

**Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
Физический факультет**

СПЕЦИАЛЬНЫЙ ПРАКТИКУМ ПО КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ

**Под редакцией
В.И. Панова и Г.Х. Китаевой**

*Допущено УМО по классическому университетскому образованию РФ
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по направлению 010700.62 «Физика»
и по специальности 010701.65 «Физика»*



Москва
2018

УДК 535.21

Авторский коллектив:

*Т.В. Долгова, А.А. Ежов, Г.Х. Китаева, К.А. Кузнецов, С.П. Кулик,
Е.В. Любин, Д.А. Музыченко, А.И. Орешкин, А.Н. Пенин, А.А. Федянин,
В.И. Панов.*

Специальный практикум по квантовой электронике: Учеб. пособие. / Под ред. В.И. Панова и Г.Х. Китаевой. – М.: Физический факультет МГУ, 2018. – 160 с. : 48 ил., 4 табл.

ISBN 978-5-8279-0151-8

Учебное пособие содержит описание девяти задач специального физического практикума по квантовой электронике. Задачи разделены на четыре раздела, каждый из которых сопровождается введением, в котором кратко изложены теоретические аспекты соответствующих задач. Представленные задачи знакомят студентов с экспериментальными методами исследования в таких практически важных направлениях, как квантовая оптика, физика наносистем и квантовая электроника. Они дают представление об эффектах параметрического рассеяния света, парадоксе Эйнштейна–Подольского–Розена, управляемых классических корреляциях, нарушениях неравенств Белла, квазисинхронных параметрических процессах, о методах диагностики электрофизических параметров наноматериалов, используемых в микроэлектронике и квантовой электронике. Целью практикума является ознакомление студентов и аспирантов с одним из фундаментальных явлений современной нелинейной и квантовой оптики — параметрическим рассеянием света в средах без центра симметрии, ознакомление с методами применения сканирующих зондовых микроскопов — атомно-силового, сканирующего туннельного, оптического ближнего поля, и методом оптического пинцета.

Учебное пособие предназначено для студентов старших курсов вузов и аспирантов физических специальностей.

Рецензенты:

*профессор В.А. Макаров
профессор А.В. Андреев*

ISBN 978-5-8279-0151-8

© Физический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова, 2018 г.
© Коллектив авторов, 2018 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие.....	5
------------------	---

Часть 1. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА

Теоретическое введение.....	6
ЗАДАЧА 1.1. Параметрическое рассеяние и рассеяние света на поляритонах.....	33
ЗАДАЧА 1.2. Параметрическое рассеяние света в квазисинхронных структурах	38
ПРИЛОЖЕНИЕ	41
Литература	42

Часть 2. ПАРАДОКС ЭЙНШТЕЙНА-ПОДОЛЬСКОГО-РОЗЕНА И НЕРАВЕНСТВА БЕЛЛА

Теоретическое введение.....	44
ЗАДАЧА 2.1. Управляемые классические корреляции типа Эйнштейна–Подольского–Розена.....	63
ЗАДАЧА 2.2. Нарушение неравенства Белла	68
ПРИЛОЖЕНИЕ 1	72
ПРИЛОЖЕНИЕ 2	74
ПРИЛОЖЕНИЕ 3	75
Литература.....	76

Часть 3. ОСНОВЫ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Теоретическое введение.....	77
Литература	111
ЗАДАЧА 3.1. Изучение поверхностных наноструктур методом атомно-силовой микроскопии.....	112
Литература	120
ЗАДАЧА 3.2. Ознакомление с работой апертурного сканирующего оптического микроскопа ближнего поля	121
Литература	127

ЗАДАЧА 3.3. Исследование поверхностных наноструктур методом сканирующей туннельной микроскопии	129
--	-----

Литература	136
------------------	-----

ЗАДАЧА 3.4. Квантово-механическое моделирование свойств нанообъектов	137
--	-----

Литература	144
------------------	-----

Часть 4. МЕТОД ОПТИЧЕСКОГО ПИНЦЕТА

Теоретическое введение.....	146
-----------------------------	-----

ЗАДАЧА 4.1. Оптический захват и манипулирование одиночными микро- и наночастицами в двойном оптическом пинцете.....	152
---	-----

Литература	157
------------------	-----

Предисловие

Специальный практикум по квантовой электронике предназначен для студентов старших курсов и аспирантов физических специальностей. Он содержит описание девяти задач. Представленные задачи знакомят студентов с экспериментальными методами исследования в таких практически важных направлениях, как квантовая оптика, физика наносистем и квантовая электроника. Задачи дают представление об эффектах параметрического рассеяния света, парадоксе Эйнштейна–Подольского–Розена и неравенствах Белла, а также о методах диагностики электрофизических параметров наноматериалов, используемых в микроэлектронике и квантовой электронике. В задачи данного практикума входит ознакомление студентов и аспирантов с одним из фундаментальных явлений нелинейной и квантовой оптики — параметрическим рассеянием света в средах без центра симметрии: получение навыков исследования корреляций, наблюдения и регистрации частотно-угловых спектров параметрического рассеяния. Практикум знакомит с работой современных сканирующих зондовых микроскопов: атомно-силового, сканирующего туннельного микроскопов и микроскопа оптического ближнего поля, а также дает представление о практике применения метода оптического пинцета.

Учебное пособие разбито на 4 части: параметрическое рассеяние света (1), парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена и неравенства Белла (2), основы сканирующей зондовой микроскопии на примерах использования атомно-силовой микроскопии и оптической микроскопии ближнего поля для изучения свойств наноструктур и метаматериалов (3), и метод манипулирования нанообъектами и их диагностики с помощью оптического пинцета (4). Каждая часть включает теоретическое введение, содержащее информацию, необходимую для общего понимания физики процессов и выполнения конкретных задач специального практикума.

Часть 1. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА

Теоретическое введение

1. Параметрическое рассеяние света

Параметрическое рассеяние (ПР) света — процесс неупругого взаимодействия электромагнитного излучения с веществом, в результате которого происходит распад части фотонов падающего излучения («накачки») на пары фотонов с меньшими частотами [1]. При этом в стационарных условиях в точности выполняется закон сохранения энергии:

$$\hbar\omega_p = \hbar\omega_s + \hbar\omega_i. \quad (1.1)$$

Это условие связывает частоту накачки $\omega_{pump} \equiv \omega_p$ с суммой частот рождающихся фотонов ω_s и ω_i . При этом каждая из частот ω_s или ω_i сама по себе может принимать различные значения в интервале от 0 до частоты накачки. Обычно фотон с большей частотой называют сигнальным ($\omega_{signal} \equiv \omega_s$), а с меньшей — холостым ($\omega_{idler} \equiv \omega_i$), так что $\omega_s > \omega_p / 2$, а $\omega_i < \omega_p / 2$. При условии $\omega_s = \omega_i = \omega_p / 2$ имеет место частотное вырождение.

Процесс параметрического рассеяния возможен только в средах с квадратичным по полю нелинейно-оптическим откликом. В идеальном случае неограниченной среды выполняется не только закон сохранения энергии (1.1), но и закон сохранения импульсов фотонов

$$\hbar\mathbf{k}_p = \hbar\mathbf{k}_s + \hbar\mathbf{k}_i, \quad (1.2)$$

следующий из обычного условия фазового (пространственного) синхронизма для волновых векторов сигнальных ($\mathbf{k}_s$), холостых волн ($\mathbf{k}_i$) и накачки ($\mathbf{k}_p$), участвующих в процессе трехчастотного нелинейно-оптического взаимодействия. В пространственно-ограниченной среде это условие может выполняться с точностью до небольшой расстройки синхронизма $\Delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_p - \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i$. В случае, когда

поглощения волн в среде нет, расстройка обратно пропорциональна длине области нелинейного взаимодействия L : $\Delta k \approx 2\pi / L$.

Вероятность процессов распада фотонов накачки при параметрическом рассеянии обычно невелика и зависит от величины квадратичной восприимчивости среды, интенсивности накачки, степени выполнения условий пространственного синхронизма. Однако характерной особенностью рассеянного излучения является тот факт, что если распад происходит, то рассеянные фотоны появляются строго парами. Такие состояния поля называют бифотонами. Если эффектами поглощения, рассеяния, отражения родившихся фотонов в среде можно пренебречь, то число сигнальных фотонов на выходе среды будет в точности равно числу холостых.

Теоретическое описание параметрического рассеяния света невозможно в рамках классической нелинейной оптики, без привлечения квантово-оптических представлений. Роль дополнительного к накачке «затравочного» излучения, необходимого для классического описания трехчастотного процесса, при параметрическом рассеянии играют квантовые флуктуации электромагнитного поля. Этим данный эффект отличается от большинства других нелинейно-оптических трехчастотных волновых процессов. Последовательное квантово-оптическое описание предсказывает не только эффективность процесса, но и необычные корреляционные свойства рассеянного поля. Связанными между собой оказываются не только частоты и волновые вектора, но и статистические флуктуации полей в сигнальном и холостом каналах.

Первым возможность параметрического рассеяния света предсказал Д.Н. Клышко, используя аппарат теории возмущения [1]. Это описание справедливо в приближении «слабого усиления», когда количество рождающихся сигнальных и холостых фотонов мало и их дальнейшая роль в нелинейно-оптическом процессе распада фотонов накачки незначительна. Такой режим называют режимом спонтанного параметрического рассеяния (СПР). Гамильтониан возмущения, отвечающий за СПР в дипольном приближении, можно представить в виде:

$$\hat{H} = - \int_V d^3r \chi^{(2)} E_p^{(+)}(r, t) \hat{E}_s^{(-)}(r, t) \hat{E}_i^{(-)}(r, t) + \text{э. с.} \quad (1.4)$$

где $E_p(r, t)$ — классическое поле накачки, $\hat{E}_s$ и $\hat{E}_p$ — операторы полей сигнальной и холостой волн, $\chi^{(2)}$ — эффективная квадратичная восприимчивость среды (рассчитывается как свертка тензора квадратичной восприимчивости с ортами поляризации сигнальных, холостых волн и волны накачки), V — объем области взаимодействия волн в нелинейной среде. Индексами (+) и (–) обозначены, соответственно, положительно- и отрицательно-частотные части полей. Волновая функция рассеянного поля в первом порядке теории возмущений определяется следующим образом:

$$|\psi\rangle = |0\rangle - \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right\} |0\rangle \equiv |0\rangle + \sum_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s} F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) |1\rangle_i |1\rangle_s. \quad (1.5)$$

Здесь учтено, что начальное состояние поля в сигнальных и холостых модах при СПР является вакуумным ($\sum_{\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i} |N_s, N_i\rangle \equiv |0\rangle$). Формально суммирование ведется по всем возможным модам сигнального и холостого каналов. Но $|1\rangle_i |1\rangle_s$ — двухфотонное энергетическое состояние, появляющееся на выходе среды и характеризующее отдельную бифотонную пару, рождается только в тех каналах, для которых эффективность процесса $F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$ отлична от 0. Функцию $F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$ часто называют **амплитудой бифотона**, этот термин широко используется в квантовой оптике. В простейшем приближении, когда нелинейная среда представляется в виде прозрачного слоя с неограниченными поперечными размерами, а накачка является плоской монохроматической волной, амплитуда бифотона зависит от проекции волновой расстройке на нормаль к слою Δk_x :

$$F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) = -i\beta e^{i\Delta k_x L/2} \text{sinc}(\Delta k_x L/2), \quad (1.6)$$

где $\beta \equiv \frac{2\pi\omega_s\omega_i}{c^2\sqrt{k_{sx}k_{ix}}} E_p L \chi^{(2)}$ — коэффициент, определяющий эффективность параметрического взаимодействия при точном пространственном синхронизме. В режиме СПР $\beta \ll 1$.

Число фотонов N_s в моде сигнального поля с частотой ω_s и волновым вектором $\mathbf{k}_s$ может быть найдено усреднением оператора числа фотонов $\hat{N}_s = a_s^+ a_s$:

$$N_s = \langle \psi | a_s^+ a_s | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}_i', \mathbf{k}_s'} F^*(\mathbf{k}_i', \mathbf{k}_s') \sum_{\mathbf{k}_i'', \mathbf{k}_s''} F(\mathbf{k}_i'', \mathbf{k}_s'') \langle 1 |_s \langle 1 |_i a_s^+ a_s | 1 \rangle_{i''} | 1 \rangle_{s''} = \\ = \sum_i |F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2.$$

Аналогичным образом можно рассчитать число холостых фотонов:

$$N_i = \langle \psi | a_i^+ a_i | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}_s} |F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2,$$

а также величины, характеризующие корреляционные функции сигнальных и холостых полей. Например, корреляционный момент $\langle \hat{N}_i \hat{N}_s \rangle$ для фотонов отдельных мод сигнального и холостого каналов получается равным квадрату модуля амплитуды бифотона:

$$\langle \hat{N}_i \hat{N}_s \rangle = \langle \psi | a_i^+ a_i a_s^+ a_s | \psi \rangle = |F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2.$$

Условие точного фазового синхронизма однозначно связывает поперечные компоненты волновых векторов в случае, когда объем нелинейного взаимодействия ничем не ограничен в поперечном направлении. При этом одной пространственно-частотной моде сигнального излучения соответствует только одна пространственно-частотная мода холостого излучения и двойное суммирование по модам $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s$ в выражении для волновой функции (1.5) можно заменить на простое суммирование по всем однозначно связанным парам мод. Учет ограниченности объема, в котором происходит нелинейный процесс, не только в продольном, но и в поперечном направлении (например, из-за ограниченности сечения накачки), приводит к расширению спектра параметрически связанных пространственных мод. Аналогичным образом, учет нестационарности накачки (например, при работе в импульсном режиме), приводит к формальному нарушению условия (1.1) и необходимости суммирования по различным продольным модам при расчете волновой функции (1.5). При многомодовом взаимодействии происходит пространственно-частотное «перепутывание» бифотонов, которое удобно описывать в терминах мод Шмидта [2].

