Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственнй университет, 2019

УДК 548.4

Оригинальная статья

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СВЕТОВОГО ПОТОКА В СРЕДЕ С РАССЕИВАЮЩИМИ ЦЕНТРАМИ

С.С. Рыбина, С.А. Третьяков

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170100, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

rybina.sofia@gmail.com, tasleo@inbox.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.356

Аннотация: Разработана математическая модель расчета параметров световых потоков, проходящих через светорассеивающую и поглощающую среду. В качестве среды были выбраны монокристаллы парателлурита и германия с известными оптическими параметрами и плотностями различных поглощающих и рассеивающих неоднородностей.

Ключевые слова: рассеяние, отражение, преломление, закон Бугера – Ламберта, индикатриса рассеяния.

1. Введение

По принципу Гюйгенса – Френеля, каждая точка волнового фронта, распространяющегося в вакууме или в однородной среде, может рассматриваться как источник элементарных волн. Эти вторичные волны усиливают друг друга в направлении распространения и гасят в других направлениях, а существующие неоднородности, имеющие размеры близкие или превышающие длину волны, приводят к тому, что волны, отражённые от каждой из них, не имеют определенных фаз и усиливают друг друга во всех направлениях [1].

В результате рассеяния, плотность потока энергии в направлении распространения убывает быстрее, чем при наличии только поглощения. Формулы, связывающие рассеяние и пропускание, основаны на законе Бугера – Ламберта, предполагающего экспоненциальное ослабление светового потока в среде I за счет поглощения и рассеяния:

$$I = I_0 \cdot e^{-\alpha_e h} = I_0 \cdot e^{-(\alpha_a + \alpha_s)h}, \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность входящего пучка, $\alpha_e, \alpha_a, \alpha_s$ – коэффициенты экстинкции, поглощения и рассеяния соответственно, h – толщина образца.

Частота рассеянного света совпадает с частотой света в первичном пучке. Если свет в первичном пучке не поляризован, то интенсивность рассеянного света во всех направлениях в плоскости, перпендикулярной к первичному пучку, одинакова. Поэтому интенсивность рассеянного света будет зависеть только от угла φ между направлением первичного пучка и направлением рассеяния. Таким образом, поток, рассеянный по всем направлениям, будет равен:

$$dF_p = \int_{4\pi} dI \cdot d\omega = \frac{1}{4\pi} \cdot B \cdot d\omega \cdot dV \cdot \int_{4\pi} \rho(\gamma) \cdot d\omega = B \cdot d\omega \cdot dV \cdot \alpha_s. \quad (2)$$

Здесь $d\omega$ – телесный угол падающего света, dV – элементарный объём рассеивающей и поглощающей среды, $\rho(\gamma)$ – коэффициент пропорциональности, называемый показателем рассеяния в направлении γ , $d\omega'$ – телесный угол рассеяния, B – яркость пучка световых лучей.

Относительное распределение рассеянного света в зависимости от угла отклонения движения фотона от первоначального направления, описывается функцией:

$$\chi(\gamma) = \frac{\rho(\gamma)}{\alpha_s}, \quad (3)$$

называемой индикатрисой рассеяния [2].

Основные варианты индикатрис, используемые при расчете вероятности рассеяния:

1. Сферическая: ($\chi(\gamma)=1$).

Индикатриса, соответствующая случаю, когда свет с одинаковой вероятностью рассеивается по всем направлениям. Графически она выглядит в виде окружности.

2. Рэлеевская:

$$\chi(\gamma) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2 \gamma). \quad (4)$$

Как видно из рис. 1 а, при данной индикатрисе, рассеяние сильнее вдоль направления распространения.

Рис. 1. Индикатрисы рассеяния: Рэлеевская (а) и индикатриса соответствующая рассеянию Ми (б).

