференционной схемы при использовании только одной длины волны можно настроить относительный продольный сдвиг зеркал лишь с точностью, кратной

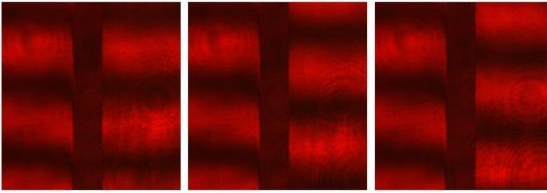


Рис. 4

Для обработки полученного изображения была написана программа в среде Matlab, рассчитывавшая спектр и сравнивавшая частоту (период) следования интерференционных полос слева и справа. Совпадение направлений интерференционных полос, а также частоты их следования соответствовали точной настройке углов наклона $\Delta\theta_x$ и $\Delta\theta_y$ составных зеркал. При изменении сдвига dz одного из настраиваемых зеркал относительно другого интерференционные линии, обусловленные этим зеркалом, «ползут» по экрану в вертикальном направлении (рис. 4). Положение зеркал, при котором все полосы правой и левой половин экрана одновременно являются продолжением друг друга, является искомым положением настроенного составного зеркала.

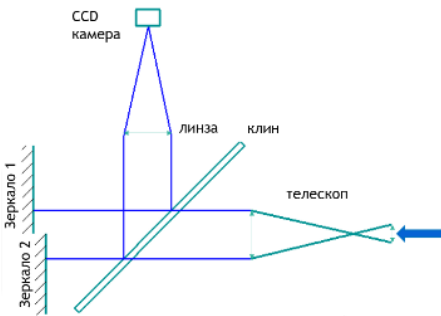


Рис.5

Другим исследованным в настоящей работе методом настройки составных решеток был метод, основанный на регистрации дальней зоны широкого пучка, отраженного такой решеткой [7–9].

Схема экспериментальной установки (рис. 5) похожа на рассмотренную выше схему, но теперь здесь нет интерферометра Майкельсона (нет опорного зеркала), а приемная ССД-камера находится в фокусе линзы.

Распределение поля излучения в фокусе линзы (дальней зоне пучка) вычисляется через преобразование Фурье:

$$E_f = \iint A(dz) e^{-\frac{x^2+y^2}{r^2}} e^{ik \frac{xx'+yy'}{f}} dx dy,$$

где $A(dz)$ – амплитуда поля, f – фокусное расстояние линзы, r – радиус пучка на выходе из телескопа, x' и y' – новые координаты в фокальной плоскости. Нами предполагалось, что на выходе расширяющего телескопа поперечное распределение интенсивности в пучке имело гауссов вид.

Распределение интенсивности в фокусе линзы рассчитывалось с помощью созданной программы, позволявшей получать результат при различных отстройках dz . Результаты хорошо согласовались с расчетами, представленными в [7]. На рисунке 6 слева направо представлены полученные нами распределения интенсивности в фокусе линзы при $\Delta\Phi=0.2\pi$ ($dz=0.05\lambda$), $\Delta\Phi=0.4\pi$ ($dz=0.1\lambda$), $\Delta\Phi=0.8\pi$ ($dz=0.2\lambda$), $\Delta\Phi=\pi$ ($dz=0.25\lambda$).

Результаты проведенного эксперимента представлены на рисунке 7. Видно, что они хорошо согласуются с теоретической моделью (рис.6). Следует заметить, что уже

при относительном сдвиге частей составного зеркала, равном $\lambda/20$, или 32 нм, образуется второе пятно, что дает нам возможность увидеть даже такой маленький сдвиг.

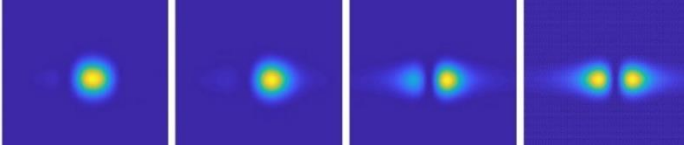


Рис. 6

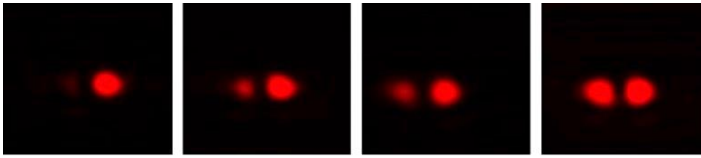


Рис. 7

Сравнение интерференционного метода и метода, основанного на наблюдении дальней зоны излучения, показало, что оба метода позволяют настроить сдвиг dz с точностью, определяемой чувствительностью и разрешением камеры, а также возможностями механической системы позиционирования решеток.

Более того, при работе в первом порядке дифракции с помощью метода наблюдения дальней зоны можно точно настроить сдвиг dx , отвечающий за непрерывность периода штрихов составной решетки, и поворот $\Delta\theta z$, отвечающий за параллельность штрихов.

- [1] Zhang T., Yonemura M., Kato Y. // Opt. Commun. 1998. P. 145.
- [2] Kessler T.J., Bunkenburg J., Huang H., Kozlov A., Meyerhofer D.D. // Opt. Lett. 2004. P. 29.
- [3] Cotel A., Crotti C., Audebert P., Le Bris C., Le Blanc C. // Opt. Lett. 2007. P. 32.
- [4] Bunkenburg J., Kessler T.J., Skulski W. and Huang H. // Opt. Lett. 2006. Vol. 31, № 10. P. 1561.
- [5] Hu Y., Zeng L., Li L. // Optics communications. 2007. P. 269.
- [6] Zeng L. and Li L. // Opt. Lett. 2006. Vol. 31, № 2. P. 152.
- [7] Cotel A., Crotti C., Audebert P., Le Bris C., and Le Blanc C. // Opt. Lett. 2007. Vol. 32, № 12. P. 32.
- [8] Montant S., Marre G., Blanchot N., Rouyer C., Videau L., Sauteret C. // Opt. Expr. 2006. Vol. 14, № 25. P. 12532.
- [9] Zuo Y., Wei X., Wang X., Zhu Q., Ren R., Huang Z., Liu H., Ying C. // Opt. Lett. 2007. Vol. 32, № 3. P. 280.

ВЛИЯНИЕ ИНЕРЦИОННОСТИ ПРИМЕСИ НА ФОРМИРОВАНИЕ МНОГОПОТОКОВОСТИ ЕЁ ДВИЖЕНИЯ В ТУРБУЛЕНТНОЙ ВЯЗКОЙ СРЕДЕ

С.Е. Лосев, Е.З. Грибова

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Исследование статистических характеристик распространения инертной плавучей примеси в турбулентной среде – достаточно актуальная задача для экологического мониторинга и предсказания климатических изменений. Существует значительное число работ, посвящённых этой теме. Например, в статьях [1,2] утверждается, что консервативная плавучая примесь подвержена кластеризации в дивергентном гидродинамическом потоке. Для малоинерционных частиц кластеризация возможна и в случайных бездивергентных полях скоростей [3]. Кластеризация на поверхности жидкости была описана в [4]. Кроме того, были попытки построить модель поведения примеси с учётом совместнодействия молекулярной и турбулентной диффузии [5]. К настоящему моменту количество публикаций, в которых при распространении пассивной примеси учитываются в том числе и инерционные характеристики частиц [3,6–8], относительно невелико. Цель данной работы – теоретическое прогнозирование появления многопоточности на основе численной модели поведения плавучей примеси в случайном поле скоростей с учётом инертности частиц.

Известно, что частицы, благодаря своим инертным свойствам, способны формировать собственное поле скоростей, отличное от поля скоростей среды [9]. Такое поле определяет диффузию частиц, что, при достаточном значении коэффициента диффузии и малой массе частиц, приводит к эффекту многопоточности распространения частиц. В данной работе исследуется влияние коэффициента диффузии и вязкости примеси в расчёте на единицу массы на формирование многопоточности.

Предположим, что частица, обладающая инертной массой, движется со скоростью v_0 сквозь турбулентный поток. Опишем диффузию такой частицы в данной среде в простейшем одномерном случае, примером которого может служить движение в узком канале, где частица движется в основном вдоль этого канала. Флуктуациями в поперечном направлении можно пренебречь.

Частица испытывает силу сопротивления со стороны среды. Пусть k – коэффициент вязкого трения на единицу массы. В лагранжевом представлении движение частицы будет описано системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = V \\ \frac{dV}{dt} = k[V'(X(t), t) - V] \end{cases} \quad (1)$$

где X – лагранжева координата, V – лагранжева скорость, V' – скорость движения среды. Будем полагать, что начальные условия заданы в виде

$$X(t=0) = y; V(t=0) = v_0, \quad (2)$$

где y – эйлерова координата.

В данной работе исследуется статистика J -якобиана преобразования эйлеровых координат в лагранжевы:

$$\frac{dX}{dy} = J(y, t). \quad (3)$$

Этот якобиан имеет наглядный физический смысл: когда его значение больше нуля, существует однозначное соответствие между лагранжевыми координатами и эйлеровыми, что означает отсутствие многопоточности. Значение меньше нуля означает наличие многопоточности.

Учитывая следующие определения:

$$\frac{dV}{dy} = U; \frac{dV'}{dx} = U'(X(t), t), \quad (4)$$

получим:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dJ}{dt} = U \\ \frac{dU}{dt} = k[U'(X(t), t)J - U] \end{array} \right. \quad (5)$$

с начальными условиями

$$J(t=0) = 1; U(t=0) = \frac{dv_0}{dy} = 0. \quad (6)$$

Второе условие в (6) исходит из предположения, что поле U не зависит от начальной координаты частицы, т.е. однородно в пространстве. Плотность вероятностей решений систем (1), (5) представлена определением

$$W(x, v, j, u, t) = \langle \delta[x - X(t)] \delta[j - J(t)] \delta[v - V(t)] \delta[u - U(t)] \rangle, \quad (7)$$

здесь и далее угловые скобки означают усреднение по ансамблю реализаций случайного поля скоростей V' . Будем считать случайные поля скоростей V' и U' гауссовыми дельта-коррелированными с нулевым средним. Тогда плотность вероятностей (7) удовлетворяет уравнению Фоккера–Планка [8]

$$\frac{\partial W}{\partial t} + v \frac{\partial W}{\partial x} - k \frac{\partial}{\partial v} (vW) + u \frac{\partial W}{\partial j} - k \frac{\partial}{\partial u} (uW) = \frac{k^2 D_{v'v'}}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial v^2} + \frac{k^2 D_{u'u'}}{2} j^2 \frac{\partial^2 W}{\partial u^2} \quad (8)$$

с начальным условием

$$W(x, v, j, u, t=0) = \langle \delta[x - y] \delta[v - v_0] \delta[u] \delta[j - 1] \rangle. \quad (9)$$

Усредняя (8) по x и v , получим уравнение

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial j} - k \frac{\partial}{\partial u} (uw) = \frac{k^2 D_{u'u'}}{2} j^2 \frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \quad (10)$$

с начальным условием

$$w(j, u, t = 0) = \langle \delta[u] \delta[j - 1] \rangle, \quad (11)$$

где

$$w(j, u; t) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, v, j, u; t) dx dv. \quad (12)$$

Для численного решения уравнения (10) перейдём к безразмерным величинам. В задаче есть два параметра размерности времени: $1/ki$ и $1/D_{u'u'}$. Введём переменные $\tau = t/t_0$, $\omega = ut_0$ так, что t_0 – величина размерности времени, которая не зависит от коэффициента вязкого трения на единицу массы ki и коэффициента диффузии $D_{u'u'}$. Тогда для безразмерной плотности вероятностей $f(j, \omega; \tau) = t_0 w(j, u; t)$ получим уравнение:

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + \omega \frac{\partial f}{\partial j} - k t_0 \frac{\partial}{\partial \omega} (\omega f) = \frac{k^2 D_{u'u'}}{2} t_0^3 j^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \omega^2}. \quad (13)$$

Решим уравнение (13) методом Кранка–Николсон для различных значений k и $D_{u'u'}$. Используем разностную схему с порядком аппроксимации $O(\Delta\tau + (\Delta\omega)^2 + (\Delta j)^2)$ на каждом шаге по τ . Шаги по переменным выбраны следующим образом: $\Delta\omega = 0.02$, $\Delta j = 0.02$, $\Delta\tau = 0.01$. Параметр $t_0 = 0.3$. Счётная область: $-2 < j < 1.5$; $-3 < \omega < 3$; $0 \leq \tau \leq 1$. На каждом шаге по времени вычислим плотность вероятностей якобиана:

$$f_j(j; \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(j, \omega; \tau) d\omega. \quad (14)$$

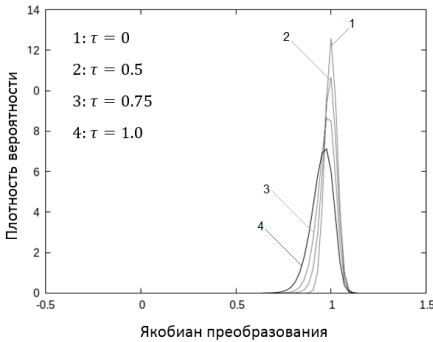


Рис. 1

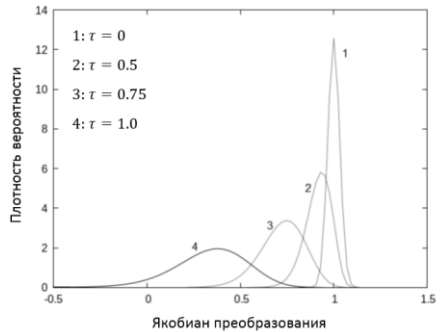


Рис. 2

На рис. 1 показана функция $f(j; \tau)$ при коэффициенте вязкого трения $k = 0.1$ и коэффициенте диффузии $D_{u'u'} = 1.0$. Видно, что плотность вероятности якобиана слабо расплывается со временем при таких параметрах. На рис. 2 при $k = 0.9$ заметны существенные различия между кривыми 1 и 4. Видно, что плотность вероятностей якобиана становится ненулевой в области $j < 0$. Это означает возникновение многопоточности. Большие значения k соответствуют меньшей массе. Частицы с меньшей массой, попадая в случайное поле скоростей, быстрее подвергаются воздействию среды и начинают двигаться вместе с ней, чем частицы с большей массой.

На рис. 3 показано, что многопоточность возникает тем раньше, чем больше коэффициент вязкого трения k .

Чтобы проследить влияние коэффициента турбулентной диффузии, зафиксируем значение вязкости $k = 1.2$ и будем менять $D_{u'u'}$.

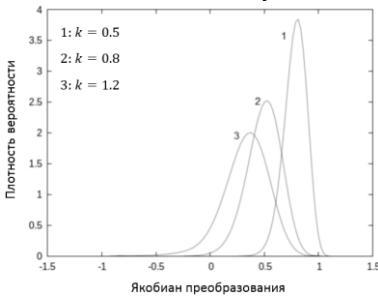


Рис. 3

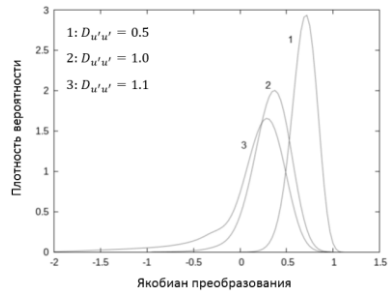


Рис. 4

Из результатов, представленных на рис. 4, видно, что при наименьшем коэффициенте диффузии (кривая 1) плотность вероятностей якобиана в области $j < 0$ равна нулю, что означает отсутствие многопоточности. Кривые 2 и 3 отличны от нуля в области отрицательных значений якобиана, при этом площадь фигуры под кривой 2 на отрезке $-2 \leq j \leq 0$ меньше площади фигуры под кривой 3 на том же отрезке. Это означает большую вероятность формирования многопоточности при большем коэффициенте диффузии.

- [1] Klyatskin V.I. // *Advances in Physical Sciences*. 1994. Vol. 111. P. 1297.
- [2] Saichev A.I., Woyczynski W.A. // *Stochastic Models in Geosystems. The IMA volumes in mathematics and its applications*. 1996. Vol. 85. P. 359.
- [3] Кляцкин В.И. // *УФН*. 2003. Т. 173, № 7. С. 689.
- [4] Saichev A.I., Zhukova I.S. // *Lectures Notes in Physics*. 1998. Vol. 511. P. 353.
- [5] Gribova E.Z., Zhukova I.S., Saichev A.I., Woyczynski W.A. // *Radiophysics and Quantum Electronics*. 2000. Vol. 43. P. 456.
- [6] Слепышев А.А. // *Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана*. 2016. Т. 52, №3. С.342.
- [7] Голицын Г.С., Чхетиани О.Г. // *Известия РАН. Физика атмосферы и океана*. 2014. Т. 50, № 6. С. 623.
- [8] Грибова Е.З. // *Изв. вузов. Радиофизика*. 2003. Т. 46, № 2. С. 162.
- [9] Maxey M.R. // *J. Fluid Mech*. 1987. Vol. 174. P. 441.

ВЫСОКОТОЧНЫЕ АБ ИНИТЮ РАСЧЕТЫ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ HCN/HNC

В.Ю.Махнев¹⁾, О.Л.Полянский^{1),2)}

¹⁾Институт прикладной физики РАН

²⁾Университетский колледж Лондона, Соединенное Королевство Великобритании и Северной Ирландии

Данная работа посвящена прецизионным глобальным расчетам молекулярной системы HCN-HNC. Интерес к этой молекулярной системе обусловлен рядом причин. В первую очередь это возможность исследования моделей химических реакций высокоточными методами молекулярной спектроскопии. Кроме этого, недавно открытая первая планета земного типа с атмосферой содержит HCN в качестве ее основного компонента.

В результате работы была построена новая глобальная abinitio поверхность потенциальной энергии (ППЭ) системы HCN-HNC без привлечения дополнительных предположений. Было показано, что полученная ППЭ позволяет получить значительно более точный результат в сравнении с предыдущими работами с той же самой формой поверхности [1].

Данная ППЭ была построена из 1541 точки, рассчитанной при помощи квантово-химического программного пакета MOLPRO с заданным aug-cc-pCV6Z базисным набором функций для вариационного расчета. Через эти точки была проведена поверхность, определяемая 277 аналитическими параметрами, с двумя минимумами, соответствующими минимумам HCN и HNC молекул, а также с седловой точкой, соответствующей барьеру изомеризации между ними по форме:

$$V(R, r, \gamma) = \sum_{ijk} c_{ijk} \cdot X^i(R, r, \gamma) \cdot Y^j(r, \gamma) \cdot P(\cos(\gamma)),$$

$$X(R, r, \gamma) = 1 - e^{-\alpha_R(\gamma)[R - R_e(r, \gamma)]},$$

$$Y(r, \gamma) = 1 - e^{-\alpha_r[r - r_e(\gamma)]}$$

Точки воспроизводятся со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 2.6 \text{ см}^{-1}$ (зеленые точки на рис.).

Для колебательных энергетических уровней HNC было получено улучшение на порядок величины разницы с экспериментальными уровнями. Среднеквадратичное отклонение 19 расчетных уровней с энергиями до 7200 см^{-1} от экспериментальных составило $\sigma = 5.6 \text{ см}^{-1}$. Для более гармоничной системы HCN 50 уровней с энергией до 15500 см^{-1} отклоняются на $\sigma = 2.1 \text{ см}^{-1}$.

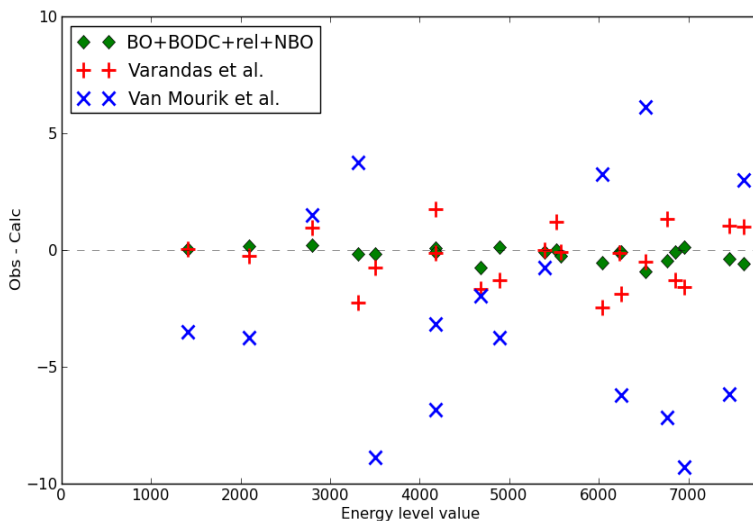


Рис.

Данный результат сопоставим с ППЭ [2], полученной на основе фита к экспериментальным данным (красные точки на рис.). В обеих частях системы HCN-HNC представленные разницы уровней не уступают по качеству соответствующим разностям эмпирической поверхности.

В рамках данной работы также были получены новые поверхности адиабатической и релятивистской поправок к приближению Борна–Оппенгеймера для системы HCN-HNC в основном состоянии. Эти поверхности позволили ещё улучшить значения расчетных уровней.

Работа была частично поддержана Российским Научным Фондом (проект 17-19-01602).

[1] Van Mourik T., et al. // J. Chem. Phys. 2001. Vol. 115. P. 3706.

[2] Varandas A. J. C., et al. // J. Phys. Chem. A. 2006. Vol. 110, No. 2. P. 1337.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В МЕТАМАТЕРИАЛАХ МЕТОДОМ FDTD

Е.В. Попутникова, Ю.А. Сёмин

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

В настоящее время большое значение приобретают композиционные материалы, искусственно созданная структура которых позволяет получить у модифицированного объекта новые свойства, отсутствующие у природных образцов, в частности аномальные значения диэлектрической и магнитной проницаемости. К таким искусственно построенным материалам с новыми свойствами относятся и метаматериалы. Использование метаматериалов может позволить не только существенно улучшить параметры известных электромагнитных приборов, таких как фазированные антенные решетки, селективные поглотители излучения, солнечные батареи, но и создать принципиально новые приборы: от сверхлинз с разрешением много меньшим длины волны излучения до экранов невидимости [1]. Однако создание такого материала – достаточно сложный процесс, поэтому большое значение имеет предварительное численное моделирование создаваемого объекта с целью предсказания его свойств.

В данной работе рассматриваются способы численного моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с метаматериалами, приводятся результаты моделирования метаматериалов. Метаматериал – композиционный материал, свойства которого обусловлены не столько свойствами составляющих его элементов, сколько искусственно созданной периодической структурой из макроскопических элементов. Обычные свойства метаматериалов обусловлены резонансным взаимодействием с материалом электромагнитной волны, распространяющейся в гетерогенной среде, наполненной включениями, которые имеют специальную форму. Размеры резонаторов и расстояния между ними остаются много меньше длины волны излучения, поэтому массивы таких резонаторов воспринимаются излучением как сплошная электромагнитная среда с определенными величинами эффективной диэлектрической и магнитной проницаемости и, соответственно, коэффициента преломления [1]. Наиболее известный класс метаматериалов – материалы, имеющие отрицательные значения реальной части как диэлектрической, так и магнитной проницаемости на интересующих частотах. Их называют DNG (double negativ) или LHM (left-handed) материалами.