Более общее описание, выходящее за рамки слабого усиления, основано на использовании уравнений для медленно меняющихся операторов Гейзенберга [3] — операторов рождения $a_s^+(x)$ и уничтожения $a_s(x)$ фотонов в моде сигнальной частоты и соответствующих операторов в моде холостой частоты $a_i^+(x)$ и $a_i(x)$:

$$\begin{aligned}\frac{da_s(x)}{dx} &= i\gamma a_i^+(x)e^{i\Delta k_x \cdot x}, \\ \frac{da_i^+(x)}{dx} &= -i\gamma^* a_s(x)e^{-i\Delta k_x \cdot x},\end{aligned}\tag{1.7}$$

где $\gamma \equiv \beta / L$. Эти уравнения можно получить, например, из широко применяющихся в нелинейной оптике уравнений для медленно меняющихся амплитуд полей. Для этого необходимо произвести замену классических амплитуд на операторы: $E_{i,s} \rightarrow \hat{E}_{i,s}^{(+)} \rightarrow ic_{k_{i,s}} a_{i,s}$, $E_{i,s}^* \rightarrow \hat{E}_{i,s}^{(-)} \rightarrow -ic_{k_{i,s}}^* a_{i,s}^+$ и учесть выражения для нормировочных коэффициентов $c_{k_{i,s}}$. Излучение лазерной накачки как при СПР, так и при параметрическом рассеянии в режиме более высокого усиления, практически не меняется после прохождения среды. Оно рассматривается как классическое поле с постоянной заданной амплитудой (E_p). Решая систему уравнений (1.7), получим выражения, связывающие операторы Гейзенберга на входе и выходе из среды для параметрического усилителя

$$\begin{aligned}a_s(L) &= Ua_s(0) + Va_i^+(0), \\ a_i^+(L) &= V^*a_s(0) + U^*a_i^+(0)\end{aligned}\tag{1.8}$$

через коэффициенты усиления и преобразования

$$\begin{aligned}U &= e^{i\Delta k \cdot L/2} \left(ch\Gamma - i \frac{\Delta k \cdot L}{2} \cdot \frac{sh\Gamma}{\Gamma} \right), \\ V &= i\beta e^{i\Delta k \cdot L/2} \frac{sh\Gamma}{\Gamma}.\end{aligned}\tag{1.9}$$

Соотношения типа (1.8) характерны для класса линейных преобразований Боголюбова. Здесь введен параметр $\Gamma \equiv \sqrt{\beta^2 - (\Delta k_x L / 2)^2}$, который определяет степень усиления волн в среде с учетом воз-

можной волновой расстройкой Δk_x . При точном пространственном синхронизме (т.е. когда $\Delta k_x = 0$) $\Gamma = \beta$, при этом $U = ch\Gamma$, $V = ish\Gamma$. В случае СПР $\beta \ll 1$. При этом из (1.9) следует, что

$$U \approx 1 + |\beta|^2 \frac{1 + i\Delta k_x L - e^{i\Delta k_x L}}{(\Delta k_x L)^2}, \text{ а коэффициент преобразования равен}$$

$V \approx i\beta e^{i\Delta k_x L/2} \text{sinc}(\Delta k_x L/2)$ и с точностью до знака совпадает с выражением (1.6) для амплитуды бифотона $F(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$, полученным методом теории возмущения.

Рассчитывать интенсивности рассеянных волн и их корреляционные свойства в общем случае ПР можно на основании соотношений (1.8) для гейзенберговских операторов, действуя ими на начальное состояние поля, которое при параметрическом рассеянии является вакуумным ($|0\rangle = \sum_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s} |0\rangle_i |0\rangle_s$). Например, среднее число сиг-

нальных фотонов при преобразовании, в котором число мод ограничивается 1 модой сигнального и 1 модой холостого канала, рассчитывается как

$$N_s = \langle 0 | a_s^\dagger(L) a_s(L) | 0 \rangle = \langle 0 | [U^* a_s^\dagger(0) + V^* a_i^\dagger(0)] [U a_s(0) + V a_i(0)] | 0 \rangle = |V|^2.$$

Помимо квантовых флуктуаций также возможны классические тепловые (планковские) флуктуации поля на достаточно низких холостых частотах. В ряде задач необходимо также учитывать фотоны от возможных внешних источников излучения холостых частот. В этих случаях справедливо более общее выражение для числа фотонов в моде сигнального излучения на выходе из рассеивающей среды:

$$N_s = |V|^2 [1 + N_i^0 + N_T(\omega_i, T)]. \quad (1.10)$$

Здесь N_i^0 — среднее число фотонов в моде излучения холостой частоты ω_i , падающего на среду вместе с накачкой, $N_T(\omega, T)$ — число фотонов в моде равновесного планковского излучения, которым описываются тепловые шумы:

$$N_T(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (1.11)$$

Таким образом, даже при отсутствии «затравочного» излучения от внешних источников на входе в рассеивающую среду ($N_i^0 = 0$ в (1.10)) на выходе появится рассеянное сигнальное излучение. Его появление на частоте ω_s можно трактовать как результат воздействия суммарного шумового поля частоты ω_i , имеющего тепловую и квантовой природу. Как видно из (1.10), эффективное число фотонов в холостой моде, создаваемое за счет квантовых флуктуаций, равно 1. Эта величина не зависит от температуры и частоты. Таким образом, эффективная яркость квантовых флуктуаций (нулевых флуктуаций электромагнитного вакуума) в процессе ПР, измеренная в квантовых единицах (числах фотонов на моду), является величиной постоянной и абсолютной.

Отметим, что эффективная яркость квантовых флуктуаций значительно превосходит яркость обычных тепловых источников излучения. Так, на частоте $10\,000\text{ см}^{-1}$ (длина волны 1 мкм) тепловой источник — абсолютно черное тело — имеет яркость в 1 фотон на моду поля при температуре около 20 000 К, а на длине волны 0.5 мкм (середина видимого диапазона) для обеспечения такой яркости его температура должна быть 40 000 К. Сравниваются яркости квантовых и тепловых флуктуаций при комнатной температуре только на длинах волн в районе 70 мкм, т.е. в далёкой инфракрасной области.

Когда среда прозрачна на всех трех частотах (ω_p , ω_s и ω_i), собственное шумовое излучение среды не оказывает влияния на интенсивность рассеянного излучения. Кроме того, можно пренебречь и влиянием тепловых флуктуаций окружающего пространства, так как частота ω_i , как правило, при ПР лежит в оптическом диапазоне частот от $\omega_p/2$ до 2000 см^{-1} (т.е. до длин волн порядка 5 мкм). При значительном уменьшении частоты, когда значения $\omega_i/2\pi$ попадают в терагерцовый диапазон и ниже, тепловые флуктуационные поля учитываются с помощью предложенного Д.Н.Клышко обобщенного закона Кирхгофа [1].

Метод спектроскопии СПР основан на измерении частотно-угловых зависимостей интенсивности сигнальных волн. Спектральная и угловая плотность мощности ($P_{\omega_s\Omega_s}$) сигнального излучения,

распространяющегося под углом θ_s , непосредственно связана с числом сигнальных фотонов в моде N_s : $P_{\omega_s \Omega_s} \sim \omega_s^3 \cos \theta_s N_s$. В направлениях точного пространственного синхронизма (1.2) амплитуда бифотона с заданными частотами ω_s , $\omega_i = \omega_p - \omega_s$ и, соответственно, плотность мощности сигнального излучения максимальны. Линию, связывающую точки максимальной интенсивности сигнала разных частот на плоскости координат ω_s, θ_s называют перестроечной кривой параметрического преобразователя частоты. Необходимость выполнения точных условий временного и пространственного синхронизма (1.1) и (1.2) для наблюдения максимальной интенсивности сигнала приводит к однозначной связи частотно-углового хода перестроечной кривой со значениями показателя преломления на сигнальных и холостых частотах. Как правило, дисперсионные характеристики кристалла в видимом диапазоне спектра сигнальных волн хорошо известны из других измерений. С учетом этих данных спектроскопия СПР позволяет по ходу перестроечной кривой определить дисперсию показателя преломления для холостых волн. Частоты этих волн могут попадать в области ИК и даже терагерцовых частот, где прямые измерения дисперсионных характеристик достаточно сложны. Анализ угловой формы линии на фиксированной частоте позволяет также определить коэффициент поглощения холостых волн. Таким образом, метод спектроскопии СПР позволяет восстановить дисперсию как мнимой, так и действительной части диэлектрической проницаемости нелинейной среды без применения соотношений Крамерса–Кронига.

Параметрическое рассеяние света можно трактовать как процесс рассеяния света на свете, точнее, рассеяния на квантовых флуктуациях электромагнитного поля. При этом частоты всех трех волн, участвующих в процессе — ω_i , ω_s , ω_p — находятся в полосе прозрачности среды. Роль среды состоит в перемешивании (благодаря нелинейной восприимчивости) разночастотных мод электромагнитного поля. Однако при приближении холостой частоты к частотам фоновых возбуждений кристалла параметрическое рассеяние приобретает характер рассеяния света на фоновых поляритонах. Рассеяние света на поляритонах (РСП) — это процесс рассеяния на собственных состояниях среды — квазичастицах, имеющих смешанную электромеханическую природу.

В принципе, фотон, вошедший в среду, уже перестаёт быть истинно фотоном. Распространяясь в среде, он «тянет» за собой волну поляризации. В результате взаимодействия с дипольно-активными возбуждениями среды скорость фотона уменьшается. Замедление это тем больше, чем сильнее фотон связан со средой, т.е. чем ближе частота холостого излучения к частотам резонансных возбуждений вещества. Величина связи фотона со средой в большой степени определяется соотношением между энергией фотона и соответствующих резонансных возбуждений среды (как электронных, так и колебательных состояний кристаллической решетки). Если частоты накачки, сигнальной и холостой волн попадают в полосу прозрачности, связь их со средой предельно мала. Энергия возбуждений, распространяющихся в среде, носит преимущественно электромагнитный характер и имеет место обычное параметрическое рассеяние света. Однако, чем ближе частота сигнального излучения подходит к частоте накачки, а уменьшающаяся при этом частота холостого фотона приближается к частотам колебательных возбуждений кристалла, тем сильнее становятся поляритонные эффекты. Вместо почти свободного холостого фотона образуется новое элементарное возбуждение — поляритон, энергия которого имеет как электромагнитную, так и механическую составляющие. Чем ближе частота поляритона к частоте оптического фонона, тем большую часть его энергии составляет вклад механических колебаний и тем меньше становится скорость распространения (групповая скорость), уменьшающаяся до нуля при точном совпадении частоты поляритона с резонансной частотой оптического фонона.

Формально, интенсивность сигнальных волн при РСП описывается суммой вкладов от параметрического и комбинационного рассеяния света, которые могут также интерферировать между собой [4,5]. Однако присутствие комбинационного вклада существенно лишь в непосредственной близости холостых частот к частотам фононов, когда разница частот не превышает нескольких десятков см^{-1} . В остальных, существенно более широких спектральных областях дисперсию поляритонов можно определять, пользуясь обычными соотношениями для формы линии СПР. При этом в случае РСП берутся соотношения, учитывающие эффекты поглощения холостых волн.

2. Частотно-угловой спектр СПР

В реальных экспериментах приходится иметь дело не с одной модой поля, а с набором мод, занимающих определенный спектральный и пространственный интервалы. Переход от числа фотонов в моде к мощности излучения частоты ω_s , рассеянного в направлении $\mathbf{k}_s / |\mathbf{k}_s|$, приходящейся на бесконечно малые спектральный $d\omega_s$ и угловой $d\theta_s$ интервалы, приводит к следующему выражению для дифференциальной мощности сигнального излучения:

$$P_{\omega\Omega} = \frac{2\hbar\omega_s^4\omega_i |\chi_{eff}^{(2)}|^2 P_p L^2}{c^5 n_i n_s \cos\theta_i} g(\Delta k_x \cdot L, y_i), \quad (1.12)$$

где P_p — мощность накачки. Форм-фактор $g(x, y)$ описывает пространственно-частотное распределение интенсивности сигнального излучения. В случае, когда поглощением волн можно пренебречь, форм-фактор $g(x, y) = g(x, 0)$ ($x \equiv \Delta k_x \cdot L$) принимает вид, характерный для параметрических процессов:

$$g(x, 0) = \left(\frac{\sin(x/2)}{x/2} \right)^2. \quad (1.13)$$

В случае, когда среда поглощает излучение на частоте холостой волны (частично или полностью), процедуры квантования полей и определения квантово-механических средних значительно усложняются. Расчет формы линии в этом случае можно проводить с использованием флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ) [1]. Как правило, суммарное поглощение на длине кристалла велико и можно пользоваться выражением для $g(\Delta k_x \cdot L, y_i)$ — фактора в выражении (1.12) в пределе, когда $y_i \equiv \frac{\alpha(\omega_i) \cdot L}{2 \cos\theta_i} \gg 1$ (здесь

$\alpha(\omega_i) \approx \frac{\omega_i \cdot \varepsilon(\omega_i)''}{c \sqrt{\varepsilon(\omega_i)'}}$ — коэффициент поглощения Бугера, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$ — комплексная диэлектрическая проницаемость нелинейной среды):

$$g(x, y) = \frac{2y}{x^2 + y^2}. \quad (1.14)$$

Как правило, в эксперименте регистрируются угловые распределения дифференциальной мощности $P_{\omega\Omega}(\theta_s)$, измеренные на различных фиксированных частотах сигнала ω_s . Как видно из (1.14), поглощение на холостой частоте приводит к лоренцевой форме линии таких распределений — в отличие от формы, описываемой функцией sinc^2 в прозрачном кристалле.

В соответствии с (1.12), частотно-угловое распределение интенсивности рассеяния зависит от таких параметров рассеивающей среды, как показатели преломления (n), поглощения (α), квадратичная восприимчивость ($\chi_{\text{eff}}^{(2)}$). Следовательно, исследуя частотно-угловой (частотно-пространственный) спектр СПР, можно определять все перечисленные параметры среды. При переходе от спонтанного параметрического рассеяния к рассеянию света на поляритонах на вид спектра СПР начинают оказывать влияние оптические фононы — через характерное изменение дисперсии мнимой и действительной частей диэлектрической проницаемости. Появляется возможность определять такие важные их параметры, как резонансные частоты, константы затухания, резонансные вклады колебаний в линейную (силу осциллятора и дипольный момент), квадратичную и кубичную (рамановскую) восприимчивости.

Показатель преломления. При изучении спектров СПР обычно реализуется ситуация, когда частоты ω_p и ω_s попадают в полосу прозрачности исследуемого кристалла в середине оптического диапазона. В этой части спектра показатели преломления n_p и n_s могут быть измерены с высокой точностью традиционными методами, и, как правило, заранее известны из литературы. Отсюда следует возможность определения по спектру СПР величины n_i на частоте холостой волны ω_i , которая может попасть в инфракрасную, и даже в терагерцовую области спектра. В том числе и в частотную область, занимаемую оптическими фононами и характеризующуюся большим поглощением. Наличие поглощения затрудняет, а часто делает невозможным прямое измерение показателя преломления методами

линейной оптики. Не говоря уже о том, что детектирование излучения в ИК-диапазоне, в пределах 10–33 мкм, и далее в терагерцовом диапазоне (33 мкм–1 мм) представляет собой крайне сложную процедуру.