3. Рассеяние Ми

Учитывает многократное рассеяние, индикатриса рассеяния сильно вытянута вперёд относительно направления падающего света. Для описания индикатрисы в случае многократного рассеяния используют

формулу разложения в ряд по полиномам Лежандра $P(\cos\gamma)$:

$$\chi(\gamma) = \sum_{i=0}^m \chi_i \cdot P(\cos\gamma). \quad (5)$$

Индикатриса, описывающая рассеяние Ми (см. рис. 1 б), имеет дифракционные максимумы [3].

2. Модель

В рамках волновых представлений – как в классических теориях, где рассматриваются микроплощадки [4-6], так и в ЕМТ-теории [7-16], оперирующей непрерывными функциями в приповерхностном слое, и только с волнами, векторы которых одинаковым образом ориентированы в падающих волнах, не существует надежных способов расчета параметров светового потока, взаимодействующего с шероховатыми поверхностями кристаллов. В модели реализован подход, заключающийся в соединении представления света в виде потока фотонов, подчиняющихся законам геометрической оптики (считается, что коэффициент преломления неоднородности и основной среды различен) или поглощающихся согласно статистике, определяемой волновыми свойствами [17].

В рамках разработанного метода вводится понятие «траектория фотона», а расчёт этих траекторий производится согласно следующим правилам, заложенным в модель взаимодействия фотонов с веществом:

1. Область среды, в которой рассматривается распространение фотонов, разбивается на ячейки (элементарные объемы). Задаваемым параметром является число рассеивающих неоднородностей (в соответствии с видом индикатрис рассеяния). В результате каждой ячейке присваивается один из трех возможных типов (среда, дефект, пустота, т.е. среда за пределами области моделирования).

2. На границах среды выполняются законы отражения и преломления; коэффициент отражения считается вероятностью отражения для каждого фотона и вычисляется по формулам Френеля.

3. Генерация фотонов происходит на входной плоскости с задаваемым распределением. После проверки на отражение, в случае прохождения, фотону приписываются индексы ячейки с проверкой на поглощение и рассеяние согласно типу ячейки (вероятность изменения траектории рассчитывается исходя из индикатрисы рассеяния). Далее определяется следующая ячейка нахождения фотона согласно изменениям его траектории. Итерации продолжаются до тех пор, пока фотон не поглотится или не покинет объем.

4. Эволюция каждого фотона учитывается в общей статистике, фиксирующей поглощение и рассеяние на каждом этапе итерации, а так же интенсивность вышедшего светового потока в зависимости от угла.

Статистика представляется в виде графиков, где по оси ординат отложено количество фотонов n , а по оси абсцисс условная толщина образца, выражаемая в количестве элементарных ячеек X (см. рис. 2).

Рис. 2. Распределения фотонов по толщине с параметрами, характеризующими концентрации рассеивающих центров различных типов: кривая 1 – распределение фотонов согласно экспоненциальному закону ослабления; кривая 2 – число фотонов, достигших слоя; кривая 3 – число фотонов, достигших слоя без изменения первоначального направления на углы, отличные от 0° и 180° ; кривая 4 – число фотонов, поглощенных в слое.

3. Результаты компьютерного моделирования

На рис. 3 и рис. 4 представлено сравнение результатов моделирования и экспериментальных результатов измерения коэффициентов отражения R и пропускания τ света ИК диапазона монокристаллов парателлурита и германия [18, 19].

Рис. 3. Расчетный (кривая 1) и экспериментальный (кривая 2) спектры отражения монокристалла парателлурита.

Рис. 4. Расчетный (кривая 1) и экспериментальный (кривая 2) спектры пропускания монокристалла германия.

Спектры получены с помощью Фурье-спектрометра Tensor-27. Как можно видеть, расхождение между расчетом и экспериментом не превышает 2,5%, а на коротковолновом и длинноволновом участках спектра, совпадает.

4. Результаты и выводы

Разработанная модель процесса распространения света в кристаллах, основанная на геометрическом приближении, а также на представлении пучка излучения в виде совокупности движущихся по индивидуальным траекториям фотонов, успешно протестирована при расчетах коэффициентов пропускания и отражения света ИК диапазона кристаллами германия и парателлурита.