Как известно, распространение электромагнитных волн описывается системой уравнений Максвелла. Существует несколько способов решения этой системы, таких как метод конечных элементов, метод моментов, метод конечных разностей во временной области (FiniteDifferenceTimeDomain, FDTD) [2]. Последний из перечисленных методов обладает рядом преимуществ: позволяет моделировать широкополосные сигналы, возвращает сразу значения напряженностей электрической и магнитной компоненты поля, что удобно, поскольку исключает необходимость промежуточных преобразований результатов моделирования, позволяет указать параметры материала для каждой точки счетного объема, что особенно важно при расчёте материалов с нелинейными свойствами и дисперсных сред [2].

Необходимо отметить, что при отрицательных значениях коэффициента преломления не могут существовать материалы без частотной дисперсии диэлектрической и

магнитной проницаемостей. Объясняется это тем, что для отрицательных ε и μ при отсутствии частотной дисперсии плотность энергии электромагнитного поля

$$w = \frac{1}{2}(\varepsilon E^2 + \mu H^2) \quad (1)$$

была бы отрицательной, что исключается. В свою очередь, при наличии частотной дисперсии плотность энергии представляется в виде:

$$w = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial(\varepsilon \cdot \omega)}{\partial \omega} E^2 + \frac{\partial(\mu \cdot \omega)}{\partial \omega} H^2 \right) \quad (2)$$

Отсюда следует, что для моделирования метаматериалов необходимо использовать некоторую модель дисперсии. Существует три модели дисперсии волн: модель Дебая, Друде и Лоренца. Две последние могут быть применены при моделировании произвольных метаматериалов. В данной работе была использована модель Лоренца, диэлектрическая и магнитная проницаемость которой представляется в виде (3) и (4) соответственно, где γ_e, γ_m – коэффициенты затухания, ω_e, ω_m – резонансные (плазменные) частоты

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_e^2}{\omega^2 - \omega_e^2 - 2i\gamma_e \omega} \right), \quad (3)$$

$$\mu(\omega) = \mu_0 \left(1 - \frac{\omega_m^2}{\omega^2 - \omega_m^2 - 2i\gamma_m \omega} \right). \quad (4)$$

При этом график зависимости $\varepsilon(\omega)$ будет иметь вид, показанный на рис. 1.

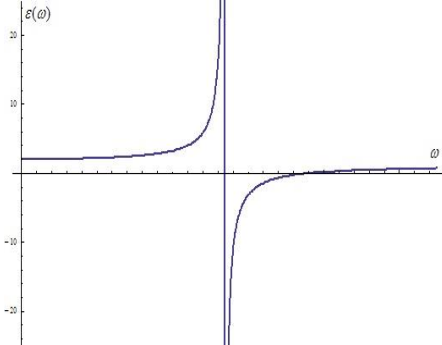


Рис. 1

Для того чтобы использовать дисперсную модель в моделировании методом FDTD, можно применить, например, метод вспомогательных дифференциальных уравнений (Auxiliary Differential Equations, ADE) [3]. Отметим, что можно выделить два основных подхода к моделированию метаматериалов: моделирование материала с частотной дисперсией, который в некотором диапазоне частот будет реагировать на электромагнитное поле, как материал с отрицательными ε и μ , и моделирование материала с периодической структурой.

Ниже приведены результаты моделирования для LHM, которые иллюстрируют некоторые его свойства. На рис. 2 пока-

зано прохождение электромагнитной волны через метаматериал с $\epsilon = -1$ и $\mu = -1$ на частоте источника. При этом ЛНМ-материал демонстрирует противоположные направления фазовой и групповой скоростей, т.е. волновой вектор в данном случае антипараллелен вектору Пойнтинга.

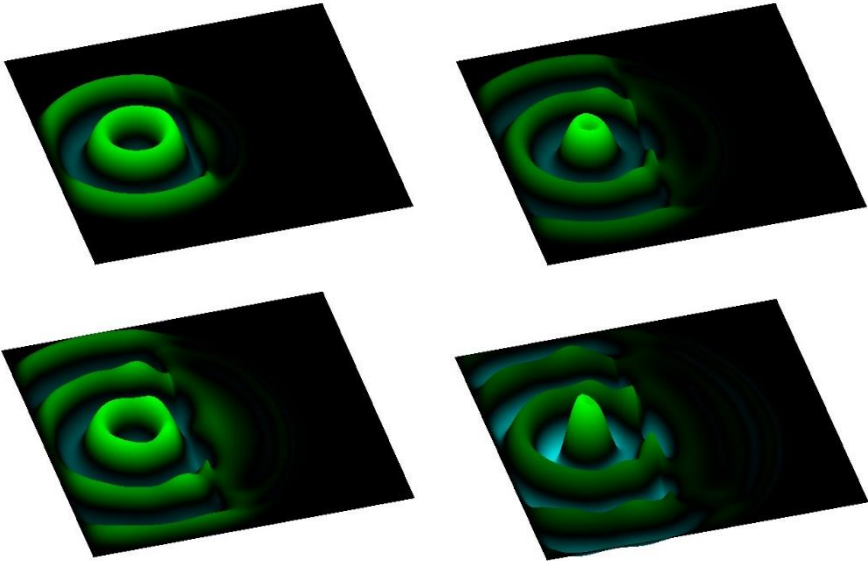


Рис. 2

ЛНМ-материал на заданной частоте будет обладать и отрицательным показателем преломления. На рис. 3 приведены результаты моделирования прохождения электромагнитной волны через метаматериал с $n = -1$ на рассматриваемой частоте (2,1 ТГц). Для задания плоской волны здесь используется метод total field / scattered field (полного и рассеянного поля), основанный на линейности уравнений Максвелла и позволяющий получить более точный результат, чем при использовании набора точечных источников [4].



Рис. 3

ЛНМ-метаматериалы интересны также тем, что позволяют добиться сверхразрешения. На рис. 4 и рис. 5 приведены результаты моделирования распространения электромагнитного излучения от двух источников, расположенных на расстоянии половины длины волны друг от друга. На рис. 4 волны распространяются в свободном пространстве, при этом уже на небольшом расстоянии от источников излучения разрешить источники невозможно. На рис. 5 излучение проходит через пластинку материала с $\varepsilon = -1$ и $\mu = -1$ на частоте излучения источников. Во втором случае после прохождения через пластинку наблюдаются два дополнительных пика напряженности поля, что позволяет разрешить источники излучения после прохождения волной пластинки из метаматериала.

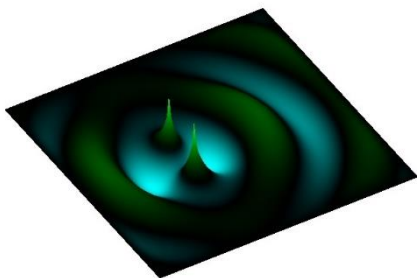


Рис. 4

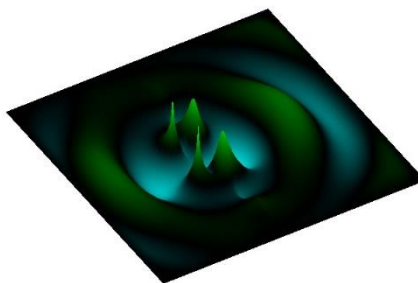


Рис. 5

Таким образом, в работе рассмотрен и реализован метод FDTD моделирования распространения электромагнитных волн с учётом дисперсии среды, смоделированы некоторые свойства метаматериалов.

- [1] Слюсар В.И. // Электроника: НТБ. 2009. № 7. С. 70.
- [2] Taflove A., Hagness S. C. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference TimeDomain Method. – Boston: Artechhouse, 2005. 1037 p.
- [3] Hao Y., Mittra R. FDTD Modeling of Metamaterials. Theory and Applications. – Boston: Artechhouse, 2008. 379 p.
- [4] Gedney S.D. Introduction to the Finite-DifferenceTime-Domain (FDTD) Method for Electromagnetics. – San Rafael: Morgan and Claypool Publishers, 2011. 250 p.

НОВЫЙ ТИП КОЛЛИМАТОРОВ И СПЕКТРОГРАФОВ БОЛЬШОЙ СВЕТОСИЛЫ ДЛЯ ПРОМЕРА ПРОФИЛЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

С.А. Семиков

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

В настоящее время активно развиваются методы спектроскопии высокого разрешения, в т.ч. для исследования профилей спектральных линий звёзд. Один из путей – астроспектрографы большой светосилы, т.к. интенсивность света звёзд мала. Чтобы повысить светосилу, можно применить батарею плоских зеркал с электромеханическим приводом, распределённых по большой площади ($\sim 1 \text{ км}^2$) и синхронно управляемых ЭВМ. Сначала свет звезды собирается в апертуру на вершине башни-обсерватории, а затем пучок сжимается коллиматором в паракиальный пучок, направляемый в спектрограф (рис. 1). Поскольку не исследуют двумерное изображение, удобны такие многозеркальные телескопы, собирающие свет звезды на щели спектрографа без строгой фокусировки и обеспечивающие достаточную светосилу и высокую разрешающую способность.

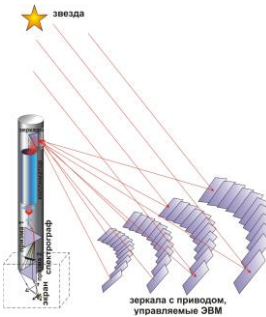


Рис. 1

Но и в этой схеме интенсивность света мала для подробного промера профиля линий звёзд. Поскольку у ряда линий профиль одинаково уширен за счёт вращения звезды, можно исследовать интегральную мощность излучения от ряда спектральных линий, собирая их спектры в одно распределение на фотопластинке (рис. 2). В итоге получается относительный интегральный спектр, где спектральная плотность мощности S – это функция не длины волны λ , а красного смещения $z = \Delta\lambda/\lambda_m$ – относительной отстройки $\Delta\lambda$ от центра линии λ_m , т.е. $S(z)$. Тогда, за счёт увеличения светосилы, может быть достигнута огромная разрешающая способность по z в профиле линии $S(z)$.

Схема спектрографа следующая. Пучок света разлагается призмой в спектр и попадает на экран – транспарант с прорезями напротив линий поглощения. Узкие участки спектра, прошедшие через щели, направляются на призму, собирающую спектр в параллельный пучок, который через линзу фокусируется на фотопластинку или ФЭУ-линейку. Но поскольку требуется получить профиль линий поглощения, совместив разные линии, необходимо после каждой щели транспаранта поставить собирающие цилиндрические линзы, дефокусирующие пучки, чтобы на фотопластинке свет от каждой прорези фокусировался не в линию, а в полосу, края которой

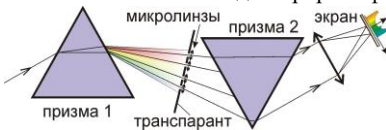


Рис. 2

соответствуют краям $\pm\Delta\lambda_m$ профиля линий. Интегральный профиль $S(z)$ получим, подобрав фокусные расстояния линз так, чтобы края профилей спектральных линий совпадали (рис. 2), наращивая полную мощность интегрального профиля $S(z)$.

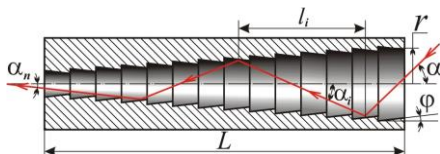


Рис. 3

ставляющей угол $\varphi \sim 1^\circ$ к оси коллиматора и обращённой к выходному отверстию прибора, типа трубочки для коктейля.

