



ISSN 2072-8387 (print)  
ISSN 2310-7251 (online)



# Вестник

МОСКОВСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ОБЛАСТНОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

*Серия*

**ФИЗИКА-  
МАТЕМАТИКА**

МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА  
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА  
НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ

БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИЙ ЖК МОДУЛЯТОР НА ОСНОВЕ  
ВОЛНОВОДНОГО ЭФФЕКТА В СВЕРХЗАКРУЧЕННОЙ  
СТРУКТУРЕ НЕМАТИКА

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ  
АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОКРЫТИЙ, НАНЕСЁННЫХ МЕТОДОМ  
ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ



2020 / № 3

ВЕСТНИК  
МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

ISSN 2072-8387 (print)

2020 / № 3

ISSN 2310-7251 (online)

серия

# ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА

## Рецензируемый научный журнал. Основан в 1998 г.

Журнал «Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика» включён Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» по следующим научным специальностям: 01.04.02 – Теоретическая физика (физико-математические науки); 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки) (См.: Список журналов на сайте ВАК при Минобрнауки России).

## The peer-reviewed journal was founded in 1998

«Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics» is included by the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation into “the List of leading reviewed academic journals and periodicals recommended for publishing in corresponding series basic research thesis results for a Ph.D. Candidate or Doctorate Degree” on the following scientific specialities: 01.04.02 – Theoretical physics (physical-mathematical sciences); 01.04.07 – Physics of the condensed state (physical-mathematical sciences) (See: the online List of journals at the site of the Supreme Certifying Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

ISSN 2072-8387 (print)

2020 / № 3

ISSN 2310-7251 (online)

series

# PHYSICS AND MATHEMATICS

BULLETIN OF THE MOSCOW REGION  
STATE UNIVERSITY

## Учредитель журнала

«Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика»

Государственное образовательное учреждение высшего образования Московской области

Московский государственный областной университет

Выходит 4 раза в год

### Редакционная коллегия

*Главный редактор:*

**Бугаев А. С.** – д. ф.-м. н., академик РАН, Московский физико-технический институт (Государственный университет)

*Заместитель главного редактора:*

**Жачкин В. А.** – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет

*Ответственный секретарь:*

**Васильчикова Е. Н.** – к. ф.-м. н., доц., Московский государственный областной университет

*Члены редакционной коллегии:*

**Беляев В. В.** – д. т. н., проф., Московский государственный областной университет;

**Боголюбов Н. Н.** – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

**Бугримов А. Л.** – д. т. н., проф., Российский государственный университет имени А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство);

**Геворкян Э. В.** – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет;

**Гладков С. О.** – д. ф.-м. н., проф., Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет);

**Емельяненко А. В.** – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;

**Калашников Е. В.** – д. ф.-м. н., проф., Московский государственный областной университет;

**Осипов М. А.** – д. ф.-м. н., проф., Университет Стратклайд (Великобритания);

**Рыбаков Ю. П.**, – д. ф.-м. н., проф., Российский университет дружбы народов;

**Чаругин В. М.** – д. ф.-м. н., проф., Московский педагогический государственный университет;

**Чигринов В. Г.** – д. ф.-м. н., проф., Гонконгский университет науки и технологий (Китай)

ISSN 2072-8387 (print)

ISSN 2310-7251 (online)

Рецензируемый научный журнал «Вестник московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика» публикует статьи по математическим проблемам термодинамики, кинетики и статистической физики; теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем; изучению различных состояний вещества и физических явлений в них; статистической физике и кинетической теории равновесных и неравновесных систем; теоретическому и экспериментальному исследованию физических свойств неупорядоченных неорганических систем; изучению экспериментального состояния конденсированных веществ и фазовых переходов в них. Журнал адресован ученым, докторантам, аспирантам и всем, интересующимся достижениями физико-математических наук.

Журнал «Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Физика-математика» зарегистрирован в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия. Регистрационное свидетельство ПИ № ФС 77-73344.

**Индекс серии «Физика-математика» по Объединенному каталогу «Пресса России» 40723**

Журнал включён в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), имеет полнотекстовую сетевую версию в Интернете на платформе Научной электронной библиотеки ([www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)), с августа 2017 г. на платформе Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (<https://cyberleninka.ru>), а также на сайте Московского государственного областного университета ([www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru)).

При цитировании ссылка на конкретную серию «Вестника Московского государственного областного университета» обязательна. Публикация материалов осуществляется в соответствии с лицензией Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

Ответственность за содержание статей несут авторы. Мнение автора может не совпадать с точкой зрения редколлегии серии. Рукописи не возвращаются.

Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. – 2020. – № 3. – 74 с.

© МГОУ, 2020.

© ИИУ МГОУ, 2020.

**Адрес Отдела по изданию научного журнала «Вестник Московского государственного областного университета»**

г. Москва, ул. Радио, д.10А, офис 98

тел. (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (доб. 6101)

e-mail: [info@vestnik-mgou.ru](mailto:info@vestnik-mgou.ru); сайт: [www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru)

**Founder of journal**  
**«Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics»**  
Moscow Region State University

————— Issued 4 times a year —————

**Editorial board**

*Editor-in-chief:*

**A. S. Bugaev** – Doctor of Physics and Mathematics, Academician of RAS, Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

*Deputy editor-in-chief:*

**V. A. Zhachkin** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Region State University

*Executive secretary:*

**E. N. Vasilchikova** – Ph.D. in Physics and Mathematics, Associate Professor, Moscow Region State University

*Members of Editorial Board:*

**V. V. Belyaev** – Doctor of Technical Sciences, Professor, Moscow Region State University;

**N. N. Bogolyubov** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

**A. L. Bugrimov** – Doctor of Technical Sciences, Professor, Kosygin State University of Russia;

**E. V. Gevorkyan** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Region State University;

**S. O. Gladkov** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University);

**A. V. Emelyanenko** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Lomonosov Moscow State University;

**E. V. Kalashnikov** – Doctor of Physics and Mathematics, Moscow Region State University;

**M. A. Osipov** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Strathclyde University (Glasgow, UK);

**Yu. P. Rybakov** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, RUDN University;

**V. M. Charugin** – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Moscow State Pedagogical University;

**V. G. Chigrinov** – Hong Kong University of Science and Technology (China)

**ISSN 2072-8387 (print)**

**ISSN 2310-7251 (online)**

The reviewed scientific journal “Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics” publishes articles on mathematical problems of thermodynamics, kinetics and statistical physics; the theory of the condensed state of classical and quantum, macroscopic and microscopic systems; the study of various states of substance and physical phenomena in them; statistical physics and the kinetic theory of equilibrium and non-equilibrium systems; theoretical and experimental research of physical features of disordered inorganic systems; the study of the experimental state of condensed substances and phase transitions in them. The journal is addressed to scientists, doctoral students, PhD students and everyone interested in the achievements of physical and mathematical sciences.

The series «Physics and Mathematics» of the Bulletin of the Moscow Region State University is registered in Federal service on supervision of legislation observance in sphere of mass communications and cultural heritage protection. The registration certificate ПИ № 0С 77 – 73344.

**Index series «Physics and Mathematics» according to the union catalog «Press of Russia» 40723**

The journal is included into the database of the Russian Science Citation Index, has a full text network version on the Internet on the platform of Scientific Electronic Library ([www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)), and from August 2017 on the platform of the Scientific Electronic Library “CyberLeninka” (<https://cyberleninka.ru>), as well as at the site of the Moscow Region State University ([www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru))

At citing the reference to a particular series of «Bulletin of the Moscow Region State University» is obligatory. Scientific publication of materials is carried out in accordance with the license of Creative Commons Attribution 4.0 (CC-BY).

The authors bear all responsibility for the content of their papers. The opinion of the Editorial Board of the series does not necessarily coincide with that of the author Manuscripts are not returned.

Bulletin of the Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics. – 2020. – № 3. – 74 p.

© MRSU, 2020.

© Moscow Region State University Editorial Office, 2020.

**The Editorial Board address:**

**Moscow Region State University**

10A Radio st., office 98, Moscow, Russia

Phones: (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (add. 6101)

e-mail: [info@vestnik-mgou.ru](mailto:info@vestnik-mgou.ru); site: [www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru)

# СОДЕРЖАНИЕ

## ФИЗИКА

- Тамбовцев И. М., Добрун Л. А., Ковшик А. П., Аксенова Е. В., Рюмцев Е. И.* МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ .....6
- Нуриев А. В., Стахарный С. А., Усов Н. Н.* ГАММА-КОРРЕКЦИЯ ПОЛНОЦВЕТНЫХ АКТИВНО-МАТРИЧНЫХ МИКРОДИСПЛЕЕВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ .....13
- Коваль О. А., Коваль Е. А.* ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ДВУМЕРНОГО ДИПОЛЯ ....23
- Симоненко Г. В.* БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИЙ ЖК МОДУЛЯТОР НА ОСНОВЕ ВОЛНОВОДНОГО ЭФФЕКТА В СВЕРХЗАКРУЧЕННОЙ СТРУКТУРЕ НЕМАТИКА .....38
- Николаева Д. В., Генералов Д. В., Паршин Б. А., Макеев М. О.* ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОКРЫТИЙ, НАНЕСЁННЫХ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ .....53
- Завитаев Э. В., Русаков О. В., Уткин А. И.* ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ НА ПРИМЕРЕ ЯДРА УРАНА .....65

# CONTENTS

## PHYSICS

- I. Tambovtcev, L. Dobrun, A. Kovshik, E. Aksenova, E. Ryumtsev.**  
ERBIUM-BASED LIQUID CRYSTAL COMPLEX FRANK CONSTANTS  
CALCULATION METHOD .....7
- A. Nuriev, S. Stakharny, N. Usov.** GAMMA CORRECTION OF FULL COLOR  
OLED MICRODISPLAYS .....13
- O. Koval, E. Koval.** NUMERICAL ANALYSIS OF ENERGY LEVELS  
OF QUANTUM PARTICLE IN FIELD OF TWO-DIMENSIONAL DIPOLE .....23
- G. Simonenko.** FAST LC MODULATOR BASED ON THE WAVEGUIDE  
EFFECT IN A SUPER-SWING NEMATIC STRUCTURE. ....38
- D. Nikolaeva, D. Generalov, B. Parshin, M. Makeev.** INVESTIGATION  
OF PHYSICAL PROPERTIES OF carbon DIAMOND-LIKE COATINGS  
APPLIED BY PULSED LASER DEPOSITION .....53
- E. Zavitaev, O. Rusakov, A. Utkin.** THE TUNNEL EFFECT FOR EXAMPLE  
OF A URANIUM NUCLEUS .....65

УДК 532.783, 544.252.22

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12

## МЕТОД РАСЧЁТА МОДУЛЕЙ ФРАНКА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ ЭРБИЯ

*Тамбовцев И. М., Добрун Л. А., Ковшик А. П., Аксенова Е. В., Рюмцев Е. И.*

*Санкт-Петербургский государственный университет  
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9, Российская  
Федерация*

### **Аннотация.**

**Цель:** определить модули Франка жидкокристаллического комплекса на основе эрбия.

**Процедура и методы.** Ёмкостным методом исследовано ориентирующее влияние магнитного поля на жидкокристаллический комплекс на основе эрбия. Получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости комплекса от магнитного поля. Предложен теоретический подход и численный метод определения упругих постоянных Франка на основе экспериментальной зависимости эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости от магнитного поля.

**Результаты.** Построены и объяснены зависимости диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля; найдены модули Франка для данного вещества.

**Теоретическая и практическая значимость.** Парамагнитные нематические жидкокристаллические комплексы на основе ионов лантаноидов (лантанидомезогены), обладают высокоэффективной люминесценцией и аномально большой для жидких кристаллов анизотропией магнитной восприимчивости. Указанные свойства нематических лантанидомезогенов позволяют создавать оптические среды с линейно поляризованной люминесценцией для использования в оптоэлектронных устройствах, управляемых с помощью электрических и магнитных полей.

**Ключевые слова:** жидкие кристаллы, лантанидомезогены, диэлектрическая проницаемость, модули Франка, фазовый переход, эффект Фредерикса

## ERBIUM-BASED LIQUID CRYSTAL COMPLEX FRANK CONSTANTS CALCULATION METHOD

*I. Tambovtcev, L. Dobrun, A. Kovshik, E. Aksenova, E. Ryumtsev*

*Saint Petersburg University*

*7–9 Universitetskaya naberezhnaya, St. Petersburg 199034, Russian Federation*

### **Abstract.**

**Aim** is to determine the Frank elastic constants of an erbium-based liquid crystal complex.

**Methodology.** The orienting effect of a magnetic field on an erbium-based liquid crystal complex was studied by a capacitive method. The dependence of the effective values of the components of the dielectric permittivity of the complex on the magnetic field is obtained. A theoretical approach and a numerical method for determining the Frank elastic constants are proposed based on the experimental dependence of the effective values of the permittivity of a cell on a magnetic field.

**Results.** The dependences of the permittivity of the sample on the applied magnetic field explained, and Frank elastic constants for this substance are found.

**Research implications.** Paramagnetic nematic liquid crystal complexes based on lanthanide ions (lanthanide mesogens) possess highly efficient luminescence and anisotropy of magnetic susceptibility is anomalously large for liquid crystals. The indicated properties of nematic lanthanide mesogens make it possible to create optical media with linearly polarized luminescence for use in optoelectronic devices controlled by electric and magnetic fields.

**Keywords:** liquid crystals, lanthanide mesogens, dielectric permittivity, Frank elastic constants, phase transition, Frédericksz transition

### **Введение**

В настоящее время интенсивно изучаются жидкокристаллические парамагнитные координационные соединения лантаноидов (лантанидомезогены). Лантанидомезогены могут использоваться в различных устройствах оптической электроники, органических светоизлучающих диодах различного цвета, плоских и гибких дисплеях, солнечных батареях, люминесцентных биозондах и т. д. [1; 2].

Объектом данного исследования являлся новый мезогенный комплекс трис[1-(4-(4- пентилциклогексил)фенил)октан-1,3-дионато]-[5- гептадецил-5'-метил-2,2'-бипиридин]эрбия. Этот комплекс  $\text{Er}(\text{DDk}_{3-5})_3\text{Vpy}_{17-1}$  синтезирован в Казанском национальном исследовательском технологическом университете [3]. Химическая структура исследуемого материала показана на рис. 1. Комплекс эрбия образует нематическую жидкокристаллическую фазу в диапазоне температур 130–160°C.

Для исследуемого вещества получена зависимость эффективных значений компонент диэлектрической проницаемости от величины ориентирующего магнитного поля  $H$ .

На основе этой зависимости численным методом найдены модули Франка для комплекса эрбия.

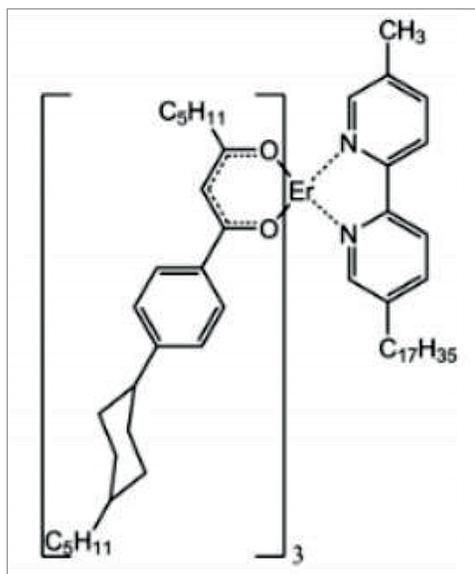


Рис. 1 / Fig. 1. Химическая структура жидкокристаллического комплекса эрбия. /  
The chemical structure of the liquid crystal complex of erbium.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

### Методы

Предложенный численный метод состоит из двух этапов. Сначала выполняется поиск минимума свободной энергии ячейки жидкого кристалла [4–6]:

$$F = S \int_0^d dz \omega(z),$$

где плотность свободной энергии имеет вид:

$$\omega = \frac{1}{2} \left[ (K_{11} \sin^2 \theta + K_{33} \cos^2 \theta) (\theta')^2 \mp \Delta \chi H^2 \sin^2 \theta - \frac{\Delta \epsilon}{4\pi} \frac{U^2 d \cos^2 \theta}{\int_0^d (\epsilon_{\perp} + \Delta \epsilon \cos^2 \theta)^{-1} dz} \right],$$

В качестве граничных условий рассматриваются модели жёсткого и мягкого сцепления (потенциал Рапини) [7] с различными условиями преднаклона на границах. Здесь знак «–» соответствует магнитному полю  $\mathbf{H}$ , перпендикулярному измерительному электрическому полю, а знак «+» – магнитному полю, параллельному измерительному электрическому полю. Эта модель также позволяет учитывать неоднородность электрического поля внутри образца.

На втором этапе решается обратная задача по нахождению модулей Франка  $K_{11}$  и  $K_{33}$  путём минимизации отклонения в рамках метода наименьших квадратов [8].

На рис. 2 представлены экспериментальные и теоретические зависимости эффективной диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля, иллюстрирующие результаты нашего исследования. Совпадение рассчитанных и экспериментальных данных показывает, что предложенный способ позволяет достичь высокой точности при использовании небольшого количе-

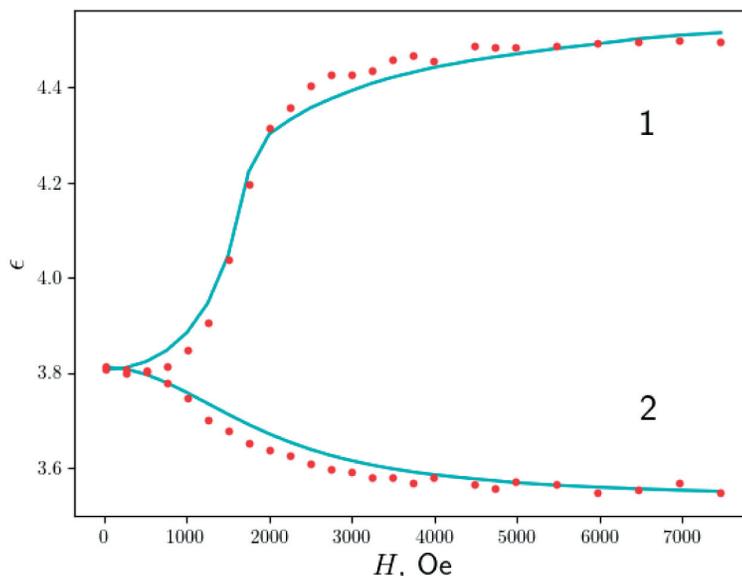


Рис. 2 / Fig. 2. Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости образца от приложенного магнитного поля (1 – в направлении параллельном и 2 – перпендикулярном направлению измерительного электрического поля): экспериментальные данные (точки) и результаты расчётов (сплошные линии). / Dependence of the effective dielectric constant of the sample on the applied magnetic field (1 – in the direction parallel and 2 – perpendicular to the direction of the measuring electric field): experimental data (points) and calculation results (solid lines).

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

ства экспериментальных данных. Это утверждение подтверждается анализом погрешностей измерений.

Данное исследование состояло из трёх частей: в первую очередь было необходимо оценить способность метода находить минимум на данных без шума. Для этого, полагая  $K_{11}$  и  $K_{33}$  фиксированными, определялась теоретическая зависимость диэлектрической проницаемости образца от магнитного поля, после чего по полученной зависимости определялись  $K_{11}$  и  $K_{33}$ , соответствующие минимуму отклонения в рамках метода наименьших квадратов. Таким образом было выяснено, что на синтетических данных метод может давать точность вплоть до четвертого знака. Вторым этапом была проверка метода на жидком кристалле, для которого модули Франка хорошо известны. В качестве такого объекта был использован распространённый жидкий кристалл 5CB. Для 5CB были рассчитаны значения модулей Франка  $K_{11}$  и  $K_{33}$ . Они совпали с полученными с помощью других экспериментальных методов значениями с точностью в пределах 5% [9].

В заключительной части исследования с помощью описанного метода были определены модули Франка  $K_{11}$  и  $K_{33}$  для комплекса эрбия и проведена оценка их погрешностей:

$$K_{11} = (7 \pm 6) 10^{-6} \text{ дин}, K_{33} = (6,7 \pm 0,5) 10^{-4} \text{ дин} = (6,7 \pm 0,5) 10^{-9} \text{ Н}$$

### Заключение

Очевидно, этот метод не может предоставить точную информацию о модуле  $K_{11}$  для комплекса эрбия, но, по крайней мере, он даёт нам информацию, что модуль  $K_{11}$  в несколько раз меньше, чем  $K_{33}$ . Предложенный метод не обладает такой высокой точностью, как, например, оптические методы, но может быть полезным для некоторых особых случаев, когда другие более точные методы оказываются неприменимыми. Следует отметить, что значения модулей Франка для комплекса эрбия оказались достаточно большими по сравнению с обычными жидкокристаллическими соединениями.

*Статья поступила в редакцию 31.07.2020 г.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Enhanced full color tunable luminescent lyotropic liquid crystals from P123 and ionic liquid by doping lanthanide complexes and AIEgen / Lei N, Shen D., Wang X., Wang J., Li Q., Chen X. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 2018. Vol. 529. P. 122–129. DOI: 10.1016/j.jcis.2018.06.012.
2. Chiriac L. F., Iliş M., Cîrcu V. Luminescent lanthanides complexes with mesogenic pyridone ligands: Emission and liquid crystals properties // *Polyhedron*. 2020. Vol. 190. P. 114748. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114748.
3. Tris ( $\beta$ -diketonates) lanthanum nematic adducts / Dzhabarov V. I., Knyazev A. A., Strelkov M. V., Molostova E. Y., Schustov V. A., Haase W., Galyametdinov Y. G. // *Liquid Crystals*. 2010. Vol. 37. Iss. 3. P. 285–291. DOI: 10.1080/02678290903506040.
4. Stewart I. W. *The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction*. London: Taylor & Francis, 2004. 351 p. (The Liquid Crystals Book Series).
5. Val'kov A. Y., Aksenova E. V., Romanov V. P. First-order and continuous Fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals // *Physical Review E*. 2013. Vol. 87. Iss. 2. P. 022508. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.022508.
6. Wales D. J. *Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 692 p.
7. Rapini A., Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois // *Journal de Physique Colloques*. 1969. Vol. 30 (C4). P. C4-54–C4-56. DOI: 10.1051/jphyscol:1969413.
8. Magnetic field-induced macroscopic alignment of liquid-crystalline lanthanide complexes / Aksenova E., Dobrun L., Kovshik A., Ryumtsev E., Tambovtcev I. // *Crystals*. 2019. Vol. 9. Iss. 10. P. 499. DOI: 10.3390/cryst9100499.
9. *Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics* / ed. by D. A. Dunmur, A. Fukuda, G. R. Luckhurst. London: The Institution of Electrical Engineers (INSPEC), 2001. 671 p. (EMIS Datareviews Series No. 25).

### REFERENCES

1. Lei N, Shen D., Wang X., Wang J., Li Q., Chen X. Enhanced full color tunable luminescent lyotropic liquid crystals from P123 and ionic liquid by doping lanthanide complexes and AIEgen. In: *Journal of Colloid and Interface Science*, 2018, vol. 529, pp. 122–129. DOI: 10.1016/j.jcis.2018.06.012.

2. Chiriac L. F., Iliş M., Cîrcu V. Luminescent lanthanides complexes with mesogenic pyridone ligands: Emission and liquid crystals properties. In: *Polyhedron*, 2020, vol. 190, pp. 114748. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114748.
3. Dzhabarov V. I., Knyazev A. A., Strelkov M. V., Molostova E. Y., Schustov V. A., Haase W., Galyametdinov Y. G. Tris( $\beta$ -diketonates) lanthanum nematic adducts. In: *Liquid Crystals*, 2010, vol. 37, iss. 3, pp. 285–291. DOI: 10.1080/02678290903506040.
4. Stewart I. W. The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals: A Mathematical Introduction. London, Taylor & Francis Publ., 2004. 351 p. (The Liquid Crystals Book Series).
5. Val'kov A. Y., Aksenova E. V., Romanov V. P. First-order and continuous Fréedericksz transitions in cholesteric liquid crystals. In: *Physical Review E*, 2013, vol. 87, iss. 2, pp. 022508. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.022508.
6. Wales D. J. Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses. Cambridge, Cambridge University Press Publ., 2003. 692 p.
7. Rapini A., Papoular M. Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois. In: *Journal de Physique Colloques*, 1969, vol. 30 (C4), pp. C4-54–C4-56. DOI: 10.1051/jphyscol:1969413.
8. Aksenova E., Dobrun L., Kovshik A., Ryumtsev E., Tambovtcev I. Magnetic field-induced macroscopic alignment of liquid-crystalline lanthanide complexes. In: *Crystals*, 2019, vol. 9, iss. 10, pp. 499. DOI: 10.3390/cryst9100499.
9. Dunmur D. A., Fukuda A., Luckhurst G. R., eds. Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics. London, The Institution of Electrical Engineers (INSPEC) Publ., 2001. 671 p. (EMIS Datareviews Series No. 25).