Волновые свойства излучения учитываются в модели индикатрисой рассеяния фотона на единицу пути на заданный угол. Вместо показателя поглощения используется вероятность рассеяния на единицу пути. Дополнительно введены ещё три параметра: концентрации трёх типов структурных дефектов в кристалле, дающих равномерное рассеяние, рэлеевское рассеяние и рассеяние Ми. Использование данных параметров позволяет рассчитывать характеристики световых потоков, рассеянных в кристалле и прошедших через него, их интенсивность и угловые распределения, а также изучать влияние дефектов структуры на рассеяние света. Модель позволяет рассчитывать число фотонов, поглощённых при распространении светового пучка в каждом слое по длине кристалла, и прогнозировать нагрев элементов силовой лазерной оптики.

Полученные в результате расчетов значения совпадают с экспериментом в пределах погрешности измерений, что подтверждает работоспособность фотонной модели распространения света в кристаллах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания (проект 2019-0126).

Библиографический список:

1. **Ландсберг, Г.С.** Оптика / Г.С. Ландсберг. 6-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 848 с.
2. **Иванов, А.П.** Оптика рассеивающих сред / А.П. Иванов. – Минск: Наука и техника, 1969. – 592 с.
3. **Кляцкин, В.Н.** К теории распространения световых пучков в среде со случайными неоднородностями / В.Н. Кляцкин, В.И. Татарский // Известия вузов. Радиофизика. – 1970. – Т. 13. – № 7. – С. 1061-1068.
4. **Басс, Ф.Г.** Рассеяние волн на статистически неровной поверхности / Ф.Г. Басс, И.М. Фукс. – М.: Наука, 1972. – 424 с.
5. **Шмелев, А.Б.** Рассеяние волн статистически неровными поверхностями / А.Б. Шмелев // Успехи физических наук. – 1972. – Т. 106. – Вып. 3. – С. 459-480.
6. **Семенов, Б.И.** Расчет рассеяния электромагнитных волн поверхностью типа шероховатого рельефа для произвольных углов наблюдения / Б.И. Семенов // Радиотехника и электроника. – 1970. – Т. 15. – № 3. – С. 595-598.
7. **Полянский, В.К.** Рассеяние света при отражении от статистически распределенных микроплощадок: дифракционное рассмотрение / В.К. Полянский, В.П. Рвачев // Оптика и спектроскопия. – 1967. – Т. 22. – Вып. 2. – С. 279-287.
8. **Nikolaeff, F.** Injection moulded subwavelength gratings for low-cost AR treatment / F. Nikolaeff, L. Lundladh, M. Johansson, et al. // Diffractive Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series. – 2001. – V. 30. – P. 50-51.
9. **Mizutani, A.** Guided-mode resonant grating filter with an antireflective structured surface / A. Mizutani, H. Kikuta, K. Iwata, H. Toyota // Journal of the Optical Society of America A. – 2002. – V. 19. – I. 7. – P. 1346-1351.
10. **Honsa, P.** Rigorous analysis of surface-relief diffraction gratings: a comparison of CM and RCWA methods / P. Honsa, I. Richter, P. Fiala // Diffractive Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series. – 2001. – V. 30. – P. 74-75.
11. **Levy, U.** Fabrication of continuous blazed DOEs using slant etching procedure / U. Levy, D. Mendlovic, E. Marom, et al. // Diffractive Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series. – 2001. – V. 30. – P. 94-95.
12. **Morris, M.G.** Diffractive optics: design, fabrication and applications / M.G. Morris // NASA. Marshall Space Flight Center, Conference on Binary Optics: An opportunity for Technical Exchange, Huntsville, Alabama February 23-25, 1993: conference paper. – Rochester, New York: The Institute of Optics University of Rochester and Rochester Photonics Corporation, 1993. – I. 3227. – P. 31-60.
13. **Souriau, L.** Characterization of threading dislocations in thin germanium layers by defect etching: toward chromium and HF-free solution / L. Souriau, T. Atanasova, V. Terzieva, et al. // Journal of the Electrochemical Society. – 2008. – V. 155. – I. 9. – P. H677-H681.
14. **Kukhlevsky, S.V.** Fields of optical waveguides as waves in free space / S.V. Kukhlevsky, G. Nyitrai, V.L. Kantsyrev // Physical Review E. – 2001. – V. 64. – I. 2. – P. 0266603-1-0266603-6.
15. **Xie, X.** The synergistic effects of carbon coating and micropore structure on the microwave absorption properties of *Co/CoO* nanoparticles / X. Xie, Y. Pang, H. Kikuchi, T. Liu // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2016. – V. 18. – I. 44. – P. 30507-30514.