Измерение n_i по спектрам СПР основано на следующем их свойстве. Максимум интенсивности рассеяния на частоте ω_s (частоте сигнальной волны, однозначно связанной условием (1.1) с частотой ω_i , на которой проводится измерение показателя преломления) имеет место при равенстве нулю волновой расстройки $\Delta \mathbf{k}$. Отсюда, с учетом (1.1) и теоремы косинусов, следует:

$$n_i = \frac{c}{\omega_i} |\mathbf{k}_i| = \frac{1}{\omega_i} \sqrt{(n_p \omega_p)^2 + (n_s \omega_s)^2 - 2n_s n_p \omega_s \omega_p \cos \theta_{s0}} \quad (1.15)$$

(θ_{s0} — угол между $\mathbf{k}_s$ и $\mathbf{k}_p$ внутри кристалла, определяемый по максимуму углового распределения интенсивности СПР на частоте ω_s). Зная показатели преломления $n_s(\omega_s)$ на всех частотах перестроенной кривой $\theta_{s0}(\omega_s)$ и пользуясь соотношением (1.15), легко определить дисперсию $n_i(\omega_i)$. Измеренный таким образом показатель преломления будет связан с диэлектрической проницаемостью кристалла $\varepsilon(\omega_i)$ соотношением $n_i(\omega_i) = \sqrt{\varepsilon'(\omega_i)}$. $\varepsilon'(\omega_i)$ — действительная часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega_i) = \varepsilon'(\omega_i) + i\varepsilon''(\omega_i)$, которая в непосредственной близости от частоты фоновонного резонанса может иметь также существенную мнимую часть $\varepsilon''(\omega_i)$.

Определив $n_i(\omega_i)$ можно также построить так называемую $\omega - \mathbf{k}$ диаграмму для поляритонов без затухания [5,6]. Кривые диаграммы («поляритонные ветви») описываются соотношениями

$$\begin{aligned} \omega_i(k_i) &= \frac{ck_i}{\sqrt{\varepsilon(\omega_i)}}, \\ \bar{\varepsilon}(\omega_i) &= \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{S_j}{\omega_{oj}^2 - \omega_i^2}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Верхняя поляритонная ветвь по мере увеличения волнового вектора переходит в частотный диапазон оптической прозрачности кристалла. Более низкочастотные ветви стремятся с ростом k_i к часто-

там соответствующих оптических фононов. Нижняя поляритонная ветвь расположена ниже частот всех оптических фононов. По мере удаления от области высокого фононного поглощения — как в более высокочастотный диапазон по верхней поляритонной ветви, так и в более низкочастотный (терагерцовый) диапазон по нижней поляритонной ветви — поглощение кристалла падает. На рис. 1.1 изображен характерный вид зависимости угла рассеяния сигнальной волны от частоты холостого излучения $\theta_{s0}(\omega_i)$. В процессе рассеяния в направлении θ_{s0} участвуют только те холостые волны, частота и волновой вектор которых удовлетворяют одновременно дисперсионной характеристике среды (1.16) и условию синхронизма (1.15). В итоге набор возможных перестроечных кривых на спектре СПР в координатах θ_{s0}, ω_i будет иметь вид, схематически представленный на рисунке. Рассеяние на верхней поляритонной ветви занимает широкий спектральный диапазон и часто формирует замкнутую (с учетом углов рассеяния θ_{s0} противоположного знака) перестроечную кривую, напоминающую по форме эллипс. Рассеяние на внутренних поляритонных ветвях формирует изогнутые кривые, расположенные в существенно более узких областях между частотами оптических фононов.

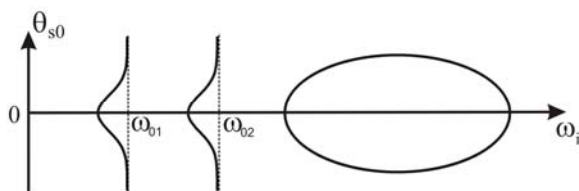


Рис. 1.1. Схематическое изображение перестроечных кривых спектра параметрического рассеяния света

Коэффициент поглощения. Как уже говорилось выше, при исследовании параметрического рассеяния частоты накачки и сигнальной волны находятся в диапазоне прозрачности среды. Частота холостой волны ω_i может при этом быть как в полосе прозрачности, так и в области сильного решеточного поглощения. Проанализируем, как поглощение среды на частоте ω_i сказывается на спектрах частотно-углового распределения интенсивности СПР.

Коэффициент поглощения α_i входит в выражение для дифференциальной мощности сигнала излучения (1.12) через параметр y в форм-факторе $g(\Delta k_x \cdot L, y_i)$. Таким образом, поглощение меняет ширину линии углового распределения интенсивности, измеренного при фиксированной частоте сигнала излучения. Форма линии углового распределения в случае, когда поглощение мало, так что $y \approx 0$, описывается функцией $\text{sinc}^2(x/2)$. Расстояние между максимумами функции, а также ширина главного максимума связаны при этом только с толщиной кристалла-рассеивателя (см. (1.13)). По мере увеличения поглощения и роста y контраст функции падает и при $y \gg 1$ форм-фактор приобретает вид лоренцевой кривой (см. (1.14)). Измерение угловой полуширины $\Delta\theta_s$ функции $P_{\omega\Omega}$ в этом случае позволяет определить величину α_i :

$$\alpha_i = \frac{2k_p \sin \theta_{i0}}{\pi} \Delta\theta_s. \quad (1.17)$$

Квадратичная восприимчивость. В выражение для дифференциальной мощности сигнала излучения СПР (1.12) входят линейные оптические параметры среды, частоты, интенсивность накачки и квадратичная восприимчивость среды. В частности, интенсивность сигнала излучения зависит от геометрии рассеяния (ориентации кристалла, направлений поляризации и распространения волн) через величину свертки ненулевых компонент тензора третьего ранга $\hat{\chi}^{(2)}$ с ортами поляризации накачки, сигнальной и холостой волн. Определить величину действующей компоненты $\chi_{ijk}^{(2)}$ (или свертки нескольких действующих компонент) можно по измерению дифференциальной мощности вдоль перестроечной кривой. Проведение измерений на разных частотах позволяет определить дисперсию $\chi_{ijk}^{(2)}$. Определение абсолютной величины квадратичной восприимчивости требует предварительной калибровки детектирующей части установки.

3. Параметрическое рассеяние света при пространственном квазисинхронизме

Одним из основных факторов, влияющих на эффективность нелинейно-оптических параметрических процессов, является степень

фазового согласования волн в среде. Наличие ненулевой расстройки синхронизма Δk существенно снижает предельно достижимую эффективность взаимодействия в пространственно-однородных нелинейных средах. Если же $\Delta k = 0$, то чем протяженнее нелинейная среда, тем выше эффективность взаимодействия. При этом коллинеарное, т.е. сонаправленное распространение волн позволяет организовать максимальную эффективность перекачки энергии от одних волн к другим в прозрачной среде. Однако найти нелинейную среду с дисперсионными характеристиками, удовлетворяющими этому условию для коллинеарного взаимодействия на произвольных заданных частотах, как правило, чрезвычайно сложно. Различные нелинейно-оптические схемы, известные на настоящий момент, обходят эту проблему по-разному. Большинство подходов можно разделить на две группы:

1. точный синхронизм на основе двулучепреломления;
2. квазисинхронизм в средах с периодической модуляцией знака нелинейной восприимчивости.

Первый вариант часто применяется, однако позволяет осуществлять преобразования только в достаточно узких частотных диапазонах. Выбор квазисинхронизма позволяет организовать полностью коллинеарное взаимодействие и одновременно решить проблемы, связанные как с поперечной, так и продольной расстройкой на любой заданной частоте нелинейно-оптического преобразования. Платой за это является некоторое снижение действующей величины квадратичной восприимчивости среды. Однако возможность существенного наращивания объема нелинейной среды может компенсировать эту потерю. Ключевым моментом здесь является выбор среды с периодической пространственной модуляцией нелинейно-оптической восприимчивости. Как правило, это сегнетоэлектрические кристаллы с регулярной 180-градусной доменной структурой, такие как ниобат или танталат лития, КТР и другие. При переходе от домена к домену в этих кристаллах направление полярной оси меняется на противоположное, соответственно этому меняется и знак действующей компоненты квадратичной восприимчивости. При этом линейная восприимчивость, показатели преломления и коэффициенты поглощения меняются лишь незначительно, и только в области доменных стенок. Возможные эффекты линейной дифракции практически не влияют на результат нелинейного взаимодействия волн.

Поясним механизм квазисинхронного согласования волн на примере коллинеарной генерации разностной частоты в режиме сла-

бого усиления. Рассмотрим кристалл, в котором квадратичная восприимчивость меняется вдоль направления, совпадающего с направлением распространения двух плоских волн лазерной накачки $A_{10}e^{ik_1x-i\omega_1t}$ и $A_{20}e^{ik_2x-i\omega_2t}$ с частотами ω_1 и ω_2 . Генерация волны $A(\Omega, x)e^{ikx-i\Omega t}$ разностной частоты $\Omega = \omega_1 - \omega_2$ осуществляется в соответствии с укороченным уравнением:

$$\frac{\partial A(\Omega, x)}{\partial x} = i \frac{2\pi\Omega^2}{kc^2} P^{(nl)}(\Omega, x) e^{-ikx+i\Omega t}. \quad (1.18)$$

Источником поля разностной частоты служит нелинейная поляризация $P^{(nl)}(\Omega, x)$, равная

$$P^{(nl)}(\Omega, x) = \chi^{(2)}(x) A_{10} e^{ik_1x-i\omega_1t} A_{20}^* e^{-ik_2x+i\omega_2t}. \quad (1.19)$$

Амплитуда волны разностной частоты на выходе кристалла рассчитывается путем интегрирования нелинейной поляризации:

$$\begin{aligned} A(\Omega, L) &= \frac{2\pi i\Omega^2}{kc^2} \int_0^L P^{(nl)}(\Omega, x') e^{-ik_x x'} dx' = \\ &= \frac{2\pi i\Omega^2}{kc^2} A_{10} A_{20}^* \int_0^L \chi^{(2)}(x') e^{i\Delta k x'} dx'. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Расстройкой синхронизма для данного процесса является величина $\Delta k = k_1 - k_2 - k$. При записи соотношений (1.18)–(1.20) в общем виде учитывается одномерная пространственная зависимость действующего значения квадратичной восприимчивости среды $\chi^{(2)}$, определяемого через свертку тензора квадратичной восприимчивости и ортов поляризации волн. В сегнетоэлектрических полидоменных кристаллах направление кристаллографических осей меняется на границах доменов. Соответственно, меняется и знак свертки, если ось X пересекает доменные границы.

В однородной нелинейной среде $\chi^{(2)} = \text{const}$. В этом случае, согласно (1.20), амплитуда волны разностной частоты будет нарастать по мере увеличения длины кристалла L только до тех пор, пока $L \leq L_{coh} = 2\pi/\Delta k$. Для неограниченного роста амплитуды необходимо выполнение условия точного синхронизма $\Delta k = 0$. Однако в среде с периодической зависимостью $\chi^{(2)}(x)$ рост амплитуды

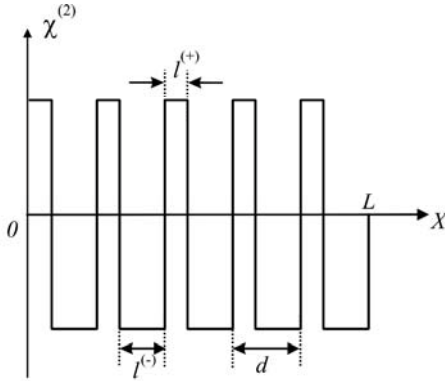


Рис. 1.2. Пространственная зависимость квадратичной восприимчивости периодически поляризованного кристалла

возможен и при условии $\Delta k \neq 0$. Действительно, представим пространственную зависимость $\chi^{(2)}(x)$, имеющую период d (рис.1.2), в виде ряда Фурье

$$\chi^{(2)}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \chi_m e^{-im\frac{2\pi}{d}x} \quad (1.21)$$

с амплитудами пространственных Фурье-гармоник χ_m , равными

$$\chi_m = \frac{1}{L} \int_0^L \chi^{(2)}(x) e^{im\frac{2\pi}{L}x} dx. \quad (1.22)$$

Решение волнового уравнения для амплитуды выходного излучения разностной частоты будет рассчитываться следующим образом:

$$A(\Omega, L) = \frac{2\pi i \Omega^2}{kc^2} A_{10} A_{20}^* \sum_{m=-\infty}^{\infty} \chi_m \int_0^L e^{i\left(\Delta k - m\frac{2\pi}{d}\right)x} dx. \quad (1.23)$$

Решение будет состоять из суммы вкладов, один из которых может неограниченно нарастать при увеличении длины среды, если выполняется условие квазисинхронизма

$$\Delta k = m \frac{2\pi}{d}. \quad (1.24)$$

Таким образом, правильно подбирая период доменной структуры, можно добиться эффективной генерации разностной частоты и в средах с $\Delta k \neq 0$.

Интенсивность квазисинхронного процесса будет также тем выше, чем больше амплитуда пространственных фурье-гармоник χ_m . Однако гармоники χ_m быстро спадают при увеличении порядка квазисинхронизма m . Для периодической зависимости $\chi^{(2)}(x)$ в полидоменных кристаллах, имеющей вид меандра,

$$\chi_m = 2\bar{\chi}(-1)^m \frac{\sin(Dm\pi)}{\pi m} e^{iDm\pi}, \quad (1.25)$$

где $\bar{\chi}$ — квадратичная восприимчивость материала однородных слоев, D — рабочий цикл сверхрешетки, определяемый как отношение толщины слоя с одинаковым знаком $\chi^{(2)}$ ко всей длине периода d : $D \equiv l^{(+)} / d$, где $d \equiv l^{(+)} + l^{(-)}$. Если толщины слоев с разным знаком $\chi^{(2)}$ одинаковы и рабочий цикл составляет $1/2$, максимумы с нечетным m отсутствуют. В частности, не будет наблюдаться сигнал и при условии точного пространственного синхронизма, при $m=0$. Максимальный квазисинхронный сигнал будет наблюдаться в первом порядке квазисинхронизма. При этом эффективная восприимчивость среды будет несколько ниже, чем в случае точного синхронизма в пространственно-однородном кристалле:

$$|\chi_1| = \frac{2\bar{\chi}}{\pi}.$$

При параметрическом рассеянии в квазисинхронных структурах вместо одной перестроечной кривой, отвечающей условию точного пространственного синхронизма, могут наблюдаться несколько кривых, каждая из которых отвечает условию (1.24) для соответствующего порядка m . Благодаря широкому спектру волн, участвующих в процессе, метод параметрического рассеяния позволяет определить как период доменной структуры (исходя из сдвига перестроечных кривых относительно друг друга), так и рабочий цикл доменной сверхрешетки, степень периодичности и особенности ее ориентации [7]. В отличие от многих других методов исследования доменных структур, значения параметров квазисинхронной сверхрешетки определяются не на поверхности, а непосредственно в толще кристалла.

Экспериментальная часть

1. Спектрограф параметрического рассеяния света

Как следует из материала предыдущей части, информация о рассеивающей среде содержится в характеристиках распределения интенсивности сигнального излучения в координатах $\omega_i - \theta_s$, и, в первую очередь — в ходе перестроечных кривых СПР. Вследствие сложной картины распределения интенсивности рассеяния в пространстве решение задачи разработки экспериментального метода регистрации перестроечной кривой вызывает ряд серьезных трудностей.