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Тамбовцев Иван Михайлович* – аспирант кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета;  
e-mail: imtambovtcev@gmail.com;

*Добрун Лилия Александровна* – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;  
e-mail: l.dobrun@spbu.ru;

*Ковшик Александр Петрович* – доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;  
e-mail: sashakovshik@yandex.ru;

*Аксенова Елена Валентиновна* – доктор физико-математических наук, профессор кафедры статистической физики Санкт-Петербургского государственного университета;

e-mail: e.aksenova@spbu.ru;

*Рюмцев Евгений Иванович* – доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета;

e-mail: rei39@mail.ru.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Ivan M. Tambovtcev* – Postgraduate student, Department of Statistical Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: imtambovtcev@gmail.com;

*Liliya A. Dobrun* – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Lecturer, Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: l.dobrun@spbu.ru;

*Alexander P. Kovshik* – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: sashakovshik@yandex.ru;

*Elena V. Aksenova* – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Statistical Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: e.aksenova@spbu.ru;

*Evgeny I. Ryumtsev* – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Molecular Biophysics and Polymer Physics, Saint Petersburg University;

e-mail: rei39@mail.ru.

---

### ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Тамбовцев И. М., Добрун Л. А., Ковшик А. П., Аксенова Е. В., Рюмцев Е. И. Метод расчёта модулей Франка жидкокристаллического комплекса на основе эрбия // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 6–12.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12

### FOR CITATION

Tambovtcev I. M., Dobrun L. A., Kovshik A. P., Aksenova E. V., Ryumtsev E. I. Erbium-based liquid crystal complex Frank constants calculation method. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 6–12.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-6-12

УДК 535.643.8

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-13-22

## ГАММА-КОРРЕКЦИЯ ПОЛНОЦВЕТНЫХ АКТИВНО-МАТРИЧНЫХ МИКРОДИСПЛЕЕВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ

**Нуриев А. В., Стахарный С. А., Усов Н. Н.**

Центральный научно-исследовательский институт «Циклон»  
107497, г. Москва, Щелковское ш., д. 77, Российская Федерация

### Аннотация.

**Цель** работы – исследование особенностей гамма-коррекции полноцветных активно-матричных микродисплеев на основе органических светодиодов в широком динамическом диапазоне яркости.

**Процедура и методы.** Исследования проведены расчётно-экспериментальным методом с помощью математического моделирования цветовых координат электролюминесценции органических светодиодов при различных яркостях и с учётом спектров пропускания RGB-светофильтров. Моделирование проводилось на основе данных, полученных при измерении электрических, светотехнических и спектральных характеристик образцов органических светодиодов и спектров пропускания RGB-светофильтров.

**Результаты.** Представлена базовая конструкция активно-матричных микродисплеев на основе органических светодиодов и метод получения полноцветного изображения с применением матрицы цветных светофильтров. Приведены электрические, светотехнические и спектральные характеристики исходных структур белого цвета свечения, проведено моделирование цветоразделения в системе RGB и рассмотрены факторы, влияющие на цветопередачу полноцветного изображения. Выявлены особенности гамма-коррекции полноцветного изображения микродисплеев в зависимости от уровня яркости свечения матрицы органических светодиодов и температуры окружающей среды.

**Практическая значимость** исследований важна при разработке полноцветных микродисплеев на основе органических светодиодов и их калибровки при производстве.

**Ключевые слова:** микродисплей, ОСИД, органический светодиод, полноцветное изображение, системы цветов

## GAMMA CORRECTION OF FULL COLOR OLED MICRODISPLAYS

**A. Nuriev, S. Stakharny, N. Usov**

Central Research Institute "Cyclone"  
77 Shelkovskoe shosse, Moscow 107497, Russian Federation

### Abstract.

**Aim** is to study the features of gamma correction of full-color active-matrix OLED microdisplays in a wide dynamic range of brightness.

**Methodology.** The study was carried out by calculation and experimental methods by modeling color coordinates of OLED electroluminescence at different luminance and accounts RGB color

filters transmission spectra. The modeling based on experimental data obtained by measuring the electrical, photometric and spectral characteristics of OLED samples and the transmission spectra of RGB color filters.

**Results.** Introduced base construction of full color active-matrix OLED microdisplays and method of forming color image by filter matrix. Electrical, photometrical and spectral characteristics of initial white OLED structures was represented as well as modeling of RGB color separation and factors affecting color balance of full color image. The features of full color OLED microdisplay gamma correction for different luminance level and temperatures are considered.

**Research implications.** Researches have practical relevance for OLED microdisplays design and calibration in production stage.

**Keywords:** microdisplay, OLED, Organic light emitting diode, full color image, color systems

### Введение

В настоящее время активно развивается направление средств отображения информации индивидуального типа – микродисплеи на основе органических светодиодов (OLED – Organic light emitting diode). Современные OLED-микродисплеи при диагонали экрана порядка 20 мм имеют разрешение до 2Кх2К полноцветного изображения, что даёт перспективу широкого применения в устройствах (очках) виртуальной, дополненной и смешанной реальности (VR, AR и MR), а также различных видеомодулей для специальных применений.

OLED-структуры представляют собой тонкоплёночные электролюминесцентные (ЭЛ) устройства на основе нанотонких слоёв органических материалов, нанесённых на различные типы подложек [1]. Для производства OLED-микродисплеев применяются подложки из монокристаллического кремния с активно-матричными схемами управления (АМСУ), изготовленными по стандартным групповым процессам кремниевой технологии. АМСУ осуществляет запись и хранение значения яркости свечения всех пикселей экрана в течение кадра, при этом каждый пиксель полноцветного экрана состоит из 3 RGB-субпикселей, баланс яркости которых отвечает за качество цветопередачи во всём динамическом диапазоне. Гамма-коррекция определяет зависимость яркости свечения экрана от уровня кодирования яркости, а в случае полноцветного изображения имеет три компоненты на каждый цветовой канал (RGB). Из-за физических особенностей OLED-структур [2; 3], форма спектра ЭЛ может изменяться в зависимости от яркости свечения [4] и рабочей температуры, что приводит к цветовым искажениям и смещению баланса белого. Исследование спектров ЭЛ исходных OLED-структур, моделирование цветodelения и кривых гамма-коррекции позволит получить высококачественное полноцветное изображение OLED-микродисплеев во всём динамическом диапазоне и при различных рабочих температурах.

### Полноцветные OLED микродисплеи и их свойства

Хорошо отработанным способом получения полноцветных OLED-микродисплеев является нанесение матрицы светофильтров поверх матри-

цы субпикселей, излучающих белый свет [1]. Схематически пиксель OLED-микродисплея, состоящий из трёх RGB-субпикселей, показан на рис. 1.

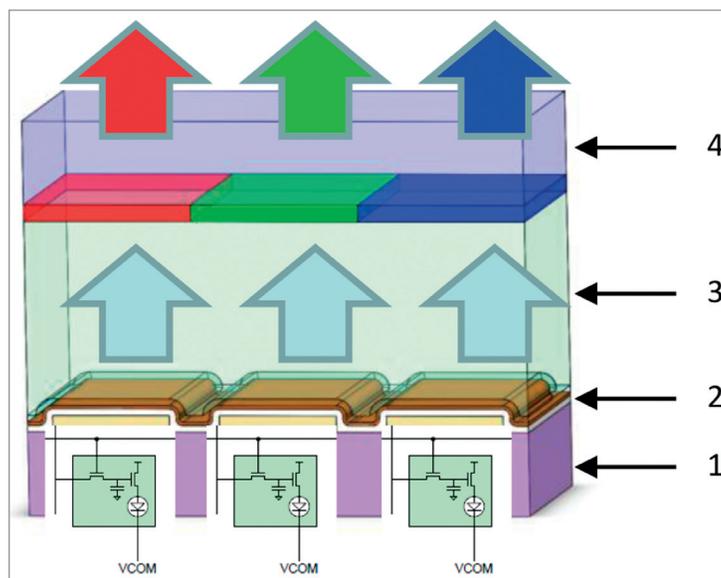


Рис. 1. / Fig. 1. Формирование RGB-субпикселей с помощью матрицы светофильтров. / Formation of RGB subpixels using a matrix of light filters.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

На кремниевой подложке с АМСУ (1) сформирована матрица субпиксельных анодов, на которую наносится многослойная OLED-структура белого цвета свечения (2) с полупрозрачным верхним катодом. Для формирования полноцветного изображения поверх OLED-структуры, при помощи УФ-отверждаемого полимера (3), наносится матрица светофильтров на покровном стекле (4), изготовленная методом фотолитографии с помощью цветных фоторезистов. Такой метод наиболее широко распространён при производстве полноцветных OLED-микродисплеев. Более перспективным является метод формирования матрицы светофильтров непосредственно поверх OLED-структуры, также методом фотолитографии [5], но требующий надёжный герметизирующий слой тонкоплёночной защиты OLED-структуры. Оба метода позволяют произвести цветделение исходного белого света свечения субпикселей в RGB-каналы полноцветного изображения с помощью светофильтров. На рис. 2 (а, б, в) показаны характеристики образцов площадью  $0,69 \text{ см}^2$  со стандартной OLED-структурой белого цвета свечения, применяемой в АО «ЦНИИ «Циклон» при производстве микродисплеев. Результирующие спектры ЭЛ данной трёхкомпонентной OLED-структуры белого цвета свечения имеют непрерывное заполнение практически на весь диапазон видимого спектра [6]. Для получения необходимого спектра ЭЛ необходим подбор высокочистых эмиссионных органических материалов, их анализ [7; 8; 9] и баланс в RGB-структуре.

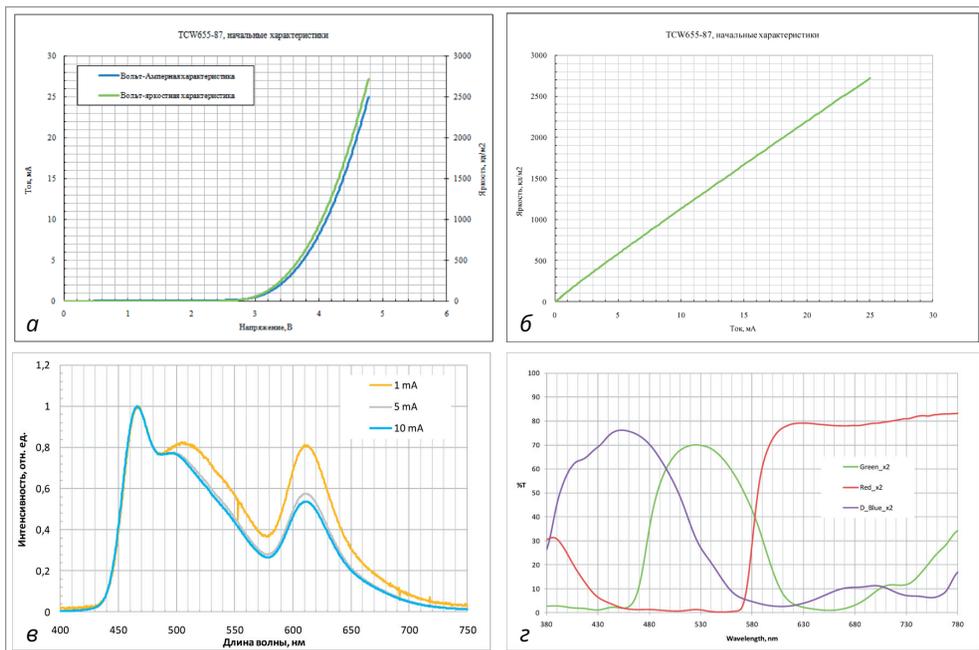


Рис. 2. / Fig. 2. а – вольт-амперные и вольт-яркостные характеристики; б – зависимость яркости от тока; в – спектр ЭЛ спектр OLED-структуры белого цвета свечения при токах 1, 5 и 10 мА; г – спектры пропускания RGB светофильтров. / а – Current-voltage and current-brightness characteristics; б – dependence of brightness on current; в – EL spectrum of OLED structure of white luminescence at currents of 1, 5 and 10 mA; г – transmission spectra of RGB light filters.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

На рис. 2б показаны спектры пропускания образцов цветных RGB-фоторезистов, изготовленных на стеклянных подложках, спектр пропускания которых аппаратно вычитался при измерениях. Цвет излучения RGB-субпикселей после цветоделения можно смоделировать интегральным произведением функции спектральной плотности мощности исходной белой OLED-структуры  $S_{OLED}(\lambda)$  на функцию спектрального пропускания соответствующего светофильтра  $S_{CF}(\lambda)$ :

$$S(\lambda) = \int_{380}^{780} S_{OLED}(\lambda) \times S_{CF}(\lambda) d\lambda. \quad (1)$$

Цветовые координаты излучения субпикселя  $x_u$  МКО рассчитываются из результирующей функции спектральной плотности мощности  $S(\lambda)$  по методу 179:2007 МКО [10]. На рис. 3 показаны цветовые координаты, рассчитанные из смоделированных спектров излучения RGB-каналов, образующих треугольник цветового охвата OLED-микродисплея. Баланс RGB-каналов определяет цветовые координаты полноцветного изображения, в том числе и градаций белого во всём динамическом диапазоне.

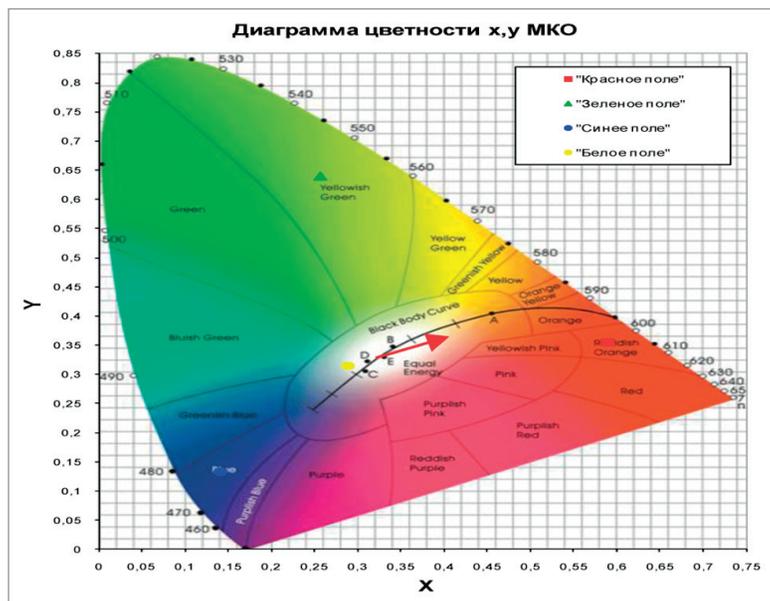


Рис. 3. / Fig. 3. Цветовые координаты RGB-каналов и белого поля. / Color coordinates of RGB channels and white field.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Как видно из нормированных спектров ЭЛ (рис. 2в) при различных токах через OLED-структуру, баланс компонент исходного спектра изменяется. В области низких токов возрастает спектральная плотность мощности в зелёной и, особенно, красной области спектра относительно синего. Данный эффект обусловлен физическими свойствами структур органических полупроводников, в которых эффективность образования более высокоэнергетических экситонов возрастает с ростом напряжения и сообщения большей энергии носителям заряда, инжектированным в структуру из электродов. Таким образом, при одинаковом RGB-балансе во всём динамическом диапазоне, шкала градаций белого будет иметь существенные цветовые искажения и смещение в красный цвет при низких яркостях.

При изменении рабочей температуры вольт-амперная характеристика (ВАХ) и спектр ЭЛ OLED-структуры также существенно изменяются.

С ростом температуры снижаются рабочие напряжения (рис. 4а) и для одинаковой величины тока, протекающей через структуру, возрастает спектральная плотность мощности в зелёной и красной области спектра относительно синего (рис. 4б).

Это объясняется снижением эффективности образования более высокоэнергетических экситонов при понижении рабочего напряжения с ростом температуры. Таким образом, при заданном RGB-балансе при пониженных температурах изображение на экране будет иметь смещение в синий цвет, а при повышенных – в красный.

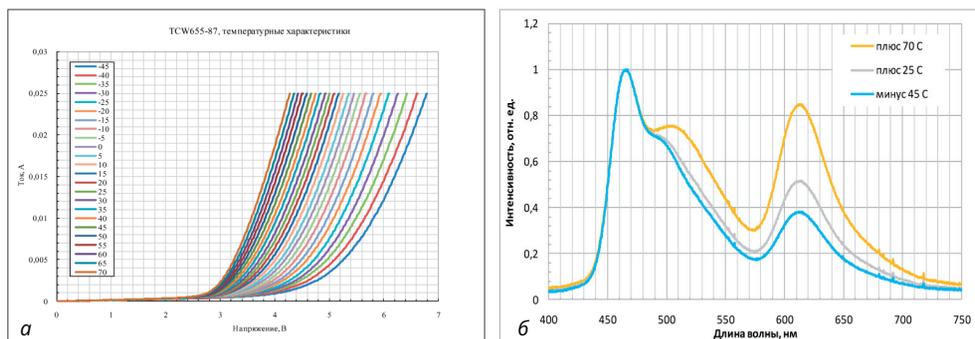


Рис. 4. / Fig. 4. Характеристики OLED-структуры белого цвета свечения при различных температурах: а – Вольт-Амперные характеристики; б – ЭЛ спектры для тока 10 мА. / Characteristics of OLED-structure of white glow at different temperatures: а – current-voltage characteristics; б – EL spectra for a current of 10 mA.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

### Гамма-коррекция полноцветных OLED-микродисплеев

Ток, протекающий через каждый субпиксель в течение кадра, определяет яркость свечения и контролируется независимыми драйверными ячейками АМСУ. Ячейки представляют собой повторители напряжения ёмкости ячейки, которое подаётся на анод субпикселя за вычетом передаточной характеристики ячейки. Так как ВАХ и, соответственно, вольт-яркостная характеристика (ВЯХ) OLED-структуры имеет сильно нелинейный характер и пороговое напряжение, до которого свечение отсутствует, входной цифровой видеосигнал необходимо преобразовывать в управляющее напряжение с поправкой на кривую гамма-коррекции. Фактически гамма-коррекция – это обратная функция ВЯХ, которая компенсирует нелинейность характеристики и пороговое напряжение OLED-структуры. Коррекция может достигаться путём табличного преобразования во внешнем микроконтроллере из 8-битного входного сигнала в 10-битный, подаваемый на вход микродисплея. На рис. 5 представлена системная гамма-коррекция ( $\Gamma=1$ ), линеаризующая яркость свечения монохромного белого МД Ldisplay (GL) в зависимости от уровня кодирования яркости входного сигнала GrayLevel (GL).

Смоделированная кривая гамма-коррекции определена как 8 поправочных коэффициентов, соответствующих нормализованных яркостей как функции  $2^i$ , где показатель  $i$  целое число, изменяющееся от 1 до 8. Для сравнения на графике приведены нормированные зависимости яркости от уровня кодирования без гамма-коррекции  $L(GL)$  OLED, определяемые характеристиками OLED-структуры, и с линеаризующей зависимостью системной гамма-коррекцией  $L(GL)$  Display. В потребительской электронике чаще используются гамма-коррекции со степенной зависимостью яркости от уровня кодирования, например со степенью 1,6 или 2,2, для получения лучшего контраста в ярких градациях.

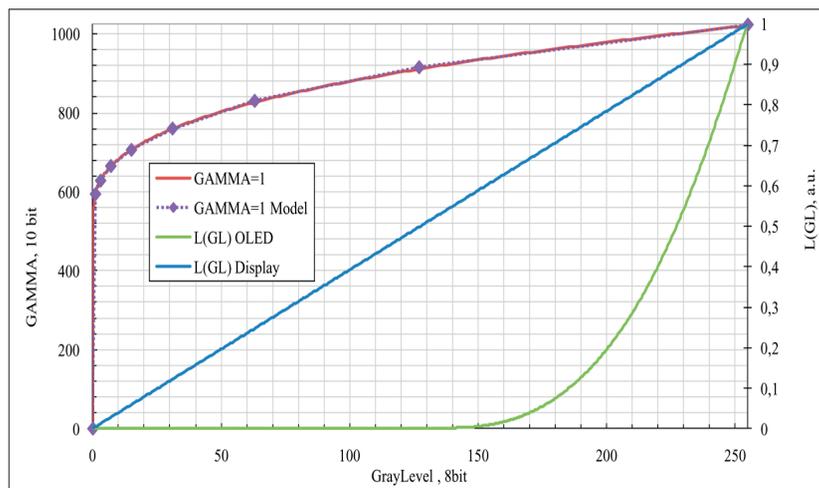


Рис. 5. / Fig. 5. Системная гамма-коррекция монохромного белого МД. / Systemic gamma correction of monochrome white MD.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Как было показано выше, форма спектра ЭЛ исходной OLED-структуры белого цвета свечения изменяется в зависимости от величины тока, протекающего через структуру. Данный эффект приведёт к цветовым искажениям полноцветного изображения МД в зависимости от яркости в случае одинаковой гамма-коррекции для всех цветовых каналов RGB.

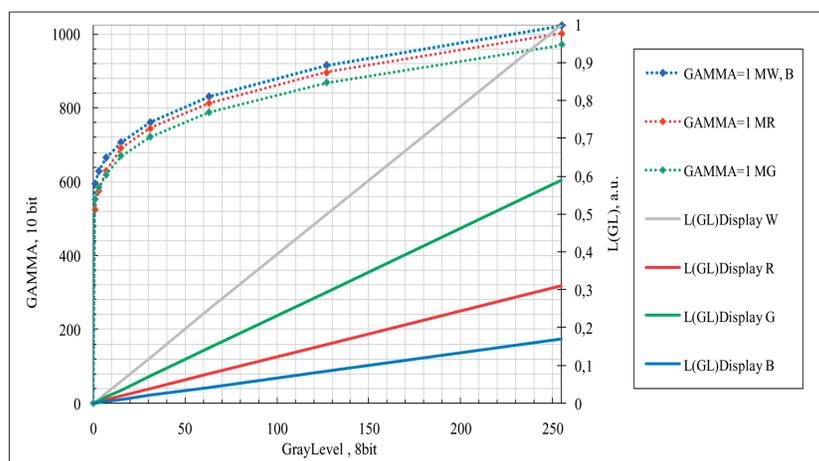


Рис. 6. / Fig. 6. Системная гамма-коррекция полноцветного МД. / Systemic gamma correction of full color MD.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

На рис. 6 показаны смоделированные независимые системные гамма-коррекции GAMMA=1 MR/G/B, позволяющие получить линейные зависимости ярко-

сти RGB каналов от уровня кодирования и соотношением, обеспечивающим одинаковые цветовые координаты белого (баланс белого) во всём динамическом диапазоне яркости МД. В данном случае кривая гамма-коррекции канала В, имеющего наименьшую световую эффективность, принята за базовую, а R и G скорректированы для обеспечения баланса белого. Для коррекции цветовых искажений, возникающих за счёт температурных изменений формы спектра ЭЛ исходных OLED-структур, требуется выявление этих закономерностей и их учёт при независимой гамма-коррекции RGB-каналов.

### Заключение

Для получения высококачественного изображения на полноцветных OLED-микродисплеях необходима независимая гамма-коррекция цветовых RGB-каналов, что обусловлено физическими принципами работы OLED-структур. Данные принципы коррекции широко применяются, описаны и предоставляются производителями OLED-микродисплеев [11, р. 26–28, 35–38] для выпускаемых ими изделий. Как правило, производители предоставляют базовые системные гамма-коррекции яркости белого поля и без учёта температурных зависимостей. Точные значения кривых гамма-коррекции могут быть получены только путём проведения исследований и моделирования с учётом свойств конкретной OLED-структуры, цветных фильтров и свойств субпиксельных ячеек активно-матричной схемы управления, используемых в конструкции конкретного микродисплея.

*Статья поступила в редакцию 10.09.2020 г.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Микродисплеи на основе органических светодиодов МД01 / Усов Н. Н., Грачёв О. А., Кондрацкий Б. А., Котовский О. А., Новичков А. А., Нуриев А. В., Чередниченко А. Г. // Современная электроника. 2016. № 1. С. 34–37.
2. Kalinowski J. Electroluminescence in organics // Journal of Physics D: Applied Physics. 1999. Vol. 32. Iss. 24. P. R179–R250. DOI: 10.1088/0022-3727/32/24/201.
3. Kalinowski J. Optical Characteristics of Organic LEDs // Organic Light-Emitting Diodes: Principles, Characteristics & Processes. New York: Taylor&-Francis Group, 2005. P. 275–343.
4. Усов Н. Н., Стахарный С. А. Органические светодиоды // Справочная книга по светотехнике / под ред. Ю. Б. Айзенберга. М.: Светотехника, 2019. С. 47–60.
5. Baldo M. A., Thompson M. E., Forrest S. R. High-efficiency fluorescent organic light-emitting devices using a phosphorescent sensitizer // Nature. 2000. Vol. 403. P. 750–753.
6. An 852x600 pixel OLED-on-silicon color microdisplay chip using CMOS subthreshold-voltage-scaling current driver / Haiqing Lin, Naviasky E., Ebner J., Evans W., Farrell P., Hufford M., Levy G., Wheeler D., Allison B., Prache O. // IEEE Journal of Solid-State Circuits. 2002. Vol. 37. No. 12. P. 1879–1889. DOI: 10.1109/ISSCC.2002.992293.
7. Строение и свойства материалов для формирования эмиссионных слоев красного цвета свечения ОСИД-структур / Чередниченко А. Г., Панина Ю. С., Стахарный С. А., Усов Н. Н. // Успехи в химии и химической технологии. 2017. Том 31. № 15 (196). С. 28–31.