16. **Weiglhofer, W.S.** Maxwell Gamett and Bruggeman formalisms for a particulate composite with bianisotropic host medium / W.S. Weiglhofer, A. Lakhtakia, B. Michel // *Microwave and Optical Technology Letters*. – 2008. – V. 15. – I. 4. – P. 263-266.
17. **Свидетельство № 2015619641 Российская Федерация.** Программа вероятностного расчета прохождения фотона через вещество: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / С.С. Рыбина, А.И. Колесников, С.А. Третьяков; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет». – № 2015614235; заявл. 21.05.15; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 09.09.15. – 1 с.
18. **Kolesnikov, A.I.** Features of light attenuation in crystals under violation of the Bouguer law / A.I. Kolesnikov, I.A. Kaplunov, I.V. Talyzin, et al. // *Crystallography Reports*. – 2008. – V. 53. – № 7. – P. 1144-1149.
19. **Kaplunov, I.A.** Method for measuring light scattering in germanium and paratellurite crystals / I.A. Kaplunov, A.I. Kolesnikov, S.L. Shaiovich // *Crystallography Reports*. – 2005. – V. 50. – Suppl. 1. – P. 546-552.

References:

1. **Landsberg, G.S.** Optics / G.S. Landsberg. 6-e izd., stereot. – M.: FIZMATLIT, 2003. – 848 p. (In Russian).
2. **Ivanov, A.P.** Optics of scattering media / A.P. Ivanov. – Minsk: Nauka i tekhnika, 1969. – 592 p. (In Russian).
3. **Klyatskin, V.N.** On the theory of propagation of light beams in a medium with random inhomogeneities / V.N. Klyatskin, V.I. Tatarskij // *Izvestiya vuzov. Radiofizika*. – 1970. – V. 13. – № 7. – P. 1061-1068. (In Russian).
4. **Bass, F.G.** Wave scattering on a statistically uneven surface / F.G. Bass, I.M. Fuks. – M.: Nauka, 1972. – 424 p. (In Russian).
5. **Shmelev, A.B.** Wave scattering by statistically uneven surfaces / A.B. Shmelev // *Uspekhi fizicheskikh nauk*. – 1972. – V. 106. – I. 3. – P. 459-480. (In Russian).
6. **Semenov, B.I.** Calculation of scattering of electromagnetic waves by a surface of a rough relief type for arbitrary viewing angles / B.I. Semenov // *Radiotekhnika i elektronika*. – 1970. – V. 15. – № 3. – P. 595-598. (In Russian).
7. **Polyanskij, V.K.** Light scattering by reflection from statistically distributed micro-sites: diffraction analysis / V.K. Polyanskij, V.P. Rvachev // *Optika i spektroskopiya*. – 1967. – V. 22. – I. 2. – P. 279-287. (In Russian).
8. **Nikolaeff, F.** Injection moulded subwavelength gratings for low-cost AR treatment / F. Nikolaeff, L. Lundladh, M. Johansson, et al. // *Diffraction Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series*. – 2001. – V. 30. – P. 50-51.
9. **Mizutani, A.** Guided-mode resonant grating filter with an antireflective structured surface / A. Mizutani, H. Kikuta, K. Iwata, H. Toyota // *Journal of the Optical Society of America A*. – 2002. – V. 19. – I. 7. – P. 1346-1351.
10. **Honsa, P.** Rigorous analysis of surface-relief diffraction gratings: a comparison of CM and RCWA methods / P. Honsa, I. Richter, P. Fiala // *Diffraction Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series*. – 2001. – V. 30. – P. 74-75.
11. **Levy, U.** Fabrication of continuous blazed DOEs using slant etching procedure / U. Levy, D. Mendlovic, E. Marom, et al. // *Diffraction Optics, Budapest, October 9-11, 2001: Topical Meeting Series*. – 2001. – V. 30. – P. 94-95.