Если луч падает под углом α к оси коллиматора, то при каждом последующем отражении этот угол уменьшается на 2φ , и после n -го отражения угол луча с осью $\alpha_n = \alpha - 2\varphi n$. Т.е. независимо от точки входа лучей в коллиматор, через $n \approx \alpha/2\varphi$ отражений пучок на выходе преобразуется в почти параллельный пучок лучей, т.к. $\alpha_n \approx 0^\circ$. Коллимирующая способность растёт при увеличении α , т.к. с ростом α растёт число n отражений в коллиматоре с длиной L и радиусом апертуры r . Так что все лучи сводятся в параллельный пучок примерно на одинаковом расстоянии L от точки входа в прибор. Длина участка луча между двумя отражениями в проекции на ось коллиматора составит $l_i = 2r/\text{tg}\alpha$. А полная длина $L \approx \Sigma(2r/\text{tg}\alpha) = \Sigma(2r/\text{tg}(\alpha - 2\varphi i))$ – без учёта конечных участков. Если $\alpha_i \ll 1$ и $\alpha \ll 1$, то $L \approx (r/\varphi)\Sigma(1/(n-i)) = r\alpha/4\varphi^2([\alpha/2\varphi] - 2)!$, где i меняется от 1 до $n-1$.

Коллимирующая способность одинакова для лучей, входящих в апертуру на разном расстоянии от оси коллиматора. Это позволяет собирать в параллельный пучок все лучи, независимо от угла и точки входа их в систему. Оценить длину коллиматора можно как $L \approx r\alpha/4\varphi^2([\alpha/2\varphi] - 2)!$, а по порядку $L \sim 2r/\varphi$ (φ в радианах). При радиусе апертуры $r \sim 0,5$ м и $\varphi \sim 1^\circ$ длина коллиматора $L \sim 100$ м. Т.е. коллиматор должен быть крупногабаритным и располагаться в башне-обсерватории вертикально, а спектрограф на выходе – в основании башни (рис. 1).

Для более точной коллимации следует уменьшать φ . Это обеспечит продольную коллимацию лучей, пересекающих ось прибора. Для поперечной коллимации и сближения с осью лучей, входящих в апертуру на расстоянии от оси (скрещивающихся с осью), следует постепенно уменьшать радиус конических зеркал к выходу коллиматора. Тогда на выходе пучок будет сужаться.

Поперечная коллимация достигается и выбором профиля поперечного сечения конического зеркала в форме храпового колеса с углом к касательной σ (рис. 4). При запуске пучка лучей под углами $\langle \beta \rangle$ к радиусу и $\langle \alpha \rangle$ – к оси с одной стороны возникает однонаправленное закручивание лучей в системе (по или против часовой). И в проекции на поперечную плоскость при каждом отражении угол β_i луча к радиусу уменьшается на 2σ , так что $\beta_i = \beta - 2\sigma i$. С ростом β и отдалением луча от оси растёт число отражений n , и угол β_i уменьшается тем быстрее, чем выше β . Т.е. поперечная коллимирующая способность растёт с ростом β , и в поперечном направлении лучи сводятся в параллельный пучок примерно на одном расстоянии L от входа. Пусть для лучей, входящих в

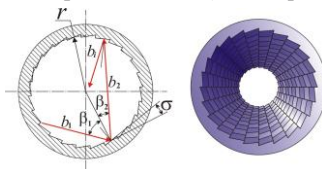


Рис. 4

систему под одним углом α , но на разном расстоянии от оси, суммарная длина траектории луча в виде ломаной в проекции на поперечную к оси плоскость равна B . Тогда сумма длин участков $b_i = 2r \cos(\beta_i)$ лучевой траектории $B = 2r \sum \cos(\beta_i) = 2r \sum \cos(\beta - 2\sigma)$, где i меняется от 1 до n .

Если на ЭВМ смоделировать коллимацию лучей отдельно по продольному и поперечному направлению, при $L/r = 110$, $\varphi = 0,5^\circ$ и $\alpha < 20^\circ$ получим $\alpha_{\max} = 6^\circ$, т.е. пучок становится из расходящегося парааксиальным. А в поперечном направлении коллимация эффективна для углов $60^\circ < \beta < 90^\circ$. Например, при $B/r = 36$ и $\sigma = 1,5^\circ$ получим $\beta_{\max} = 4,7^\circ$, т.е. пучок становится парааксиальным. Это справедливо в приближении $\varphi \ll 1$ и $\sigma \ll 1$, а для строгого решения следует использовать общую формулу преобразования углов в продольном и поперечном направлении. Задача легко решается моделированием на ЭВМ с поиском оптимальных углов φ , σ , соотношения L/r и средних углов входа лучей $\langle \alpha \rangle$ и $\langle \beta \rangle$. Условие оптимизации – уменьшение числа отражений ni экстремальных углов выхода α_{ni} и β_n .

Новый тип спектрографа может найти применение в доплеровской томографии – для поиска и измерения параметров орбит экзопланет по вариациям профиля спектральных линий, уширенных за счёт вращения звезды. Также можно регистрировать прохождение по диску Солнца пятен, планет, АМС, спутников, самолётов-невидимок и других объектов без применения мощных телескопов, т.к. интенсивность света высока и достаточна для промера профиля линий.

Рассмотрим звезду с угловой скоростью ω , радиусом R и осью вращения, перпендикулярной лучу зрения \mathbf{r} (рис. 5). Лучевая скорость на краях звезды $V_r = \pm \omega R$. В других точках на диске звезды лучевые скорости принимают промежуточные значения $-\omega R < V_r < \omega R$. Разделим диск звезды на полосы, параллельные оси вращения и смещённые от неё в проекции на картинную плоскость на расстояния ρ . Лучевая скорость точек в пределах полосы $V_r = \omega \rho$. Эффект Доплера вызывает дисперсию лучевых скоростей по диску звезды ($\Delta V_r = 2\omega R$), и профиль линий поглощения уширится. Для звёзд с высокими окружными скоростями ($V \sim 100$ км/с), типа Альтаира, уширение $2\Delta\lambda_m$ от дисперсии скоростей ΔV_r много больше ширины линии $\delta\lambda$ на участках с $V_r \approx 0$ [1, 2, 4].

Интенсивность участка линии $d\lambda$, соответствующего скорости V_r , примерно пропорциональна площади dS полосы с такой скоростью в интервале от V_r до $V_r + dV_r$. Профиль линии $\Delta W(\Delta\lambda)$ повторяет форму диска звезды, в первом приближении это дуга эллипса, в согласии с наблюдениями, в т.ч. у Альтаира и Ахернара [1, 4].

Поскольку затмение звезды планетой или звёздным пятном уменьшает площадь полосы соответствующего V_r , пропорционально снизится интенсивность участка $d\lambda$ на профиле линии поглощения: появится локальный максимум (рис. 5), по движению которого можно найти элементы орбиты планеты и координаты пятна или планеты. В этом состоит метод доплеровской томографии [1–3].

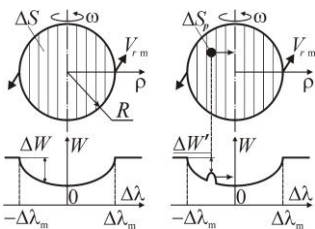


Рис. 5

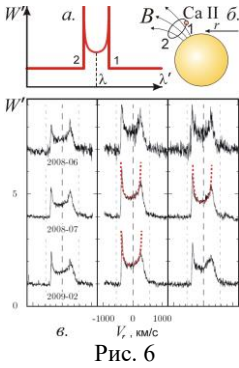


Рис. 6

У Солнца профиль линии отличается от дуги эллипса ввиду малой окружной скорости ($V_r \sim 2$ км/с), потемнения к краю и уширения линий от других эффектов [5]. Однако, сравнивая при компьютерной обработке искажённый (при затмении) и неискажённый профиль спектральных линий, можно найти положение и движение планеты, пятна, спутника, АМС и т.д.

У эмиссионных линий профили сложнее, т.к. излучающие ионы летят в магнитном поле звезды с ускорениями a_r и скоростями $V_r \sim 100$ км/с под действием силы Лоренца (рис. 6, б). Если упрощённо считать, что ионы движутся по окружности, лучевая скорость иона меняется со временем t как $V_r(t) = V_m \sin(\omega t)$, где V_m – амплитуда лучевой скорости, ω – циклотронная частота, и по доплер-эффекту

$$\Delta\lambda(t) = \lambda V_m \sin(\omega t) / c = \Delta\lambda_m \sin(\omega t).$$

Интенсивность участка профиля $W d\lambda'$ пропорциональна времени экспозиции dt линии с соответствующей длиной волны $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$, т.е. $W d\lambda' = w dt$, где w – константа. Отсюда профиль линии, т.е. спектральная плотность мощности

$$W(\lambda + \Delta\lambda) = w \frac{dt}{d\Delta\lambda} = \frac{w^*}{\sqrt{1 - \Delta\lambda^2 / \Delta\lambda_m^2}}, \quad (1)$$

где $w^* = wc / \omega \lambda V_m$, $\Delta\lambda_m = \lambda V_m / c$. Действительно, профиль эмиссионных линий характеризуется такой формой типа «ласточкин хвост» (рис. 6), например, у белого карлика SDSSJ1228+1040 [10, 11]. При интерпретации профиля линий [10] по эффекту Доплера ионы должны двигаться со скоростями ~ 500 км/с.

Другая возможная причина уширения линий – гипотетический эффект Ритца $\lambda' = \lambda_0(1 + ra_r/c^2)$ [7–9]. Если лучевое ускорение a_r иона складывается из лучевого ускорения свободного падения a_g и ускорения a_m от силы Лоренца, то $a_r = a_g + a_m \cos(\omega t)$. В итоге, по эффекту Ритца новая длина волны $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$, где $\lambda = \lambda_0 + \lambda_0 a_g / c^2$ – средняя длина волны линии, $\Delta\lambda = \lambda_0 a_m \cos(\omega t) / c^2$ – быстропеременная поправка к λ . Отсюда, усредняя по времени, найдём, что профиль линии задан формулой (1), но $w^* = wc^2 / \omega \lambda_0 a_m$, а $\Delta\lambda = \lambda_0 a_m / c^2$, в согласии с [10, 11].

- [1] Cameron A.C., Bruce V.A., Miller G.R.M., et al. // MNRAS. 2010. Vol. 403, P. 151.
- [2] Johnson M.C., Cochran W.D., Cameron A.C., et al. // Astroph. J. Lett. 2015. Vol. 810.
- [3] Böhm T., Holschneider M., Lignieres F., et al. // Astron. & Astroph. 2015. Vol. 557.
- [4] Физика космоса. – М.: Советская энциклопедия, 1986. 783 с.
- [5] Мензел Д.Г. Наше Солнце. – М.: Физматлит, 1963. 328 с.
- [6] Aufdenberg J.P., Merand A., Coude du Foresto V., et al. // Astroph. J. 2006. Vol. 645.
- [7] Семиков С.А. // История науки и техники. 2007. № 1. С. 60.
- [8] Мушаилов Б.Р., Теплицкая В.С. // Вестник МГУ. Сер. 3. 2011. № 6. С. 98.
- [9] Семиков С.А. // Вестник Нижегородского Государственного университета. 2013. № 4(1). С. 56.
- [10] Manser C.J., Gänsicke B.T., Marsh T.R., et al. // MNRAS. 2016. Vol. 455, Is. 4.
- [11] Hartmann S., Nagel T., Rauch T., et al. // Astron. & Astroph. 2016. Vol. 593.

СУБДОПЛЕРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТОРСИОННО-ВРАЩАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛ CH_2DOH

С.А. Шарабакина^{1), 2)}, А.В. Лапинов²⁾, Г.Ю. Голубятников²⁾

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского

²⁾Институт прикладной физики РАН

При помощи созданного в ИПФ РАН субдоплеровского спектрометра выполнены исследования торсионно-вращательного спектра молекул однократно дейтерированного метанола CH_2DOH . Благодаря измерениям на основе провала Лэмба экспериментальные точности частот переходов в диапазоне 44 – 520 ГГц улучшены в сравнении традиционной спектроскопией [1,2] примерно на два порядка. Полученные данные представляют большой интерес как при исследованиях физических параметров в областях звездообразования, так и при поиске возможных вариаций фундаментальных констант. Т.к. из-за нарушения симметрии в метильной группе в CH_2DOH уже нет разделения на Ан Е-метанол, спектр данной молекулы становится значительно богаче. Кроме этого появляется возможность наблюдений сверхтонких расщеплений, обусловленных квадрупольным спин-вращательным взаимодействием молекулы с ядром дейтерия. Типичный пример измерений в зависимости от давления приведен на рис. 1.