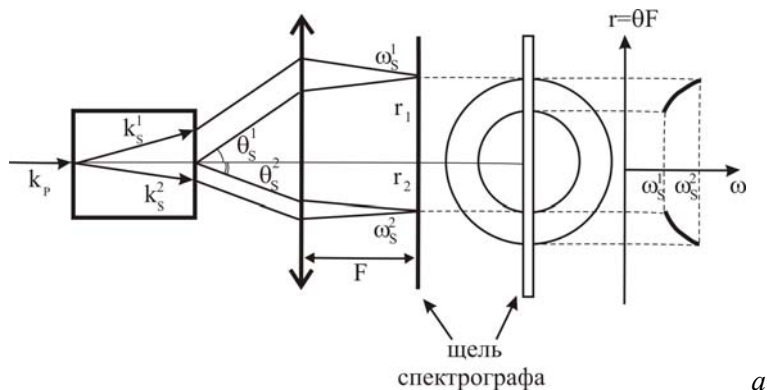
Наиболее простой метод регистрации спектров СПР заключается в том, что в пространстве после кристалла размещается входное отверстие фотоприемника с малой апертурой. Для выделения необходимой частоты на входе приемника располагается, например, интерференционный светофильтр. Однако при этом методе регистрации теряется большой объем информации, особенно в области рассеяния на поляритонах. Поэтому в настоящее время используется другой метод — метод скрещенной частотно-угловой дисперсии.

Осуществляется он следующим образом. После рассеивающего кристалла располагается линза (рис.1.3). Таким образом, что ее передний фокус приблизительно находится внутри рассеивающего объема, а оптическая ось совпадает с направлением вектора $\mathbf{k}_p$. Тогда, в случае пространственно-изотропной геометрии рассеяния, в правой фокальной плоскости линзы образуется набор цветных колец (в общем случае они могут иметь более сложный вид замкнутых кривых с меняющейся по ходу интенсивностью). Кольцо каждого цвета имеет диаметр, который соответствует определенному углу рассеяния сигнальной волны данной длины волны (частоты) в кристалле. Вследствие непрерывного характера спектра СПР кольца переходят друг в друга по диаметру, сливаются и образуют сплошной фон со смешанным цветом. В фокальную плоскость линзы помещается входная щель спектрографа так, чтобы луч накачки проходил через ее центр; при этом щель определяет ориентацию плоскости треугольника волновых векторов, которому соответствует сигнальное излучение, выбранное для последующей регистрации.

Спектрограф строит изображение входной щели в фокальной плоскости камеры, где расположены либо фотопленка, либо фотоприемник. Пространственное положение изображения щели спектрографа (это направление перпендикулярно щели) определяется длиной волны регистрируемого сигнального излучения, которая однозначно, через условие (1.1), связана с частотой холостых волн ω_i . Таким образом в выходной плоскости спектрографа сигнальное излучение фокусируется в семейство точек, сливающееся в непрерывную кривую линию с координатами $\omega_i - r_s$, где r_s — отклонение точки кривой на частоте $\omega_s = \omega_p - \omega_i$ от оси, задаваемой направлением вектора $\mathbf{k}_p$ (радиус «кольца», соответствующего холостой частоте ω_i и, соответственно, сигнальной частоте $\omega_s = \omega_p - \omega_i$). Величина r_s однозначно связана с углом θ_s через фокусное расстояние линзы $r_s = f \operatorname{tg} \theta_s$ ($r_s = f \theta_s$ при малых θ_s). Частотно-угловой спектр ПР имеет форму несколько размытой линии, ширина которой зависит от длины кристалла и коэффициента поглощения (через форм-фактор g в (1.12)). В пределах углового сечения линии на каждой частоте можно определить точки максимальной интенсивности. Они соответствуют условию точного пространственного синхронизма и, как правило, находятся в центре линии. При переходе от одной частоты к другой эти точки выстраиваются в перестроечную кривую СПР.

Для согласования углов рассеяния θ_s с углами зрения спектрального прибора (спектрографа), как правило, бывает необходимо использовать не одну линзу, а систему из трех линз, взаимное расположение которых приведено на рис. 1.3(б).

Блок-схема спектрографа СПР приведена на рис.1.4. Спектрограф СПР включает в себя источник излучения накачки /1/, элементы системы формирования излучения накачки /2–4,12/, элементы формирования сигнального излучения /6–10/, спектральный прибор и приемную систему /11/.



б

Рис. 1.3. Схемы построения спектра СПР со скрещенной частотно-угловой дисперсией: *а* — однолинзовая схема; *б* — трехлинзовая схема

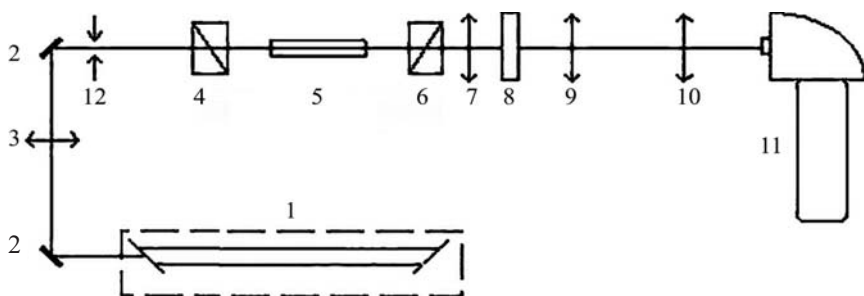


Рис. 1.4. Экспериментальная установка для наблюдения и регистрации спектров СПР: 1 — лазер, 2 — поворотные зеркала, 3 — длиннофокусная линза, 4 — поляризатор, 5 — исследуемый кристалл, 6 — анализатор, 7, 9, 10 — оптическая система линз, 8 — светофильтр, 11 — спектрограф, 12 — диафрагма

В качестве источника излучения накачки в задачах используются аргоновый лазер непрерывного действия (длина волны 488 нм, мощность генерации 0.5–1 Вт), или полупроводниковый диодный лазер (длина волны 408 нм, мощность генерации 200 мВт).

Система формирования излучения накачки включает в себя набор поворотных зеркал, диафрагму, длиннофокусную линзу, поляризатор. Основная задача системы — сформировать на исследуемом образце /5/ пучок поляризованного излучения накачки нужного диаметра и расходимости, излучение должно быть отфильтровано от волн с другими частотами и направлениями.

Система формирования сигнального излучения имеет своей задачей выделение сигнального излучения нужной поляризации, а также отделение слабого сигнального излучения от интенсивного фона, образующегося в результате упругого рассеяния излучения накачки на элементах оптической схемы.

В задачах реализован вариант трехлинзовой оптической системы регистрации СПР. Конфокальное расположение первой и второй линз обеспечивает эквивалентность данной и однолинзовой систем (для приосевых пучков излучения). Частотную селекцию рассеянного излучения обеспечивает спектральный прибор — спектрограф ИСП-51.

Приемная система необходима для регистрации спектров и выдачи информации в цифровой или аналоговой форме. При исследовании формы перестроечной кривой наиболее информативной является широкополосная приемная система с параллельным сбором информации, функционирующая на основе высокочувствительной фотографической пленки. При измерении формы линии перестроечной кривой и интенсивности рассеяния более предпочтительной оказывается узкополосная фотоэлектрическая система приема. Фотоэлектрическая система, как правило, включает в себя световод и фотоэлектронный умножитель (ФЭУ), схему электрической обработки, системы сканирования полосы пропускания спектрографа СПР по углу и частоте и двухкоординатный регистрирующий прибор.

Наиболее оптимальной и современной является фотоэлектрическая схема с параллельным накоплением информации — так называемые многоканальные оптические анализаторы на базе фотодиодных линеек или CCD-матриц. Однако реализовать с помощью этих элементов параллельный прием в таком же широком спектральном диапазоне и с таким же уровнем спектрального разрешения, как при использовании фотопленки, достаточно сложно.

2. Исследуемые объекты

Исследуемыми объектами — кристаллами, спектры СПР которых регистрируются и обрабатываются в задачах, служат одни из наиболее распространенных нелинейно-оптических кристаллов: йодат лития, бета-борат бария и ниобат лития. В качестве факультативного задания, могут быть выданы двуосные кристаллы формиата лития ($\text{LiCOOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$) и йодноватой кислоты ($\alpha\text{-HIO}_3$).

а) **Ниобат лития** — пьезоэлектрический кристалл тригональной системы, относящийся к классу симметрии $3m$. Химическая формула LiNbO_3 . Основные элементы симметрии этой группы: ось вращения третьего порядка и три плоскости зеркальной симметрии, развернутые под углом 120° друг к другу [8]. Кристалл оптически одноосный со значительным двулучепреломлением. Для предотвращения эффекта «оптического повреждения» используется образец с примесью ионов Mg.

Нелинейные оптические свойства кристалла описываются тензором квадратичной восприимчивости $\hat{\chi}^{(2)}$, имеющим вид [8]

$$\hat{\chi}^{(2)} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \chi_{xxz} & \chi_{xxy} \\ \chi_{yxx} & \chi_{yyy} & 0 & \chi_{yyz} & 0 & 0 \\ \chi_{zxx} & \chi_{zyy} & \chi_{zzz} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Оси координат X, Y, Z образуют прямоугольную систему, связанную с элементами симметрии кристаллической решетки следующим образом:

- ось Z совпадает с осью третьего порядка и с оптической осью кристалла,
- ось X лежит в плоскости зеркальной симметрии,
- ось Y перпендикулярна плоскости зеркальной симметрии.

Вид тензора $\hat{\chi}^{(2)}$ определяет возможные геометрии наблюдения рассеяния.

Условие пространственного синхронизма в пространственно-однородном кристалле может быть выполнено или за счет анизотропии достаточной величины (вне резонансной области спектра собственных колебаний кристаллической решетки), за счет аномальной дисперсии в резонансной части спектра (при рассеянии на поляритонах), либо за счет различного наклона дисперсионных кривых в поляритонном диапазоне и оптическом диапазоне прозрачности

кристалла (например, при рассеянии во всей области нижней поляритонной кривой, включая терагерцовый диапазон прозрачности).

В кристалле LiNbO_3 при частоте излучения накачки 20000 см^{-1} (соответствующей длине волны $\lambda = 0.5 \text{ мкм}$) условие точного пространственного синхронизма на верхней поляритонной ветви может быть выполнено в пространственно-однородном кристалле в широком диапазоне частот тогда, когда волна накачки является необыкновенной (вектор поляризации лежит в плоскости, содержащей ось Z), а сигнальная и поляритонная волны — обыкновенные (вектора поляризации $\vec{e}_s$ и $\vec{e}_i$ лежат в плоскости, перпендикулярной Z). Такой тип взаимодействия носит название «взаимодействие *ооо*-типа». Это возможно, когда плоскость треугольника волновых векторов («треугольник синхронизма») перпендикулярна плоскости $[XOY]$ и содержит в себе ось Z . Плоскость треугольника синхронизма при наблюдении задается ориентацией входной щели спектрографа. При этом интенсивность рассеяния будет определяться компонентами χ_{xxz} и χ_{yyz} тензора $\hat{\chi}^{(2)}$. Ясно также, что хотя двулучепреломление кристалла позволяет выполнить условие синхронизма и для необыкновенной поляритонной волны, отсутствие неравных нулю компонент χ_{xyx} , χ_{zyx} не позволяет наблюдать рассеяние на необыкновенно-поляризованных холостых волнах в этой геометрии.

Кристаллы ниобата лития обладают фоторефрактивными свойствами, которые могут приводить к появлению оптических неоднородностей при лазерном облучении образцов. Для того, чтобы поднять лучевую стойкость кристаллов, их легируют различными антифоторефрактивными примесями (Mg , Zn и др.) уже на стадии роста. В зависимости от типа легирующей примеси и ее концентрации меняются и дисперсионные характеристики кристаллов, которые требуют прецизионного измерения. В данной работе будут измеряться характеристики кристаллов, содержащие примесь ионов магния — Mg:LiNbO_3 .

б) **Йодат лития.** Химическая формула LiIO_3 — пьезоэлектрический кристалл гексагональной системы, относящийся к классу симметрии 6. Нелинейно-оптические свойства кристалла описываются тензором квадратичной восприимчивости $\hat{\chi}$ следующего вида:

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \chi_{xxz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi_{yyz} & \chi_{yxz} & 0 \\ \chi_{zxx} & \chi_{zyy} & \chi_{zzz} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Исследуемый в задаче образец вырезан таким образом, что оптическая ось кристалла образует угол $\gamma = 52^\circ$ с нормалью ко входной грани. Это должно быть учтено при расчете показателя преломления для необыкновенно поляризованной волны накачки с использованием данных Приложения:

$$n_e(\omega_p) = n_p = \frac{n_e(\omega_p)n_o(\omega_p)}{\sqrt{n_e^2(\omega_p)\cos^2\gamma + n_o^2(\omega_p)\sin^2\gamma}}. \quad (1.26)$$

Как и в кристалле ниобата лития, в LiIO_3 реализуется взаимодействие *оое*-типа.

в) Кристалл бета-бората бария (ВВО). Химическая формула BaB_2O_4 — кристалл тригональной системы, относящийся к классу тригональной симметрии $3m$, пространственная группа $R3c$. Кристаллы ВВО характеризуются широким диапазоном фазового синхронизма 410 нм–350 нм и высокой оптической однородностью. Кристаллы широко применяются: для генерация второй, третьей, четвертой и пятой гармоник неодимовых лазеров, удвоения, утроения и смещения частот титан-сапфировых лазеров, удвоения частот аргоновых ионных лазеров, лазеров на парах меди и рубиновых лазеров, при разработке сверхбыстрых импульсных лазеров и лазеров дальнего УФ-диапазона.

Тензор квадратичной восприимчивости ВВО совпадает с тензором для кристаллов LiNbO_3 . В задаче реализуется взаимодействие *оое*-типа.

Исследуемый в задаче образец вырезан таким образом, что оптическая ось кристалла образует угол $\gamma = 37^\circ$ с нормалью ко входной грани, что учитывается при расчете показателя преломления для необыкновенно поляризованных волн с использованием данных Приложения.

г) Периодически поляризованные кристаллы легированного ниобата лития. Химические формулы Mg:Y:LiNbO_3 , Mg:Nb:LiNbO_3 . Регулярные доменные структуры в образцах созданы методом роста кристаллов в асимметричном тепловом поле [9]. По степени периодичности структуры, получаемые данным методом, проигрывают структурам, создаваемым широко распространенным методом переполяризации тонких кристаллических пластин во

внешнем электрическом поле [10]. Однако ростовой метод позволяет получить домены с гораздо большими поперечными размерами вдоль оси Z (до 1 см и выше, в отличие от 500–700 мкм при переполаризации во внешнем поле).