8. Чередниченко А. Г., Усов Н. Н. Идентификационный анализ органических электролюминесцентных соединений // *Успехи в химии и химической технологии*. 2017. Т. 31. № 1. С. 112–114.
9. Стахарный С. А. Органические светодиоды – инновационный источник света // *Светотехника*. 2018. Специальный выпуск «Свет в музее». С. 71–75.
10. CIE 179:2007. Methods for Characterising Tristimulus Colorimeters for Measuring the Colour of Light [Электронный ресурс]. URL: <http://cie.co.at/publications/methods-characterising-tristimulus-colorimeters-measuring-colour-light> (дата обращения: 20.03.2020).
11. eMagin Corporation. 1280x1024 Low power color XL AMOLED microdisplay. Datasheet for p/n EMA-101400-01, 2016 [Электронный ресурс]. URL: <https://emagin.com/products/sxga120/2-product-sheets/249-data-sheet-sxga120> (дата обращения: 20.03.2020).

## REFERENCES

1. Usov N. N., Grachev O. A., Kondratskii B. A., Kotovskii O. A., Novichkov A. A., Nuriev A. V., Cherednichenko A. G. [Microdisplays based on organic LEDs MD01]. In: *Sovremennaya elektronika* [Modern electronics], 2016, no. 1, pp. 34–37.
2. Kalinowski J. Electroluminescence in organics. In: *Journal of Physics D: Applied Physics*, 1999, vol. 32, iss. 24, pp. R179–R250. DOI: 10.1088/0022-3727/32/24/201.
3. Kalinowski J. Optical Characteristics of Organic LEDs. In: *Organic Light-Emitting Diodes: Principles, Characteristics & Processes*. New York, Taylor&Francis Group Publ., 2005, pp. 275–343.
4. Usov N. N., Stakharnyi S. A. [Organic LEDs]. In: *Spravochnaya kniga po svetotekhnike* [Lighting Engineering Reference Book]. Moscow, Svetotekhnika Publ., 2019, pp. 47–60.
5. Baldo M. A., Thompson M. E., Forrest S. R. High-efficiency fluorescent organic light-emitting devices using a phosphorescent sensitizer. In: *Nature*, 2000, vol. 403, pp. 750–753.
6. Haiqing Lin, Naviasky E., Ebner J., Evans W., Farrell P., Hufford M., Levy G., Wheeler D., Allison B., Prache O. An 852x600 pixel OLED-on-silicon color microdisplay chip using CMOS subthreshold-voltage-scaling current driver. In: *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, 2002, vol. 37, no. 12, pp. 1879–1889. DOI: 10.1109/ISSCC.2002.992293.
7. Cherednichenko A. G., Panina Yu. S., Stakharnyi S. A., Usov N. N. [Structure and properties of materials for forming the emission layers of the red color luminescence OLED structures]. In: *Uspekhi v khimii i khimicheskoi tekhnologii* [Advances in chemistry and chemical technology], 2017, vol. 31, no. 15 (196), pp. 28–31.
8. Cherednichenko A. G., Usov N. N. [Identification analysis of organic electroluminescent materials]. In: *Uspekhi v khimii i khimicheskoi tekhnologii* [Advances in chemistry and chemical technology], 2017, vol. 31, no. 1, pp. 112–114.
9. Stakharnyi S. A. [Organic LEDs – an innovative light source]. In: *Svetotekhnika* [Lighting engineering], 2018, Special issue “Light in the Museum”, pp. 71–75.
10. CIE 179:2007. Methods for Characterising Tristimulus Colorimeters for Measuring the Colour of Light. Available at: <http://cie.co.at/publications/methods-characterising-tristimulus-colorimeters-measuring-colour-light> (accessed: 20.03.2020).
11. eMagin Corporation. 1280x1024 Low power color XL AMOLED microdisplay. Datasheet for p/n EMA-101400-01, 2016. Available at: <https://emagin.com/products/sxga120/2-product-sheets/249-data-sheet-sxga120> (accessed: 20.03.2020).

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Нуриев Александр Вадимович* – кандидат технических наук, заместитель начальника отделения 600 Центрального научно-исследовательского института «Циклон»;  
e-mail: nurievav@gmail.com;

*Стахарный Сергей Алексеевич* – начальник отделения 600 Центрального научно-исследовательского института «Циклон»;  
e-mail: stakharnys@yandex.ru;

*Усов Николай Николаевич* – доктор технических наук, главный конструктор Центрального научно-исследовательского института «Циклон»;  
e-mail: usov-nn@yandex.ru.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Alexandr V. Nuriev* – Cand. Sci. (Engineering), Deputy Head of Division 600, Central Research Institute “Cyclone”;  
e-mail: nurievav@gmail.com;

*Sergey A. Stakharny* – Head of Division 600, Central Research Institute “Cyclone”;  
e-mail: stakharnys@yandex.ru;

*Nikolay N. Usov* – Dr. Sci. (Engineering), Chief Designer, Central Research Institute “Cyclone”;  
e-mail: usov-nn@yandex.ru.

---

### ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Нуриев А. В., Стахарный С. А., Усов Н. Н. Гамма-коррекция полноцветных активно-матричных микродисплеев на основе органических светодиодов // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 13–22.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-13-22

### FOR CITATION

Nuriev A. V., Stakharny S. A., Usov N. N. Gamma correction of full color OLED microdisplays. In: *Bulletin of the Moscow state regional University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 13–22.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-13-22

УДК 539.22

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37

## ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ДВУМЕРНОГО ДИПОЛЯ

**Коваль О. А.<sup>1</sup>, Коваль Е. А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук  
119017, г. Москва, Пыжевский пер., д. 3, Российская Федерация*

<sup>2</sup> *Объединенный институт ядерных исследований  
141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6, Российская Федерация*

### Аннотация.

**Целью** работы является численное исследование энергетических уровней связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя с помощью предложенного численного алгоритма для решения двумерного уравнения Шредингера.

**Процедура и методы.** С помощью специального разложения волновой функции двумерное уравнение Шредингера сведено к решению краевой задачи Штурма-Лиувилля для системы дифференциальных уравнений. Для решения задачи поиска собственных значений матрицы, получаемой при конечно-разностной аппроксимации производных, применён метод обратных итераций со сдвигом.

**Результаты.** Определены значения уровней энергии и соответствующие им собственные волновые функции квантовой частицы в поле двумерного диполя.

**Теоретическая и/или практическая значимость.** С помощью предложенного численного алгоритма с хорошей точностью получены значения энергетических уровней связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя. Получено согласие с результатами других авторов, использовавших вариационный подход, для которого отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные нами расчёты с известной оценкой точности восполняют этот пробел.

**Ключевые слова:** двумерное уравнение Шредингера, анизотропные взаимодействия, численный алгоритм

**Благодарности.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-32-80003).

## NUMERICAL ANALYSIS OF ENERGY LEVELS OF QUANTUM PARTICLE IN FIELD OF TWO-DIMENSIONAL DIPOLE

**O. Koval<sup>1</sup>, E. Koval<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *A. M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics of Russian Academy of Sciences  
3 Pyzhevsky pereulok, Moscow 119017, Russian Federation*

<sup>2</sup> *Joint Institute for Nuclear Research  
6 ulitsa Joliot-Curie, Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation*

**Abstract.**

**Aim** of the paper is a numerical investigation of energy levels of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole, based on the numerical algorithm proposed for solving the full two-dimensional Schrödinger equation.

**Methodology.** With the help of special expansion of a wave function the two-dimensional Schrödinger equation was transformed to the Sturm-Liouville boundary problem for the system of differential equations. The method of inverted iterations with a shift was applied to the matrix eigenvalues search problem, that was obtained after a finite-difference approximation of the derivatives.

**Results.** The low-lying energy levels and the corresponding wave functions of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole were determined.

**Research implications.** The energy levels of bound states of a quantum particle in a field of a two-dimensional dipole were obtained using the proposed numerical algorithm. The agreement was obtained with the work of other author, where the variational approach was used, for which there is no error estimates of the calculated values relative to the exact solution. The calculations that were carried out by us with known convergence and error estimates fill this gap.

**Keywords:** two-dimensional Schrödinger equation, anisotropic interactions, numerical algorithm

**Acknowledgments.** This research was supported by the Russian Fund for Basic Research (grant No. 19-32-80003).

**Введение**

Физика дипольных систем активно развивалась последние годы [1–4]. В ряде работ (напр. [1; 2]) экспериментально получены ультрахолодные газы (в том числе с диполь-дипольным взаимодействием [2]) в квази-двумерных геометриях дископодобных ловушек, движение частиц в которых близко к движению в плоскости. Дипольное взаимодействие имеет дальнедействующий и анизотропный характер, что влияет на свойства системы, как это было обнаружено в физике ультрахолодных атомов и полярных молекул в квази-двумерных и трёхмерных геометриях оптических ловушек [5], атомов Ридберга во внешних полях [6], экзотических стабильных конфигурациях в ультрахолодных газах [7], и в экспериментальных исследованиях нематических жидких кристаллов во внешних магнитных полях [8].

Целью работы является численный анализ уровней энергии связанных состояний квантовой частицы в поле двумерного диполя [9; 10]. Потенциал взаимодействия частицы с силовым центром  $V_p(\rho, \varphi)$  описывается нецентральной потенциалом вида [9]:

$$V_p(\rho, \varphi) = p \frac{\cos(\varphi)}{\rho}, \quad (1)$$

где  $\rho$  и  $\varphi$  – полярные координаты, определённые в плоскости  $XY$ ;  $p$  – величина эффективного дипольного момента. В электростатике такой потенциал может быть реализован как потенциал диполя, образованного двумя близкими беско-

нечными прямыми, с равными и противоположными линейными плотностями зарядов [9]. Форма потенциала представлена на рис. 1.

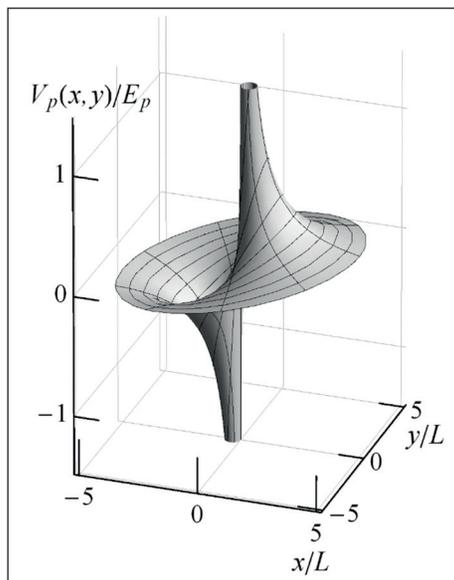


Рис. 1. / Fig. 1. Поверхность потенциальной энергии  $V_p(x, y)$  (в единицах  $E_p = 2mp^2/\hbar^2$ ) как функция координат  $x, y$  (в единицах  $L = \hbar^2/2mp$ ). / The potential energy surface  $V_p(x, y)$  (in units of  $E_p = 2mp^2/\hbar^2$ ) as a function of  $x, y$  coordinates (in units  $L = \hbar^2/2mp$ ).

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Для решения задач с анизотропным потенциалом, в которых переменные не разделяются, необходимы численные алгоритмы, позволяющие решать двумерное уравнение Шредингера без дополнительных аппроксимаций, таких как учёт анизотропной части потенциала по теории возмущений или пренебрежение вкладами высших парциальных волн при низких энергиях столкновений.

В частности, потенциал не допускает разделения переменных, вследствие чего в ряде работ использованы аналитические и численные методы, развитые для анализа радиальных уравнений в рамках различных приближений (например, метод асимптотических итераций [11], квазиклассическое приближение [12], метод фазовых функций [13]). Нами предложен численный алгоритм для точного решения соответствующего двумерного уравнения Шредингера [9] для точечной частицы массы  $m$  в поле диполя:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_p(\rho, \varphi) \right] \Psi(\rho, \varphi) = E \Psi(\rho, \varphi). \quad (2)$$

В единицах длины  $L = \frac{\hbar^2}{2mp}$  и энергии  $E_p = \frac{2mp^2}{\hbar^2}$ ;  $\epsilon \equiv E/E_p$  двумерное урав-

нение Шредингера с потенциалом может быть записано в безразмерном виде:

$$\left[ -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos(\varphi)}{\rho} \right] \Psi(\rho, \varphi) = \epsilon \Psi(\rho, \varphi). \quad (3)$$

Потенциал инвариантен относительно отражения относительно оси  $X$   $V_p(\rho, \varphi) = V_p(\rho, -\varphi)$ , и благодаря этой симметрии потенциала связанные состояния являются либо чётными  $\Psi(\rho, \varphi) = \Psi(\rho, -\varphi)$  либо нечётными  $\Psi(\rho, \varphi) = -\Psi(\rho, -\varphi)$ . Для  $p > 0$  потенциал является притягивающим в области  $x < 0$ .

Как отмечено в работе [9], начиная с начальной оценки Ландауэра энергии основного состояния ( $E = -0,102E_p$ ) [14], другими авторами предпринято несколько попыток расчёта уровней энергии и собственных функций системы в вариационном подходе с различными базисными функциями [14–19].

В работе [9] представлено сравнение результатов нескольких методов диагонализации матриц, полученных конечно-разностной дискретизацией двумерного уравнения Шредингера на сетках по пространственным координатам, в частности, метода сопряжённых градиентов, алгоритма Якоби-Дэвидсона и алгоритма Арнольди-Ланцоша. Авторами [9] отмечено, что дискретизация по пространственным координатам и применение методов диагонализации матриц предпочтительнее для низколежащих состояний, чем вариационные исследования, но наилучшее значение энергии основного состояния ( $E = -0,139E_p$ ) было рассчитано с помощью конечно-разностной дискретизации по пространственным координатам только с 2%-ной точностью. В работе [10] авторами показано, что вариационный метод Релея-Ритца быстрее сходится по числу  $K$  базисных функций при разложении волновой функции по двумерным аналогам орбиталей слейтеровского типа, чем при использовании в качестве базисных функций волновых функций «двумерного атома водорода». Проверка того, что причиной этого факта является неполнота базиса используемых функций, выполнена в работе [20], где разложение волновой функции произведено по полному базису с помощью метода полиномиальных ортогональных проекций, что уменьшило необходимое число вариационных параметров сходимости.

### **Алгоритм для численного решения задачи на связанные состояния для двухчастичных двумерных систем**

Для решения двумерного уравнения Шредингера нами предложена вычислительная схема, основанная на методе обратных итераций со сдвигом и модификации метода представления дискретной переменной. Погрешность вычислений может контролироваться с помощью шага разностных сеток.

Для построения численного алгоритма решения двумерного уравнения с произвольным анизотропным потенциалом  $V(\rho, \varphi)$  используется метод Мележика В. С. [21] для решения многомерной задачи рассеяния.

Для представления волновой функции на равномерной разностной сетке  $\varphi_j = \frac{2\pi j}{2M+1}$  ( $j = 0, 1, \dots, 2M$ ) по угловой переменной  $\varphi$  используются собственные функции:

$$\xi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\varphi-\pi)} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (4)$$

оператора  $h^{(0)}(\varphi) = \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$  в качестве Фурье базиса. Количество базисных

функций разложения волновой функции выбирается равным количеству точек разностной сетки по угловой переменной, что позволяет определить квадратную  $(2M+1) \times (2M+1)$  матрицу  $\xi_{jm} = \xi_m(\varphi_j)$  на разностной сетке по угловой переменной. С помощью соотношения полноты Фурье базиса

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \xi_m(\varphi_k) \xi_m^*(\varphi_j) = \delta(\varphi_k - \varphi_j),$$

которое на разностной сетке принимает вид:

$$\sum_{m=-M}^M \xi_{km} \xi_{jm}^* = \frac{2M+1}{2\pi} \delta_{kj},$$

элементы обратной матрицы  $\xi_{mj}^{-1}$  могут быть получены

$$\text{в явном виде: } \xi_{mj}^{-1} = \frac{2\pi}{2M+1} \xi_{jm}^* = \frac{\sqrt{2\pi}}{2M+1} e^{-im(\varphi_j-\pi)}.$$

Волновая функция представлена в виде разложения:

$$\Psi(\rho, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\varphi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho). \quad (5)$$

Заметим, что радиальные функции  $\psi_j(\rho)$  определяются значениями волновой функции в узлах разностной сетки  $\varphi_j$ :

$$\psi_j(\rho) = \sqrt{\rho} \Psi(\rho, \varphi_j). \quad (6)$$

Преимуществом используемого разложения по сравнению с вариационными исследованиями и разложением по парциальным волнам является наличие оценки погрешности аппроксимации [22]:

$$\delta\Psi(\rho, \varphi) = \left| \Psi(\rho, \varphi) - \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\varphi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho) \right| < \text{const} \times \frac{\ln M}{M^k}, \quad (7)$$

где  $k$  – число непрерывных и ограниченных производных по  $\varphi$ . Быстрая скорость сходимости по числу точек сетки  $2M+1$  по угловой переменной для потенциала продемонстрирована в табл. 3. Использование разложения по парциальным волнам для сильно анизотропных потенциалов неэффективно из-за большого числа требуемых базисных функций [23]. Особенностью вариационного подхода, часто используемого авторами [9; 10], является тот факт, что для него получаемые значения энергии являются оценкой сверху точного значения энергии системы и отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения [24].

В представлении (5) уравнение Шредингера (2) преобразуется в систему  $(2M+1)$  связанных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \Psi_j(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \Psi_j(\rho) + \sum_{j'=0}^{2M} V_{jj'} \Psi_{j'}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'=0}^{2M} h_{jj'}^{(0)} \Psi_{j'}(\rho) = \epsilon \Psi_j(\rho), \quad (8)$$

где матрица потенциала диагональная и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной:

$$V_{jj'}(\rho) = V(\rho, \varphi_j) \delta_{jj'}, \quad (9)$$

если потенциал не содержит операторов интегрирования или дифференцирования. В случае их наличия требуется аппроксимация операторов интегрирования конечно-разностными аналогами, и матрица потенциала становится недиагональной.

Недиагональная матрица оператора  $h^{(0)}$  определяется следующим образом:

$$h_{jj'}^{(0)} = - \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (10)$$

Постановка задачи помимо уравнения требует определения граничных условий на радиальные функции.

Левое граничное условие для радиальных функций  $(\bar{\Psi}(\rho))_j = \Psi_j(\rho)$  определяется из условия конечности волновой функции в нуле  $\left( \Psi(\rho, \varphi_j) = \frac{\Psi_j(\rho)}{\sqrt{\rho}} \rightarrow \text{const} \right)$

и имеет вид:

$$\Psi_j(\rho=0) = 0 \quad (j=0, 1, \dots, 2M), \quad (11)$$

правое – из условия стремления волновой функции к нулю на бесконечности:

$$\Psi_j(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (j=0, 1, \dots, 2M). \quad (12)$$

Для решения задачи на собственные значения (8), (11) и (12) вводится неравномерная сетка по радиальной переменной  $\rho$ : (по аналогии с квазиравномерными сетками [25]):  $\rho_j = \rho_N t_j^2$ , ( $j=1, 2, \dots, N$ ), узлы на которой определяются отображением  $\rho_j \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$  на равномерную сетку  $s_j \in [0, 1]$ . Максимальный радиус сетки для потенциала, требующийся для расчёта энергий низколежащих связанных состояний, составил  $\rho_N = 300$ .

Для дискретизации используется семиточечная конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности для второй производной. На равномерной сетке узлов  $\left\{ s_k = kh, h = \frac{s_N}{N}, k = 1, 2, \dots, N-1 \right\}$ ,  $\left\{ \Psi^k = \Psi(s_k) \right\}$  она имеет вид [26]:

$$\left. \frac{d^2 \Psi(s)}{ds^2} \right|_{s=s_k} = \frac{1}{180h^2} (2\Psi^{k-3} - 27\Psi^{k-2} + 270\Psi^{k-1} - 490\Psi^k + 270\Psi^{k+1} - 27\Psi^{k+2} + 2\Psi^{k+3}) + O(h^6). \quad (13)$$

В результате такой аппроксимации задача (8) сводится к линейным уравнениям вида:

$$a_k \Psi^{k-3} + b_k \Psi^{k-2} + c_k \Psi^{k-1} + (d_k + E \cdot I) \Psi^k + e_k \Psi^{k+1} + f_k \Psi^{k+2} + g_k \Psi^{k+3} = h_k, \quad (14)$$

с диагональными матрицами  $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k$ , ( $I$  – единичная матрица) и недиагональной матрицей  $d_k$ , включающей матрицу  $h^{(0)}$ .

Собственные значения и соответствующие собственные векторы получаемой матрицы гамильтониана определяются численно с помощью метода обратных итераций со сдвигом [27].

Возникающая на каждой итерации алгебраическая задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [28] для блок-диагональной матрицы.

Матрицы  $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k$ , имеют блочную структуру, что позволяет оптимально использовать ресурсы. Быстрая сходимость по обратным итерациям подтверждается малым средним числом обратных итераций  $\approx 10$ .

### Результаты

Предложенная вычислительная схема применена для расчёта уровней энергии точечной частицы в поле анизотропного двумерного дипольного потенциала и собственных функций низколежащих связанных состояний. Улучшена точность результатов недавних работ других авторов [10; 11; 20]. В табл. 1 приведено сравнение вычисленных с точностью до шести знаков после запятой уровней энергий  $\epsilon_n$  пяти ( $n = 1 - 5$ ) низколежащих чётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [10] и [11] других авторов, а в табл. 2 – сравнение вычисленных с точностью до семи знаков после запятой уровней энергий  $\epsilon_n$  пяти ( $n = 1 - 5$ ) низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [11] и [20] других авторов. В [10] и [11] авторами использовались вариационные методы с разложением волновой функции по собственным функциям «двумерного атома водорода» [10] и по функциям слейтеровского типа [11]; в работе [20] – метод проекций волновой функции на ортогональные полиномы (“orthogonal polynomial projection quantization”).

Анализ табл. 1 и табл. 2 демонстрирует хорошее согласие с результатами работ [10; 11; 20] и применимость как используемой вычислительной схемы, так и вариационных методик для оценки основного и первых возбужденных состояний для описания систем с нецентральными потенциалами в плоскости.

На рис. 2 (а-д) приведены пространственные распределения плотности вероятности вычисленных пяти низколежащих чётных связанных состояний  $n = 1, 2, \dots, 5$ , а на рис. 3 (а-д) – нечётных связанных состояний  $n = 1, 2, \dots, 5$ . График распределений  $n = 5$  чётного и нечётного возбужденных состояний существенно отличается от состояний  $n < 5$ : вместо дальнейшего появления дополнительных областей вдоль оси  $X$  распределения разделяются на дополнительные области по оси  $Y$ . Изменение формы распределения объясняется компенсацией сужения плотности распределения состояний ( $n = 5$ ) по оси  $X$  растяжением вдоль оси  $Y$  и более компактными пространственными размерами всего распределения в

Таблица 1 / Table 1

**Сравнение вычисленных нами значений уровней энергий  $\epsilon_n$  (в ед.  $E_p$ ) пяти низколежащих чётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [9; 10] других авторов / The comparison of the calculated values of energy levels  $\epsilon_n$  (in units  $E_p$ ) of five low-lying even bound states (3rd column) with the results of Refs. [10; 10] of the other authors.**

$n$	$ \epsilon_n $ [9]	$ \epsilon_n $ [10]	$ \epsilon_n $
1	0,0970	0,137741	0,137748
2	0,0328	0,041152	0,041159
3	0,0221	0,019967	0,019974
4	0,0167	0,011852	0,011859
5	0,0119	0,009747	0,009747

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Таблица 2 / Table 2

**Сравнение вычисленных нами значений уровней энергий  $\epsilon_n$  (в ед.  $E_p$ ) пяти низколежащих нечётных связанных состояний (3-й столбец) с результатами работ [10; 20] других авторов / The comparison of the calculated values of energy levels  $\epsilon_n$  (in units  $E_p$ ) of five low-lying odd bound states (3rd column) with the results of Refs. [10; 20] of the other authors.**

$n$	$ \epsilon_n $ [9]	$ \epsilon_n $ [10]	$ \epsilon_n $
1	0,0232932	0,0232932	0,0232932
2	0,0125862	0,0125863	0,0125862
3	0,0079918	0,0079919	0,0079919
4	0,0055643	0,0055644	0,0055644
5	0,0053312	0,0053312	0,0053312

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

целом, по сравнению с распределениями  $n = 4$  чётного и нечётного возбужденных состояний. Качественно оно объяснимо на примере связанных состояний точечной частицы в поле двумерного анизотропного ( $\omega_x \ll \omega_y$ ) гармонического осциллятора (полная энергия которого  $E = \hbar\omega_x(n_x + 1) + \hbar\omega_y(n_y + 1)$ ). Накопление квантов возбуждения происходит по переменной  $x$  пока выполняется  $\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$ , после чего энергия увеличивается за счёт возбуждения по оси  $Y$  с изменением формы распределения и накопление продолжается по переменной  $X$  ( $\hbar\omega_x(n_x + 1) < 2\hbar\omega_y$ ) и т.д.