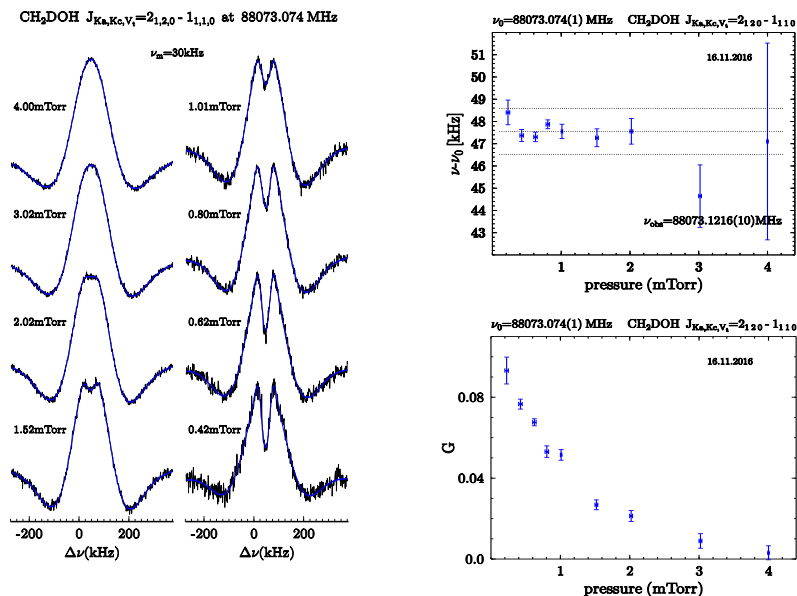


Рис. 1

Слева на данном рисунке показано, как меняется форма линии чисто вращательного перехода на частоте 88 ГГц на второй гармонике частоты модуляции в зависимости от давления газа в ячейке и результат аппроксимации методом наименьших квадратов.

Справа сверху показано, как от давления зависит точность определения частоты перехода. Наглядно видно, что, несмотря на то, что при больших давлениях шумы измерений на профилях падают, точность определения центра линии с уменьшением глубины провала Лэмба также падает. Это полностью согласуется с тем, что при доплеровской спектроскопии точность измерений существенно хуже. И лишь при очень малых давлениях, когда шумы измерений на профилях линий становятся очень большими (в нашем случае < 0.5 мторр), точность нелинейных субдоплеровских измерений также ухудшается. Зависимость глубины провала Лэмба от давления приведена внизу справа.

На рис. 2 приведены аналогичные исследования для торсионно-вращательного перехода на частоте 248 ГГц. Т.к. интенсивность излучения ЛОВ в данном случае была больше, провал Лэмба наблюдался уже при давлении в 4 мторр.

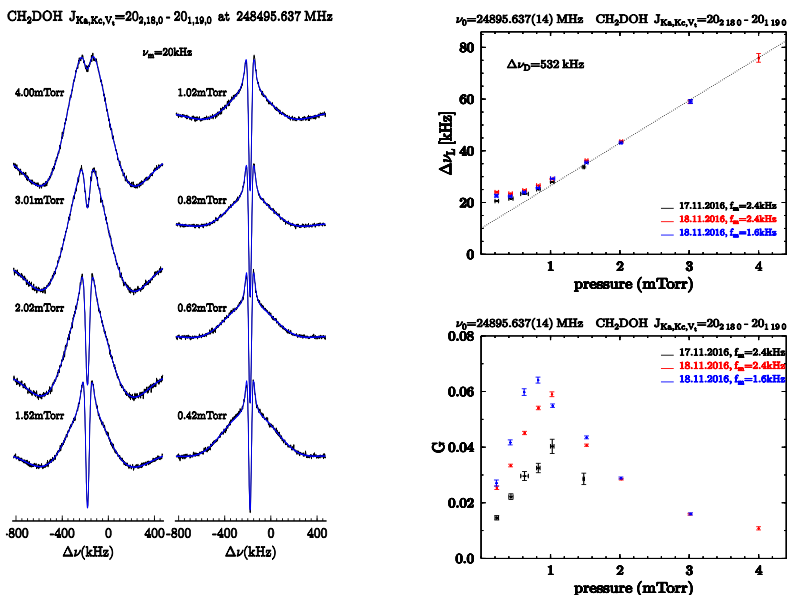


Рис. 2

Справа сверху на рис. 2 приведена зависимость от давления ширины провала. При давлении выше 1.5 мторр доминирующим механизмом, определяющим ширину линии, являются соударения между молекулами. Ширина линии при этом прямо пропорциональна давлению. При давлении меньше 1 мторр начинают доминировать остальные вклады, главным образом уширение излучением, пролетное уширение и уширение за счет неразрешенной сверхтонкой структуры. Практически во всех случаях естественная ширина линии пренебрежимо мала. Из-за уширения излучением ЛОВ при низких давлениях уменьшается и глубина самого провала (рис. 2 внизу справа). Разным цветом на данном рисунке изображены точки, соответствующие как разной интенсивности ЛОВ, так и разной частоте модуляции.

На рис. 3 приведены переходы, для которых нам удалось измерить величину сверхтонкого расщепления за счет спин-вращательного взаимодействия молекулы с электрическим квадрупольным моментом ядра дейтерия. При $J = 1$ вращательный уровень расщеплен на три подуровня со значениями полного углового момента $F = 0, 2, 1$. Соответствующие отношения интенсивностей равны 1:5:3. Именно это и изображено на рисунке красным цветом. Синим показан результат аппроксимации измеренных профилей методом наименьших квадратов. Т.к. два приведенных спектра имеют один и тот же верхний уровень и отличаются лишь нижним уровнем $J=0$, который не расщеплен, величина квадрупольного расщепления практически одинакова.

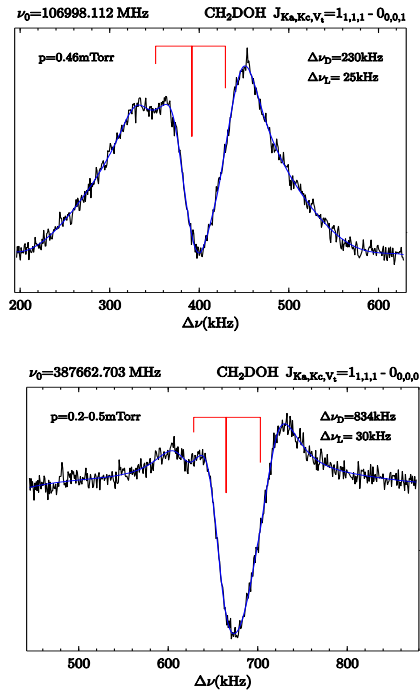


Рис. 3

Доплеровская ширина линии по половинному уровню на частоте 107 ГГц равна 230 кГц, ширина провала Лэмба в каждой из сверхтонких компонент равна 25 кГц. Доплеровская ширина линии по половинному уровню на частоте 388 ГГц равна 834 кГц, ширина провала Лэмба в каждой из сверхтонких компонент равна 30 кГц.

На рис. 4 слева показана разница между значениями частот, приведенными в каталоге JPL [1] и нашими значениями, измеренными по провалу Лэмба. Отметим, что, не смотря на то, что характерная погрешность частот, указанных в JPL каталоге составляет 1-2 кГц, реальная ошибка достигает 200 и более кГц. Наиболее яркий пример ошибок в частотах переходов приведен на рис. 3, где сдвиг частоты составил 400 и 670 кГц.

Характерная ошибка измерений частоты по провалу Лэмба порядка 1 кГц и ниже. Данный факт подтверждается сравнением субдоплеровских измерений частот переходов в OCS, проведенных на спектрометре университета г. Киль (Германия) [3] и в Нижнем Новгороде [4]. Измерения в Нижнем Новгороде имеют погрешность примерно в 3 раза меньше.

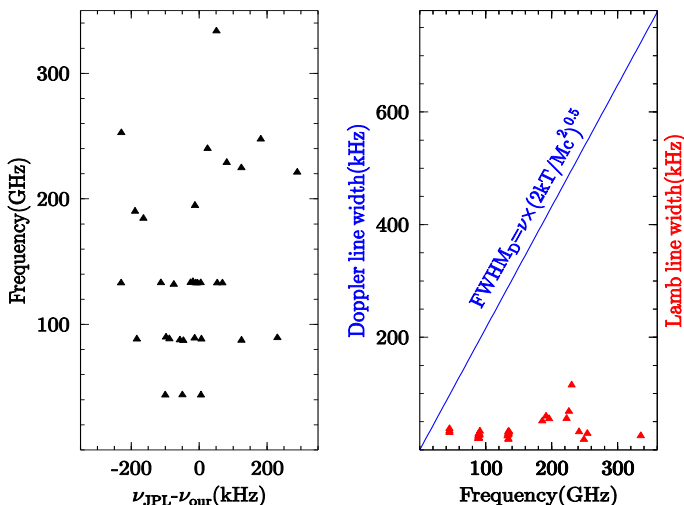


Рис. 4

Т.о., благодаря субдоплеровской спектроскопии с провалом Лэмба, примерно на два порядка повышена точность измерений частот переходов для однократно дейтерированного метанола CH_2DOH в сравнении с приведенными в [1,2]. Для ряда переходов впервые измерена сверхтонкая структура за счет спин-вращательного взаимодействия молекулы с электрическим квадрупольным моментом ядра дейтерия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 16-02-00761.

- [1] <https://spec.jpl.nasa.gov/>; <https://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catdir.html>.
 [2] Hilali A.El., Coudert L.H., Konov I., Klee S. // Chem. Phys. J. 2011. Vol. 135. P 194309.
 [3] Golubiatnikov G.Yu., Lapinov A.V., Guarnieri A., Knoechel R. // Molec. Spectrosc. J. 2005. Vol. 234. P. 190.
 [4] Голубятников Г.Ю., Белов С.П., Лапинов А.В. // Изв. ВУЗов. Радиофизика. 2015. Т. 58, № 8. С. 691.

ИЗМЕРЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ШТРИХОВ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК

К.А. Сидоров¹⁾, А.С. Зуев²⁾, И.В. Яковлев^{1,2)}

¹⁾ННГУ им. Лобачевского

²⁾Институт прикладной физики РАН

Важным элементом многих оптических систем являются дифракционные решетки. Они используются в приборах для измерения спектральных свойств излучения, в генераторах лазерных импульсов, в стретчерах и компрессорах мощных лазерных установок и т.д. При этом основным параметром, определяющим свойства решеток, является плотность штрихов. В связи с этим измерение и контроль плотности штрихов дифракционных решеток является важной прикладной задачей [1,2]. В некоторых случаях, например, при замене дифракционной решетки в компрессоре chirпированных лазерных импульсов, важно знать не только абсолютную плотность штрихов, но и разность плотностей (относительную плотность) штрихов решеток. Настоящая работа посвящена исследованию и развитию методов прецизионного измерения как абсолютных, так и относительных значений плотности штрихов дифракционных решеток.

В частности, был усовершенствован метод измерения разности плотностей штрихов решеток, точность которого в работе [3] составляла 0.01 штрих/мм. С целью повышения точности измерений стандартный окуляр автоколлиматора был заменен оптической системой с цифровой регистрацией изображения ПЗС-камерой. Для переноса изображения на камеру был использован трансфокатор, позволявший увеличивать размер изображения автоколлимационной сетки на камере. Автоколлимационная сетка подсвечивалась излучением He-Ne лазера.