Возможны два варианта ориентации нормали к доменным стенкам ростовых структур — параллельно кристаллографической оси Z («Х-домены») или под углом $\alpha = 57^\circ$ к оси Z («домены гранного типа»). В ходе выполнения заданий практикума будут исследоваться образцы с входными и выходными гранями, вырезанными параллельно доменным стенкам. Будут получены спектры ПР на верхней поляритонной ветви в геометрии ooe и измерены частоты, на которых наблюдается квазисинхронное коллинеарное ПР в разных порядках квазисинхронизма m . Условие квазисинхронизма при коллинеарном параметрическом рассеянии света (т.е. при $\theta_s = \theta_i = 0$) имеет вид:

$$k_p - k_s - k_i = m \frac{2\pi}{d} . \quad (1.27)$$

Это условие можно переписать в терминах волновых чисел $\nu = 1/\lambda = \omega/2\pi c$, учитывая связь сигнальных и холостых частот (1.1):

$$n_p \nu_p - n_s \nu_s - n_i (\nu_p - \nu_s) = m/d . \quad (1.28)$$

Показатели преломления n_i и n_s в случае ooe -типа взаимодействия зависят только от частоты, однако показатель преломления необыкновенно поляризованной волны накачки зависит и от ориентации доменной системы. Расчет показателя преломления n_p ведется по формуле (1.26) с подстановкой значений $\gamma = 57^\circ$ в случае доменов гранного типа, либо $\gamma = 90^\circ$ для Х-доменов.

Измерив частоты квазисинхронного коллинеарного ПР для различных порядков квазисинхронизма m , на основании (1.28) можно рассчитать как период сверхрешетки, так и показатели преломления на соответствующих частотах холостых волн. Для этого, как и в других случаях, необходимы сведения о дисперсии показателя преломления кристалла в области частот накачки и сигнальных волн. Если же дисперсионные свойства кристалла на холостой частоте также известны с высокой точностью, то может быть определена и заранее неизвестная ориентация доменной решетки.

Однако для тех образцов кристаллов, с которыми будет проходить выполнение задачи практикума, возможны только два типа доменных систем, и их ориентации легко определить, даже не имея предварительных сведений о дисперсии показателя преломления на холостых частотах. Для этого достаточно визуального сравнения перестроечных кривых в полидоменном кристалле и монодоменном образце, вырезанном перпендикулярно оси X . Ориентация доменов X -типа совпадает с ориентацией входных и выходных граней монодоменного образца данной геометрии. Поэтому перестроечная кривая, соответствующая нулевому порядку квазисинхронизма, будет совпадать с перестроечной кривой, соответствующей точному синхронизму в монодоменном образце. Ориентация гранных доменов существенно иная. Показатель преломления и волновой вектор необыкновенно поляризованной волны накачки в кристалле, вырезанном параллельно гранным доменам, будет отличаться от соответствующих параметров в монодоменном образце. При замене монодоменного кристалла полидоменным эллипс на частотно-угловом спектре СПР в нулевом порядке квазисинхронизма изменит свою форму.

ЗАДАЧА 1.1. Параметрическое рассеяние и рассеяние света на поляритонах

Цели задачи:

Ознакомиться с одним из фундаментальных явлений нелинейной и квантовой оптики — параметрическим рассеянием света.

Получить навыки наблюдения параметрического рассеяния света и рассеяния света на поляритонах. Ознакомиться с методами регистрации спектров параметрического рассеяния света (спектров ПР).

Получить представление о том, какая информация о рассеивающей среде содержится в спектрах ПР, как связаны характеристики спектров ПР с оптическими и динамическими параметрами рассеивающего объекта. Научиться извлекать необходимую информацию о параметрах рассеивающего объекта из спектров ПР.

Упражнение 1. Визуальное наблюдение спектра ПР

1. Включение установки.

а) Согласно техническому описанию и Инструкции по технике безопасности включить источник накачки — лазер.

ВНИМАНИЕ! Лазерное излучение опасно для зрения. Поэтому необходимо строго соблюдать меры предосторожности при работе с лазером. Совершенно недопустимо попадание в глаза не только рассеянного излучения, но и всевозможных бликов от зеркальных и незачерненных поверхностей.

Во избежание разбюстировки оптической схемы все последующие действия производятся **только в присутствии преподавателя!**

б) Проверить прохождение луча накачки по оптической оси системы. Для этого необходимо развернуть примерно на 10° – 20° анализатор /6/ (см. рис.1.4) от положения точного скрещивания с поляризатором /4/ и убрать заграждающий фильтр /8/. При этом луч накачки должен проходить по центрам оптических элементов, попадать на середину щели спектрографа и выходить посередине его кассетной части.

в) Возвратить анализатор в исходное состояние, добившись минимальной интенсивности прошедшего через систему поляризатор-кристалл-анализатор света. Поставить заграждающий светофильтр /8/. Закрыть оптическую систему светозащитным кожухом.

2. Наблюдение спектра ПР

Визуальное наблюдение спектра ПР проводится двумя методами.

Первый метод заключается в следующем. Необходимо расположиться напротив выхода камеры спектрографа примерно на расстоянии 40–60 см. Затем рассматривать выходную плоскость спектрографа, аккомодируя зрение на бесконечность. Основными реперами, по которым необходимо настраивать зрение, являются яркая вертикальная линия сине-зеленого цвета — линия остаточного излучения накачки, рассеянного на оптических элементах установки, и горизонтальная дорожка разноцветных точек, образованная линиями спонтанного свечения газового разряда. Спектр параметрического рассеяния располагается в области более длинных волн относительно накачки (в «красной области» диапазона пропускания спектрографа). Замкнутая кривая, по форме близкая к эллипсу, соответствует рассеянию на верхней поляритонной кривой. «Эллипс» симметричен относительно горизонтальной дорожки.

Второй метод заключается в наблюдении спектра в выходной плоскости спектрографа с помощью линзы. Реперы в этом случае те же, что и в первом.

Упражнение 2. Регистрация перестроечных кривых ПР

1. Получение спектрограмм.

Для получения спектрограмм — фотографического изображения спектра ПР на фотопленке — выполняются все операции, описанные в п.2 предыдущего упражнения. Затем на выходной кассетной части спектрографа устанавливается кассета со специальным адаптером для фотопленки. В работе используется фотопленка типа РФ-3 или А-29. Необходимо внимательно следить при зарядке пленки в кассету за тем, чтобы эмульсионный слой был обращен в сторону камеры спектрографа.

Для увеличения чувствительности фотопленки в задаче используется метод проявления специальным проявителем с серноокислым гидразином, что требует особо тщательной светоизоляции в процессе работы с пленкой. Кроме того, серноокислый гидразин ядовит. Хотя он входит в состав проявителя в малых количествах, это требует повышенной аккуратности при работе и соблюдения всех правил техники безопасности.

Другой возможный метод регистрации спектрограмм — с помощью фотоэлектрической ССD-камеры (устанавливается преподавателем).

2. Обработка спектрограмм.

Обработка спектрограмм включает в себя следующие операции:

1) Определение частотной и угловой дисперсии спектрографа ПР;

2) Перевод спектра ПР из координат $\lambda_s - r_s$ в прямоугольные координаты $\omega_i - \theta_s$ — построение перестроечной кривой спектра ПР ($\theta_s = Kr_s$, где r_s — смещение точки с максимальной интенсивностью рассеяния на частоте ω_i относительно пучка накачки в направлении, перпендикулярном направлению частотной дисперсии с учетом кривизны спектральной линии).

3) Расчет по полученной кривой величины волнового вектора k_i и ее дисперсии во всем диапазоне существования рассеяния при реализованной геометрии эксперимента.

4) Вычисление функции $\varepsilon'(\omega_i)$ (частотной зависимости действительной части диэлектрической проницаемости) и построение дисперсионной кривой кристалла $\omega_i(k_i)$ — закона дисперсии.

5) Оценка ошибок измерения.

Рассмотрим порядок выполнения перечисленных выше пунктов задания:

1. Определение частотной и угловой дисперсии спектрографа ПР.

а) Определение частотной дисперсии спектрографа. На установке, в которой в качестве спектрального прибора используется спектрограф типа ИСП-51, длина волны сигнального излучения (в нанометрах) определяется по формуле

$$\lambda_s(x) = -4 \cdot 10^{-5} \cdot x^3 + 0.013 \cdot x^2 + 0.95 \cdot x + 488,$$

где x — расстояние в миллиметрах по пленке, отсчитанное от линии накачки ($\lambda_p = 488$ нм).

Затем дисперсионная кривая переводится в перестроечную кривую согласно выражению

$$\frac{\omega_i(x)}{2\pi c} \equiv \nu_i(x) = \frac{1}{\lambda_p} - \frac{1}{\lambda_s(x)},$$

и все последующие измерения проводятся в единицах частоты $\frac{\omega_i(x)}{2\pi c} \equiv \nu_i$, измеряемой в обратных сантиметрах.

б) Определение угловой дисперсии спектрографа ПР.

Определение угловой дисперсии спектрографа ПР можно провести путем простого расчета связи величины смещения r от оси, положение которой задается лучом накачки $\vec{k}_p$, с углом рассеяния θ_s через известные параметры оптической системы спектрографа ПР (фокусные расстояния линз, коллиматора и камеры спектрографа).

Более точное определение можно провести экспериментально, используя тот факт, что излучение монохроматической волны (распространяющейся в широком пространственном угле), прошедшее через эталон Фабри-Перо, приобретает вид круговых конусов. Угол расхождения конусов определяется порядком интерференции и легко рассчитывается при известной базе эталона: $2hn \cos \theta_j = m_j \lambda$ (h — база эталона, m_j — порядок интерференции). Процедура определения заключается в следующем. Эталон Фабри-Перо с известной базой размещается на месте кристалла и освещается рассеянным излучением ртутной лампы. Входная щель спектрографа раскрывается до величины ~ 0.2 – 0.4 мм. При этом на выходе спектрографа наблюдается широкое изображение спектральной линии, иссеченное горизонтальными дугами с центром на оси установки. Разные дуги соответствуют разным порядкам интерференции. Измерение диаметра дуг одного порядка позволяет определить коэффициент увеличения системы

$$K = \theta_j / r_j.$$

Для большей точности K определяется по порядкам с большим номером (10–20).

Проведение калибровки в задачу не входит. При обработке результатов необходимо пользоваться следующим значением K для установки со спектрографом ИСП-51: $K = 0.022$ рад/мм.

Определенные по спектрограмме углы рассеяния вне кристалла необходимо пересчитать в соответствующие углы *внутри* кристалла, используя данные Приложения.

2. Перевод спектра ПР в координаты $\nu_i - \theta_s$.

Перевод спектра осуществляется сканированием фотопленки со спектром на сканере. По полученному изображению определяются координаты $\nu_i - r_s$, которые затем легко переводятся в координаты $\nu_i - \theta_s$. При переводе необходимо учитывать кривизну спектральных линий.

3. Расчет волнового вектора k_i .

Полученная в координатах ν_i, θ_s перестроенная кривая позволяет определить величину волнового вектора поляритонной волны по формуле

$$k_i = \sqrt{k_p^2 + k_s^2 - 2k_p k_s \cos \theta_s}.$$

Необходимые для расчета значения модулей векторов $|\mathbf{k}_p|$ и $|\mathbf{k}_s|$ определяются на основе известных дисперсионных характеристик кристаллов в видимом диапазоне (см. Приложение).

Затем определяется действительная часть диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon'(\nu_i) = \left(\frac{k(\nu_i)}{2\pi\nu_i} \right)^2,$$

а также строится дисперсионная кривая $\nu_i(k_i)$. Результаты проведенных измерений представляются в виде графиков и таблицы:

- 1) $\varepsilon' = \varepsilon'(\nu_i)$
- 2) $n_i = n(\nu_i)$
- 3) $\nu_i = \nu_i(k_i)$
- 4) $\theta = \theta_s(\nu_i)$

x	λ_s	ν_s	ν_i	r_s	θ_s^{out}	θ_s^{in}	k_i	θ_i	n_i
-----	-------------	---------	---------	-------	------------------	-----------------	-------	------------	-------

Размерность величин ν_s и k_i [см⁻¹]. Определить ошибку измерения.

ЗАДАЧА 1.2. Параметрическое рассеяние света в квазисинхронных структурах

Цели задачи:

Ознакомиться с особенностями квазисинхронных нелинейно-оптических процессов на примере параметрического рассеяния света в периодически поляризованных кристаллах.

Получить навыки наблюдения параметрического рассеяния света. Ознакомиться с методами регистрации спектров параметрического рассеяния света (спектров ПР).

Получить представление о том, какая информация о характеристиках квазисинхронной структуры содержится в спектрах ПР. Научиться извлекать информацию о периоде пространственной модуляции квадратичной восприимчивости среды и ориентации нелинейной сверхрешетки.

Упражнение 1. Визуальное наблюдение спектров ПР в периодически поляризованном и однородном кристалле ниобата лития

См. инструкции в описании Задачи 1.1 по данному упражнению.

Определить качественное различие спектров в полидоменных и монодоменных кристаллах. По наличию смещения длинноволнового конца эллипса определить тип доменной структуры полидоменного образца.

Перестроечная кривая ПР на верхней поляритонной ветви в монодоменном кристалле ниобата лития имеет вид замкнутого «эллипса». В периодически поляризованном кристалле каждый порядок квазисинхронизма приводит к появлению отдельно отстоящего нового «эллипса» на спектрограмме. При этом для исследуемых в задаче образцов возможны 2 варианта:

1. Центральный эллипс, соответствующий нулевому порядку квазисинхронизма, наблюдается на тех же частотах, что и эллипс в монодоменном кристалле.

2. Вся группа эллипсов, включая центральный, смещается относительно эллипса, наблюдавшегося в монодоменном кристалле.

Первый случай соответствует доменам X-типа, второй случай — гранным доменам.

Упражнение 2. Регистрация перестроечных кривых ПР в периодически поляризованном кристалле

1. **Получение спектрограмм.** См. инструкции в описании Задачи 1.1 по данному пункту.

2. Обработка спектрограммы.

а) Определение частотной дисперсии спектрографа.

На установке, в которой в качестве спектрального прибора используется спектрограф типа ИСП-51, длина волны сигнального излучения определяется по формуле

$$\lambda_s(x) = -4 \cdot 10^{-5} \cdot x^3 + 0.013 \cdot x^2 + 0.95 \cdot x + 488,$$

где x — расстояние в миллиметрах по пленке, отсчитанное от линии накачки ($\lambda_p = 488$ нм), λ_s — длина волны сигнального излучения в нанометрах.

б) Определение частот коллинеарного параметрического рассеяния света на верхней поляритонной ветви.

Для измерения частотных сдвигов эллипсов, соответствующих коллинеарному ПР, необходимо прежде всего определить линию нулевых углов рассеяния. Провести эту линию помогает тот факт, что при взаимодействии *ооо* все перестроечные кривые ПР в исследуемых образцах должны быть симметричны относительно оси нулевых углов.

Наиболее резко различаются положения длинноволновых «красных» концов эллипсов, соответствующих различным порядкам квазисинхронизма. В этом спектральном диапазоне предлагается определить длины волн сигнального излучения λ_{sm} , в которых квазисинхронные перестроечные кривые различных порядков m пересекают ось нулевых углов. Порядок квазисинхронизма при этом определяется исходя из того, что яркость сигнального излучения при $m = +1$ и $m = -1$ примерно одинакова и должна быть значительно выше, чем яркость следующих эллипсов, соответствующих $m = +2$ и $m = -2$. Эллипс, соответствующий $m = 0$, должен располагаться в центре, между перестроечными кривыми, соответствующими $m = +1$ и $m = -1$. При этом его яркость зависит от степени периодичности и рабочего цикла доменной сверхрешетки. Она может быть как выше, так ниже яркости смещенных эллипсов.