В табл. 3 продемонстрирована быстрая сходимость уровней энергий  $\epsilon_n$  ( $n = 1 - 5$ ) низколежащих чётных связанных состояний по числу точек угловой сетки  $M$ :  $M \approx 20$  точек достаточно для достижения точности в шесть знаков после запятой.

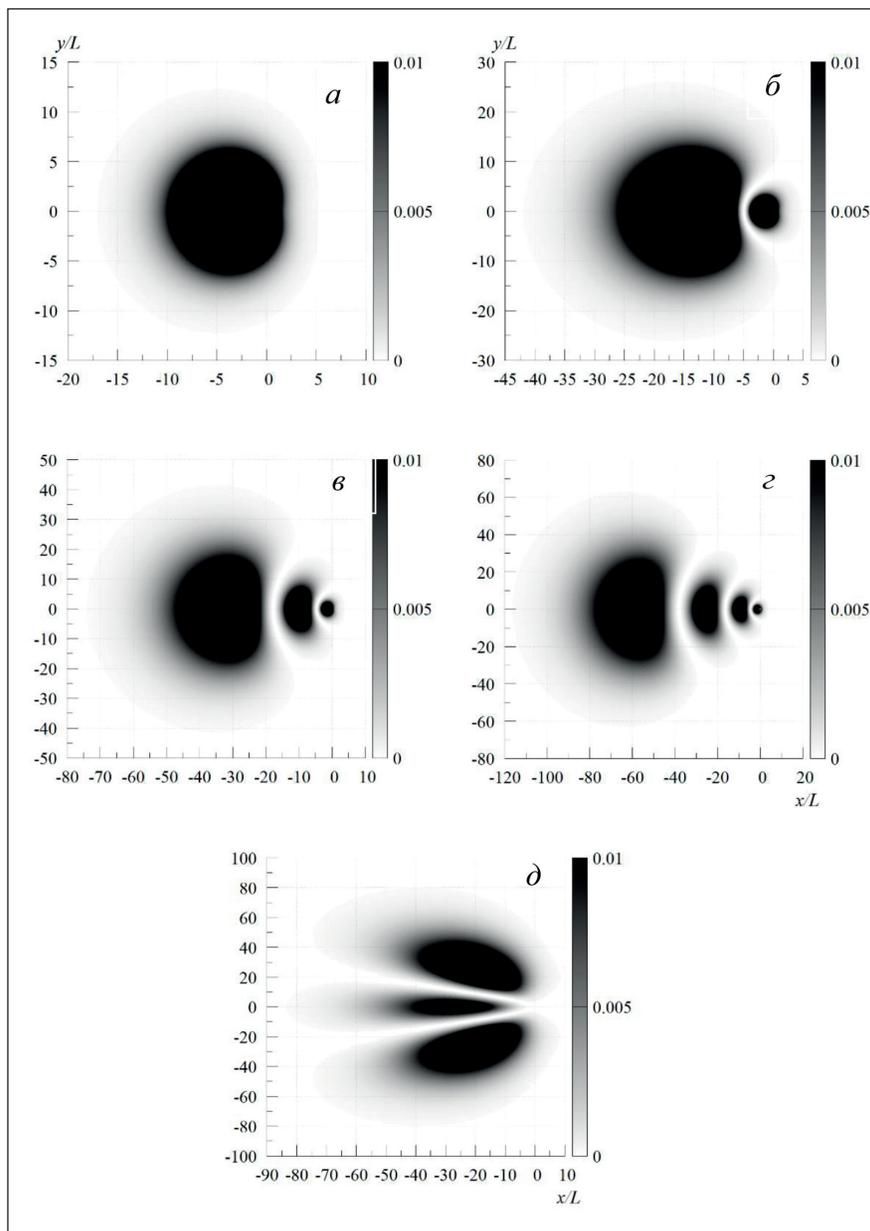


Рис. 2. / Fig. 2. Плотности вероятности  $n = 1$  (а), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д) низколежащих чётных связанных состояний. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности.  $L = \hbar^2/2mp$  – характерный линейный масштаб задачи. / Probability density plots of five ( $n = 1$  (a), 2 (б), 3 (в), 4 (г), 5 (д)) low-lying even bound states. Dark regions correspond to high densities.

$L = \hbar^2/2mp$  – a length scale of a problem.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

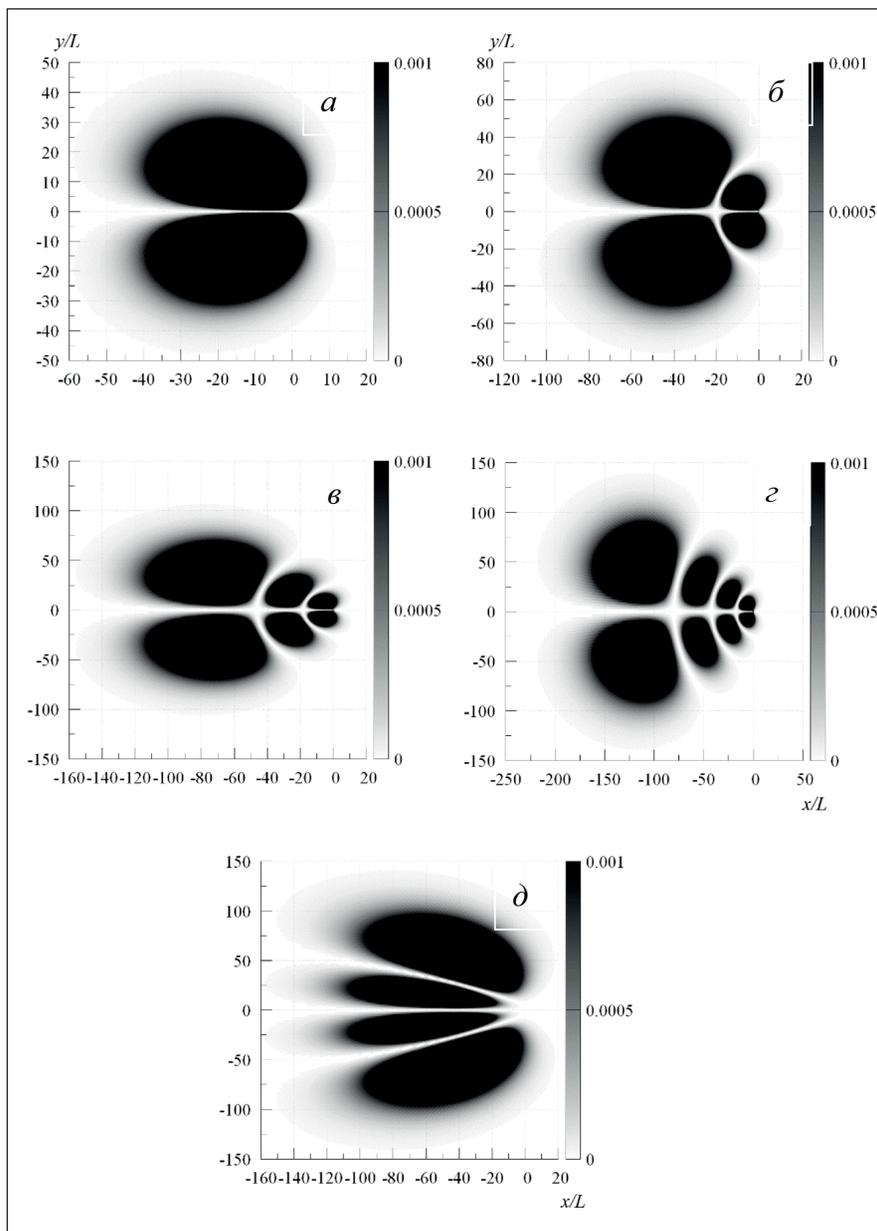


Рис. 3. / Fig. 3. Плотности вероятности  $n = 1$  (*a*), 2 (*б*), 3 (*в*), 4 (*г*), 5 (*д*) низколежащих нечётных связанных состояний. Области, обозначенные тёмным цветом, соответствуют большим значениям функции плотности вероятности.  $L = \hbar^2/2mp$  – характерный линейный масштаб задачи. / Probability density plots of five ( $n = 1$  (*a*), 2 (*б*), 3 (*в*), 4 (*г*), 5 (*д*)) low-lying odd bound states. Dark regions correspond to high densities.  $L = \hbar^2/2mp$  – a length scale of a problem.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Таблица 3 / Table 3

**Зависимость уровней энергий  $\epsilon_n$  (в ед.  $E_p$ ) пяти ( $n = 1 - 5$ ) низколежащих чётных связанных состояний от числа угловых точек сетки  $M$  / The dependence of the energy levels  $\epsilon_n$  (in units  $E_p$ ) of five ( $n = 1 - 5$ ) low-lying even bound states on the number of angular-grid points  $M$ .**

M	$ \epsilon_n $				
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
6	0,137671	0,040562	0,019957	0,011255	0,008853
8	0,137747	0,041110	0,019845	0,011702	0,008571
10	0,137748	0,041156	0,019973	0,011825	0,009115
20	0,137748	0,041159	0,019974	0,011859	0,009747
40	0,137748	0,041159	0,019974	0,011859	0,009747

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

### Заключение

В работе исследованы связанные состояния точечной квантовой частицы в поле двумерного диполя с помощью предложенного численного алгоритма, основанного на методе представления дискретной переменной и методе обратных итераций со сдвигом для определения собственных значений матрицы. Анизотропия потенциала взаимодействия частицы с полем двумерного диполя приводит к связи различных парциальных волн и состояний с различным угловым моментом. Рассчитаны энергии и плотности вероятности состояний с улучшением точности и хорошим согласием с результатами работ [10; 11; 20], для которых отсутствуют оценки ошибок вычисленных значений относительно истинного решения. Выполненные нами расчёты с помощью предложенного алгоритма с известной оценкой точности восполняют этот пробел.

Статья поступила в редакцию 14.09.2020 г.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Martiyanov K., Makhalov V., Turlapov A. Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms // Physical Review Letters. 2010. Vol. 105. Iss. 3. P. 030404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.030404.
2. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime / Ni K. K., Ospelkaus S., Wang D., Qiyimayner G., Neyenhuis B., de Miranda M. H. G., Bohn J. L., Ye J., Jin D. S. // Nature. 2010. Vol. 464. Iss. 7293. P. 1324–1328. DOI: 10.1038/nature08953.
3. Near-threshold bound states of the dipole-dipole interaction / Karman T., Frye M. D., Reddel J. D., Hutson J. M. // Physical Review A. 2018. Vol. 98. Iss. 6. P. 062502. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.062502.
4. Baranov M. A. Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases // Physical Reports. 2008. Vol. 464. Iss. 3. P. 71–111. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.04.007.

5. The physics of dipolar bosonic quantum gases / Lahaye T., Menotti C., Santos L., Lewenstein M., Pfau T. // *Reports on Progress in Physics*. 2009. Vol. 72. Iss. 12. P. 126401. DOI: 10.1088/0034-4885/72/12/126401.
6. Browaeys A., Barredo D., Lahaye T. Experimental investigations of dipole–dipole interactions between a few Rydberg atoms // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2016. Vol. 49. Iss. 15. P. 152001. DOI: 10.1088/0953-4075/49/15/152001.
7. Observation of quantum droplets in a strongly dipolar Bose gas / Ferrier-Barbut I., Kadau H., Schmitt M., Wenzel M., Pfau T. // *Physical Review Letters*. 2016. Vol. 116. P. 215301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.215301.
8. Parameters of LC molecules' movement measured by dielectric spectroscopy in wide temperature range / Chaousov D. N., Kurilov A. D., Belyaev V. V., Kumar S. // *Opto-Electronics Review*. 2018. Vol. 26. Iss. 1. P. 44–49. DOI: 10.1016/j.opelre.2017.12.001.
9. Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions / Dasbiswas K., Goswami D., Yoo C. D., Dorsey A. T. // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. Iss. 6. P. 064516. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.064516.
10. Amore P., Fernández F. M. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2012. Vol. 45. Iss. 23. P. 235004. DOI: 10.1088/0953-4075/45/23/235004.
11. Ciftci H., Hall R. L., Saad N. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2003. Vol. 36. Iss. 47. P. 11807. DOI: 10.1088/0305-4470/36/47/008.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1974. 752 с. (Серия: Теоретическая физика. Т. 3).
13. Бабииков В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 287 с.
14. Landauer R. Bound States in dislocations // *Physical Review*. 1954. Vol. 94. Iss. 5. P. 1386. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1386.2.
15. Emtage P. Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators // *Physical Review*. 1967. Vol. 163. Iss. 3. P. 865. DOI: 10.1103/PhysRev.163.865.
16. Nabutovskii V., Shapiro B. Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation // *JETP Letters*. 1977. Vol. 26. Iss. 9. P. 473–475.
17. Слюсарев В. А., Чишко К. А. Электронные локализованные состояния на краевой дислокации в металле // *Физика металлов и металловедение*. 1984. Т. 58. № 5. С. 877–883.
18. Dubrovskii I. A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal // *Low Temperature Physics*. 1997. Vol. 23. Iss. 12. P. 976–979. DOI: 10.1063/1.593506.
19. Farvacque J.-L., Francois P. Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors // *Physica Status Solidi (b)*. 2001. Vol. 223. Iss. 3. P. 635–648. DOI: 10.1002/1521-3951(200102)223:3<635::AID-PSSB635>3.0.CO;2-K.
20. Handy C., Vranceanu D. Rapidly converging bound state eigenenergies for the two-dimensional quantum dipole // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2013. Vol. 46. Iss. 11. P. 115002. DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115002.
21. Melezhik V. S. New method for solving multidimensional scattering problem // *Journal of Computational Physics*. 1991. Vol. 92. Iss. 1. P. 67–81. DOI: 10.1016/0021-9991(91)90292-S.
22. Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S. Anisotropic quantum scattering in two dimensions // *Physical Review A*. 2014. Vol. 89. Iss. 5. P. 052710. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.052710.
23. Melezhik V. S., Hu C.-Y. Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field // *Physical Review Letters*. 2003. Vol. 90. Iss. 8. P. 083202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.083202.

24. Давыдов А. С. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1973. 704 с.
25. Калиткин Н. Н., Альшин А. В., Альшина Е. А., Рогов Б. В. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005. 224 с.
26. Handbook of Mathematical Functions / eds. Abramowitz M., Stegun A. I. Washington: U.S. National Bureau of Standards, 1965. 470 p.
27. Калиткин Н. Н. Численные методы; 2 изд. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
28. Gelfand I. M., Fomin S. V. Calculus of variations / ed. by Silverman R. A. USA: Courier Corporation, 2000. 240 p.

## REFERENCES

1. Martiyanov K., Makhalov V., Turlapov A. Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms. In: *Physical Review Letters*, 2010, vol. 105, iss. 3, pp. 030404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.030404.
2. Ni K. K., Ospelkaus S., Wang D., Qiyтmйner G., Neyenhuis B., de Miranda M. H. G., Bohn J. L., Ye J., Jin D. S. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime. In: *Nature*, 2010, vol. 464, iss. 7293, pp. 1324–1328. DOI: 10.1038/nature08953.
3. Karman T., Frye M. D., Reddel J. D., Hutson J. M. Near-threshold bound states of the dipole-dipole interaction. In: *Physical Review A*, 2018, vol. 98, iss. 6, pp. 062502. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.062502.
4. Baranov M. A. Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases. In: *Physical Reports*, 2008, vol. 464, iss. 3, pp. 71–111. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.04.007.
5. Lahaye T., Menotti C., Santos L., Lewenstein M., Pfau T. The physics of dipolar bosonic quantum gases. In: *Reports on Progress in Physics*, 2009, vol. 72, iss. 12, pp. 126401. DOI: 10.1088/0034-4885/72/12/126401.
6. Browaeys A., Barredo D., Lahaye T. Experimental investigations of dipole–dipole interactions between a few Rydberg atoms. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2016, vol. 49, iss. 15, pp. 152001. DOI: 10.1088/0953-4075/49/15/152001.
7. Ferrier-Barbut I., Kadau H., Schmitt M., Wenzel M., Pfau T. Observation of quantum droplets in a strongly dipolar Bose gas. In: *Physical Review Letters*, 2016, vol. 116, pp. 215301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.215301.
8. Chausov D. N., Kurilov A. D., Belyaev V. V., Kumar S. Parameters of LC molecules' movement measured by dielectric spectroscopy in wide temperature range. In: *Opto-Electronics Review*, 2018, vol. 26, iss. 1, pp. 44–49. DOI: 10.1016/j.opelre.2017.12.001.
9. Dasbiswas K., Goswami D., Yoo C. D., Dorsey A. T. Bound states of edge dislocations: The quantum dipole problem in two dimensions. In: *Physical Review B*, 2010, vol. 81, iss. 6, pp. 064516. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.064516.
10. Amore P., Fernández F. M. Bound states for the quantum dipole moment in two dimensions. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2012, vol. 45, iss. 23, pp. 235004. DOI: 10.1088/0953-4075/45/23/235004.
11. Ciftci H., Hall R. L., Saad N. Asymptotic iteration method for eigenvalue problems. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2003, vol. 36, iss. 47, pp. 11807. DOI: 10.1088/0305-4470/36/47/008.
12. Landau L. D., Lifshits E. M. *Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya)* [Quantum mechanics (nonrelativistic theory)]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 752 p. (Series: Theoretical Physics. Vol. 3).
13. Babikov V. V. *Metod fazovykh funktsii v kvantovoi mekhanike* [Phase function method in quantum mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1976. 287 p.

14. Landauer R. Bound States in dislocations. In: *Physical Review*, 1954, vol. 94, iss. 5, pp. 1386. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1386.2.
15. Emtage P. Binding of electrons, holes, and excitons to dislocations in insulators. In: *Physical Review*, 1967, vol. 163, iss. 3, pp. 865. DOI: 10.1103/PhysRev.163.865.
16. Nabutovskii V., Shapiro B. Localized States of Order-Parameter Near a Dislocation. In: *JETP Letters*, 1977, vol. 26, iss. 9, pp. 473–475.
17. Slyusarev V. A., Chishko K. A. [Electronic localized states at an edge dislocation in a metal]. In: *Fizika metallov i metallovedenie* [The Physics of Metals and Metallography], 1984, vol. 58, no. 5, pp. 877–883.
18. Dubrovskii I. A new variational method in the problem of the spectrum of elementary excitations in an edge-dislocation crystal. In: *Low Temperature Physics*, 1997, vol. 23, iss. 12, pp. 976–979. DOI: 10.1063/1.593506.
19. Farvacque J.-L., Francois P. Numerical determination of shallow electronic states bound by dislocations in semiconductors. In: *Physica Status Solidi (b)*, 2001, vol. 223, iss. 3, pp. 635–648. DOI: 10.1002/1521-3951(200102)223:3<635::AID-PSSB635>3.0.CO;2-K.
20. Handy C., Vranceanu D. Rapidly converging bound state eigenenergies for the two-dimensional quantum dipole. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2013, vol. 46, iss. 11, pp. 115002. DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115002.
21. Melezhik V. S. New method for solving multidimensional scattering problem. In: *Journal of Computational Physics*, 1991, vol. 92, iss. 1, pp. 67–81. DOI: 10.1016/0021-9991(91)90292-S.
22. Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S. Anisotropic quantum scattering in two dimensions. In: *Physical Review A*, 2014, vol. 89, iss. 5, pp. 052710. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.052710.
23. Melezhik V. S., Hu C.-Y. Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field. In: *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 8, pp. 083202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.083202.
24. Davydov A. S. *Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* [Quantum mechanics. Nonrelativistic theory]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 704 p.
25. Kalitkin H. H., Al'shin A. B., Al'shina E. A., Rogov B. V. *Vychisleniya na kvaziravnomernykh setkakh* [Calculations on quasi-uniform grids]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2005. 224 p.
26. Abramowitz M., Stegun A. I., eds. *Handbook of Mathematical Functions*. Washington, U.S. National Bureau of Standards Publ., 1965. 470 p.
27. Kalitkin N. N. *Chislennyye metody* [Numerical methods]. Saint-Petersburg, BKHV-Peterburg Publ., 2011. 592 p.
28. Gelfand I. M., Fomin S. V.; Silverman R. A. ed. *Calculus of variations*. USA, Courier Corporation Publ., 2000. 240 p.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Коваль Оксана Александровна – младший научный сотрудник Института физики атмосферы им. А. М. Обухова Российской академии наук;  
e-mail: kov.oksana20@gmail.com;

Коваль Евгений Александрович – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Объединённого института ядерных исследований;  
e-mail: e-cov@yandex.ru.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Oksana A. Koval* – junior researcher, A. M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics of Russian Academy of Sciences;

e-mail: kov.oksana20@gmail.com;

*Eugene A. Koval* – Cand. Sci. (Phys.-Math.), junior researcher, Joint Institute for Nuclear Research;

e-mail: e-cov@yandex.ru

---

### ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Коваль О. А., Коваль Е. А. Численный анализ энергетических уровней квантовой частицы в поле двумерного диполя // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 23–37.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37

### FOR CITATION

Koval O. A., Koval E. A. Numerical analysis of energy levels of quantum particle in field of two-dimensional dipole. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 23–37.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-23-37

УДК 535.361; 610.849.19; 618.723

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-38-52

## БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИЙ ЖК МОДУЛЯТОР НА ОСНОВЕ ВОЛНОВОДНОГО ЭФФЕКТА В СВЕРХЗАКРУЧЕННОЙ СТРУКТУРЕ НЕМАТИКА

**Симоненко Г. В.**

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского*

*410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Российская Федерация*

### **Аннотация.**

**Цель** исследования – поиск конструкции ЖК модулятора света на основе нематика с минимальным временем срабатывания.

**Процедура и методы.** Методом исследования является компьютерное моделирование интегральных характеристик различных конструкций ЖК модулятора. Процедура исследования включала в себя сравнение интегральных характеристик различных конструкций модулятора.

**Результаты.** Обнаружена линейная регрессия в зависимости полного времени срабатывания ЖК модулятора от угла закрутки структуры нематика. Также показано, что оптимальными интегральными характеристиками обладает ЖК модулятор, выполненный на основе ЖК структуры с углом закрутки  $270^\circ$  при антисимметричных граничных условиях с малыми значениями углов преднаклона на ориентирующих подложках, работающий в волноводной моде и использующий фазовый пленочный компенсатор.

**Теоретическая значимость** работы заключается в обнаружении линейной регрессии в зависимости полного времени срабатывания ЖК модулятора от угла закрутки структуры нематика. **Практическая значимость** работы состоит в том, что найдена оптимальная конструкция ЖК модулятора, которая одновременно имеет малое полное время срабатывания (менее 4 мс) и приемлемый уровень контрастного отношения (не менее 300:1).

**Ключевые слова:** жидкий кристалл, моделирование, интегральные характеристики, технологические параметры

**Благодарности:** Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 19-07-01005.

## FAST LC MODULATOR BASED ON THE WAVEGUIDE EFFECT IN A SUPER-SWING NEMATIC STRUCTURE

**G. Simonenko**

*Saratov State University*

*83 ulitsa Astrakhanskaya, Saratov 410012, Russian Federation*

### **Abstract.**

**Aim.** The aim of this article is to search for the design of an LC light modulator based on a nematic with minimal response time.

**Methodology.** The research method is computer simulation of the integral characteristics of various designs of the LC modulator. The research procedure included a comparison of the integral characteristics of various modulator designs.

**Results.** As a result of the studies, a linear regression was found depending on the total response time of the LC modulator on the twist angle of the nematic structure. It has also been shown that an LC modulator made on the basis of an LC structure with a swivel angle of  $270^\circ$  under antisymmetric boundary conditions with small pre-tilt angles on orienting substrates, operating in the waveguide mode and using a phase film compensator, has optimal integral characteristics.

**Research implications** is to detect linear regression as a function of the total response time of the LC modulator on the twist angle of the nematic structure. The practical significance of the work lies in the fact that the optimal design of the LCD modulator was found, which simultaneously has a small total response time (less than 4 milliseconds) and an acceptable level of contrast ratio (at least 300: 1).

**Keywords:** liquid crystal, modeling, integrated characteristics, technological parameters

**Acknowledgments:** This research was supported by an RFBR grant No. 19-07-01005.

## Введение

В настоящее время жидкие кристаллы (ЖК) нашли своё применение в различных областях науки и техники: от систем управления с помощью оптических элементов [1] до систем обработки и отображения информации [2; 3]. Наиболее известными устройствами на основе ЖК являются всевозможные типы модуляторов светового потока: индикаторные системы [2; 3], дисплеи [2; 3]<sup>1</sup>, затворы [4–7]<sup>2</sup>. В связи с быстрым развитием 3D-систем для визуализации и систем управления оптическим потоком с помощью ЖК модуляторов [2–6]<sup>3</sup> актуальной задачей является улучшение оптических и динамических характеристик [8]. В наиболее распространённых ЖК устройствах в качестве ЖК вещества используются нематерики, основным недостатком которых является большое время срабатывания (не менее 4 мс [2; 3; 8]). В таких устройствах, как правило, используется эффект управляемого электрическим полем двойного лучепреломления:

<sup>1</sup> Также см.: Патент № 2490818 С1 Российская Федерация, МПК H04N 13/04 (2006.01), G02B 27/26 (2006.01). Автостереоскопический дисплей с полноэкранным 3d-разрешением (варианты) и способ управления активным параллаксным барьером дисплея : заявл. 28.02.2012 : опубл. 20.08.2013 / Ежов В. А. – 38 с. : ил.