После предварительной настройки параллельности плоскостей и штрихов двух близко расположенных дифракционных решеток широкий пучок излучения He-Ne лазера направлялся перпендикулярно их рабочим плоскостям. При этом направление пучка θ_1 , отраженного в первый порядок дифракции, согласно известной формуле решетки:

$$\sin(\alpha) + \sin(\theta_m) = \lambda m N,$$

где α – угол падения на решетку, θ_m – угол отражения, λ – длина волны излучения, m – порядок дифракции, N – плотность штрихов, совпадало с углом Литтрова второго порядка θ_{L2} :

$$\sin(\theta_1) = \lambda N \equiv \sin(\theta_{L2}).$$

Под этим углом устанавливался модифицированный автоколлиматор, на ПЗС-камере которого наблюдались как автоколлимационные сетки, так и сфокусированные изображения пучка He-Ne лазера, обусловленные отражениями от двух разных решеток (рис.). По разнице отклонения $d\theta$ лазерных лучей рассчитывалась разность плотностей штрихов $dN_{\text{отн}}$ исследуемых решеток:

$$dN_{\text{отн}} = d\theta \frac{\cos(\theta)}{\lambda}.$$

Для точного определения углов между лучами была создана программа обработки изображения, благодаря программному анализу также позволявшая улучшить выделение полезного сигнала на уровне шумов.

Значение угла отражения θ находилось из соотношения:

$$\operatorname{tg}(\theta) = \frac{\sin(\theta_{13}) - \sin(\theta_{14}) + 2\sin(\theta_{12})}{2 - 2\cos(\theta_{12}) - \cos(\theta_{13}) + \cos(\theta_{14})}$$

Здесь θ_{12} – угол между пучками, θ_{13} – смещение сетки относительно пучка для первой решетки, θ_{14} – угол между сетками. Благодаря проведенной модернизации автоколлиматора углы между лучами измерялись с точностью не хуже чем $0.2''$, что позволило повысить точность измерения относительной плотности штрихов до 0.0007 штрих/мм.

Также было предложено и реализовано два метода измерения абсолютной плотности штрихов решеток использованием модифицированного автоколлиматора. Один из методов заключался в расположении дополнительного зеркала строго под углом 45° к дифракционной решетке и использовании в качестве источника излучения неоновой лампы. При нормальном падении коллимированного излучения неоновой лампы с длиной волны 585 нм (главный пик) на исследуемую решетку с плотностью штрихов около 1200 линий/мм отраженный в первый порядок дифракции пучок идет под углом, близким к 45° . Измерение угла отражения излучения от решетки относительно угла 45° позволило определить значение абсолютной плотности штрихов решетки с точностью $dN_{\text{абс}}/N=4 \cdot 10^{-6}$.

Другой метод измерения абсолютной плотности штрихов дифракционных решеток был основан на использовании двух коллимированных источников излучения с близкими длинами волн. Лучи на разных длинах направлялись на решетку по нормали, далее с помощью автоколлиматора измерялся угол между отраженными лучами. По результатам измерения рассчитывалась абсолютная плотность штрихов решетки. Точность измерения плотности штрихов составила $dN_{\text{абс}}/N=2 \cdot 10^{-5}$. Полученные значения точности в обоих методах находятся на мировом уровне и даже несколько превышают его.

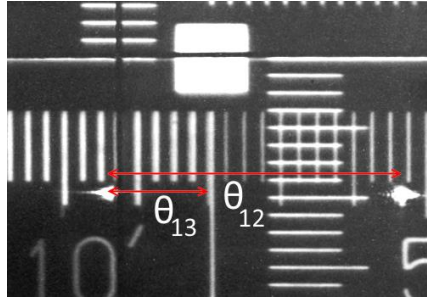


Рис.

- [1] Wang Q., Liu Z., Chen H., Wang Y., Jiang X., Fu S. // Rev. Scient. Instr. 2015. Vol. 86, № 2. P. 023109.
- [2] Du L., Du X., Wang Q. // AIP Conf. Proc. 2016. Vol. 1741, № 1. P. 040039.
- [3] Яковлев И.В. // Квантовая электроника. 2012. Т. 42, № 11. С. 996.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ КОМПРЕССИОННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ КОГЕРЕНТНАЯ ЭЛАСТОГРАФИЯ: ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ И ПУТИ ИХ РАЗРЕШЕНИЯ

А.А. Советский^{1),3)}, А.Л. Матвеев¹⁾, Л.А. Матвеев¹⁾, Е.В. Губарькова²⁾, Г.В. Геликонов¹⁾, В.Ю. Зайцев¹⁾

¹⁾Институт прикладной физики РАН

²⁾Нижегородская государственная медицинская академия

³⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Эластография (визуализация величины сдвигового модуля G биологической ткани) – это метод, дающий диагностическую информацию, дополняющую получение традиционных структурных изображений различными типами зондирующих полей. Первоначально данный термин был введён в ультразвуке [1], где полезность эластографии связана с гораздо более сильной зависимостью модуля сдвига от изменений структуры ткани по сравнению с изменчивостью характеристик продольных ультразвуковых волн. В мягких биологических тканях продольная скорость определяется, главным образом, объемным модулем упругости K и плотностью ткани ρ , $V_p = [(K + 4G/3)/\rho]^{1/2}$ и слабо зависит от модуля сдвига G , который в мягких биотканях на несколько порядков меньше объемного модуля, $G \ll K$. Однако для разных тканей и отличающихся состояний (патология/норма) одной и той же ткани именно модуль сдвига может отличаться существенно (иногда на порядки величины), тогда как объёмный модуль почти неизменен.

После введения методов получения эластографических изображений в медицинском ультразвуке несколько вариантов эластографии были предложены и в оптической когерентной томографии (ОКТ) [2]. Один из таких подходов использует возбуждение поверхностной (Рэлееской) волны, для визуализации которой используют ОКТ. Изменная скорость поверхностной волны может быть связана с сдвиговым модулем упругости G через известные теоретические зависимости [3]. Этот подход может оказаться реализуем в ряде практических приложений, например, в офтальмологии. Еще один подход, который активно развивается в ОКТ, компрессионная оптическая когерентная эластография, был представлен впервые в работе Шмитта [4] по аналогии с ультразвуковой реализацией этого метода. Подобно УЗИ производится сравнение между ОКТ-сканами ткани в исходном и деформированном состоянии. Деформации могут быть созданы либо с помощью специальных (например, пьезо) приводов [5] или производиться прижатием к биоткани самого ОКТ-зонда.

Предполагая неоднородность ткани плоскостлой (по нормали к оптическому пучку) и считая, что деформируемая ткань может свободно расширяться в боковых направлениях (т.е. полагая, что адгезия между образцом и поверхностью зонда пренебрежимо мала), в окрестности ОКТ зонда упругое напряжение σ можно считать приблизительно одноосным (вдоль пучка) и однородным. Тогда исходя из закона Гука $\sigma = \epsilon E$, отношение аксиальных деформаций слоёв будет обратно пропорциональным отношению модулей Юнга и модулей сдвига этих слоёв:

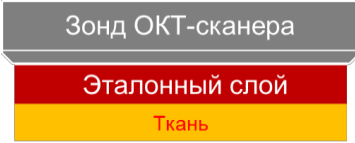


Рис. 1

из слоёв будет изначально известен. Такой эталонный независимый калиброванный слой (например, силикон известной жёсткости) можно поместить между поверхностью зонда и исследуемым образцом (рис. 1). Зная модуль Юнга силикона и определив деформации в ткани и в силиконе, можно получить абсолютное значение модуля Юнга ткани: $E_2 = \varepsilon_1 / \varepsilon_2 \cdot E_1$.

Оценка локальных деформаций с помощью эталонного слоя позволяет не только проводить оценку абсолютной величины жёсткости ткани, но и снизить влияние граничных условий (частичной адгезии на поверхности ОКТ зонда), которые могут привести к существенным искажениям значений жёсткости в зоне контакта зонда с исследуемой тканью. Прилипание приводит к тому, что деформация ткани определится не только сдвиговым модулем $G = E/3$, но и частичным вкладом объёмного модуля $K \gg G$, что может быть воспринято как ложное ужесточение поверхностного слоя и привести к ошибочным медицинским заключениям. Силикон, помещённый между зондом и тканью, позволяет обнаруживать наличие такого прилипания и определять локализацию залипшей области (на рис.2 зона прилипания выделена пунктиром); при этом удаётся значительно уменьшить проявление этого эффекта на границе силикон-ткань за счёт возможности силикона расширяться в латеральном направлении вместе с тканью. Значительного снижения влияния прилипания можно добиться, смазывая поверхности контактов (например, глицерином), однако это может привести к нежелательным «уплываниям» исследуемой области ткани из зоны сканирования.

Другой важной проблемой, которую решает реализация количественной компрессионной ОКТ эластографии с использованием калиброванных слоёв, является неоднородность распределения нагрузки вследствие неровности поверхности ткани, наличия неплоской или даже плоской наклонной по отношению к зонду поверхности. При наличии однородного слоя, неровности на его поверхности могут привести к значительным неоднородностям деформации, не учитывая которые, можно получить искажённое эластографическое изображение с неравномерным распределением жёсткости. Индикатором нагрузки, визуализирующим неоднородность деформации, является однородный калиброванный силикон, который заполняет полости, образованные неровностями, и позволяет оценить значение жёсткости по всей ширине кадра, не сдавливая ткань значительно до выравнивания выступающих неровностей. На рис.2 центральная область выпуклой опухоли на ухе мыши первой

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \frac{E_2}{E_1} = \frac{G_2}{G_1} \quad (1)$$

Данное соотношение позволяет, не измеряя одномоментно нагрузку и деформацию, получать не только относительные значения жёсткости, но и абсолютные, если модуль Юнга одного

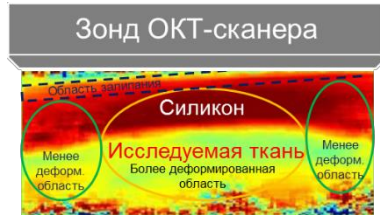


Рис.2

на ухе мыши первой

контактирует с силиконом и создает в нем повышенные деформации, что отражено на распределении кумулятивно накопленной деформации в силиконе, которая значительно выше в центральной области над выпуклой опухолью. Зная, что силикон однороден по упругости, можно нормировать данное распределение деформаций по уровню в силиконе вне области залипания, чтобы получить эластографическое изображение рис.3, на котором распределение деформаций не столь искажено влиянием неровностей ткани.

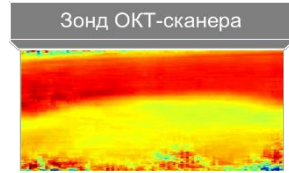


Рис.3

Эластограмма рис. 3 получена с помощью «векторного» метода оценки градиента фазы [6] и накопления межкадровых деформаций, уровень которых $<1\%$. Такой подход дает эффективное повышение отношения сигнал/шум для оцениваемых градиентов фазы и позволяет значительно расширить диапазон визуализируемых деформаций, открывая возможность для изучения отклонения поведения ткани от линейного закона Гука.

На основе разработанного подхода исследована эволюция жесткости опухоли на ухе мыши при её естественном развитии, обладающей незначительной нелинейностью (рис.4, по наклону кривых можно судить о жёсткости: опухоль на 7 день составляла ~ 800 кПа, на 12 день ~ 1600 кПа, на 16 день ~ 1800 кПа). Однако большинство других тканей продемонстрировало выраженную нелинейность: так стенка сердечного сосуда (рис.5) обладает нелинейностью на масштабе деформации менее 10%, тогда как силикон можно считать линейным до деформаций порядка 50%.