Для каждого измеренного значения λ_{sm} определяются частоты холостой и сигнальной волн в см^{-1} (волновые числа ν_{im}) согласно выражениям

$$\nu_{im} = \frac{1}{\lambda_p} - \frac{1}{\lambda_{sm}}, \quad \nu_{sm} = \frac{1}{\lambda_{sm}}.$$

в.) Определение показателя преломления полидоменного кристалла на частоте холостой волны, соответствующей коллинеарному ПР в 0-м порядке квазисинхронизма.

Сначала с помощью данных о дисперсии показателя преломления кристалла Mg:LiNbO_3 (см. приложение), определяются показатели преломления для сигнальных волн $n_{sm} \equiv n_s(\lambda_{sm})$ и накачки n_p . При расчете n_p для необыкновенно поляризованной накачки потребуются также соотношение (1.26) и информация об ориентации доменной решетки, определенная в Упражнении 1. Затем с помощью соотношения (1.28) для $m = 0$ определяется показатель преломления для холостой волны в центре диапазона $n_{i0} \equiv n_i(v_{i0})$

$$\frac{n_p v_p - n_{s0} v_{s0}}{v_{i0}} = n_{i0}.$$

г.) Определение периода доменной структуры.

Для определения периода d надо подставить полученные на предыдущих этапах величины в соотношения (1.28) для $m = +1$, и $m = -1$. Для оценки показателей преломления холостых волн на частотах коллинеарного ПР при $m = +1, -1$ с высокой точностью можно аппроксимировать дисперсию $n_i(v_{im})$ линейной зависимостью вида $n_i(v_{im}) = n_{i0} + m\delta$. Получатся 2 уравнения с неизвестными d и δ :

$$n_p v_p - n_{s,+1} v_{s,+1} - (n_{i0} + \delta) v_{i,+1} = 1/d,$$

$$n_p v_p - n_{s,-1} v_{s,-1} - (n_{i0} - \delta) v_{i,-1} = -1/d.$$

Как следствие, получаем выражение для расчета малой дисперсионной поправки δ :

$$\delta = \frac{2n_p v_p - n_{s,+1} v_{s,+1} - n_{s,-1} v_{s,-1} - n_{i0} (v_{i,+1} + v_{i,-1})}{v_{i,+1} - v_{i,-1}}.$$

С помощью данного выражения определяется величина поправки δ , а затем, после подстановки полученного δ в любое из уравнений системы (1.28) при $m = +1$ или $m = -1$, рассчитывается период структуры d .

Результаты работы представляются в виде таблицы:

m	λ_{sm}	v_{sm}	v_{im}	n_{im}	δ	d
-----	----------------	----------	----------	----------	----------	-----

В конце работы необходимо определить ошибку измерения периода квазисинхронной структуры.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Дисперсионная формула (формула Селмейера):

$$n_{o,e}^2 = A - \frac{B}{C - \lambda^2} - D\lambda^2$$

Таблица 1.1. Дисперсия показателей преломления кристалла $\text{LiNbO}_3\text{:Mg (5\%) [11]}$

Длина волны (нм)	n_o	n_e
435.8	2.3863	2.2802
491.6	2.3403	2.2416
546.1	2.3114	2.2172
577.0	2.2988	2.2068
579.0	2.2980	2.2062
632.8	2.2816	2.1922
694.3	2.2678	2.1805
840.0	2.2460	2.1622

Поляризация	A	$10^{-4}B$	$10^{-4}C$	10^8D
о	4.9017	11.228	4.9656	3.9636
е	4.5583	9.1806	4.8086	3.2068

Таблица 1.2. Дисперсия показателей преломления кристалла LiIO_3 [12]

Длина волны (нм)	n_o	n_e
400	1.948	1.780
436	1.931	1.766
500	1.908	1.754
530	1.901	1.750
578	1.888	1.742
690	1.875	1.731
800	1.868	1.724
1060	1.860	1.719

Поляризация	A	$10^{-4}B$	$10^{-4}C$	10^8D
о	3.4157	4.7031	3.531	0.88
е	2.9187	3.5114	2.822	0.36

Таблица 1.3. Дисперсия показателей преломления кристалла ВВО [13]

Длина волны (нм)	n_o	n_e
213	1.8465	1.6742
266	1.7571	1.6139
355	1.7055	1.5775
532	1.6551	1.5555
1064	1.888	1.5426

Поляризация	A	$10^{-4}B$	$10^{-4}C$	10^8D
o	2,7405	1.84	1.79	15.5
e	2.373	1.28	1.56	4.4

Литература

1. Клышко Д.Н. Фотоны и нелинейная оптика. М.: Наука, 1980. Гл.1, §1.1, 1.2; гл.6, §6.1, 6.2, 6.3.
2. Straupe S.S., Ivanov D.P., Kalinkin A.A., Bobrov I.B., Kulik S.P. // Physical Review A, v.83, p. 060302(R) (2011).
3. Huttner B., Barnett S.M. // Physical Review A, v.46, p.4306 (1992).
4. Пуле А., Матъе Ж-П. Колебательные спектры и симметрия кристаллов. М.: Мир, 1973, Гл.6, §5-10.
5. Поливанов Ю.Н. // Успехи физических наук, т.126, с.185 (1978) (первые 10 стр.).
6. Агранович В.М., Гинзбург В.Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теории экситонов. М.: Наука, 1979. Введение, стр.13-31; Гл.1, с.56-87.
7. Китаева Г.Х., Пенин А.Н. // Квантовая электроника, т. 34, с. 597 (2004).
8. Най Дж. Физические свойства кристаллов. М.: Мир, 1967. Гл.7, §1,2,5, табл. 20, 21.
9. Naumova I.I., Evlanova N.F., Gliko O.A., Lavrishchev S.V. // Journal of Crystal Growth, v. 181, p. 160 (1997).

10. *Myers L.E., Eckardt R.C., Fejer M.M., Byer R.L., Bosenberg W.R., Pierce J.W.* // Journal of the Optical Society of America B, v.12, p.2102 (1995).
11. *Александровский А.Л., Ершова Г.И., Китаева Г.Х., Кулик С.П., Наумова И.И., Тарасенко В.В.* // Квантовая электроника, т.18, с.254 (1991).
12. *Nath G., Haussuhl S.* // Appl. Phys. Lett., 14, p.154 (1969), Kato K. // IEEE Journal of Quantum Electronics, v.21, p.119 (1985).
13. *Eimerl D., Davis L., and Velsko S., Graham E. K., Zalkin A.* // Journal of Applied Physics, v.62, p.1968 (1987).

Часть 2. ПАРАДОКС ЭЙНШТЕЙНА–ПОДОЛЬСКОГО–РОЗЕНА И НЕРАВЕНСТВА БЕЛЛА

Теоретическое введение

1. Введение

В 1935 г. А.Эйнштейн, Б.Подольский и Н.Розен обратили внимание на существование полных (100%-ных) управляемых квантовых корреляций между наблюдаемыми свойствами двух удаленных частиц. На основании этого они пришли к выводу, что, измеряя свойства одной частицы, можно косвенно, без всякого возмущения, производить точные измерения некоммутирующих наблюдаемых у другой частицы. Возможность же измерения некоммутирующих наблюдаемых приводит к выводу о существовании их и до измерения, *априори*. Этот вывод противоречит основным принципам квантовой механики. Таким образом, делается предположение о необходимости *дополнить* квантовую теорию, т.е. описать свойства обеих частиц (и их корреляции) с помощью некоторых «скрытых» параметров, например, в терминах классической статистической физики и ввести тем самым квантовую физику к классической.

Примерно 30 лет спустя Белл из общих соображений показал, что эта логическая схема возможна лишь, если дополнить классическую физику какими-то новыми далекодействующими взаимодействиями, т.е. ввести *нелокальность*. Однако экспериментальное подтверждение нарушения неравенств Белла (в точном соответствии с предсказаниями квантовой теории) показало — согласно современной распространенной терминологии — неприменимость *локального реализма*. Остаются две основные альтернативы — признать *нелокальный реализм* или примириться с квантовой теорией в копенгагенской (или иной) трактовке. Иногда говорят также (довольно не последовательно) о *нелокальности квантовой теории*.

Однако при доказательстве неравенства Белла используется не просто факт существования корреляций или их величина (фактически в доказательстве фигурируют неполные корреляции), а некоторое более тонкое их свойство. Поэтому естественно возникает вопрос — являются ли сами по себе управляемые корреляции между показаниями двух приборов данного типа существенно квантовым явлением? Часто считают, что наличие этих корреляций является достаточным доказательством нелокальности и что парадокс Эйн-

штейна–Подольского–Розена (ЭПР) заключается именно в их существовании.

Фундаментальное различие квантовых и классических физических представлений наиболее контрастно проявляется при рассмотрении экспериментов, демонстрирующих парадокс ЭПР [1] в варианте Боба [2] и нарушение неравенств Белла [3]. Здесь целесообразно выделить два отдельных вопроса или «парадокса»:

- существование «нелокально» управляемой корреляции типа ЭПР-Боба между показаниями удаленных приборов и

- парадокс Белла — нарушение некоторых неравенств, составленных из этих показаний.

В первой задаче данной части практикума описывается действующая классическая радиотехническая модель, имеющая много общего с квантовыми ЭПР-моделями. Она демонстрирует первый из перечисленных выше парадоксов, т.е. имитирует управляемую корреляцию или антикорреляцию типа ЭПР-Боба, включая полную, 100%-ную. Ее анализ выявляет простой классический механизм как возникновения таких корреляций, так и воздействия на них удаленных наблюдателей, и тем самым снимает окружающий их ореол таинственности. Таким образом, первый парадокс лишается статуса истинного квантового парадокса, поскольку имеет классический аналог.

Второй парадокс — нарушение неравенства Белла — является истинным парадоксом, он демонстрирует принципиальное отличие квантовых и классических представлений. В проведенных до сих пор экспериментах он выявляется лишь в условиях неполной корреляции и лишь в результате статистической обработки достаточно большого массива экспериментальных данных. В нашей модели неравенства Белла, конечно, не нарушаются.

2. Парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена и управляемые классические корреляции

В 1935 году А.Эйнштейн, Б.Подольский и Н.Розен предложили мысленный эксперимент, на основании результатов которого они пришли к выводу, что квантово-механическое описание не является полным, и что существуют элементы реальности, которые не учитываются в квантовой механике.

2.1. Парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена и его формальное разрешение. Будем рассматривать так называемый парадокс ЭПР в варианте, предложенном Д. Бомом.

Пусть имеется система двух частиц, так что полный спин системы равен нулю. Например, это может быть электрон-позитронная пара. Другим примером служит двухфотонный распад атома, когда поляризации фотонов ортогональны. При спонтанном параметрическом рассеянии можно так ориентировать кристалл (или пару кристаллов), что излучение в двух пространственных модах будет также удовлетворять этому условию.

Совместное состояние пары частиц записывается в виде антисимметричной комбинации спиновых состояний со спином 1/2:

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\rangle|\uparrow_2\rangle]. \quad (2.1)$$

Здесь $|\uparrow_i\rangle$, $|\downarrow_i\rangle$ — собственные состояния z -компонент спина i -й частицы с собственными значениями 1/2. Антисимметричное (синглетное) состояние (2.1) инвариантно относительно вращений, т.е. оно сохраняет свой вид в любом базисе. Другими словами, это состояние имеет один и тот же вид независимо от того, какая ось используется для определения проекции спина. В частности, если выбрано направление x , то состояние (2.1) переходит в:

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\rightarrow_1\rangle|\leftarrow_2\rangle - |\leftarrow_1\rangle|\rightarrow_2\rangle], \quad (2.2)$$

где $|\rightarrow_i\rangle$, $|\leftarrow_i\rangle$ — собственные состояния x -компоненты спина.

Предположим, что две частицы разлетелись настолько далеко, что взаимодействием между ними можно пренебречь. Будем производить измерение z -компоненты спина одной частицы (или вертикальной поляризации в одном оптическом пучке). Это измерение, в соответствии с (2.1), может дать либо значение +1/2, либо -1/2. Если измерение дало результат +1/2, то коррелированная с ней частица должна оказаться в состоянии со спином -1/2. Объясняется это действием проекционного постулата: После проведения измерения над системой она проецируется на состояние данной наблюдаемой. В данном случае наблюдаемой служит проекция на ось z первой частицы. Поскольку какое-либо влияние между частицами исключено по условию эксперимента, то отсюда делается вывод, что вторая частица имела такое значение проекции спина и *до измерения* над первой частицей. То есть *априори* существовал элемент физической ре-

альности в виде определенного значения проекции спина второй частицы на ось z .

Теперь предположим, что в эксперименте измеряется x -компонента первой частицы. Согласно инвариантности состояния (2.1) относительно вращений будем рассматривать состояние (2.2), т.е. эквивалентное представление исходного состояния (2.1).

Аналогичные рассуждения приводят к тому, что у второй частицы априори существует определенное значение x -компоненты спина, в зависимости от результата измерения над первой частицей. Наблюдаемой в данном случае является значение x -компоненты спина первой частицы, а полное состояние системы проецируется либо на состояние $|\rightarrow_1\rangle|\leftarrow_2\rangle$, либо на состояние $|\leftarrow_1\rangle|\rightarrow_2\rangle$.

Поскольку две проекции спина — несовместные переменные, они соответствуют некоммутирующим операторам, то не существует такого состояния системы, в котором обе переменные имели бы определенные значения. Отсюда Эйнштейн, Подольский и Розен сделали вывод о неполноте квантово-механического описания, в которое следует добавить «скрытые» параметры.

Парадокс разрешается в рамках аппарата стандартной квантовой механики. Прежде всего, заметим, что поскольку рассматриваемые частицы «1» и «2» взаимодействовали в прошлом, то им нельзя по отдельности приписать волновую функцию. Существует лишь совместная волновая функция $|\Psi\rangle$. На языке поляризационной оптики это означает, что у обоих пучков степень поляризации равна нулю. Таким образом, состояние каждой частицы (или излучения в каждом из пучков) является смешанным и его следует описывать с помощью матрицы плотности. Из свойств матрицы плотности следует, что состояние одной из взаимодействующих частиц можно найти, взяв след по «лишним» переменным от матрицы плотности общей системы. Тогда до измерения его состояние есть:

$$\rho_2 = Sp_{(1)}\rho_{12} = Sp_{(1)}(|\Psi\rangle\langle\Psi|). \quad (2.3)$$

Здесь мы учли, что общее состояние описывается волновой функцией, т.е. является чистым. Тогда из (2.3) следует:

$$\rho_2 = Sp_{(1)}(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \frac{1}{2}[\lvert\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \lvert\downarrow\rangle\langle\downarrow|]. \quad (2.4)$$

Замечание. При выводе (2.4) мы воспользовались тем, что операция Sp оставляет только те компоненты выражения $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, ко-

торые содержат диагональные элементы по первой частице, т.е. вида $|\uparrow_1\rangle|\downarrow_2\rangle\langle\downarrow_2|\langle\uparrow_1|$.