<sup>2</sup> Также см.: Патент № 2488150 С1 Российская Федерация, МПК G02C 7/00 (2006.01), G02B 27/22 (2006.01). Мультистандартные жидкокристаллические стереоочки : заявл. 30.12.2011 : опубл. 20.07.2013 / Студенцов С. А., Ежов В. А. – 23 с. : ил.

<sup>3</sup> Также см.: Патент № 2490818 С1 Российская Федерация, МПК H04N 13/04 (2006.01), G02B 27/26 (2006.01). Автостереоскопический дисплей с полноэкранным 3d-разрешением (варианты) и способ управления активным параллаксным барьером дисплея : заявл. 28.02.2012 : опубл. 20.08.2013 / Ежов В. А. – 38 с. : ил.; Патент № 2488150 С1 Российская Федерация, МПК G02C 7/00 (2006.01), G02B 27/22 (2006.01). Мультистандартные жидкокристаллические стереоочки : заявл. 30.12.2011 : опубл. 20.07.2013 / Студенцов С. А., Ежов В. А. – 23 с. : ил.

ЖК модулятор на основе  $\pi$ -ячеек [7; 9]<sup>1</sup>, твист-ячеек [10], супертвист-ячеек<sup>2</sup>. На сегодня известны конструкции ЖК модуляторов, которые имеют меньшие времена срабатывания [11–14], однако они не получили широкого распространения. На данный момент существует ясное понимание связи между физико-техническими параметрами такого устройства и его характеристиками [15], однако вопрос об оптимальной конструкции ЖК модулятора на основе нематика остаётся открытым. В частности, необходимо выяснить, при каких граничных условиях в ЖК ячейке модулятор имеет оптимальный набор характеристик: максимальное пропускание в состоянии «открыто»; максимальное контрастное отношение между состояниями «открыто» и «закрыто»; минимальная ахроматичность устройства в состоянии «открыто»; минимальное время срабатывания устройства. К параметрам, которые однозначно определяют граничные условия, относятся угол закрутки структуры ЖК и углы преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках [16–19]. Поэтому нами выполнено компьютерное моделирование характеристик ЖК модулятора для 3D-приложений в зависимости от его конструктивных параметров: угла закрутки структуры ЖК в ячейке и углов преднаклона молекул ЖК на ориентирующих поверхностях ячейки. Статья состоит из нескольких разделов, в которых даётся краткое описание характеристик ЖК устройства и метода их моделирования и приведены результаты компьютерного моделирования оптических и динамических (временных) характеристик модуляторов.

### **Интегральные характеристики жк модулятора и их моделирование**

С конца 90-х годов XX в. для поиска оптимальной конструкции ЖК устройства используется метод компьютерного моделирования [16; 17]. Поэтому для этой цели мы применяли пакет программ *MOUSE-LCD* [20], который позволяет производить моделирование характеристик различных ЖК устройств с точностью в пределах 10% [19; 20], что обычно не превышает погрешность эксперимента. В этом случае погрешность моделирования определяется в основном точностью задания физических и конструктивных параметров модулятора.

При моделировании ЖК модулятора нами использовался стандартный набор его четырёх характеристик [15; 21]:

<sup>1</sup> См. также: Патент № 2488150 С1 Российская Федерация, МПК G02С 7/00 (2006.01), G02В 27/22 (2006.01). Мультистандартные жидкокристаллические стереоочки : заявл. 30.12.2011 : опубл. 20.07.2013 / Студенцов С. А., Ежов В. А. – 23 с. : ил.; Патент № 2393517 С2 Российская Федерация, МПК G02F 1/00 (2006.01). Пассивно-матричный жидкокристаллический дисплей и способ его управления : заявл. 30.06.2008 : опубл. 27.06.2010 / Студенцов С. А., Брежнев В. А., Жуков Н. Д., Горфинкель Б. И. – 28 с. : ил.

<sup>2</sup> См.: Patent US 5327269. Fast switching 270o twist nematic liquid crystal device and eyewear incorporating the device. 05.07.1994 / Lipton L., Tilton M. [Электронный ресурс]. URL: <https://patentimages.storage.googleapis.com/39/41/56/d10f69283db7b5/US5327269.pdf> (дата обращения: 20.01.2020); Патент № 2449333 С1 Российская Федерация. МПК G02F 1/13 (2006.01). Жидкокристаллический затвор : заявл. 11.02.2010 : опубл. 27.04.2012 / Студенцов С. А., Брежнев В. А., Горфинкель Б. И. – 16 с. : ил.

- максимальное среднее по спектру пропускание ЖК модулятора в состоянии «выключено»  $T_{off}$ ;
- среднее по спектру контрастное отношение устройства  $C$ ;
- ахроматичность устройства  $H_{off}$  в состоянии «выключено» совместно с условием условия  $H_{off} \leq 0,05$ ;
- полное время срабатывания ЖК устройства  $\tau$ :

$$\tau = \tau_{reac} + \tau_{relax},$$

где  $\tau_{reac}$  – время включения устройства;  $\tau_{relax}$  – время выключения устройства.

Часто в состоянии «выключено» ЖК устройство имеет максимальное пропускание, поэтому это состояние называют ещё состоянием «открыто». В этом случае в состоянии «включено» устройство имеет минимальное пропускание и соответственно называется состоянием «закрыто».

### Результаты компьютерного моделирования

Основными технологическими параметрами, существенным образом влияющими на характеристики ЖК устройства, являются граничные условия в рабочей ЖК ячейке [16; 17]. Поэтому мы исследовали характеристики ЖК устройств, выполненных на базе тонких ЖК ячеек с симметричными и антисимметричными граничными условиями и различными углами закрутки структуры  $\Phi_T$ , а ЖК ячейка заполнена смесью со следующими физическими параметрами:  $K_{11} = 10,5 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{22} = 6,9 \cdot 10^{-6}$  дин,  $K_{33} = 16,8 \cdot 10^{-6}$  дин,  $\epsilon_{\perp} = 4,88$ ,  $\epsilon_{\parallel} = 13,54$ , вращательная вязкость  $\gamma_1 = 0,15$  единиц СГС. Анизотропия показателей преломления ЖК  $\Delta n = 0,2$  (на длине волны 550 нм), её дисперсия – слабая. Во всех расчётах эти физические параметры ЖК оставались постоянными. В качестве поляризаторов использовалась плёнка *NPF – F 1205 DU*. Технологические параметры (толщины и показатели преломления) стеклянных подложек, электродных и ориентирующих слоёв были взяты из работы [22]. Чтобы исключить влияние величины управляющего напряжения на характеристики модулятора, во всех случаях считалось, что для состояния «выключено»  $U_{off} \leq U_{Fred}$  ( $U_{Fred}$  – пороговое напряжение перехода Фредерикса), а для состояния «включено»  $U_{on} = 12$  В. Для исключения влияния на характеристики ЖК модулятора толщины ЖК слоя, она для всех расчётов бралась равной 3,5 мкм. Для антисимметричных граничных условий угол преднаклона в отсутствие управляющего напряжения на одной ориентирующей подложке в ячейке  $\theta_{01}$ , а на противоположной –  $\theta_{02} = -\theta_{01}$ . При симметричных граничных условиях значения углов преднаклона на обеих ориентирующих поверхностях были одинаковы ( $\theta_{02} = \theta_{01}$ ).

В первую очередь заметим, что полное время срабатывания ЖК устройства не может быть меньше, чем постоянная времени  $\eta$ , связанная с ориентационными эффектами [23]:

$$\eta = \frac{\mu d^2}{\pi^2 K},$$

где  $\mu$  – средняя вязкость ЖК,  $K$  – средний коэффициент упругости ЖК.

Поэтому время срабатывания ЖК модулятора в наших условиях не может быть меньше 100 мкс, и это является принципиальным ограничением быстродействия данных ЖК устройств. Однако в настоящем минимальное время срабатывания ЖК модуляторов на основе нематиков составляет единицы миллисекунд [3; 8], и, следовательно, существует принципиальная возможность уменьшить время срабатывания ЖК модулятора путём выбора его оптимальной конструкции.

Известно [15–17], что из всех конструктивных параметров ЖК модулятора (кроме толщины ЖК слоя  $d$ ) максимальное влияние на его оптические и динамические характеристики оказывает угол закрутки ЖК структуры в ячейке. На основе ЖК структур с различными углами закрутки существует большое количество устройств отображения и обработки информации, которые для своей работы используют волноводный или интерференционный режим [16; 17]. Однако, для исследования динамики перехода Фредерикса из одного состояния в другое обычно используют эффект интерференции поляризованных лучей (интерференционный режим) в ЖК структуре, так как в этом случае изменение оптического отклика точно следует за деформационным искажением директора ЖК без временных задержек. Поэтому для исследования влияния угла закрутки структуры ЖК на полное время срабатывания ЖК модулятора мы приняли, что угол ориентации входного поляризатора ( $\alpha_{in}$ ) составлял  $45^\circ$  к направлению ориентации молекул ЖК на первой подложке, а угол ориентации выходного поляризатора ( $\alpha_{out}$ ) равнялся  $-45^\circ$  к тому же направлению.

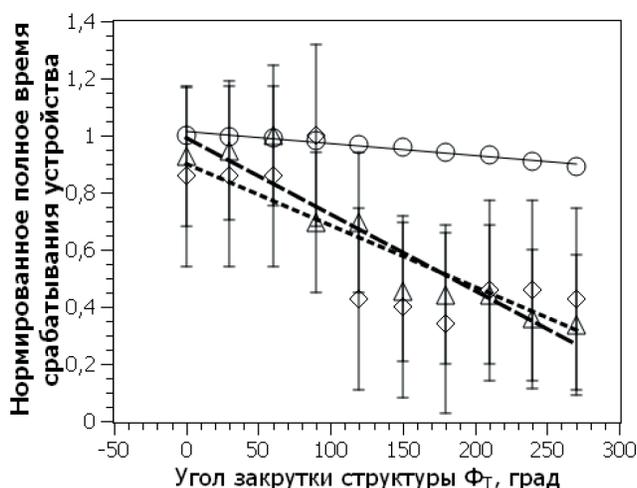


Рис. 1. / Fig. 1. Зависимость времени срабатывания ЖК модулятора от угла закрутки структуры для симметричных ( $\diamond$ ,  $\circ$ ) и антисимметричных ( $\Delta$ ) граничных условий. /

Dependence of the response time of the LC modulator on the twist angle of the structure for symmetric ( $\diamond$ ,  $\circ$ ) and antisymmetric ( $\Delta$ ) boundary conditions.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

На рис. 1 показаны зависимости нормированного полного времени срабатывания ЖК модулятора от угла закрутки структуры ЖК. Нормировка полного

времени срабатывания ЖК модулятора была произведена на время полного срабатывания  $\tau^{\max}$  при  $\Phi_T = 0^\circ$ , причём для симметричных граничных условий  $\tau^{\max} = 22$  мс, а для антисимметричных граничных условий  $\tau^{\max} = 15$  мс.

Как видно из рис. 1 с ростом  $\Phi_T$   $\tau$  падает, причём зависимость  $\tau = \tau(\Phi_T)$  с погрешностью не более чем 13% является линейной, как для симметричных граничных условий, так и для антисимметричных граничных условий. Скорость изменения функции  $\tau(\Phi_T)$  для антисимметричных граничных условий выше, чем для симметричных граничных условий. Для того, чтобы объяснить поведение функции  $\tau = \tau(\Phi_T)$ , используем известные зависимости времён реакции и релаксации от управляющего напряжения [15; 16]:

$$\tau_{\text{reac}} \approx \frac{\Omega}{U_{\text{on}}^2 - U_{\text{off}}^2}, \quad \tau_{\text{relax}} \approx \sigma(U_{\text{on}} - U_{\text{off}})^\alpha, \quad (1)$$

где величины параметров  $\sigma$ ,  $\alpha$  и  $\Omega$  определяются значениями физических постоянных ЖК вещества, используемого в модуляторе.

Учитывая то, что в нашем случае  $U_{\text{off}} = U_{\text{Fred}}$  и

$$U_{\text{Fred}} = 2\pi \sqrt{\frac{\pi k_{11}}{\epsilon_{//}} \left( 1 + \left( \frac{\Phi_T}{\pi} \right)^2 \left( \frac{k_{33}}{k_{11}} - \frac{2k_{22}}{k_{11}} \left( 1 - \frac{2\pi d}{\rho_0 \Phi_T} \right) \right) \right) \frac{\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}}{\epsilon_{//}}}, \quad (2)$$

а также, что  $U_{\text{on}} \gg U_{\text{off}}$  путём несложных преобразований получим выражение для  $\tau = \tau(\Phi_T)$  в следующем виде:

$$\tau = \Gamma_1 \left( 1 + \frac{\Gamma_2 \left( 1 + \left( \frac{\Phi_T}{\pi} \right)^2 \Gamma_3 \right)}{U_{\text{on}}^2} \right) + \Gamma_4 \left( 1 - \Gamma_5 \frac{\left( \frac{\Phi_T}{\pi} \right)}{U_{\text{on}}} \right), \quad (3)$$

где коэффициенты  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4, \Gamma_5$  – являются комбинацией физических параметров ЖК вещества, используемого в модуляторе.

На рис. 1 зависимость  $\tau = \tau(\Phi_T)$ , полученная с помощью выражения (3), отмечена кружками. Из рисунка видно, что функция  $\tau = \tau(\Phi_T)$  имеет линейный характер, однако скорость её изменения существенно ниже, чем у аналогичных линейных функций, полученных без допущений прямым численным методом. Линейный характер функции  $\tau = \tau(\Phi_T)$  связан с тем, что управляющее напряжение  $U_{\text{on}}$  имеет высокое значение, и поэтому первое слагаемое в формуле (3) практически не зависит от  $\Phi_T$  и вся зависимость  $\tau$  от  $\Phi_T$  скрыта во втором слагаемом, которое линейно зависит от величины угла закрутки структуры ЖК. Различие в скоростях изменения  $\tau = \tau(\Phi_T)$  можно объяснить тем, что выражение (3) получено с помощью большого числа допущений и для случая нулевого угла преднаклона молекул ЖК на ориентирующих поверхностях ЖК ячейки. Тем не менее, это выражение объясняет линейный характер зависимости  $\tau = \tau(\Phi_T)$ . Следовательно, можно сделать вывод, что для получения малых

значений полного времени срабатывания ЖК модулятора при высоких управляющих напряжениях необходимо использовать структуры с углом закрутки  $\Phi_T = 270^\circ$ .

Основываясь на предыдущем выводе, остановимся на рассмотрении различных конструкций ЖК модуляторов на основе структуры ЖК с углом закрутки  $270^\circ$ . Таких конструкций может быть восемь, которые различаются по типу граничных условий, оптической моде, используемой для реализации модуляции излучения, и наличию фазового компенсатора. Как отмечено выше, тип граничных условий делится на симметричные граничные условия и антисимметричные граничные условия. Для любого типа граничных условий оптическая мода, которая используется для получения модуляции излучения, делится на волноводную и интерференционную. В интерференционной моде используется эффект интерференции поляризованных лучей в рабочей ЖК ячейке, поэтому входной поляризатор ориентирован под  $45^\circ$  к направлению натирания на первой подложке ячейки ( $\alpha_{in} = 45^\circ$ ), а выходной поляризатор – под  $-45^\circ$  к тому же направлению ( $\alpha_{out} = -45^\circ$ ) [16; 17]. В волноводной моде используется эффект поворота плоскости поляризации света, распространяющегося через ЖК ячейку, отслеживающего поворот молекул ЖК в закрученной структуре ровно на угол закрутки. В этом случае входной поляризатор ориентирован под углом  $0^\circ$  к направлению натирания на первой подложке ячейки ( $\alpha_{in} = 0^\circ$ ), а выходной поляризатор – под  $90^\circ$  к тому же направлению ( $\alpha_{out} = 90^\circ$ ). Кроме этого для реализации волноводного режима для ЖК ячейки необходимо выполнение условия  $\Delta n \cdot d \geq \lambda$  ( $\lambda$  – длина волны видимого диапазона) [16; 17]. Для улучшения оптических характеристик любого типа модулятора применяется фазовый компенсатор. Он представляет из себя анизотропную полимерную, как правило, одноосную плёнку [18]. В табл. 1 приведены основные интегральные характеристики различных ЖК модуляторов, работающих на основе ЖК структуры с  $\Phi_T = 270^\circ$ . Как видно из этой таблицы, наилучшие интегральные характеристики имеют ЖК модуляторы на основе волноводной моды в ячейках с симметричными и антисимметричными граничными условиями с фазовым компенсатором. При этом для достижения оптимальных характеристик ЖК модулятора необходимо использовать одноосный фазовый компенсатор со следующими параметрами: угол ориентации оптической оси фазового компенсатора относительно направления натирания на первой подложке ЖК ячейки равен  $28^\circ$ , оптическая разность хода фазового компенсатора составляет  $0,0345$  мкм. Заметим, что модуляторы с симметричными граничными условиями имеют 10%-ый выигрыш по контрастному отношению, но в 2,5 раза проигрывают модуляторам с антисимметричными граничными условиями по величине полного времени срабатывания. Исходя из этого можно считать, что ЖК модулятор на основе волноводной моды в ячейках с антисимметричными граничными условиями и с фазовым компенсатором имеет оптимальный набор интегральных характеристик, а именно: максимально возможные значения  $T_{off}$  и  $C$ , и минимально возможные значения  $\tau$  и  $H_{off}$ .

Таблица 1 / Table 1

**Характеристики ЖК модулятора на основе структуры с углом закрутки 270° при симметричных и антисимметричных граничных условиях / Characteristics of an LC modulator based on a structure with a twist angle of 270° under symmetric and antisymmetric boundary conditions**

	$\alpha_{in} = 0^\circ, \alpha_{out} = 90^\circ$ без фазового компенсатора		$\alpha_{in} = 0^\circ, \alpha_{out} = 90^\circ$ с фазовым компенсатором		$\alpha_{in} = 45^\circ, \alpha_{out} = -45^\circ$ без фазового компенсатора		$\alpha_{in} = 45^\circ, \alpha_{out} = -45^\circ$ с фазовым компенсатором	
	$\theta_{02} = \theta_{01}$	$\theta_{02} = -\theta_{01}$	$\theta_{02} = \theta_{01}$	$\theta_{02} = -\theta_{01}$	$\theta_{02} = \theta_{01}$	$\theta_{02} = -\theta_{01}$	$\theta_{02} = \theta_{01}$	$\theta_{02} = -\theta_{01}$
$T_{off}$	0,387	0,387	0,386	0,38	0,385	0,385	–	0,385
C	355	29	427	384	423	287	–	292
$\tau$	9	5,25	9	3,75	9	4,5	–	4,75
$H_{off}$	0,0324	0,0324	0,033	0,032	0,057	0,057	–	0,056

Источник: по данным автора.

Рассмотрим влияние технологических параметров на интегральные характеристики граничных условий ЖК модулятора на основе волноводной моды в ячейках с антисимметричными граничными условиями и с фазовым компенсатором. К технологическим параметрам относятся граничные условия: величина угла преднаклона молекул ЖК на ориентирующих поверхностях, величина энергии сцепления молекул ЖК с ориентирующей поверхностью, величина отношения  $d/p_0$  ( $p_0$  – шаг хиральной добавки) ЖК смеси. Остановимся на изучении зависимости интегральных характеристик ЖК модулятора от угла преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках ( $\theta_{01}, \theta_{02}, \theta_{01} = -\theta_{02}$ ) и величины  $d/p_0$ .

Заметим, что в состоянии «выключено» для всех углов преднаклона молекул ЖК в ячейке для нарушения волноводного режима требуется сильная деформация слоя ЖК [16], а этого на самом деле не происходит. Поэтому среднее по спектру пропускание устройства  $T_{off}$  и его ахроматичность  $H_{off}$  в состоянии «выключено» не зависят от углов преднаклона молекул ЖК на ориентирующих поверхностях в пределах их изменения от 2° до 14°. Зависимости среднего по спектру контрастного отношения и полного срабатывания времени от величин углов преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках представлены на рис. 2. На рис. 2а показана зависимость нормированного среднего по спектру контрастного отношения  $C^{nor}$  от угла преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках  $\theta_{01}$  ( $\theta_{02} = -\theta_{01}$ ). Нормировка среднего по спектру контрастного отношения была произведена на максимальное значение  $C^{max} = 384$ , то есть  $C^{nor} = C/C^{max}$  ( $C$  – текущее значение среднего по спектру контрастного отношения). Из этого рисунка видно, что с ростом  $\theta_{01}$   $C^{nor}$  падает. Отметим, что зависимость  $C^{nor} = C^{nor}(\theta_{01})$  с погрешностью не более чем 15% носит линейный характер.

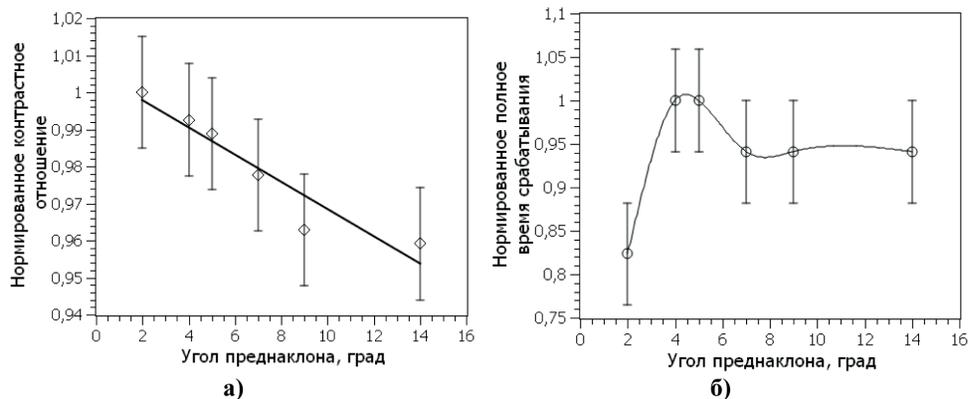


Рис. 2. / Fig. 2. Интегральные характеристики ЖК модулятора в зависимости от угла преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках: а – нормированное контрастное отношение; б – нормированное полное время срабатывания. / Integral characteristics of the LC modulator as a function of the pre-tilt angle of the LC molecules on orienting substrates: а – normalized contrast ratio; б – normalized total response time.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Уменьшение контрастного отношения не превышает 5% при изменении угла преднаклона на ориентирующих подложках от  $2^\circ$  до  $14^\circ$ . Следовательно, можно сказать о слабом влиянии этого технологического параметра на контрастное отношение. На рис. 2б показана зависимость нормированного полного времени срабатывания ЖК модулятора  $\tau^{\text{нор}}$  от технологического параметра  $\theta_{01}$  ( $\theta_{02} = -2^\circ$ ). Нормировка полного времени срабатывания производилась на максимальное значение  $\tau^{\text{max}} = 4.25$  мс, то есть  $\tau^{\text{нор}} = \tau/\tau^{\text{max}}$  ( $\tau$  – текущее полное время срабатывания ЖК модулятора). Зависимость  $\tau^{\text{нор}} = \tau^{\text{нор}}(\theta_{01})$  имеет характер кривой с максимумом, положение которого определяется физическими параметрами ЖК смеси в ячейке. Минимальное значение полного времени срабатывания достигается при  $\theta_{01} = 2$  ( $\theta_{02} = -2^\circ$ ), а максимальное изменение  $\tau^{\text{нор}}$  не превышает 20% при вариации  $\theta_{01}$  от  $2^\circ$  до  $14^\circ$ . Таким образом, можно сделать вывод о том, что с точки зрения интегральных характеристик ЖК модулятора оптимальным значением технологического параметра  $\theta_{01}$  является  $2^\circ$ , что обеспечивается стандартной технологией ориентации нематического ЖК, известной с середины 1970-х гг. [16].

Результаты нашего моделирования показали, что технологический параметр  $d/p_0$  не оказывает влияния на величины  $T_{\text{off}}$  и  $H_{\text{off}}$ . Это объясняется так же, как и для случая зависимости этих характеристик от углов преднаклона молекул ЖК на ориентирующих подложках. Стоит отметить, что изменения этого параметра должны происходить в пределах одной зоны Гранжана, то есть  $0.5 \leq d/p_0 \leq 1$ . При этом во избежание появления нежелательных диэлектрических доменов следует использовать только левую часть зоны Гранжана ( $0.5 \leq d/p_0 \leq 0.75$ ) [16]. Узкий диапазон изменения параметра  $d/p_0$  приводит к тому, что значение полного

времени срабатывания ЖК модулятора не зависит от него, а на его контрастное отношение этот параметр влияет только в пределах 5% (рис. 3).