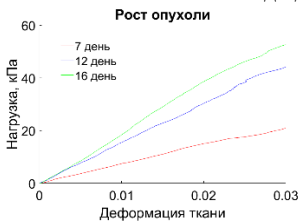


Рис.4

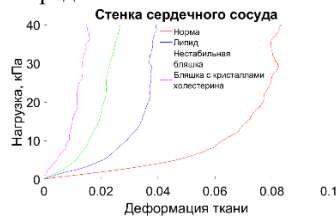


Рис.5

Таким образом, количественная компрессионная ОКТ эластография с использованием калиброванных слоёв открывает возможность для изучения нелинейных характеристик ткани, что может послужить дополнительным маркером при составлении медицинских заключений при дифференциации типа и состояния ткани.

- [1] Parker K. J., et al. // Phys. Med. Biol. 2011. Vol. 56, № 1. P. 1.
- [2] Liang X., et al. // J. of innovative opt. health sciences. 2010. Vol. 3, № 4. P. 221.
- [3] Wang S., et al. // Laser Physics Letters. 2013. Vol. 10, № 7. P. 075605.
- [4] Schmitt J.M. // Optics express. 1998. Vol. 3, № 6. P. 199.
- [5] Kennedy K.M., et al. // Scientific Reports. 2015. Vol. 5. P. 15538.
- [6] Zaitsev V.Y., et al. // J. Biomed. Optics. 2016. V. 21, № 11. P. 116005.

СПОСОБЫ ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ СУБТГЦ РАДИОАКУСТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

И.Н. Вилков, М.А. Кошелев, А.И. Цветков, М.Ю. Глявин, М.Ю. Третьяков

Институт прикладной физики РАН

Газовая молекулярная спектроскопия является мощным инструментом как для фундаментальных исследований, так и для практических приложений, таких как качественный и количественный газовый анализ, неинвазивная медицина, атмосферное дистанционное зондирование и т.д. Чувствительность является одним из ключевых параметров любого спектрометра, которая определяет диапазон возможных применений для решения как фундаментальных, так и прикладных задач. Чем выше чувствительность, тем выше точность измерения параметров спектральной линии и тем больше количество линий, которые могут наблюдаться в эксперименте (тем меньшее количество молекул в газовой смеси, необходимое для определения их линий в спектре), и тем выше точность, с которой можно исследовать свойства молекул.

В настоящее время известно довольно большое количество широкополосных спектрометров, используемых для изучения спектров различных молекул в мм/субмм диапазоне длин волн. Их можно разделить на два типа по принципу регистрации молекулярных спектров: измеряющие характеристики либо зондирующего излучения (первый тип), либо исследуемого газа (второй тип).

Для большинства спектрометров мм/субмм диапазона первого типа достигается чувствительность, близкая к пределу, определяемому фундаментальными физическими принципами (см., например, [1], глава 15, стр. 414). Единственный способ, который позволяет продвинуться в решении проблемы достижения высокой чувствительности, называется оптико-акустическим (фотоакустическим или радиоакустическим) детектированием поглощения [2].

Чувствительность любого спектрометра определяется несколькими факторами. Наиболее важными из них являются мощность излучения, шум детектора и спектральная чистота излучения. В спектрометрах первого типа (например, классическом видео-спектрометре) чувствительность увеличивается с увеличением мощности излучения до тех пор, пока шумы детектора не будут превзойдены радиационным шумом. Как правило, для миллиметровых/субмиллиметровых спектрометров с охлаждаемым гелием болометром верхний предел мощности излучения составляет около 1 мВт. Дальнейшее улучшение чувствительности спектрометра может быть достигнуто за счет увеличения длины оптического пути и накопления (усреднения) спектров (если условия окружающей среды и газа достаточно стабильны).

Ситуация радикально меняется для спектрометров второго типа, например, для спектрометра с радиоакустическим детектором поглощения газа – РАД-спектрометра. Предельная чувствительность спектрометра достигается, когда тепловые флуктуации мембраны определяются предпочтительно броуновским движением газа. Эти колебания не зависят от мощности излучения, проходящего через газовую ячейку. Между тем полезная амплитуда сигнала прямо пропорциональна мощности излучения, поглощенного газом, и, следовательно, линейно возрастает с мощностью. Таким образом, чувствительность метода РАД также линейно возрастает.

Здесь мы приводим последние результаты по достижению высокой чувствительности РАД-спектрометра с использованием нескольких подходов, таких как увеличение мощности излучения, оптимизация параметров ячейки для снижения шума и усреднение данных.

В качестве источников излучения в РАД-спектрометре используются лампы обратной волны (ЛОВ), серия которых охватывает очень широкий диапазон частот от 35 до 1500 ГГц. Высокая стабильность и точное знание частоты излучения, а также низкий уровень фазового шума обеспечивается за счет использования системы фазовой автоподстройки частоты излучения и микроволнового синтезатора частоты, синхронизированного с сигналом стандарта частоты и времени. Мощность ЛОВ может варьироваться от долей до десятков мВт (достигая более 100 мВт в лучших лампах) в рабочем диапазоне частот. Большая мощность излучения, подходящая для задач молекулярной спектроскопии, в течение длительного времени не была доступна из-за ограниченного выбора источников излучения мм/субмм диапазона.

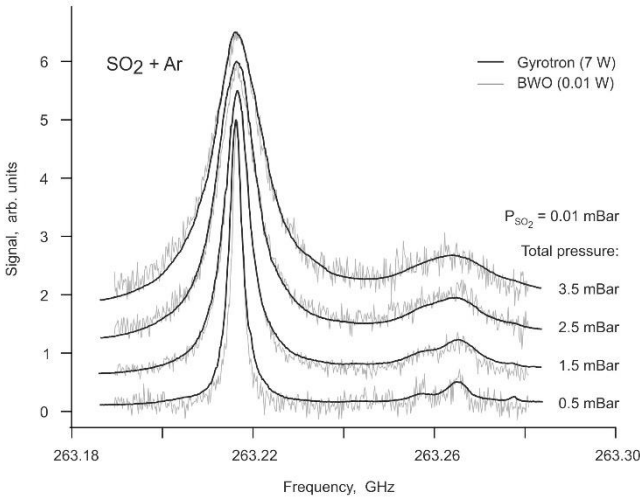


Рис. 1

Прогресс в разработке мощных источников излучения, который был достигнут в последние годы, позволил протестировать «силовой» подход к повышению чувствительности метода РАД [3]. В частности, в ИПФ РАН была разработана автоматизированная установка [4] на основе гиротрона, работающего на частоте около 263 ГГц в непрерывном режиме с максимальной мощностью излучения до 1 кВт. Этот гиротрон допускает плавную перестройку частоты излучения, хотя и в малых (по меркам спектроскопии) пределах, порядка 0.2 ГГц, изменением рабочего напряжения и температуры резонатора гиротрона.

Экспериментальные спектры смеси SO_2 и аргона, полученные с использованием РАД-спектрометра при различных давлениях газа в ячейке при двух существенно разных значениях мощности излучения, показаны на рис. 1. Наглядно продемонстрировано, что увеличение мощности излучения примерно на три порядка приводит к

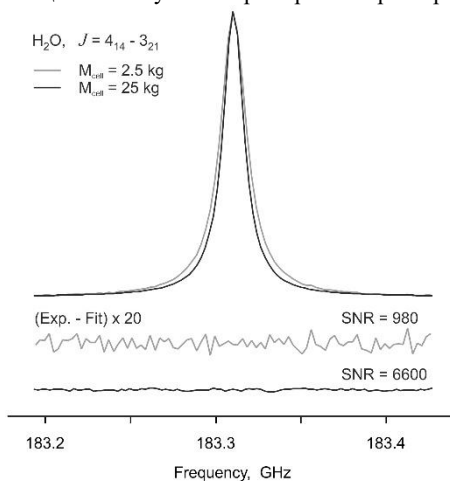


Рис. 2

пропорциональному увеличению чувствительности РАД спектрометра. Достигнутая чувствительность спектрометра не является предельной, так как главный ограничивающий фактор - это эффект насыщения линии SO_2 мощностью излучения. Его влияние может быть существенно уменьшено надлежащим выбором объекта исследования (молекулы и спектрального перехода) и условий эксперимента (прежде всего - ширины линии).

Для уменьшения влияния внешних акустических и механических шумов ячейка утяжелялась примерно в десять раз свинцовыми шариками диаметром 3 мм (исходная масса ячейки составляла около 2.5 кг). Анализ экспериментальных спектров, записанных с использованием ячейки со значительно отличающимися весами (рис. 2), показал почти семикратное различие отношения сигнала к шуму в экспериментальных спектрах.

Наконец, высокая стабильность параметров излучения (частоты и мощности) и экспериментальных условий (температура в комнате, давление и температура газа в ячейке) позволили усреднить большое количество повторных экспериментальных записей для каждого выбранного давления для многократного увеличения отношения сигнала к шуму записанных спектров (рис. 3). Нижняя часть рис. 3 представляет собой увеличенную часть верхнего графика. Двадцать спектров, записанных при 1,1 торр чистого кислорода, показаны серым цветом, черная кривая является результатом их

усреднения. Достигнутая чувствительность спектрометра РАД позволила впервые исследовать зависимость столкновительного уширения линии тонкой структуры кислорода вблизи 118 ГГц от скорости поглощающих молекул [5].

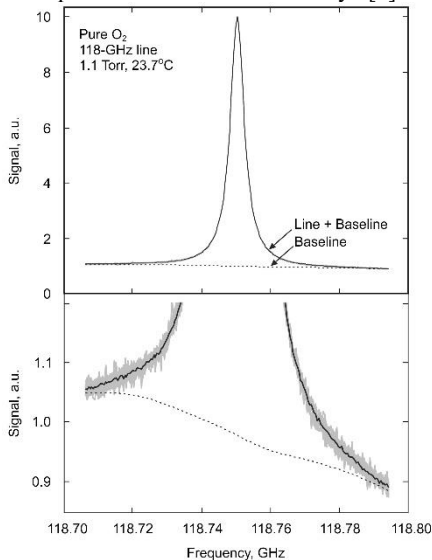


Рис. 3

Стоит отметить, что описанные методы повышения чувствительности РАД спектрометра были протестированы отдельно и независимо друг от друга. Объединение этих методов в один «комплекс мер» может позволить достичь рекордной чувствительности спектрометра РАД.

Исследование поддержано Российским Научным Фондом (проект 17-19-01602).

- [1] Townes C.H., Schawlow A.L. // *Microwave Spectroscopy*, Mc Graw-Hill, New York-London-Toronto, 1955.
- [2] Pao Y.-H. (Ed.) // *Optoacoustic Spectroscopy and Detection*, Academic Press, London, 1977.
- [3] Koshelev M.A., Tsvetkov A.I., Morozkin M.V., Glyavin M.Yu., Tretyakov M.Yu. // *J. Molec. Spectrosc.* 2017. Vol. 331. P 9.
- [4] Glyavin M.Yu., Chirkov A.V., Denisov G.G., Fokin A.P., Kholoptsev V.V., Kuftin A.N., Luchinin A.G., Golubyatnikov G.Yu., Malygin V.I., Morozkin M.V., Manuilov V.N., Proyavin M.D., Sedov A.S., Sokolov E.V., Tai E.M., Tsvetkov A.I., Zapevalov V.E. // *Rev. Sci. Instr.* 2015. Vol. 86, No. 5. P. 054705.
- [5] Koshelev M.A., Delahaye T., Serov E.A., Vilkov I.N., Boulet C., Tretyakov M.Yu. // *J. Quant. Spectrosc. Radiative Transfer* 2017. Vol. 196. P. 78.