12. **Morris, M.G.** Diffractive optics: design, fabrication and applications / M.G. Morris // NASA. Marshall Space Flight Center, Conference on Binary Optics: An opportunity for Technical Exchange, Huntsville, Alabama February 23-25, 1993: conference paper. – Rochester, New York: The Institute of Optics University of Rochester and Rochester Photonics Corporation, 1993. – I. 3227. – P. 31-60.
13. **Souriau, L.** Characterization of threading dislocations in thin germanium layers by defect etching: toward chromium and HF-free solution / L. Souriau, T. Atanasova, V. Terzieva, et al. // Journal of the Electrochemical Society. – 2008. – V. 155. – I. 9. – P. H677-H681.
14. **Kukhlevsky, S.V.** Fields of optical waveguides as waves in free space / S.V. Kukhlevsky, G. Nyitray, V.L. Kantsyrev // Physical Review E. – 2001. – V. 64. – I. 2. – P. 0266603-1-0266603-6.
15. **Xie, X.** The synergistic effects of carbon coating and micropore structure on the microwave absorption properties of *Co/CoO* nanoparticles / X. Xie, Y. Pang, H. Kikuchi, T. Liu // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2016. – V.18. – I. 44. – P. 30507-30514.
16. **Weiglhofer, W.S.** Maxwell Gamett and Bruggeman formalisms for a particulate composite with bianisotropic host medium / W.S. Weiglhofer, A. Lakhtakia, B. Michel // Microwave and Optical Technology Letters. – 2008. – V. 15. – I. 4. – P. 263-266.
17. **Certificate № 2015619641 Russian Federation.** Program for the probabilistic calculation of the passage of a photon through a substance: certificate of state registration of a computer program / S.S. Rybina, A.I. Kolesnikov, S.A. Tret'yakov; заявитель i правообладатель Federal'noe gosudarstvennoe byudzhetnoe obrazovatel'noe uchrezhdenie vysshego obrazovaniya «Tverskoj gosudarstvennyj universitet». – № 2015614235; заявл. 21.05.15; zaregistrirovano v reestre programm dlya EVM 09.09.15. – 1 p. (In Russian).
18. **Kolesnikov, A.I.** Features of light attenuation in crystals under violation of the Bouguer law / A.I. Kolesnikov, I.A. Kaplunov, I.V. Talyzin, et al. // Crystallography Reports. – 2008. – V. 53. – № 7. – P. 1144-1149.
19. **Kaplunov, I.A.** Method for measuring light scattering in germanium and paratellurite crystals / I.A. Kaplunov, A.I. Kolesnikov, S.L. Shaiovich // Crystallography Reports. – 2005. – V. 50. – Suppl. 1. – P. 546-552.

Original paper

MODELING PROCESS OF DISTRIBUTION OF LIGHT FLOW IN THE ENVIRONMENT WITH DIFFUSING CENTERS

S.S. Rybina, S.A. Tret'yakov
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.356

Abstract: A mathematical model is developed for calculating parameters of light fluxes propagating through a light-scattering and absorbing medium. Single crystals of paratellurite and germanium with known optical parameters and densities of various absorbing and scattering inhomogeneities were chosen as mediums.

Keywords: scattering, reflection, refraction, Bouguer-Lambert law, scattering indicatrix.

Рыбина София Сергеевна – аспирант кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Третьяков Сергей Андреевич – старший преподаватель кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Sofia S. Rybina – postgraduate student, Department of Applied Physics, Tver State University

Sergey A. Tret'yakov – Senior Lecturer, Department of Applied Physics, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 01.08.2019; после рецензирования/revised: 06.09.2019; принята/accepted 15.10.2019.