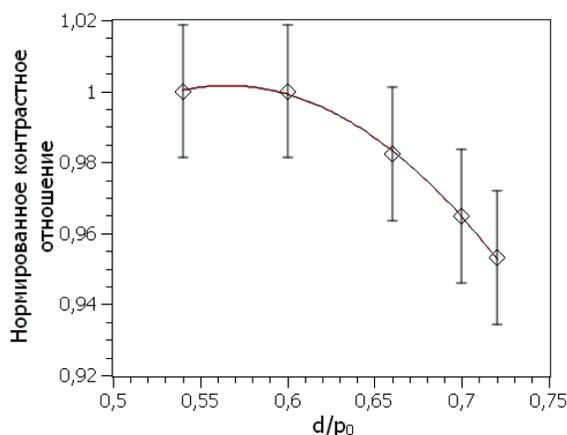


Рис. 3. / Fig. 3. Зависимость нормированного среднего по спектру контрастного отношения от параметра  $d/p_0$ . / Dependence of the normalized mean over the spectrum of the contrast ratio on the parameter  $d/p_0$ .

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

### Заключение

В данной работе выполнен компьютерный анализ интегральных характеристик различных конструкций ЖК модулятора и приведено сравнение их интегральных характеристик. В результате анализа интегральных характеристик ЖК модулятора показано, что полное время срабатывания ЖК модулятора является линейной регрессией в зависимости от угла закрутки структуры нематика. Для примера в табл. 2 представлены интегральные характеристики основных конструкций быстродействующих ЖК модуляторов на основе структур с различными углами закрутки.

Таблица 2 / Table 2

Характеристики ЖК модулятора на базе тонких ячеек с антисимметричными граничными условиями на основе структур с различными углами закрутки / Characteristics of an LC modulator based on thin cells with antisymmetric boundary conditions based on structures with different twist angles

Характеристика	Угол закрутки антисимметричной структуры			
	0°	90°	180°	270°
Среднее по спектру пропускание ЖК устройства в состоянии «выключено» $T_{off}$	0,39	0,42	0,42	0,372
Среднее по спектру контрастное отношение ЖК устройства С	334	3500	1396	387

Характеристика	Угол закрутки антисимметричной структуры			
	0°	90°	180°	270°
Полное время срабатывания ЖК устройства $\tau$ , мкс	9	6	5	3,75
Ахроматичность ЖК устройства в состоянии «выключено» $H_{off}$	$\geq 0,05$	$\leq 0,05$	$\geq 0,05$	$\leq 0,05$

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Как показывает анализ этих данных, безусловным лидером по оптическим интегральным характеристикам ( $T_{off}$ ,  $C$ ,  $H_{off}$ ) является твист-индикатор, однако по динамике переключения из одного состояния в другое и обратно он только на 3-ем месте из 4-х. Весьма неплохой набор всех интегральных характеристик имеет ЖК модулятор на основе  $\pi$ -ячейки с углом закрутки структуры ЖК 180°, основным недостатком которого является слабо окрашенное состояние с максимальным пропусканием. Это является некоторым ограничением для использования такого модулятора во всём видимом диапазоне длин волн света. С другой стороны, самым малым полным временем срабатывания обладает модулятор на основе структуры с углом закрутки 270°, но это устройство имеет достаточно низкое значение контрастного отношения. Если основным требованием, которое предъявляется к ЖК модулятору, является минимальное полное время срабатывания  $\tau$ , при посредственных значениях оптических характеристик, то следует выбирать устройство на основе этой структуры ЖК. Например, для большинства ЖК устройств требуемый уровень контрастного отношения составляет 300:1 при ахроматичности  $H \leq 0.05$ . В то же время полное время срабатывания такого устройства должно быть как можно меньше, в идеале не более 3–5 миллисекунд (лучше меньше). Поэтому при таких требованиях к интегральным характеристикам следует выбрать модулятор на основе структуры с углом закрутки 270°.

Таким образом, в статье выполнен компьютерный анализ различных конструкций ЖК модуляторов света и на основе его интегральных характеристик найдена оптимальная конструкция подобного устройства. Показано, что оптимальными интегральными характеристиками обладает ЖК модулятор, выполненный на основе ЖК структуры с углом закрутки 270° при антисимметричных граничных условиях с малыми значениями углов преднаклона на ориентирующих подложках, работающих в волноводной моде и использующий фазовый плёночный компенсатор.

Статья поступила в редакцию 21.09.2020 г.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Jaroszewicz L. R., Bennis N. Liquid Crystal Optical Devices // Crystals. 2019. Vol. 9. Iss. 10. P. 523. DOI: 10.3390/cryst9100523.
2. Obayya S., Hameed M. F. O., Areed N. F. F. Computational Liquid Crystal Photonics: Fundamentals, Modelling and Applications. Great Britain: John Wiley & Sons, 2016. 272 P. DOI: 10.1002/9781119041993.

3. Беляев В. В., Островский Б. И., Пикина Е. С. 14-я Европейская конференция по жидким кристаллам (ECLC-2017), 25–30 июня 2017, Москва // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2018. Т. 18. № 1. С. 84–94. DOI: 10.18083/LCAppl.2018.1.84.
4. Wittenbecher L, Zigmantas D. Correction of Fabry-Pérot interference effects in phase and amplitude pulse shapers based on liquid crystal spatial light modulators // Optics Express. 2019. Vol. 27. Iss. 16. P. 22970–22982. DOI: 10.1364/OE.27.022970.
5. Котова С. П., Майорова А. М., Самагин С. А. Возможность формирования двухлепестковых вихревых световых полей с помощью модифицированного ЖК фокусатора // Оптика и спектроскопия. 2019. Т. 126. № 1. С. 18–23. DOI: 10.21883/OS.2019.01.47047.256-18.
6. Woods A. J. Crosstalk in stereoscopic displays: a Review // Journal of Electronic Imaging. 2012. Vol. 21. Iss. 4. P. 040902. DOI: 10.1117/1.JEI.21.4.040902.
7. Зинчик А. А. Применение пространственных модуляторов света для формирования лазерных пучков со спиральным распределением фазы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2015. Т. 15. № 5. С. 817–824. DOI: 10.17586/2226-1494-2015-15-5-817-824.
8. Беляев В. В. Перспективные применения и технологии жидкокристаллических устройств отображения информации и фотоники // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2015. Т. 15. № 3. С. 7–27. DOI: 10.18083/LCAppl.2015.3.7.
9. Bos P. J., Koehler/Beran K. R. The  $\pi$ -cell: A fast liquid-crystal optical-switching device // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 1984. Vol. 113. Iss. 1. P. 329–339. DOI: 10.1080/00268948408071693.
10. Schadt M., Helfrich W. Voltage Dependent Optical Activity of a Twisted Nematic Liquid Crystal // Applied Physics Letters. 1971. Vol. 18. Iss. 4. P. 127–128. DOI: 10.1063/1.1653593.
11. Cheng H., Bhowmik A. K., Bos P. J. Fast-response liquid crystal variable optical retarder and multilevel attenuator // Optical Engineering. 2013. Vol. 52. Iss. 10. P. 107105. DOI: 10.1117/1.OE.52.10.107105.
12. Komitov L., Hegde G., Kolev D. Fast liquid crystal light shutter // Journal of Physics D: Applied physics. 2011. Vol. 44. No. 44. P. 442002–442006. DOI: 10.1088/0022-3727/44/44/442002.
13. 30 to 50 ns Liquid-Crystal Optical Switches / Geis M. W., Molnar R. J., Turner G. W., Lyszczarz T. M., Osgood R. M., Kimball B. R. // Proceedings of SPIE. 2010. Vol. 7618. Emerging Liquid Crystal Technologies V (12 February 2010). P. 76180J. DOI: 10.1117/12.840281.
14. Microsecond-range optical shutter for unpolarized light with chiral nematic liquid crystal / Mohammadimasoudi M., Shin J., Lee K., Neyts K., Beeckman J. // AIP Advances. 2015. Vol. 5. Iss. 4. P. 047122–047125. DOI: 10.1063/1.4918303.
15. Симоненко Г. В. Компьютерное моделирование характеристик быстродействующих классических модуляторов на основе жидких кристаллов. Саратов: Изд-во Саратовского университета, 2018. 136 с.
16. Сухариер А. С. Жидкокристаллические индикаторы. М.: Радио и связь, 1991. 256 с.
17. Chigrinov V. G. Liquid crystal devices. Physics and applications. Boston-London: Artech House Publishing, 1999. 359 p.
18. Chigrinov V. G., Kozenkov V. M., Kwok H. S. Photoalignment of liquid crystalline materials: Physics and applications. Great Britain: John Wiley & Sons, 2008. 248 p. DOI: 10.1002/9780470751800.
19. One Methylene Group in the Side Chain Can Alter by 90 Degrees the Orientation of a Main-Chain Liquid Crystal on a Unidirectional Substrate / Odarchenko Ya., Defaux M.,

- Rosenthal M., Akhkiamova A., Bovsunovskaya P., Melnikov A., Rodygin A., Rychkov A., Gerasimov K., Anokhin D. V., Zhu X., Ivanov D. I. // *ACS Macro Letters*. 2018. Vol. 7. Iss. 4. P. 453–458. DOI: 10.1021/acsmacrolett.8b00044.
20. The optimization of LCD electrooptical behavior using MOUSE-LCD software / Chigrinov V. G., Simonenko G. V., Yakovlev D. A., Podjachev Yu. B. // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2000. Vol. 351. P. 17–25. DOI: 10.1080/10587250008023248
21. Симоненко Г. В., Студенцов С. А., Ежов В. А. Ахроматичность ЖК-модулятора для 3D приложений // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2015. Т. 15. № 3. С. 82–90. DOI: 10.18083/LCAppl.2015.3.82.
22. Курчаткин С. П. Поверхностные явления и структура термотропных жидких кристаллов в капиллярных объемах: дисс. ... докт. хим. наук. Саратов, 2001. 290 с.
23. де Жен П.-Ж. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 404 с.

### REFERENCES

1. Jaroszewicz L. R., Bennis N. Liquid Crystal Optical Devices. In: *Crystals*, 2019, vol. 9, iss. 10, pp. 523. DOI: 10.3390/cryst9100523.
2. Obayya S., Hameed M. F. O., Areed N. F. F. Computational Liquid Crystal Photonics: Fundamentals, Modelling and Applications. Great Britain, John Wiley & Sons Publ., 2016. 272 P. DOI: 10.1002/9781119041993.
3. Belyaev V. V., Ostrovskii B. I., Pikina E. S. [The 14th European Conference on Liquid Crystals (ECLC 2017), June 25–30, 2017, Moscow]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application. Russian Journal], 2018, vol. 18, no. 1, pp. 84–94. DOI: 10.18083/LCAppl.2018.1.84.
4. Wittenbecher L, Zigmantas D. Correction of Fabry-Pérot interference effects in phase and amplitude pulse shapers based on liquid crystal spatial light modulators. In: *Optics Express*, 2019, vol. 2, iss. 16, pp. 22970–22982. DOI: 10.1364/OE.27.022970.
5. Kotova S. P., Maiorova A. M., Samagin S. A. [The possibility of forming two-lobe vortex light fields using a modified liquid-crystal focusator]. In: *Optika i spektroskopiya* [Optics and Spectroscopy], 2019, vol. 126, no. 1, pp. 18–23. DOI: 10.21883/OS.2019.01.47047.256-18.
6. Woods A. J. Crosstalk in stereoscopic displays: a Review. In: *Journal of Electronic Imaging*, 2012, vol. 21, iss. 4, pp. 040902. DOI: 10.1117/1.JEI.21.4.040902.
7. Zinchik A. A. [Application of spatial light modulators for generation of laser beams with a spiral phase distribution]. In: *Nauchno-tekhnicheskii vestnik informatsionnykh tekhnologii, mekhaniki i optiki* [Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics], 2015, vol. 15, no. 5, pp. 817–824. DOI: 10.17586/2226-1494-2015-15-5-817-824.
8. Belyaev V. V. [Promising Applications and Technologies of Liquid Crystal Displays and Photonics Devices]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application. Russian Journal], 2015, vol. 15, no. 3, pp. 7–27. DOI: 10.18083/LCAppl.2015.3.7.
9. Bos P. J., Koehler/Beran K. R. The  $\pi$ -cell: A fast liquid-crystal optical-switching device. In: *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 1984, vol. 113, iss. 1, pp. 329–339. DOI: 10.1080/00268948408071693.
10. Schadt M., Helfrich W. Voltage Dependent Optical Activity of a Twisted Nematic Liquid Crystal. In: *Applied Physics Letters*, 1971, vol. 18, iss. 4, pp. 127–128. DOI: 10.1063/1.1653593.
11. Cheng H., Bhowmik A. K., Bos P. J. Fast-response liquid crystal variable optical retarder and multilevel attenuator. In: *Optical Engineering*, 2013, vol. 52, iss. 10, pp. 107105. DOI: 10.1117/1.OE.52.10.107105.

12. Komitov L., Hegde G., Kolev D. Fast liquid crystal light shutter. In: *Journal of Physics D: Applied physics*, 2011, vol. 44, no. 44, pp. 442002–442006. DOI: 10.1088/0022-3727/44/44/442002.
13. Geis M. W., Molnar R. J., Turner G. W., Lyszczarz T. M., Osgood R. M., Kimball B. R. 30 to 50 ns Liquid-Crystal Optical Switches. In: *Proceedings of SPIE*, 2010, vol. 7618. Emerging Liquid Crystal Technologies V (12 February 2010), pp. 76180J. DOI: 10.1117/12.840281.
14. Mohammadimasoudi M., Shin J., Lee K., Neyts K., Beeckman J. Microsecond-range optical shutter for unpolarized light with chiral nematic liquid crystal. In: *AIP Advances*, 2015, vol. 5, iss. 4, pp. 047122–047125. DOI: 10.1063/1.4918303.
15. Simonenko G. V. *Komp'yuternoe modelirovanie kharakteristik bystrodeistvuyushchikh klassicheskikh modulyatorov na osnove zhidkikh kristallov* [Computer simulation of characteristics of high-speed classical modulators based on liquid crystals]. Saratov, Saratov University Publ., 2018. 136 p.
16. Sukhariy A. S. *Zhidkokristallicheskie indikatory* [Liquid crystal displays]. Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1991. 256 p.
17. Chigrinov V. G. *Liquid crystal devices. Physics and applications*. Boston-London, Artech House Publishing, 1999. 359 p.
18. Chigrinov V. G., Kozenkov V. M., Kwok H. S. *Photoalignment of liquid crystalline materials: Physics and applications*. Great Britain, John Wiley & Sons, 2008. 248 p. DOI: 10.1002/9780470751800.
19. Odarchenko Ya., Defaux M., Rosenthal M., Akhkiamova A., Bovsunovskaya P., Melnikov A., Rodygin A., Rychkov A., Gerasimov K., Anokhin D. V., Zhu X., Ivanov D. I. One Methylene Group in the Side Chain Can Alter by 90 Degrees the Orientation of a Main-Chain Liquid Crystal on a Unidirectional Substrate. In: *ACS Macro Letters*, 2018, vol. 7, iss. 4, pp. 453–458. DOI: 10.1021/acsmacrolett.8b00044.
20. Chigrinov V. G., Simonenko G. V., Yakovlev D. A., Podjachev Yu. B. The optimization of LCD electrooptical behavior using MOUSE-LCD software. In: *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 2000, vol. 351, pp. 17–25. DOI: 10.1080/10587250008023248
21. Simonenko G. V., Studentsov S. A., Ezhov V. A. [Achromaticity of the LC Modulator for 3D Applications]. In: *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* [Liquid Crystals and their Application. Russian Journal], 2015, vol. 15, no. 3, pp. 82–90. DOI: 10.18083/LCAppl.2015.3.82.
22. Kurchatkin S. P. *Poverkhnostrnye yavleniya i struktura termotropnykh zhidkikh kristallov v kapillyarnykh ob'emakh: diss. ... dokt. khim. nauk* [Surface phenomena and structure of thermotropic liquid crystals in capillary volumes: D. thesis in Chemical Sciences]. Saratov, 2001. 290 p.
23. de Gennes P.-G. *Fizika zhidkikh kristallov* [Physics of liquid crystals]. Moscow, Mir Publ., 1977. 404 p.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Симоненко Георгий Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики и биофотоники Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского;  
e-mail: gvsim1960@hotmail.com.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Georgy V. Simonenko – Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., Department of Optics and Biophotonics, Saratov State University;  
e-mail: gvsim1960@hotmail.com.

**ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ**

Симоненко Г. В. Быстродействующий ЖК модулятор на основе волноводного эффекта в сверхзакрученной структуре нематика // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. 2020. № 3. С. 38-52.  
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-38-52

**FOR CITATION**

Simonenko G. V. Computer analysis of the influence of technological parameters of a high-speed liquid crystal modulator on its integral characteristics. In: *Bulletin of the Moscow Region State University. Series: Physics-Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 38–52.  
DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-38-52

УДК 621.793 + 535.544

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-53-64

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОКРЫТИЙ, НАНЕСЁННЫХ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

**Николаева Д. В.<sup>1</sup>, Генералов Д. В.<sup>1</sup>, Паршин Б. А.<sup>2</sup>, Makeev M. O.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Российский университет дружбы народов

117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Российская Федерация

<sup>2</sup> Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)

105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1, Российская Федерация

### Аннотация.

**Цель исследования** – определение толщин и оптических констант углеродных алмазоподобных покрытий, нанесённых методом импульсного лазерного осаждения, для выработки рекомендаций по технологическим режимам нанесения данных покрытий на медные и алюминиевые зеркала.

**Процедура и методы.** Для определения толщин и оптических констант углеродных алмазоподобных покрытий применяется метод ИК-спектроскопической эллипсометрии.

**Результаты.** Определены толщины и оптические константы углеродных алмазоподобных покрытий, нанесённых на образцы медных и алюминиевых зеркал методом импульсного лазерного осаждения.

**Теоретическая и практическая значимость.** Определены оптимальные с точки зрения оптических характеристик технологические режимы нанесения алмазоподобных покрытий методом импульсного лазерного осаждения на медные и алюминиевые подложки.

**Ключевые слова:** углеродное алмазоподобное покрытие, эллипсометрия, упрочнение, оптические элементы, факторы космического пространства, технологические режимы, импульсное лазерное осаждение

## INVESTIGATION OF PHYSICAL PROPERTIES OF CARBON DIAMOND-LIKE COATINGS APPLIED BY PULSED LASER DEPOSITION

**D. Nikolaeva<sup>1</sup>, D. Generalov<sup>1</sup>, B. Parshin<sup>2</sup>, M. Makeev<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Peoples' Friendship University of Russia

6 ulitsa Miklukho-Maklaya, Moscow 117198, Russian Federation

<sup>2</sup> Bauman Moscow State Technical University

5 build. 1 ulitsa 2-ya Baumanskaya, Moscow 105005, Russian Federation

**Abstract.**

**Aim:** determination of the thickness and optical constants of carbon diamond-like coatings applied by pulsed laser deposition to develop recommendations for technological modes of applying these coatings to copper and aluminum mirrors.

**Methodology.** The infrared spectroscopic ellipsometry method is used to determine the thickness and optical constants of carbon diamond-like coatings.

**Results.** The thicknesses and optical constants of carbon diamond-like coatings applied to samples of copper and aluminum mirrors by pulsed laser deposition were determined.

**Research implications.** The optimal technological modes for applying diamond-like coatings by pulsed laser deposition to copper and aluminum substrates are determined from the point of view of optical characteristics.

**Keywords:** carbon diamond-like coating, ellipsometry, reinforcing, optical elements, space factors, technological modes, pulsed laser deposition

**Введение**

Воздействие различных внешних факторов на оптические элементы может приводить к деградации поверхностных слоёв и, соответственно, ухудшению оптических свойств элементов. Такими факторами могут быть факторы космического пространства (электроны, протоны, солнечная радиация и пр.) при размещении оптических элементов в условиях космоса, так и просто сложные погодные условия (песок, дождь и пр.).

Для защиты оптических элементов от данных вредных факторов применяются различные защитные покрытия. При этом крайне желательно, чтобы защитные покрытия не ухудшали оптические характеристики функциональных элементов, на которые они наносятся (линзы, зеркала и пр.). В качестве таких покрытий перспективным является применение углеродных алмазоподобных покрытий, обладающих рядом уникальных свойств. К этим свойствам относятся высокая износоустойчивость и твёрдость, низкий коэффициент трения, прозрачность в инфракрасном диапазоне спектра, а также биосовместимость и др. [1–7].

В данной работе методом ИК-спектроскопической эллипсометрии проведено исследование углеродных алмазоподобных покрытий, нанесённых методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО) для улучшения прочностных характеристик оптических зеркал. Метод ИК-спектроскопической эллипсометрии широко используется для определения толщин и оптических свойств тонких плёнок [8–14].

**Методика эксперимента**

Объектами исследований являлись две серии образцов зеркал диаметром 20 мм. В качестве подложки использовались плоскопараллельные пластины из К8 толщиной 5 мм. Методом магнетронного напыления на образцы первой серии был нанесён слой Cu толщиной 500 нм, а методом ионного распыления на образцы второй серии – слой Al толщиной 300 нм. Далее наносилось алмазоподобное покрытие методом импульсного лазерного осаждения.

Метод импульсного лазерного осаждения является уникальным технологическим процессом, который позволяет нанести на поверхность материалы, обладающие специальными свойствами, в данном случае – углеродное алмазоподобное покрытие. Использование данного метода помогает добиться повышения поверхностной прочности, снижения трения, коррозионной устойчивости и др. Метод импульсного лазерного осаждения обладает рядом особенностей [15]:

- мощный лазерный импульс воздействует на вещество, и при данном воздействии тонкий слой вещества мишени почти мгновенно испаряется, а стехиометрия испаренного вещества будет соответствовать стехиометрии исходной мишени, что особенно важно для получения плёнок из многокомпонентных материалов;

- процесс осаждения плёнок может быть произведён в большом диапазоне давлений фонового газа, что позволяет получать плёнки из материалов, имеющих высокое давление насыщенных паров некоторых элементов из их состава;

- данный метод позволяет получать плёнки из материалов с разными свойствами и не требует конструкционных изменений в напылительном оборудовании.

На рис. 1 представлена схема импульсного лазерного осаждения.

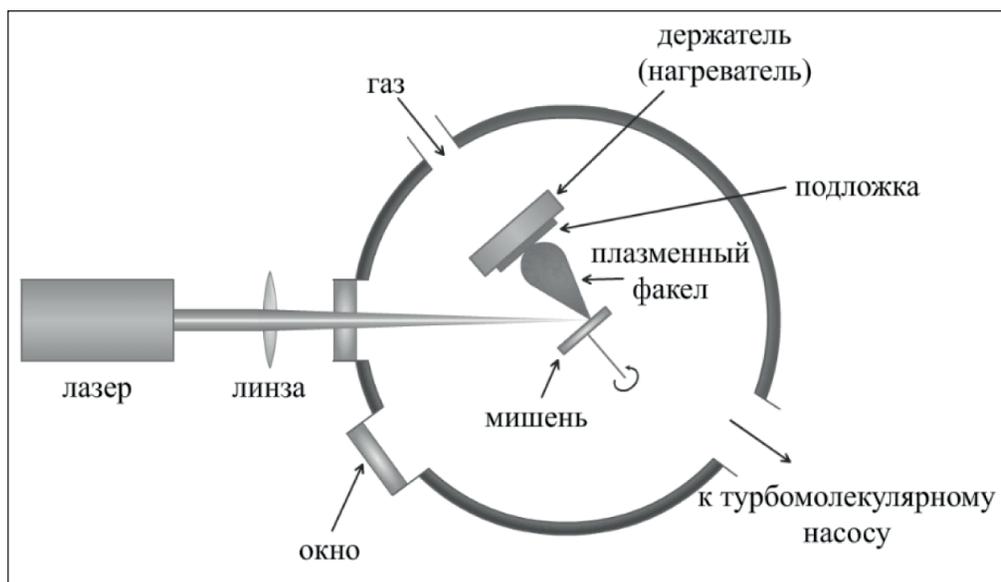


Рис. 1. / Fig. 1. Схема импульсного лазерного осаждения. /  
Schematic of pulsed laser deposition.

Источник: [7] / Source: [7].

Согласно схеме на рис. 1 на образцы и наносилось алмазоподобное покрытие. В табл. 1 приведены технологические режимы изготовления образцов.

Таблица 1 / Table 1

**Технологические режимы изготовления образцов / Technological modes of manufacturing samples**

Материал подложки	Образец	Описание покрытия	Кол-во импульсов	Энергия импульса, мДж	Расстояние между подложкой и мишенью, мм	Температура подложки, °С
Cu	Cu-1	DLC	3000	71	70	300
Cu	Cu-2	DLC	3000	138	70	175
Cu	Cu-3	DLC	3000	139	70	300
Al	Al-1	Титан	30000	130	70	25
		DLC	6000			
Al	Al-2	DLC	10000	120	110	25
Al	Al-3	DLC	3500	121	110	25

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Толщина наносимого защитного покрытия определялась методом ИК-спектроскопической эллипсометрии. Данный метод основан на определении изменения поляризации световой волны при взаимодействии с образцом, что описывает основное уравнение эллипсометрии [16]:

$$\frac{R_p}{R_s} = \operatorname{tg} \Psi \cdot e^{i\Delta}, \quad (1)$$

где  $\Psi$  и  $\Delta$  – эллипсометрические параметры,  $i$  – мнимое число.