«СУХОЙ» АТМОСФЕРНЫЙ КONTИНУУМ: НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА ИЗВЕСТНЫЕ МИКРОВОЛНОВЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

А.О. Зибарова¹⁾, М.Ю. Третьяков²⁾

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского

²⁾Институт прикладной физики РАН

В верхних слоях атмосферы, где влажность почти отсутствует, наиболее существенными составляющими спектра являются резонансные линии кислорода и «сухой» (не имеющий отношения к молекулам воды) атмосферный континуум. Точные значения их параметров необходимы для моделей распространения излучения. В этой работе речь пойдет о континууме.

Чтобы выделить из экспериментальных данных континуальное поглощение, необходимо из полного наблюдаемого в эксперименте поглощения вычесть резонансное (мономолекулярное) поглощение. В частности, в миллиметровом диапазоне длин волн в сухом воздухе, где резонансный спектр есть только у молекулярного кислорода, следует учесть его вращательный спектр, спектр тонкой структуры (полоса 60 ГГц и линия вблизи 118 ГГц) и линии «нулевых» переходов, иногда называемые дебаевским поглощением. Особенностью спектра тонкой структуры и «нулевых» переходов является заметное даже при атмосферных давлениях проявление эффекта столкновительной связи линий, называемого еще спектральным обменом или интерференцией [1].

Появление континуального поглощения связано с тем, что воздух не является идеальным газом. В нем зависимость давления от плотности описывается вириальным уравнением $P=A \cdot \rho + B \cdot \rho^2 + C \cdot \rho^3 + \dots$, причем все его коэффициенты зависят от температуры. Аналогичным образом общее поглощение может быть разложено на составляющие $\alpha(v, \rho) = \alpha_1(v, \rho) \cdot \rho + \alpha_2(v, \rho) \cdot \rho^2 + \alpha_3(v, \rho) \cdot \rho^3 + \dots$, где $\alpha_1(v, \rho)$, $\alpha_2(v, \rho)$, $\alpha_3(v, \rho)$ – нормированные на число частиц спектры мономолекулярного, бимолекулярного и тримолекулярного поглощения соответственно. Вириальные коэффициенты входят в амплитудные множители соответствующих спектров.

В приближении разреженного газа, в котором доминируют парные взаимодействия, что достаточно хорошо соответствует атмосферным условиям, в разложениях можно пренебречь всеми слагаемыми, кроме первых двух. $B(T)$ характеризует количество парных состояний молекул в газе. Известно, что в атмосферных условиях в сухом воздухе вероятность образования димеров (двойных молекул) мала, и основной вклад в бимолекулярное поглощение вносят свободные пары, то есть такие парные состояния, при которых сталкивающиеся мономеры испытывают лишь однократное сближение.

При столкновении молекул, образующих свободную пару, их поля перекрываются, происходит кратковременное искажение структуры молекул и связанное с этим перераспределение зарядов. Оно тем сильнее, чем меньше прицельный параметр и больше скорость сближения. При этом даже у неполярных молекул кратковременно появляется дипольный момент, обеспечивающий возможность взаимодействия с полем. Этот эффект называется столкновительно индуцированным поглощением (СИП). Он является доминирующим при формировании континуального поглощения в сухом воздухе.

Наиболее точные на сегодня результаты расчетов СИП в азоте, кислороде и сухом воздухе в области рототрансляционных полос приведены в [2]. Авторы статьи демонстрируют удовлетворительное согласие расчетов с экспериментальными данными для азота [3] и кислорода [4].

Результаты единственных на сегодняшний день исследований континуума в сухом воздухе и в его основных составляющих в условиях, близких к атмосферным, представлены в [5]. Они выполнены в миллиметровом диапазоне длин волн с помощью техники микроволновой спектроскопии. Опубликованные там же измерения для азота неплохо согласуются с предшествующими данными, полученными в длинноволновой части миллиметрового диапазона.

Авторы [5] подтвердили хорошо известную экспериментально установленную эмпирическую зависимость для континуального поглощения в миллиметровом диапазоне длин волн:

$$\alpha_{cont}^{dry} = C(T) \cdot P_{air}^2 \cdot \nu^2 = C_{dry} \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{x_{dry}} \cdot P_{air}^2 \cdot \nu^2. \quad (1)$$

В формулах $C(T)$, C_{dry} , x_{dry} – коэффициенты эмпирической аппроксимации континуума, ν – частота (ГГц), P_{air} – давление воздуха (торр), T – температура (К).

Но при выделении СИП в сухом воздухе в [5] был допущен ряд неточностей. Мономолекулярное кислородное поглощение считалось константой, равной дебаевскому поглощению, и рассчитывалось по выражению, используемому во всех версиях Millimeter-wave Propagation Model (MPM) [6]

$$\alpha_{deb} = 1.1 \times 10^{-8} P_{air}^2 \left(\frac{T}{300}\right)^{-2.8} \frac{\partial B}{\text{км}}. \quad (2)$$

Таким образом, авторы [5] пренебрегли всеми составляющими мономолекулярного поглощения, кроме линий «нулевых» переходов, хотя расчет поглощения в сухом воздухе по модели MPM-11 [6] (рис. 1) демонстрирует явную частотную зависимость, а именно рост поглощения при понижении частоты, что связано в основном с влиянием крыла полосы вблизи 60 ГГц. В исследуемый диапазон попадает низкочастотная линия вращательного триплета изотопа $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, присутствующего в кислороде в естественной концентрации. Более того, дебаевское поглощение можно считать константой только при условии, что «нулевые» переходы не интерферируют ни между собой, ни с другими линиями. Такое допущение не имеет оснований, поскольку линии «нулевых» переходов друг с другом перекрываются, а сами переходы происходят в пределах неопределенности энергии уровней, между которыми разрешены столкновительные переходы. Интерференция линий полосы между собой приводит к перераспределению интенсивности от края полосы к её центру. В частном случае дебаевского поглощения в O_2 это означает увеличение поглощения вблизи нуля и его уменьшение с ростом частоты. Это учитывается в MPM за счет коррекции коэффициентов интерференции линий тонкой структуры [7]. Таким образом, смысл имеет только полное поглощение, рассчитываемое в MPM. Это проявляется, в частности, в том, что полное модельное поглощение на

более высоких частотах оказывается меньше дебаевской составляющей (рис. 1), рассчитанной по формуле (1), не учитывающей эффект интерференции.

Расчет мономолекулярного поглощения в сухом воздухе с помощью модели ECS-13 (EnergyCorrectionSudden) [8], которая более точно по сравнению с МРМ учитывает эффект интерференции и линий тонкой структуры O_2 , и нулевых переходов, дает примерно на 60% меньший результат, чем считалось в [5]. Это указывает на то, что авторы [5] использовали завышенную оценку величины мономолекулярного кислородного поглощения, и, следовательно, СИП было недооценено.

В этой работе мономолекулярное поглощение моделировалось с помощью ECS-13, включающей линии тонкой структуры и дебаевское поглощение, а отсутствующий в ней вращательный спектр – с помощью МРМ-11. Полученное таким образом поглощение вычиталось из функции, аппроксимирующей экспериментальные данные, соответствующие полному поглощению в сухом воздухе [5]:

$$\alpha^{dry} = \alpha_{deb} + 5.64(17) \times 10^{-13} P^2 \left(\frac{T}{300} \right)^{-3.35(11)} \nu^2 \frac{\partial B}{\partial \nu} \quad (3)$$

Оставшееся поглощение интерпретировалось как бимолекулярное и аппроксимировалось функцией (1). В результате было получено

$$\alpha_{cont}^{dry} = 7.1(2) \times 10^{-13} P^2 \left(\frac{T}{300} \right)^{-3.22(11)} \nu^2 \frac{\partial B}{\partial \nu} \quad (4)$$

На рис. 2 символами отмечены экспериментальные данные (рис. 17 работы [5]), соответствующие полному поглощению в сухом воздухе, цветными линиями – аппроксимация, подобранная в [5], черными линиями – аппроксимация, предложенная в этой работе. Видно, что новая физически обоснованная модель столь же хорошо соответствует имеющимся экспериментальным данным, как и упрощенная модель из работы [5].

Одним из результатов теоретического расчета [2] является то, что в мм-субмм диапазоне длин волн континуум в сухом воздухе с хорошей степенью точности можно рассматривать, как азотный континуум с множителем 0.84. Это позволяет использовать данные работы [5] о спектре континуума в N_2 для проверки выделения СИП в сухом воздухе. (Из-за отсутствия у азота резонансного спектра в мм-диапазоне частот бимолекулярное поглощение, составляющее наблюдаемый континуум, является доминирующим, и интерпретация этих данных в работе [5] не вызывает сомнений). На рис. 3

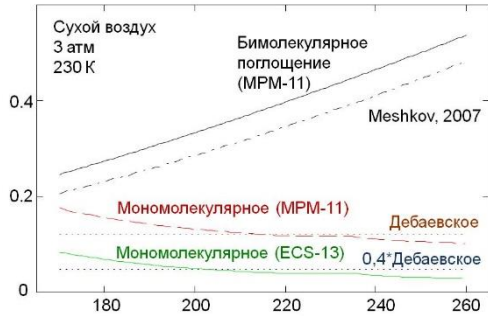


Рис. 1

видно, что коэффициенты эмпирической аппроксимации континуума $C_{air}(T)$ воздуха и $0,84 \times C_{N_2}(T)$ при методе обработки данных, использовавшемся в [5], отличаются на 15-20%, что значительно выходит за границы интервалов допустимых погрешностей экспериментальных данных. Сделанная нами коррекция приводит к согласию результатов.

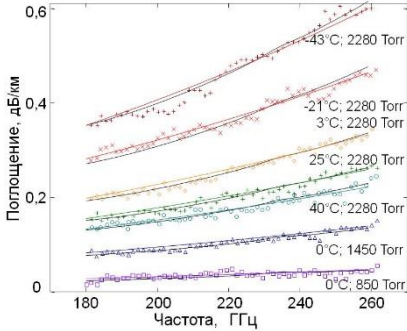


Рис. 2

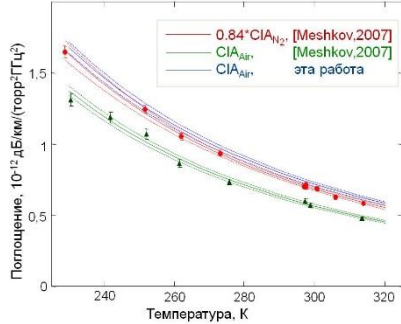


Рис. 3

Таким образом, показано, что корректный учет мономолекулярного кислородного поглощения приводит к предсказанной теоретически в [2] согласованности результатов вычисления СИП в сухом воздухе и в азоте. Это дает основание считать, что полученные коэффициенты правильнее описывают континуальное поглощение в сухом воздухе и могут быть рекомендованы к использованию в моделях распространения.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, проект 15-05-04387.

- [1] Rosenkranz P.W. // IEEE Trans. Anten. Propagat. 1975. Vol. 23, № 4. P. 498.
- [2] Boissoles J., et al. // JQSRT. 2003. Vol. 82, № 4. P. 505.
- [3] Borysov A., Frommhold L. // Astroph. J. 1986. Vol. 311. P. 1043.
- [4] Bosomworth D.H., Gush H.P. // Can. J. Phys. 1965. Vol. 42. P. 751.
- [5] Meshkov A.I., De Lucia F.C. // JQSRT. 2007. Vol. 108, № 2. P. 256.
- [6] Makarov D.S., et al. // JQSRT. 2011. Vol. 112. P. 1420.
- [7] Liebe H.J., et al. // JQSRT. 1992. Vol. 45, № 5/6. P. 629.
- [8] Makarov D.S., et al. // JQSRT. 2013. Vol. 124. P. 1.

Секция «Общая физика»

Заседание секции проводилось 23 мая 2017 г.
Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.