С другой стороны, то же состояние описывается выражением (2.2):

$$\rho_2 = S p_{(1)} \left(|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| \right) = \frac{1}{2} [|\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| + |\leftarrow\rangle\langle\leftarrow|]. \quad (2.5)$$

Видно, что оператор плотности второй частицы представляется в виде единичного оператора с точностью до $1/2$ (поскольку $\hat{I} = \sum_n |n\rangle\langle n|$).

Что же происходит со второй частицей *после измерения*? Если измерялась z -компонента спина первой частицы, то состояние второй было либо $|\uparrow\rangle$, либо $|\downarrow\rangle$, причем с равной вероятностью. Если же измеряется x -компонента спина первой частицы, то с равной вероятностью состояние второй частицы оказывается либо $|\rightarrow\rangle$, либо $|\leftarrow\rangle$. Таким образом оператор плотности до и после измерения имеет один и тот же вид, хотя и описывает результаты разных экспериментов. Значит, экспериментально невозможно отличить все эти состояния.

2.2. Демонстрация ЭПР-корреляций. Предлагаемая модель реализует экспериментальную ситуацию, изображенную на рис. 2.1, и часто используемую при наглядном описании экспериментов типа ЭПР-Боба. Передатчик S время от времени посылает сообщения одновременно двум удаленным адресатам A и B . Сообщения содержат команды зажечь лампы зеленого или красного цвета. Символически четыре возможных альтернативных исхода одной передачи можно представить так: $(++)$, $(-+)$, $(+-)$ или $(--)$; здесь знак плюс соответствует зеленой лампе, минус — красной.

В распоряжении каждого наблюдателя A и B имеется по одной регулировочной ручке с тремя особыми положениями, маркированными знаками $-\pi$, 0 и $+\pi$.

Передачи многократно повторяются, причем исход каждой из них случаен — на каждом приемнике с равными вероятностями $1/2$, не зависящими от положения ручек α и β , зажигается или зеленая или красная лампа. Фактически в нашем демонстрационном эксперименте лампы вспыхивают примерно раз в секунду в течение половины секунды.

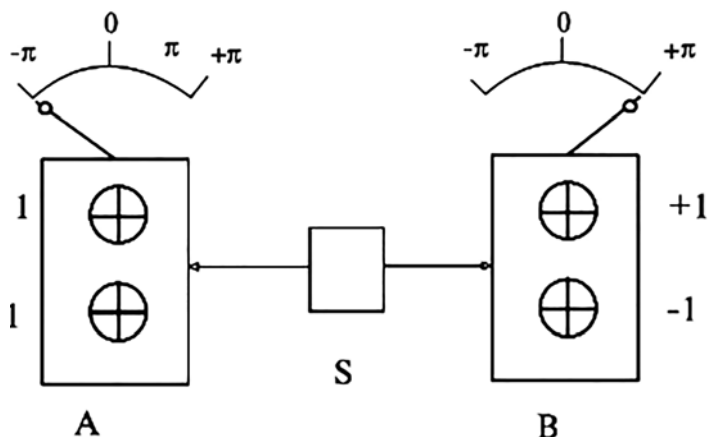


Рис. 2.1. Общая схема экспериментов для демонстрации корреляций ЭПР-типа и выявления нарушения или выполнения неравенств Белла

Наблюдатель S , видящий одновременно обе пары ламп в A и B , замечает, что между цветами вспыхивающих одновременно ламп имеется определенная корреляция, причем ее величина и знак зависят от положений ручек. Наиболее характерны три ситуации.

1. Если обе ручки стоят, например, в одинаковых средних положениях «0», то цвета ламп каждый раз одинаковы, т.е. наблюдаются только исходы $(++)$ или $(--)$. Таким образом, цвета полностью коррелированы. Полная корреляция наблюдается также и в более общем случае — при условии, что сумма координат ручек $\gamma = \alpha + \beta$ равна 0. (Практически из-за технических ограничений достигалась не идеальная корреляция, а лишь порядка 90%.)

2. Но стоит только одному из наблюдателей перевести свою ручку в одно из крайних положений — так, что $\gamma = \pm\pi$, как наблюдаются только исходы $(-+)$ или $(+-)$, т.е. цвета становятся антикоррелированными.

3. Наконец, если ручки стоят, например, в положениях «0» и « $\pi/2$ » (или, вообще, расположены так, что $\gamma = \pm\pi/2$), то корреляция цветов ламп в A и B полностью отсутствует.

Возникает естественный вопрос: как, например, положение ручки в A (или в B) может влиять на цвет лампы, которая загорится при очередной передаче в B (или в A)? Пусть ручки в A и B стоят в среднем положении «0». Наблюдатель в A увидев зеленую вспышку уверен, что в этот же момент вспыхнула зеленая лампа.

Переведя потом ручку в крайнее положение и опять увидев зеленую вспышку он теперь уверен, что в этот же момент вспыхнула уже красная лампа. Как лампы в B «узнают» о положении ручки в A ? Налицо, казалось бы, управление на расстоянии.

Описанные три серии наблюдений с нашей моделью в точности воспроизводят квантовую корреляцию, антикорреляцию или ее отсутствие, наблюдаемые в «настоящих» экспериментах типа ЭПР-Боба. В квантовом случае переносчиками информации служат пары фотонов или частиц со спином $1/2$ с коррелированными свойствами. Вспышкам ламп соответствует одновременная регистрация пары частиц в двух детекторах. Положениям ручек α и β на рис.2.1 соответствуют в оптических экспериментах длины оптических путей или ориентации поляризационных призм в интерферометрах интенсивности, а в экспериментах с ферми-частицами — ориентации магнитов Штерна–Герлаха. Правда, в квантовых экспериментах моменты передачи очередного «сообщения» (т.е. моменты вылета пар частиц) случайны, а в нашей модели они регулярны. Однако не представляет труда сделать их также случайными с помощью генератора случайных чисел. Квантовая стохастичность интервалов между сообщениями не имеет значения в обсуждаемых вопросах.

Нередко ответ на заданный выше вопрос в контексте квантовых экспериментов звучит так: «это проявление *квантовой нелокальности*». При этом, по-видимому, имеется ввиду некоторое таинственное сверхсветовое влияние аппаратуры в A на события в B (или наоборот). Иногда также говорится, что квантовая механика предсказывает более сильные корреляции, чем это допускается *локальными* классическими теориями или *локальным реализмом*. Под *локальностью* понимается, соответственно, отсутствие дальнего действия за счет неизвестных взаимодействий между аппаратурой в A и B ¹⁾. Еще один популярный термин — «несепарабельность квантовых объектов». В данном контексте под этим понимается необходимость совместного описания пар коррелированных частиц, даже если они разлетелись на большое расстояние, невозможность их раздельного, индивидуального описания (в этом смысле пары электрических сигналов в нашем эксперименте также можно считать несепарабельными).

¹⁾ Однако, наиболее часто термин *нелокальность* употребляют при неполной ЭПР-корреляции в связи с нарушением неравенств Белла в квантовых моделях и экспериментах.

Более конкретный и точный ответ заключается в том, что положения ручек влияют лишь на «свои» лампы и что этого вполне достаточно для изменения степени и знака корреляции удаленных сигналов. Это утверждение, по-видимому, не совсем тривиально и рассматриваемая модель должна помочь преодолеть устоявшееся предубеждение. В нашей модели, как и в “настоящих” квантовых ЭПР-моделях, используется некоторый общий принцип управления “на расстоянии” парными корреляциями. Это управление осуществляется путем отбора определенных подмножеств из имеющегося в A и B общего информационного множества. Он поясняется далее на простом конкретном примере (см. ниже рисунок 2.3). Отличие классической и квантовой моделей заключается лишь в способе описания этого общего априорного множества. В первом случае это можно сделать с помощью совместных вероятностей для всех возможных “сообщений”, а во втором — лишь с помощью волновой функции переносчика информации.

Таким образом, воздействие удаленных наблюдателей на их взаимные корреляции не означает, как и следовало ожидать, какого-либо таинственного дальнего действия, оно вполне локально. Обратим внимание, что наблюдение корреляции требует передачи информации от A и B (протоколов испытаний с фиксацией номера или времени передачи) с помощью обычных каналов к третьему наблюдателю C ; сами же A и B никакого видимого влияния положения ручек — своих или чужих — на характер вспышек не замечают. Это обстоятельство исключает часто обсуждаемую возможность сверхсветового обмена информацией между A и B с помощью ЭПР-корреляции.

3. Проверка неравенства Белла

Доказательство неприменимости скрытых параметров для описания некоторых предсказаний квантовых моделей называют теоремой Белла.

Ниже будет рассмотрен случай двух наблюдателей и дихотомной наблюдаемой (или так называемый телеграфный сигнал, т.е. сигнал, принимающий два значения). Однако если число наблюдателей N растет, то, как показали независимо Д.Н.Клышко и Д.Мермин, отношение квантового и классического пределов для некоторой наблюдаемой величины S_N растет как $2^{(N-1)/2}$.

3.1. Неравенство Белла. Рассмотрим некоторый случайный процесс, который можно характеризовать четырьмя переменными A, A', B, B' . Каждая дискретная случайная величина может принимать два значения, например: $A' \rightarrow a' = \pm 1$, и т.д. (В квантовой теории такой параметризации отвечают операторы некой физической величины и принимаемые собственные значения). Иногда мы будем писать $A' = \pm 1$ и т.д.

Для наглядности будем полагать, что имеется передатчик, который посылает сообщения двум наблюдателям, A и B . У каждого наблюдателя имеется по одной ручке, с помощью которой он может менять свою наблюдаемую: $A \rightarrow A', B \rightarrow B'$ (см. рис.2.1). В общем случае число положений ручки произвольно, т.е. наблюдаемые A и B зависят от параметров $A(\alpha), B(\beta)$. Например, сообщение состоит в команде зажечь лампу красного (–) или зеленого (+) цвета. Одна передача может содержать четыре исхода: $(++)$, $(+-)$, $(-+)$, $(--)$. Передачи повторяются многократно, а исход каждой из них случаен. Т.е. независимо от выбора наблюдаемой, A или A', B или B' , у каждого наблюдателя загорается красная или зеленая лампа. Эксперимент состоит в выяснении корреляции цвета ламп у разных наблюдателей. Опишем этот процесс математически.

Предположим, что существует положительно определенная нормированная функция совместного распределения вероятностей этих четырех величин:

$$P(A, A', B, B') \geq 0, \quad (2.6)$$

удовлетворяющая условию нормировки:

$$\sum_{a, a', b, b'} P(A, A', B, B') = 1. \quad (2.7)$$

Для функций распределения можно вычислять маргинальные вероятности по правилам:

$$P(+1, A', B, B') + P(-1, A', B, B') = P(A', B, B'). \quad (2.8)$$

Введем величину S — так называемую наблюдаемую Белла, которая выражается через моменты наблюдаемых величин:

$$\langle S \rangle \equiv \frac{1}{2} \{ \langle AB \rangle + \langle A'B \rangle + \langle AB' \rangle - \langle A'B' \rangle \}. \quad (2.9)$$

Неравенство Белла (часто его называют неравенством Белла типа Гринберга–Хорна–Шимони–Хольта) имеет вид (доказательство вынесено в приложение):

$$|\langle S \rangle| \leq 1. \quad (2.10)$$

Таким образом, величина S , составленная из результатов наблюдений, не может по модулю превышать единицу! Это неравенство нарушается в экспериментах с объектами, которые описываются квантово-механически (на языке волновых функций).

Важно, что принципиальное отличие классических и квантовых экспериментов с двумя наблюдателями типа ЭПР-Боба проявляется лишь при некоторых **промежуточных** положениях ручек, отличных от рассмотренных выше и вызывающих **неполную** корреляцию. При этом для выявления этого отличия надо проводить по меньшей мере четыре серии наблюдений (при четырех положениях ручек (α, β)) и рассчитывать из них четыре коэффициента корреляции. Таким образом, это отличие имеет лишь статистический характер.

Введем следующую параметризацию результатов эксперимента, изображенного на рис 2.1. При загорании зеленой или красной лампы у левого приемника будем приписывать дискретной случайной величине A значения $a = +1$ или $a = -1$ соответственно. Аналогично, пусть дихотомная (двузначная) случайная величина B со значениями $b = \pm 1$ отображает цвет загорающихся ламп у правого приемника. Пусть переменные α, β с интервалом значений $(-\pi, +\pi)$ обозначают положения регулировочных ручек, влияющих каким-то образом на совместную статистику A и B , а переменная $\gamma = \alpha + \beta$ — их сумму. Итак, имеются два «телеграфных» случайных процесса $a_i(\alpha)$ и $b_i(\beta)$, корреляция между которыми зависит от двух регулируемых параметров α и β (i — номер испытания).

Степень корреляции удобно характеризовать средним значением от произведения наблюдаемых случайных чисел: $M(\gamma) = \langle A(\alpha)B(\beta) \rangle$. Таким образом, $M = +1$ соответствует полной корреляции, $M = -1$ — антикорреляции и $M = 0$ отсутствию корреляции. В этой связи будем называть параметр M просто *корреляцией*.

На рис.2.2 изображены три зависимости $M(\gamma)$: зависимость, полученная согласно классической теории для нашей модели, дающей

$$M_{class}(\gamma) = 1 - 2|\gamma|/\pi \quad (-\pi \leq \gamma \leq +\pi), \quad (2.11)$$

зависимость, полученная согласно квантовой теории для “настоящих” экспериментов ЭПР-типа, дающей

$$M_{quant}(\gamma) = \cos \gamma, \quad (2.12)$$

и зависимость, получаемая по результатам экспериментов с нашей радиотехнической моделью. Ромбами отмечены точки пересечения квантовой и классической зависимостей, обсуждавшиеся выше, а кружками и квадратами — точки, используемые обычно при формулировке и проверке неравенства Белла (см. ниже). Отметим, что известная классическая ЭПР-модель, состоящая из двух частиц с коррелированными угловыми моментами также приводит к зависимости (2.11).