Три основные категории задач, которые могут быть решены благодаря использованию эллипсометрического метода, показаны на рис. 2.

Таким образом, из рис. 2 видно, что применение метода ИК-спектроскопической эллипсометрии предоставляет возможность определить оптические свойства и толщину тонких плёнок [17]. Измерения были проведены на ИК-спектральном эллипсометре IR-VASE.

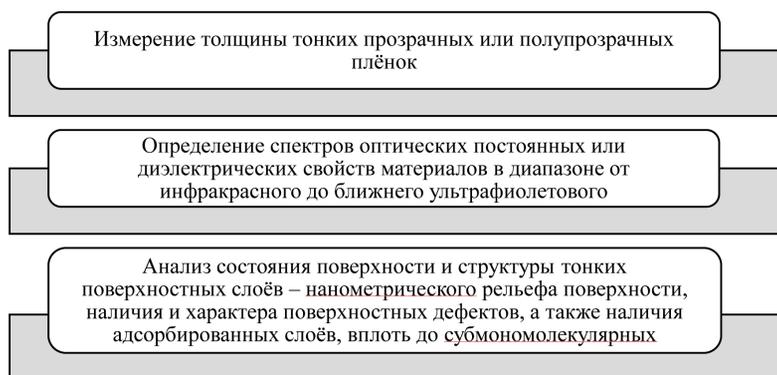


Рис. 2. / Fig. 2. Основные задачи, решаемые методом эллипсометрии. / The main tasks solved by the ellipsometry method.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Основные технические характеристики данного прибора представлены на рис. 3.



Рис. 3. / Fig. 3. Технические характеристики эллипсометра IR-VASE. /  
Technical characteristics of the IR-VASE ellipsometer.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Для построения эллипсометрических моделей была использована программная среда WVASE32 [18]. При помощи данной программы проводится обработка измерений эллипсометра IR-VASE.

Для исследования слоёв Cu и DLC была использована оптическая модель Друде, а для слоя Al – модель Друде и модель Лоренца.

При помощи модели Друде могут быть описаны эффект Холла, удельная проводимость, теплопроводность металлов и др. Следующая формула определяет величину электропроводности в соответствии с моделью Друде [18]:

$$\sigma_0 = \frac{1}{\rho_0} = \frac{e^2 n_v \tau}{m_e}, \quad (2)$$

где  $m_e$  – масса свободного электрона ( $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$  кг),  $\tau$  – время релаксации,  $n_v$  – концентрация электронов в единице объёма.

Для того, чтобы описать электронные, молекулярные и другие колебания в материале применяется осциллятор Лоренца, определяемый по следующей формуле [19]:

$$\varepsilon(h\nu) = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = \varepsilon_{1\infty} + \sum_k \frac{A_k B_k E_k}{E_k^2 - (h\nu)^2 - iB_k \times h\nu}, \quad (3)$$

где  $A_k$  – амплитуда  $k$ -го осциллятора, является безразмерной величиной,  $B_k$  – ширина  $k$ -го осциллятора ( $\text{см}^{-1}$ ),  $E_k$  – центральная энергия ( $\text{см}^{-1}$ ).

Методика исследования методом эллипсометрии включала в себя 5 этапов. На первом этапе были определены экспериментальные данные. Произвели измерения исходных образцов. При помощи эллипсометра IR-VASE были получены эллипсометрические параметры  $\Psi$  и  $\Delta$ . Вторым этапом включал в себя построение эллипсометрической модели исходных образцов, определение оптических констант слоёв и структуру модели. На следующем этапе было произведено измерение образцов с нанесённым алмазоподобным покрытием. Определены  $\Psi$  и  $\Delta$  на базе эллипсометрических моделей. Четвёртый этап – корректировка, где было произведено сравнение данных на базе модели с экспериментальными данными, а также последовательно уточнялись параметры модели. Заключительный пятый этап подразумевал анализ полученных результатов. Определены толщины слоёв и их оптические константы.

### Результаты измерений

Для всех образцов методом ИК-спектральной эллипсометрии были получены экспериментальные спектры эллипсометрических параметров  $\Psi$  и  $\Delta$ . Также на основе проведённых измерений и анализе литературных данных разработаны оптические модели слоёв алюминия, меди и защитного DLC покрытия, с использованием которых затем были построены эллипсометрические модели всех образцов. На рис. 4 и рис. 5 представлены примеры разработанных моделей для образцов Al-1 и Cu-2.

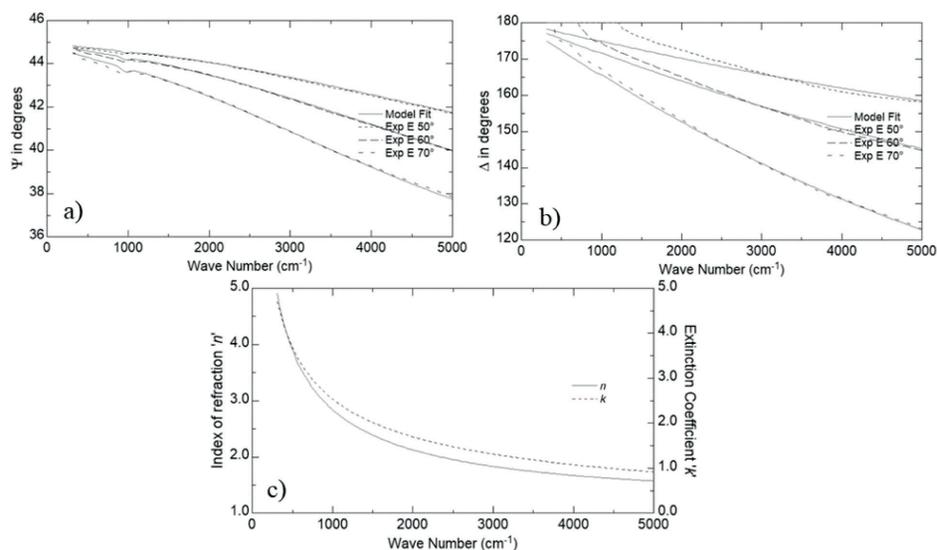


Рис. 4. / Fig. 4. Спектры эллипсометрических параметров  $\Psi$ (a) и  $\Delta$ (b), оптические константы  $n$  и  $k$ (c) образца Al-1. / Spectra of ellipsometric parameters  $\Psi$ (a) and  $\Delta$ (b), optical constants  $n$  and  $k$ (c) of sample Al-1.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

На основе моделей были определены толщины наносимых алмазоподобных покрытий, а также усреднённые значения (в диапазоне длин волн от 2 до 33 мкм) показателей преломления  $n$  и поглощения  $k$ . Полученные результаты приведены в табл. 2.

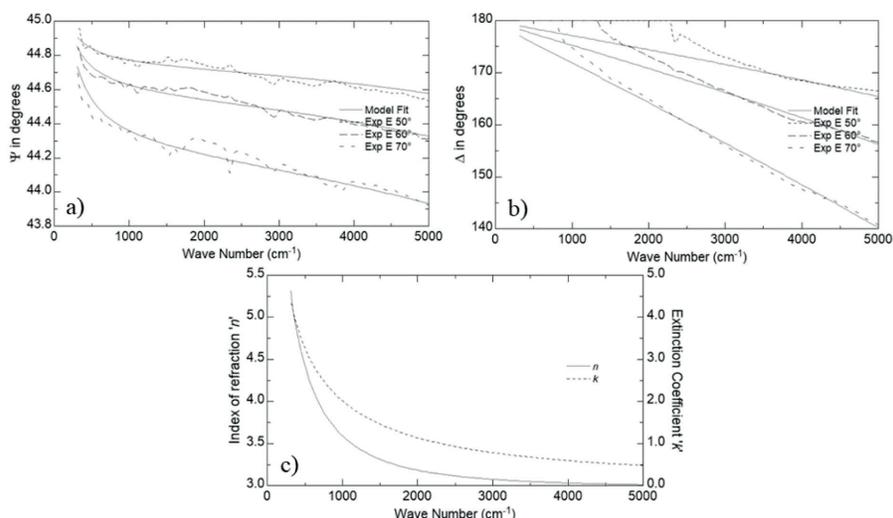


Рис. 5. / Fig. 5. Спектры эллипсометрических параметров  $\Psi$ (a) и  $\Delta$ (b), оптические константы  $n$  и  $k$ (c) образца Cu-2. / Spectra of ellipsometric parameters  $\Psi$ (a) and  $\Delta$ (b), optical constants  $n$  and  $k$ (c) of the Cu-2 sample.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Таблица 2 / Table 2

### Полученные результаты / Results

Образец	Толщина DLC покрытия, нм	Усреднённое значение показателя преломления ( $n$ )	Усреднённое значение показателя поглощения ( $k$ )
Cu-1	$6,2 \pm 0,2$	3,17	0,84
Cu-2	$10,4 \pm 0,4$	3,29	1,21
Cu-3	$11,4 \pm 0,4$	6,76	1,71
Al-1	$56,5 \pm 0,5$	2,18	1,72
Al-2	$29,4 \pm 0,4$	2,74	12,12
Al-3	$46,0 \pm 0,1$	1,14	8,72

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Покрyтия для зеркал с точки зрения оптических характеристик должны обладать минимальными значениями показателя поглощения и невысокими значениями показателя преломления. Этим критериям удовлетворяют алмазоподобные покрyтия, нанесённые на образцы Cu-1, Cu-2 и Al-1. Для их изготовления были использованы следующие технологические режимы:

– для Cu-1 – 3000 импульсов, энергия импульса 71 мДж, температура подложки 300 °С;

- для Cu-2 – 3000 импульсов, энергия импульса 138 мДж, температура подложки 175 °С;
- для Al-1 – 6000 импульсов, энергия импульса 130 мДж, температура подложки 25 °С.

### Заключение

В ходе данной работы методом ИК-спектроскопической эллипсометрии было проведено исследование углеродных алмазоподобных покрытий, нанесённых методом ИЛО для улучшения прочностных характеристик Cu и Al зеркал. В результате были определены толщины и оптические константы DLC-покрытий. С точки зрения оптических характеристик более предпочтительными являются покрытия, нанесённые на образцы Cu-1, Cu-2 и Al-1. Данные DLC-покрытия обладают наименьшими значениями показателя поглощения, что объясняется, по-видимому, меньшим количеством  $sp^2$  связей и, соответственно, меньшей концентрацией свободных электронов. Поэтому в дальнейшем планируется проведение исследований химического состава и структуры DLC-покрытий. В частности, степень алмазоподобия (соотношение  $sp^3$  и  $sp^2$  фаз) может быть определена методом спектроскопии комбинационного рассеяния.

Также следует учитывать, что в зависимости от условий эксплуатации оптических элементов будут важны их прочностные и стойкостные характеристики, такие, как твёрдость, модуль Юнга, износостойкость, стойкость к воздействию ионизирующих излучений и др. Поэтому окончательный выбор оптимальных технологических режимов нанесения алмазоподобных покрытий методом импульсного лазерного осаждения будет проводиться с учётом большего числа характеристик.

*Статья поступила в редакцию 07.07.2020 г.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon // Materials science and engineering: R: Reports. 2002. Vol. 37. Iss. 4–6. P. 129–281. DOI: 10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
2. Bewilogua K., Hofmann D. History of diamond-like carbon films – from first experiments to worldwide applications // Surface and Coatings Technology. 2014. Vol. 242. P. 214–225. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2014.01.031.
3. Grill A. Diamond-like carbon coatings as biocompatible materials – an overview // Diamond and related materials. 2003. Vol. 12. Iss. 2. P. 166–170. DOI: 10.1016/S0925-9635(03)00018-9.
4. Hauert R. DLC films in biomedical applications // Tribology of Diamond-Like Carbon Films. Boston, MA: Springer, 2008. P. 494–509. DOI: 10.1007/978-0-387-49891-1\_20.
5. Protective diamond-like carbon coatings for future optical storage disks / Piazza F., Grambole D., Schneider D., Casiraghi C., Ferrari A. C., Robertson J. // Diamond and Related Materials. 2005. Vol. 14. Iss. 3–7. P. 994–999. DOI: 10.1016/j.diamond.2004.12.028.
6. Diamond-like carbon protective anti-reflection coating for Si solar cell / Choi W. S., Kim K., Yi J., Hong B. // Materials Letters. 2008. Vol. 62. Iss. 4–5. P. 577–580. DOI: 10.1016/j.matlet.2007.06.019.
7. Упрочнение зеркальной поверхности за счет нанесения углеродной наноструктуры / Батшев В. И., Козлов А. Б., Мачихин А. С., Макеев М. О., Осипков А. С.,

- Булатов М. Ф., Кинжагулов И. Ю., Степанова К. А. // Оптика и спектроскопия. 2019. Т. 127. № 10. С. 581–585. DOI: 10.21883/OS.2019.10.48361.174-19.
8. Progress in Spectroscopic Ellipsometry: Applications from Vacuum Ultraviolet to Infrared / Hilfiker J. N., Bungay C. L., Synowicki R. A., Tiwald T. E., Herzinger C. M., Johs B., Pribil G. K., Woollam J. A. // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2003. Vol. 21. Iss. 4. P. 1103-1108. DOI: 10.1116/1.1569928.
  9. Survey of methods to characterize thin absorbing films with Spectroscopic Ellipsometry / Hilfiker J. N., Singh N., Tiwald T., Convey D., Smith S. M., Baker J. H., Tompkins H. G. // Thin Solid Films. 2008. Vol. 516. Iss. 22. P. 7979–7989. DOI: 10.1016/j.tsf.2008.04.060.
  10. Use of Molecular Vibrations to Analyze Very Thin Films with Infrared Ellipsometry / Tompkins H. G., Tiwald T., Bungay C., Hooper A. E. // The Journal of Physical Chemistry B. 2004. Vol. 108. Iss. 12. P. 3777–3780. DOI: 10.1021/jp035731a.
  11. Liu P., Zhang Y., Martin S. T. Complex Refractive Indices of Thin Films of Secondary Organic Materials by Spectroscopic Ellipsometry from 220 to 1200 nm // Environmental Science & Technology. 2013. Vol. 47. Iss. 23. P. 13594–13601. DOI: 10.1021/es403411e.
  12. Infrared optical properties of amorphous and nanocrystalline Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> thin films / Bright T. J., Watjen J. I., Zhang Z. M., Muratore C., Voevodin A. A., Koukis D. I., Tanner D. B., Arenas D. J. // Journal of Applied Physics. 2013. Vol. 114. Iss. 8. P. 083515. DOI: 10.1063/1.4819325.
  13. Макеев М. О., Жукова Е. А. Исследование алмазоподобных покрытий методами ИК-спектральной эллипсометрии и спектроскопии комбинационного рассеяния света // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2013. № 07. С. 229–240. DOI: 10.7463/0713.0597996.
  14. Макеев М. О., Зверев А. В., Родионов И. А. Исследование характеристик и методов нанесения резиста с применением ИК-спектральной эллипсометрии // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия: Приборостроение. 2015. № 6 (105). С. 125–134. DOI: 10.18698/0236-3933-2015-6-125-134.
  15. Ремез Л. М., Шупенев А. Е., Куликов И. В. Анализ влияния технологических параметров процесса импульсного лазерного осаждения на физико-морфологические свойства тонких пленок // Студенческая научная весна: Машиностроительные технологии: материалы Всероссийской научно-технической конференции (7–10 апреля, 2015, Москва, МГТУ им. Н. Э. Баумана) [Электронный ресурс]. URL: studvesna.ru?go=articles&id=1196 (дата обращения: 22.06.2020).
  16. Handbook of ellipsometry / ed. by H. G. Tompkins, E. A. Irene. Norwich, NY: William Andrew Publishing, Springer, 2005. 870 p.
  17. Рывкина Н. Г. Эллипсометрия в нанотехнологиях // Мир измерений. 2009. № 10. С. 19–25.
  18. IR-VASE User's Manual. USA: J. A. Woollam Co. Inc., 2006. 670 p.
  19. Wooten F. Optical Properties of Solids. New York: Academic Press, 1972. 270 p.

## REFERENCES

1. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon. In: *Materials science and engineering: R: Reports*, 2002, vol. 37, iss. 4–6, pp. 129–281. DOI: 10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
2. Bewilogua K., Hofmann D. History of diamond-like carbon films – from first experiments to worldwide applications. In: *Surface and Coatings Technology*, 2014, vol. 242, pp. 214–225. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2014.01.031.
3. Grill A. Diamond-like carbon coatings as biocompatible materials – an overview. In:

- Diamond and related materials*, 2003, vol. 12, iss. 2, pp. 166–170. DOI: 10.1016/S0925-9635(03)00018-9.
4. Hauert R. DLC films in biomedical applications. In: *Tribology of Diamond-Like Carbon Films*. Boston, MA, Springer Publ., 2008, pp. 494–509. DOI: 10.1007/978-0-387-49891-1\_20.
  5. Piazza F., Grambole D., Schneider D., Casiraghi C., Ferrari A. C., Robertson J. Protective diamond-like carbon coatings for future optical storage disks. In: *Diamond and Related Materials*, 2005, vol. 14, iss. 3–7, pp. 994–999. DOI: 10.1016/j.diamond.2004.12.028.
  6. Choi W. S., Kim K., Yi J., Hong B. Diamond-like carbon protective anti-reflection coating for Si solar cell. In: *Materials Letters*, 2008, vol. 62, iss. 4–5, pp. 577–580. DOI: 10.1016/j.matlet.2007.06.019.
  7. Batshev V. I., Kozlov A. B., Machikhin A. S., Makeev M. O., Osipkov A. S., Bulatov M. F., Kinzhagulov I. Yu., Stepanova K. A. [Reinforcing of a mirror surface via the deposition of a carbon nanostructure]. In: *Optika i spektroskopiya* [Optics and Spectroscopy], 2019, vol. 127, no. 10, pp. 581–585. DOI: 10.21883/OS.2019.10.48361.174-19.
  8. Hilfiker J. N., Bungay C. L., Synowicki R. A., Tiwald T. E., Herzinger C. M., Johs B., Pribil G. K., Woollam J. A. Progress in Spectroscopic Ellipsometry: Applications from Vacuum Ultraviolet to Infrared. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 2003, vol. 21, iss. 4, pp. 1103–1108. DOI: 10.1116/1.1569928.
  9. Hilfiker J. N., Singh N., Tiwald T., Convey D., Smith S. M., Baker J. H., Tompkins H. G. Survey of methods to characterize thin absorbing films with Spectroscopic Ellipsometry. In: *Thin Solid Films*, 2008, vol. 516, iss. 22, pp. 7979–7989. DOI: 10.1016/j.tsf.2008.04.060.
  10. Tompkins H. G., Tiwald T., Bungay C., Hooper A. E. Use of Molecular Vibrations to Analyze Very Thin Films with Infrared Ellipsometry. In: *The Journal of Physical Chemistry B*, 2004, vol. 108, iss. 12, pp. 3777–3780. DOI: 10.1021/jp035731a.
  11. Liu P., Zhang Y., Martin S. T. Complex Refractive Indices of Thin Films of Secondary Organic Materials by Spectroscopic Ellipsometry from 220 to 1200 nm. In: *Environmental Science & Technology*, 2013, vol. 47, iss. 23, pp. 13594–13601. DOI: 10.1021/es403411e.
  12. Bright T. J., Watjen J. I., Zhang Z. M., Muratore C., Voevodin A. A., Koukis D. I., Tanner D. B., Arenas D. J. Infrared optical properties of amorphous and nanocrystalline Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> thin films. In: *Journal of Applied Physics*, 2013, vol. 114, iss. 8, pp. 083515. DOI: 10.1063/1.4819325.
  13. Makeev M. O., Zhukova E. A. [Study of diamond-like coatings by IR-spectral ellipsometry and Raman spectroscopy]. In: *Nauka i obrazovanie: nauchnoe izdanie MGTU im. N. E. Baumana* [Science and Education of Bauman MSTU], 2013, no. 07, pp. 229–240. DOI: 10.7463/0713.0597996.
  14. Makeev M. O., Zverev A. V., Rodionov I. A. [Research into characteristics and methods of resist coating by infrared spectral ellipsometry]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. N. E. Baumana. Seriya: Priborostroenie* [Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Instrument Engineering], 2015, no. 6 (105), pp. 125–134. DOI: 10.18698/0236-3933-2015-6-125-134
  15. Remez L. M., Shupenev A. E., Kulikov I. V. [Analysis of the influence of technological parameters of the pulsed laser deposition process on the physico-morphological properties of thin films]. In: *Studencheskaya nauchnaya vesna: Mashinostroitel'nye tekhnologii: materialy Vserossiiskoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii (7–10 aprelya, 2015, Moskva, MGTU im. N. E. Baumana)* [Student Scientific Spring: Engineering Technologies: Materials of the All-Russian Scientific and Technical Conference (April 7–10, 2015, Moscow, Bauman Moscow State Technical University)]. Available at: studvesna.ru?go=articles&id=1196 (accessed: 22.06.2020).

16. Tompkins H. G., Irene E. A., eds. Handbook of ellipsometry. Norwich, NY, William Andrew Publishing, Springer Publ., 2005. 870 p.
17. Ryvkina N. G. [Ellipsometry in nanotechnology]. In: *Mir izmerenii* [Measurements World], 2009, no. 10, pp. 19–25.
18. IR-VASE User's Manual. USA, J. A. Woollam Co. Inc. Publ., 2006. 670 p.
19. Wooten F. Optical Properties of Solids. New York, Academic Press Publ., 1972. 270 p.

---

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Николаева Дарья Владимировна* – студент департамента механики и мехатроники Российского университета дружбы народов;  
e-mail: darnik.dn2@gmail.com;

*Генералов Дмитрий Владимирович* – студент департамента механики и мехатроники Российского университета дружбы народов;  
e-mail: 1032181886@pfur.ru;

*Паршин Богдан Александрович* – студент факультета «Радиоэлектроника и лазерная техника» Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана (национального исследовательского университета);  
e-mail: bodya67rus97@bk.ru;

*Макеев Мстислав Олегович* – кандидат технических наук, начальник сектора испытаний, измерений и аналитики лаборатории «Технологии маскирующих материалов» РУНЦ «Безопасность» Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана (национального исследовательского университета); доцент департамента механики и мехатроники Российского университета дружбы народов;  
e-mail: mc.stiv@gmail.com

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Daria V. Nikolaeva* – student, Department of Mechanics and Mechatronics, Peoples' Friendship University of Russia;  
e-mail: darnik.dn2@gmail.com;

*Dmitrii V. Generalov* – student, Department of Mechanics and Mechatronics, Peoples' Friendship University of Russia;  
e-mail: 1032181886@pfur.ru;

*Bogdan A. Parshin* – student, the faculty “Radio electronics and laser technology”, Bauman Moscow State Technical University;  
e-mail: bodya67rus97@bk.ru;

*Mstislav O. Makeev* – Cand. Sci. (Engineering), Assoc. Prof., Head of the Sector for Testing, Measurements and Analytics, the Laboratory “Technologies of Masking Materials” of the Regional educational and scientific center “Security”, Bauman Moscow State Technical University; Assoc. Prof., Department of Mechanics and Mechatronics, Peoples' Friendship University of Russia;  
e-mail: mc.stiv@gmail.com.

**ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ**

Николаева Д. В., Генералов Д. В., Паршин Б. А., Makeev М. О. Исследование физических свойств углеродных алмазоподобных покрытий, нанесённых методом импульсного лазерного осаждения // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 3. С. 53–64.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-53-64

**FOR CITATION**

Nikolaeva D. V., Generalov D. V., Parshin B. A., Makeev M. O. Investigation of physical properties of carbon diamond-like coatings applied by pulsed laser deposition // Bulletin of Moscow State Regional University. Series: Physics and Mathematics. 2020. no. 3. pp. 53–64.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-53-64

УДК 530.145.6+537.21

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-65-73

## ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ НА ПРИМЕРЕ ЯДРА УРАНА

**Завитаев Э. В., Русаков О. В., Уткин А. И.**

*Государственный гуманитарно-технологический университет  
142611, Московская обл., г. Орехово-Зуево, ул. Зелёная, д. 22. Российская  
Федерация*

### **Аннотация.**

**Целью** статьи является рассмотрение упрощённой модели туннелирования  $\alpha$ -частицы в ядре урана.

**Процедура и методы.** На основе совмещения двух квантово-механических моделей выполнен расчёт прозрачности потенциального барьера как функции главного квантового числа.

**Результаты.** Рассчитана прозрачность потенциального барьера для  $\alpha$ -частицы в поле ядерных сил урана в зависимости от главного квантового числа.

**Теоретическая значимость.** Построена функциональная зависимость прозрачности барьера от главного квантового числа; проведено обсуждение полученных результатов.

**Ключевые слова:** волновая функция, плотность вероятности, потенциальная яма, потенциальный барьер,  $\alpha$ -распад, прозрачность барьера, главное квантовое число

## THE TUNNEL EFFECT FOR EXAMPLE OF A URANIUM NUCLEUS

**E. Zavitaev, O. Rusakov, A. Utkin**

*State University of Humanities and Technology  
22 Zelenaya ulitsa, Orekhovo-Zuyevo 142611, Moscow Region, Russian Federation*

### **Abstract.**

**Aim** of the article is to consider a simplified model of tunneling of an  $\alpha$ -particle in the uranium nucleus.

**Methodology.** Based on the combination of two quantum-mechanical models, the transparency of the potential barrier as a function of the main quantum number is calculated.

**Results.** The transparency of the potential barrier for  $\alpha$ -particle in the field of nuclear forces of uranium is calculated depending on the main quantum number.

**Research implications.** The functional dependence of the barrier transparency on the main quantum number is constructed, and the results obtained are discussed.

**Keywords:** wave function, probability density, potential well, potential barrier,  $\alpha$ -decay, the transparency of the barrier, main quantum number

## Введение

В настоящее время активно развивается наноэлектроника [6] на основе квантово-механических явлений, таких, как туннельный эффект и др. Это связано с важным прикладным значением квантово-механических задач, например, они используются в объяснении  $\alpha$ -распада, эффекта Джозефсона и в современных технологиях (туннельный диод, растровый туннельный микроскоп и др.). Поэтому к качеству, параметрам и свойствам таких приборов предъявляются довольно высокие требования [2; 3].

Подробное изучение квантово-механических эффектов позволяет иметь более детальное представление о явлениях микромира. В данной работе на основе квантово-механических моделей, таких, как потенциальная яма бесконечной глубины и потенциальный барьер, выполнен расчёт прозрачности барьера ядра урана, как функции главного квантового числа, определяющего энергию  $\alpha$ -частицы в потенциальной яме, и текущего расстояния, отсчитываемого от центра ядра.

## Постановка задачи

Рассматривается упрощённая модель ядра урана радиуса  $R$ , в поле ядерных сил которого образуется  $\alpha$ -частица массы  $m$ , на основе совмещения двух квантово-механических моделей: потенциальная яма бесконечной глубины и потенциальный барьер поля ядра урана.

Как известно из курса квантовой механики [1], потенциальная яма – это такая область пространства, где присутствует локальный минимум потенциальной энергии частицы, и где её полная энергия принимает дискретные значения:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1)$$

где  $L$  – ширина потенциальной ямы,  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж · с – постоянная

Планка-Дирака,  $m$  – масса частицы,  $n$  – главное квантовое число.

Причём каждому значению энергии  $E_n$  соответствует собственная волновая функция  $\psi_n(x)$ , описывающая данное состояние. Эта функция, по сути, является математической формой, с помощью которой можно описывать эволюцию состояния квантово-механической системы. Положив потенциальную энергию частицы внутри ямы  $U(x) = 0$ , данную функцию можно найти как решение стационарного уравнения Шредингера [4; 5]:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0. \quad (2)$$

Отсюда волновая функция  $\alpha$ -частицы имеет вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L} x, \quad (3)$$

где  $L$  – ширина потенциальной ямы;  $n$  – главное квантовое число, определяющее количество гребней для функции  $|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi n}{L} x$  (см. рис. 1).

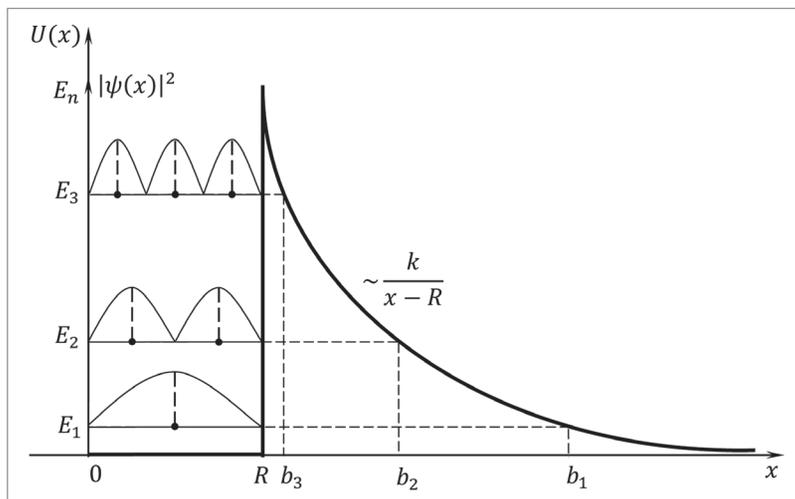


Рис. 1. / Fig. 1. Схема туннелирования  $\alpha$ -частицы в поле ядра урана. / Scheme of tunneling of an  $\alpha$ -particle in the field of a uranium nucleus.

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Рассмотрим  $\alpha$ -распад, то есть самопроизвольное испускание ядром урана ядер атома гелия  ${}^4_2\text{He}$ . Просачивание  $\alpha$ -частицы происходит благодаря туннельному эффекту. Для  $\alpha$ -частицы ядро атома урана, в котором она находится, – это потенциальная яма, а граница между ядром и внешним пространством – потенциальный барьер, через который ядру  ${}^4_2\text{He}$  нужно пройти. Точно определить нахождение  ${}^4_2\text{He}$  в ядре урана невозможно в силу соотношения неопределённостей Гейзенберга, поэтому внутри потенциальной ямы строится вышеописанная плотность вероятности  $|\psi_n(x)|^2$  обнаружить частицу в заданном квантовом состоянии (рис. 1).

Спад потенциального барьера за пределами ядра урана (рис. 1), образованного сильным взаимодействием, следует из-за кулоновского отталкивания между  $\alpha$ -частицей и протонами в ядре [8].

Таким образом, ядро урана радиуса  $R$  является барьером для  $\alpha$ -частицы в силу того, что ядерное притяжение на расстояниях  $10^{-16} \div 10^{-15}$  метра сильнее кулоновского отталкивания в десятки-сотни раз. Поэтому частица, взяв энергию у соседних нуклонов (например, в результате поглощения ядром электрона или высокоэнергетичного  $\gamma$ -кванта), может перейти с основного уровня  $E_1$  на  $E_2$  (или  $E_3, E_4, \dots$ ) и за счёт этого проникнуть сквозь указанный барьер с большей вероятностью [9; 10].

Исходя из вышесказанного, цель данного исследования – выяснить функциональную зависимость между прозрачностью  $D$  потенциального барьера

$\alpha$ -частицы в поле ядерных сил урана от её главного квантового числа  $n$  и представить зависимость  $D(n)$  графически.

### Расчёт ширины и прозрачности барьера

Рассчитаем ширину и прозрачность барьера в условиях предложенной нами модели. Положив для определённости в формулах (1) и (3) ширину ямы  $L = R$  (см. рис. 1.), рассмотрим задачу по просачиванию  $\alpha$ -частицы через потенциальный барьер ядерных и кулоновских сил ядра урана  ${}_{92}^{238}U$  ( $A \approx 238$ ,  $z = 92$ ).

Вероятность пройти через барьер  $D$  (прозрачность барьера) определяется соотношением [7]:

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^{b_n} \sqrt{2m(U(x) - E_n)} dx\right), \quad (4)$$

где  $U(x) = \frac{k}{x-R} \left( k \approx \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} = \left. \begin{matrix} z_1 = 90 \\ z_2 = 2 \end{matrix} \right) = 4,1 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{м} \right.$  – постоянная, за-

висящая от заряда ядра и вылетевшей частицы,  $m \approx 4$  а.е.м. – масса  $\alpha$ -частицы (1 а.е.м.  $\approx 1,6 \cdot 10^{-27}$  кг),  $E_n$  – определяется формулой (1).

Пределы интегрирования, как видно на рис. 1, принимают следующие значения:  $a = L = R$ ,  $b = \{b_1, b_2, b_3, \dots\}$ . Найдём  $b = \{b_1, b_2, b_3, \dots, b_n\}$ , приравняв графики функций  $E_n$  и  $U(x)$  в точке  $b$  (см. рис. 1), т. е.

$$E_n = U(b_n) \Rightarrow \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \Big|_{L=R} = \frac{k}{x-R} \Big|_{x=b_n} \Rightarrow b_n = R + \frac{2kmR^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

или

$$b_n = R + \frac{C \cdot R}{n^2} = R \left( 1 + \frac{C}{n^2} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5)$$

где  $R \approx rA^{1/3} \approx 9,3 \cdot 10^{-15}$  м – радиус ядра урана ( $r \approx 1,5 \cdot 10^{-15}$  м – средний радиус нуклона в ядре),  $C = \frac{2mkR}{\pi^2 \hbar^2} \approx \frac{8 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} \cdot 4,1 \cdot 10^{-26} \cdot 9,3 \cdot 10^{-15}}{3,14^2 \cdot 1,05^2 \cdot 10^{-68}} \approx 46,6$  – безразмер-

ная константа.

Тогда ширина барьера зависит от  $n$  и определяется выражением:

$$\Delta_n = b_n - a = |a = R| = R + \frac{2kmR^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} - R = \frac{2kmR^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

или

$$\Delta_n = R \left( 1 + \frac{C}{n^2} \right) - R = \frac{C \cdot R}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6)$$

откуда для урана атомной массы  $A \approx 238$  и радиуса  $R \approx 9,3 \cdot 10^{-15}$  м найдём:

$$\Delta_n = b_n - a = |a = R| = \frac{2kmR^2}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{8kmR^2}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \left| \frac{m \approx 4 \text{ а.е.м}}{1 \text{ а.е.м} \approx 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг}} \right| \approx$$

$$\approx \frac{32kR^2 \cdot 1 \text{ а.е.м}}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \approx \left| \begin{array}{l} k \approx \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} = 4,1 \cdot 10^{-26} \text{ Дж} \cdot \text{м} \\ R \approx rA^{1/3} \approx 9,3 \cdot 10^{-15} \text{ м} \end{array} \right| \approx$$

$$\approx \frac{32 \cdot 4,1 \cdot 10^{-26} \cdot (9,3 \cdot 10^{-15})^2 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}}{(6,63 \cdot 10^{-34})^2} \cdot \frac{1}{n^2} \approx \frac{428,5 \cdot 10^{-15}}{n^2} \text{ м} \approx \frac{428,5}{n^2} \text{ фм.} \quad (7)$$

Из (7) рассчитаем ширину барьера:

$$\begin{cases} \Delta_1 \approx 428500 \text{ ам,} & \text{при } n = 1, \\ \Delta_{10} \approx 4285 \text{ ам,} & \text{при } n = 10, \\ \Delta_{100} \approx 42,85 \text{ ам,} & \text{при } n = 100, \\ \Delta_{1000} \approx 0,4285 \text{ ам,} & \text{при } n = 1000, \end{cases}$$

т. е. при  $n \rightarrow \infty$  ширина барьера  $\Delta_\infty \rightarrow 0$ .

Аналогично, разность энергий в формуле (4) будет равна:

$$U(x) - E_n = \frac{k}{x-R} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (8)$$

т. е. она уменьшается с ростом главного квантового числа  $n$  (см. рис. 1).

Подставив  $a = R$ , (5) и (8) в (4), найдём прозрачность барьера  $D$ , соответствующую энергии частицы  $E_n$ , определяемую равенством (1):

$$= D_0 \left| \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_R^{b_n} \sqrt{2m \left( \frac{k}{x-R} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} n^2 \right)} dx \right) \right|^2 =$$

$$= D_0 \left| \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_R^{R(1+C/n^2)} \sqrt{\frac{2mk}{x-R} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{R^2} n^2} dx \right) \right|^2 =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \xi = \frac{x}{R}, \quad d\xi = \frac{dx}{R} \\ \xi_1 = \frac{R}{R} = 1, \quad \xi_2 \approx \frac{R(1+C/n^2)}{R} = 1 + \frac{C}{n^2} \end{array} \right| =$$

$$= D_0 \left| \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_1^{1+C/n^2} \sqrt{\frac{2mk}{(\xi-1)R} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{R^2} n^2} R d\xi \right) \right|^2 =$$

$$\begin{aligned}
 &= D_0 \left| \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_1^{1+C_*/n^2} \sqrt{\frac{2mkR}{\xi-1} - \pi^2 \hbar^2 n^2} d\xi \right) \right|^2 = \\
 &= D_0 \left| \exp \left( -\pi \int_1^{1+C_*/n^2} \sqrt{\frac{2mkR}{\pi^2 \hbar^2 (\xi-1)} - n^2} d\xi \right) \right|^2 \approx \\
 &\approx D_0 \left| \exp \left( -\pi \int_1^{1+C_*/n^2} \sqrt{\frac{C_*}{\xi-1} - n^2} d\xi \right) \right|^2.
 \end{aligned}$$

Вычислим интеграл в последней формуле  $\int_1^{1+C_*/n^2} \sqrt{\frac{C_*}{\xi-1} - n^2} d\xi$ , где  $\xi$  – безразмерная текущая координата, отсчитываемая от центра ядра. Для этого делаем замену переменной интегрирования:  $\xi = 1 + \frac{C_*}{n^2} \cos^2 \varphi$ . При этом

$\varphi \in \left[ 0, \frac{\pi}{2} \right)$ . И  $\xi_1 \rightarrow 1$  отвечает  $\varphi_1 \rightarrow \frac{\pi}{2}$ , а  $\xi_2 = 1 + \frac{C_*}{n^2}$  отвечает  $\varphi_2 = 0$ . Имеем:

$d\xi = \xi'(\varphi) d\varphi = -\frac{C_*}{n^2} \sin(2\varphi) d\varphi$ , и тогда интеграл

$$\begin{aligned}
 \int_1^{1+C_*/n^2} \sqrt{\frac{C_*}{\xi-1} - n^2} d\xi &= \int_{\pi/2}^0 \sqrt{\frac{n^2}{\cos^2 \varphi} - n^2} \left( -\frac{C_*}{n^2} \right) \sin(2\varphi) d\varphi = \frac{2C_*}{n} \int_0^{\pi/2} \operatorname{tg} \varphi \sin \varphi \cos \varphi d\varphi = \\
 &= \frac{2C_*}{n} \int_0^{\pi/2} \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{C_*}{n} \int_0^{\pi/2} (1 - \cos(2\varphi)) d\varphi = \frac{\pi C_*}{2n}.
 \end{aligned}$$

Окончательно получим

$$D_n = D_0 \left| \exp \left( -\frac{\pi^2 C_*}{2n} \right) \right|^2, \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (9)$$

где  $D_0 \approx 1$ ,  $C_* \approx 46,6$ .

### Заключение

Найденная функция  $D_n$  (формула (9)) позволяет рассчитать вероятность просачивания  $\alpha$ -частицы сквозь потенциальный барьер поля ядерных сил урана, схематически изображённый на рис. 1.

На рис. 2 и 3 представлена одна и та же кривая (в разных масштабах) зависимости прозрачности барьера  $D_n$  от главного квантового числа  $n$  (формула (9)).

Как видно из рис. 2,  $\alpha$ -частица, находясь в состоянии с главным квантовым числом  $n < 60$ , не может преодолеть потенциальный барьер, так как прозрач-

ность барьера близка к нулю. При достижении  $\alpha$ -частицей достаточно большой энергии, которая соответствует  $n = 2000$  (рис. 3), вероятность её просачивания через барьер составляет порядка 80%. При дальнейшем увеличении главного квантового числа  $n$  (рис. 3), кривая асимптотически стремится к 1.

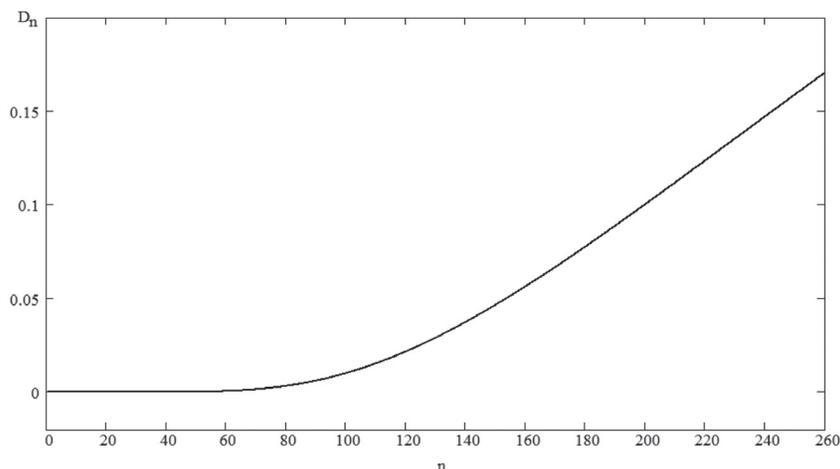


Рис. 2. / Fig. 2. Зависимость прозрачности барьера  $D_n$  для  $\alpha$ -частицы, образованного сильным взаимодействием нуклонов ядра урана, от квантового числа  $n \in (0; 260)$ . / Dependence of the transparency of the barrier  $D_n$  for an  $\alpha$ -particle formed by the strong interaction of nucleons of the uranium nucleus on the quantum number  $n \in (0; 260)$ .

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

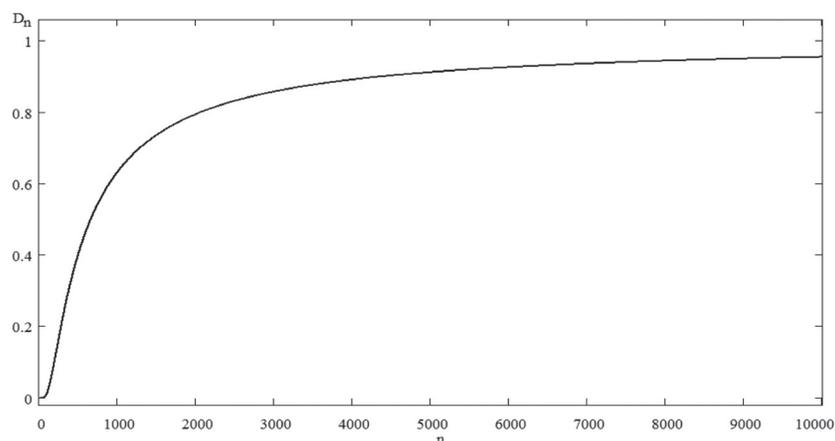


Рис. 3. / Fig. 3. Зависимость прозрачности барьера  $D_n$  для  $\alpha$ -частицы, образованного сильным взаимодействием нуклонов ядра урана, от квантового числа  $n \in (0; 10000)$ . / Dependence of the transparency of the barrier  $D_n$  for an  $\alpha$ -particle formed by the strong interaction of nucleons of the uranium nucleus on the quantum number  $n \in (0; 10000)$ .

Источник: данные авторов / Source: authors' data.

Статья поступила в редакцию 29.09.2020 г.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. М.: Ленанд, 2019. 672 с.
2. Делоне Н. Б. Туннельный эффект // Соросовский образовательный журнал. 2000. Т. 6. № 1. С. 79–84.
3. Келдыш Л. В. Динамическое туннелирование // Вестник российской академии наук. 2016. Т. 86. № 12. С. 1059–1072. DOI: 10.7868/S0869587316120057.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: учебное пособие в 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2019. 800 с.
5. Матвеев А. Н. Атомная физика. М.: Оникс, 2007. 432 с.
6. Понятов А. Сверхпроводящая электроника для суперкомпьютеров // Наука и жизнь. 2015. № 7. С. 49–63.
7. Савельев И. В. Курс общей физики. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. СПб.: Лань, 2019. 320 с.
8. Самоволик В. В. Расчет вероятности туннельного эффекта для экранированного кулоновского барьера // Труды молодых ученых Алтайского государственного университета. № 5. Барнаул: Алтайский государственный университет, 2008. С. 212–214.
9. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 1. М.: АСТ, 2019. 448 с.
10. Razavy M. Quantum theory of tunneling. Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2003. 549 p.

## REFERENCES

1. Blokhintsev D. I. *Osnovy kvantovoi mekhaniki* [Fundamentals of Quantum Mechanics]. Moscow, Lenand Publ., 2019. 672 p.
2. Delone N. B. [Tunnel effect]. In: *Sorosovskii obrazovatel'nyi zhurnal* [Soros Education Journal], 2000, vol. 6, no. 1, pp. 79–84.
3. Keldysh L. V. [Dynamic tunneling]. In: *Vestnik rossiiskoi akademii nauk* [Herald of the Russian Academy of Sciences], 2016, vol. 86, no. 12, pp. 1059–1072. DOI: 10.7868/S0869587316120057.
4. Landau L. D., Lifshits E. M. *Teoreticheskaya fizika: v 10 t. T. 3. Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya)* [Theoretical physics: in 10 volumes. Vol. 3. Quantum mechanics (nonrelativistic theory)]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2019. 800 p.
5. Matveev A. N. *Atomnaya fizika* [Atomic physics]. Moscow, Oniks Publ., 2007. 432 p.
6. Ponyatov A. [Superconducting electronics for supercomputers]. In: *Nauka i zhizn'* [Science and life], 2015, no. 7, pp. 49–63.
7. Savelev I. V. *Kurs obshchei fiziki. T. 3. Kvantovaya optika. Atomnaya fizika. Fizika tverdogo tela* [General physics course. Vol. 3. Quantum optics. Atomic physics. Solid state physics]. St. Petersburg, Lan' Publ., 2019. 320 p.
8. Samovolik V. V. [Calculation of the probability of tunneling effect for a screened Coulomb barrier]. In: *Trudy molodykh uchenykh Altaiskogo gosudarstvennogo universiteta. No. 5* [Proceedings of young scientists of the Altai State University]. Barnaul, Altai State University Publ., 2008, pp. 212–214.
9. Feynman R., Leighton R., Sands M. *Feinmanovskie lektzii po fizike. T. 1* [Feynman Lectures in Physics. Vol. 1]. Moscow, AST Publ., 2019. 448 p.
10. Razavy M. Quantum theory of tunneling. Singapore, World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2003. 549 p.

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

*Завитаев Эдуард Валерьевич* – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математики и физики Государственного гуманитарно-технологического университета;  
e-mail: eduardzavitaev@yandex.ru;

*Русаков Олег Владимирович* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и физики Государственного гуманитарно-технологического университета;  
e-mail: olegrusmail@mail.ru;

*Уткин Алексей Игоревич* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и физики Государственного гуманитарно-технологического университета;  
e-mail: aiutkin@yandex.ru.

### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

*Eduard V. Zavitaev* – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Department of Mathematics and Physics, State University of Humanities and Technology;  
e-mail: eduardzavitaev@yandex.ru;

*Oleg V. Rusakov* – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Mathematics and Physics, State University of Humanities and Technology;  
e-mail: olegrusmail@mail.ru;

*Aleksei I. Utkin* – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Mathematics and Physics, State University of Humanities and Technology;  
e-mail: aiutkin@yandex.ru.

---

### ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Завитаев Э. В., Русаков О. В., Уткин А. И. Туннельный эффект на примере ядра урана // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-математика. 2020. № 3. С. 65–73.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-65-73

### FOR CITATION

Zavitaev E. V., Rusakov O. V., Utkin A. I. The tunnel effect for example of a uranium nucleus. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*, 2020, no. 3, pp. 65–73.

DOI: 10.18384/2310-7251-2020-3-65-73



## ВЕСТНИК МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Рецензируемый научный журнал «Вестник Московского государственного областного университета» основан в 1998 г.

Сегодня Московским государственным областным университетом выпускается десять научных журналов по разным отраслям науки. Журналы включены в Перечень ВАК (составленный Высшей аттестационной комиссией при Минобрнауки РФ Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук). Журналы включены в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ).

Печатные версии журналов зарегистрированы в Федеральной службе по надзору за соблюдением законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Полнотекстовые версии журналов доступны в интернете на сайте Вестника Московского государственного областного университета ([www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru)), а также на платформах Научной электронной библиотеки ([www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)) и Научной электронной библиотеки «КиберЛенинка» (<https://cyberleninka.ru>).

---

## ВЕСТНИК МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБЛАСТНОГО УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ: ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА  
2020. № 3

Над номером работали:

Литературный редактор М.С. Тарасова  
Переводчик И.А. Улиткин  
Корректор М.С. Тарасова  
Компьютерная верстка Н.Н. Жильцов

Отдел по изданию научного журнала  
«Вестник Московского государственного областного университета»  
Информационно-издательского управления МГОУ  
105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А, офис 98  
тел. (495) 723-56-31; (495) 780-09-42 (доб. 6101)  
e-mail: [info@vestnik-mgou.ru](mailto:info@vestnik-mgou.ru)  
сайт: [www.vestnik-mgou.ru](http://www.vestnik-mgou.ru)

Формат 70x108/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура «Minion Pro».

Тираж 500 экз. Усл. п. л. 4,75, уч.-изд. л. 4,75.

Подписано в печать: 30.10.2020. Дата выхода в свет: 13.11.2020. Заказ № 2020/10-14.

Отпечатано в ИИУ МГОУ  
105005, г. Москва, ул. Радио, 10А

ISSN 2072-8387



9 772072 838027 >