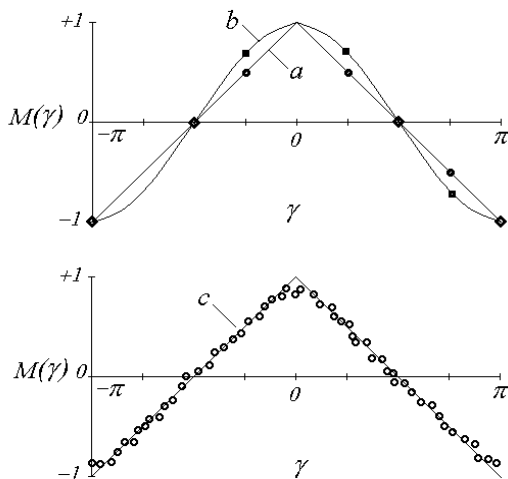


Рис. 2.2. Зависимость корреляции $M = \langle AB \rangle$ цвета ламп на рис.2.1 от суммы координат регулировочных ручек $\gamma = \alpha + \beta$ согласно классической теории (a), квантовой теории (b) и рассматриваемого эксперимента (c)

Итак, наблюдаемое отличие рассматриваемых конкретных моделей сводится к различию вида зависимости корреляции $M(\gamma) = \langle AB \rangle$ от суммы координат ручек $\gamma = \alpha + \beta$ — косинусоидальной кривой или ломаной прямой. Превышение по абсолютной величине квантовой корреляции над классической (для наших частных моделей) достигает 41% при $\gamma = \pm\pi/4, \pm 3\pi/4$ (см. кружки и квадраты на рис.2.2). Таким образом, если исключить общие точки

$0, \pm\pi/2, \pm\pi$, то в рассматриваемых примерах квантовые корреляции действительно несколько сильнее классических.

Можно показать, что среднее значение $M(\gamma) = \langle AB \rangle$ определяет также и совместное распределение вероятностей $P(a,b) = (1+abM)/4$ для случайных величин A и B (здесь $a, b = \pm 1$). В соответствии с (2.11), (2.12) это распределение имеет следующую форму в классической и квантовой моделях:

$$P(++) = P(--)=\frac{1}{2} - \frac{|\gamma|}{2\pi}, \quad P(+-)=P(-+)=\frac{|\gamma|}{2\pi}, \quad (2.13)$$

$$P(++) = P(--)=\frac{1}{2} \cos^2\left(\frac{\gamma}{2}\right), \quad P(+-)=P(-+)=\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\gamma}{2}\right) \quad (2.14)$$

Здесь, например, $P(+,-)$ — относительная частота события $(+,-)$ при достаточно большом числе испытаний. Следовательно, обычное определение среднего значения дает

$$M = \sum_{a,b} abP(a,b) = P(++) + P(--)-P(-+)-P(+-) = 4P(++) - 1.$$

Протокол некоторой серии испытаний с фиксированными a, b запишется в виде таблицы следующего вида.

i	a_i	b_i	$m_i = a_i b_i$
	$\alpha = \pi/2$	$\beta = \pi/4$	$\gamma = 3\pi/4$
1	+1	-1	-1
2	-1	-1	+1
3	-1	+1	-1
4	+1	-1	-1
5	+1	+1	+1

В последней колонке выписаны произведения $m_i = a_i b_i$, характеризующие после усреднения корреляцию между цветами ламп. Статистическая обработка таких записей, полученных при различных парах α и β , была представлена выше на рис.2.2с. Оказалось, что среднее значение $M = \langle m_i \rangle$, в соответствии с теоретическими зависимостями (2.11), (2.12), зависит лишь от суммы координат регулировочных ручек γ .

Проведем теперь последовательно 4 серии испытаний (из N испытаний в каждом) со следующими 4 наборами параметров:

$$(\alpha, \beta) = (0, -\pi/4), (\pi/2, -\pi/4), (0, \pi/4), (\pi/2, \pi/4).$$

При этом, соответственно, $\gamma = -\pi/4, \pi/4, \pi/4, 3\pi/4$, см. рис. 2.2. Обозначим

$$A \equiv a(0), a' \equiv a(\pi/2), b \equiv b(-\pi/4), b' \equiv b(\pi/4)$$

и образуем N чисел

$$s_k \equiv \frac{1}{2} (a_k b_k + a'_{N+k} b_{N+k} + a_{2N+k} b'_{2N+k} - a'_{3N+k} b'_{3N+k}). \quad (2.15)$$

Эти числа принимают с определенными вероятностями значения 0, $\pm 1, \pm 2$, т.е. они реализуют некоторую случайную величину S . Подчеркнем, что для вычисления ее отдельной реализации s_k используются результаты четырех различных испытаний при указанных наборах (α, β) .

После усреднения полученных чисел s_k при достаточно большом N мы обнаружим, что $\langle S \rangle_{\text{exp}} \approx 1$. Этот же результат следует из (2.11) или графика на рис.2.2а:

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &= \frac{\langle AB \rangle + \langle A'B \rangle + \langle AB' \rangle - \langle A'B' \rangle}{2} = \\ &= \frac{M(-\pi/4) + M(\pi/4) + M(\pi/4) - M(3\pi/4)}{2} = \frac{1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2}{2} = 1. \end{aligned}$$

Полученное значение $\langle S \rangle$ является максимальным для любых классических моделей, так как в последних должно выполняться следующее неравенство Белла:

$$|\langle S \rangle_{\text{class}}| \leq 1. \quad (2.16)$$

В то же время в соответствующих квантовых моделях имеет место более слабое ограничение

$$|\langle S \rangle_{\text{quant}}| \leq \sqrt{2}. \quad (2.17)$$

Это предельное значение как раз обеспечивается функцией (2.12):

$$|\langle S \rangle_{\text{quant}}| = \frac{1}{2} [\cos(-\pi/4) + \cos(\pi/4) + \cos(\pi/4) - \cos(3\pi/4)] = \sqrt{2}.$$

Полученное различие на 41% квантового и классического значений для величины $\langle S \rangle$ максимально для рассматриваемых моделей, при другом выборе набора параметров α и β оно будет меньше.

Заметим, что отдельные реализации S_k , а также их усредненные значения, найденные при **конечном** N , могут превышать по модулю пределы в (2.16), (2.17), т.е. эти неравенства имеют лишь статистический характер.

Подчеркнем, что неравенства (2.16), (2.17) ограничивают не саму величину корреляции $M(\gamma)$ наблюдаемых A и B , а лишь среднее от некоторой билинейной комбинации этих наблюдаемых при различных α и β , т.е. ограничивает некоторый функционал $S(\alpha, \beta, \alpha', \beta')$ от $M(\alpha + \beta)$.

Доказательство неприменимости скрытых параметров для описания некоторых предсказаний квантовых моделей часто называют теоремой Белла.

4. Управление корреляцией на расстоянии

Рассмотрим сначала простой метод получения двух дихотомных случайных сигналов с регулируемой степенью взаимной корреляции из одного непрерывного случайного процесса. Пусть $\phi(t)$ — стационарный случайный процесс с $\langle \phi \rangle = 0$, определяющий случайную фазу, которая равномерно распределена на приведенном интервале $0 \div 2\pi$. Образует из него случайный телеграфный сигнал с помощью алгоритма

$$a(\alpha, t) \equiv \text{sign}\{\cos[\phi(t) + \alpha]\}, \quad (2.18)$$

где α — произвольный параметр. Из этого определения следует, что $\langle a(\alpha) \rangle = 0$ и $a(\alpha \pm \pi) = -a(\alpha)$, т.е. сигналы $a(\alpha)$ и $a(\alpha \pm \pi)$ антикоррелированы. В то же время $a \equiv a(\alpha)$ и

$$a' \equiv a(\alpha \pm p/2) = \mp \text{sign}\{\sin[\phi(t) + \alpha]\} \quad (2.19)$$

— некоррелированные сигналы, так как $\cos x$ и $\sin x$ — ортогональные функции (см. рис.2.3). Нетрудно найти корреляцию сигналов $a(\alpha)$ и $a(a + \Delta\alpha)$ в общем случае:

$$M(\Delta\alpha) \equiv \langle a(\alpha)a(\alpha + \Delta\alpha) \rangle = 1 - \frac{2}{\pi}|\Delta\alpha| \quad (-\pi \leq \Delta\alpha \leq \pi). \quad (2.20)$$

Таким образом, из одного случайного процесса $\phi(t)$ мы можем образовать два (или более) случайных дихотомных сигнала $a(\alpha)$ и $a(\alpha + \Delta\alpha)$ с произвольной степенью корреляции между ними $M(\Delta\alpha)$, лежащей между -1 и $+1$. Следовательно, если передать (например,

по радио или интернет-связи) один и тот же процесс $\phi(t)$ несколькими удаленным

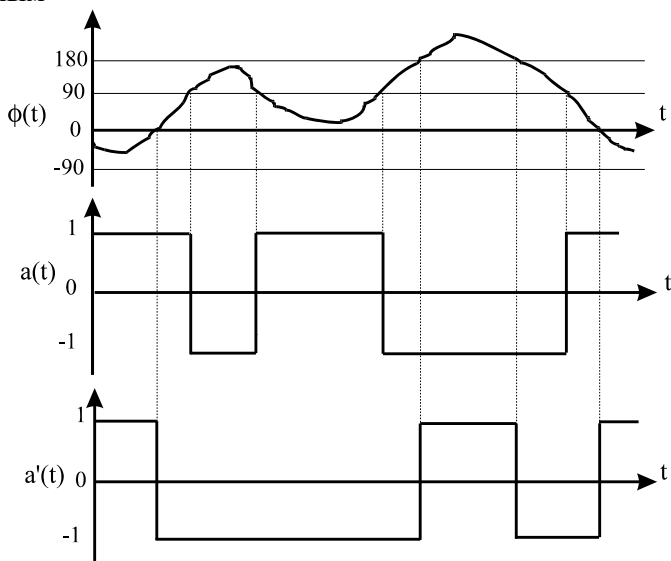


Рис. 2.3. Формирование двух независимых телеграфных сигналов $a(t)$ и $a'(t)$ из одного случайного процесса по правилу (2.19)

наблюдателям, то каждый из них с помощью «своего» локального параметра a_n сможет влиять «на расстоянии» на парную взаимную корреляцию наблюдаемых. Этот эффект является классическим аналогом корреляции ЭПР-Боба. Однако, характер зависимости корреляции от параметров здесь другой, см. рис.2.2. В «настоящих» ЭПР-экспериментах телеграфный характер сигналов обусловлен дихотомным спектром наблюдаемых операторов: число проекций спина $1/2$ на выделенное направление и число типов поляризации фотона равно двум. Здесь же дихотомность обеспечивается двузначностью функции $\text{sign}(x)$. Для реализации описанной процедуры промодулируем случайным сигналом $\phi(t)$ фазу «несущего» монохроматического колебания $X(t)$ с частотой ω_a : $X(t) = \cos[\omega_a t + \phi(t)]$ (полагаем время корреляции t_f процесса $\phi(t)$ много большим периода колебания $1/\omega_a$). Далее введем в колебание $X(t)$ регулируемый сдвиг фазы α и смешаем его с «гомодинным» колебанием $\cos(\omega_a t)$, имеющим стабильную фазу. Полученную суперпозицию

$$Z(t) = \cos[\omega_a t + \phi(t) + \alpha] + \cos(\omega_a t)$$

продетектируем. На выходе квадратичного детектора (после фильтрации высокочастотной компоненты с частотой $2\omega_a$) получим низкочастотный сигнал $|Z(t)|^2 \approx 2 + 2\cos[\phi(t) + \alpha]$. Отсюда с помощью нелинейного усиления с ограничением нетрудно сформировать нужный сигнал $a(\alpha, t)$ вида (2.19).

Далее промодулируем одним и тем же случайным процессом $\phi(t)$ два колебания (возможно с разными средними частотами, $\omega_a \neq \omega_b$) и пошлем их по системе связи двум адресатам A, B , где из них с помощью гомодинных фазовых детекторов описанным выше способом образуются два телеграфных сигнала $a(\alpha, t)$ и $b(\beta, t)$ (здесь α, β — фазы, добавляемые в приемных пунктах A и B). При этом $\langle a \rangle = \langle b \rangle = 0$ независимо от α и β , но наблюдатель C , располагающий реализациями обоих процессов, обнаружит описанную выше корреляцию (ср. (2.20)), зависящую от разности фаз:

$$M(\alpha - \beta) = \langle \alpha \beta \rangle = 1 - \frac{2|\alpha - \beta|}{\pi}. \quad (2.21)$$

Существенно, что значение этой корреляции зависит от обоих параметров α и β , т.е. каждый наблюдатель A и B может изменить ее величину и знак, причем он сам никаких изменений не обнаружит. При изменении, например, α из исходного общего процесса $\phi(t)$ формируется другой сигнал $a(\alpha) \rightarrow a(\alpha + \Delta\alpha)$, который при $\Delta\alpha = \pi$ антикоррелирован с первоначальным сигналом.

Этот пример наглядно показывает, что можно влиять на корреляцию двух стохастических процессов в удаленных областях изменяя лишь один из них. Следовательно, и в контексте квантовых ЭПР-экспериментов нет никакой необходимости для объяснения зависимости корреляций от регулировочных ручек на рис.2.1 говорить о каком-то таинственном «нелокальном влиянии» измерений в удаленных детекторах друг на друга.

Отметим возможность передачи в A и B случайного процесса $\phi(t)$ непосредственно (по телефону), без использования «несущих» колебаний, с его последующей обработкой в приемных пунктах, а также варианты с управляемой корреляцией $\langle a_1 a_2 \dots a_N \rangle$ между N приемниками.

Подчеркнем, что описанный здесь классический имитатор квантовых эффектов, использующий два двухконтурных параметрических генератора (см. Приложение 1), во многом аналогичен «настоящим» ЭПР-установкам. Известны три основных типа таких устано-

вок: на пучках ферми-частиц со спином $1/2$ и оптические, с использованием обычных или поляризационных интерферометров интенсивности.

В оптических ЭПР-экспериментах в последнее время также используют параметрические источники света, но в режиме усиления, когда излучаемый свет порождается собственным квантовым шумом параметрического усилителя, (эффект *параметрического рассеяния света*). При этом операторы наблюдаемых величин $A=A(0)$, $A'=A(\pi/2)$ можно интерпретировать как операторы $\cos(\phi)$ и $\sin(\phi)$, где ϕ — разность фаз двух колебаний. В оптике для фазового детектирования используются светоделители. И в классической, и в квантовооптической моделях общая информация, посылаемая в i -й передаче к наблюдателям, закодирована в случайной фазе ϕ_i , что позволяет наблюдателям образовывать двузначные телеграфные сигналы с регулируемой степенью корреляции.

Формальное описание поляризационных оптических и спиновых ЭПР-экспериментов также имеет много общего с рассмотренной моделью. В поляризационных экспериментах общей случайной фазой можно считать угол поляризации, при этом управление отбором информации производится поляризационной призмой. В экспериментах с ферми-частицами роль случайной фазы играет угол между спином и магнитным полем Штерна–Герлаха. Принципиальное отличие квантовых экспериментов, приводящее к возможности нарушения неравенств Белла, сводится «лишь» к невозможности одновременно, в одном испытании, измерить $A_i(\alpha)$ и $A_i(\alpha')$ при $\alpha \neq \alpha'$ — так как в каждом приемном пункте при каждом испытании в распоряжении имеется только один фотон или ферми-частица.

Таким образом, описанная действующая классическая модель наглядно показывает, что управляемый на расстоянии эффект корреляции типа ЭПР-Боба имеет близкий классический аналог, сам по себе этот эффект не свидетельствует о каких-либо таинственных сверхсветовых влияниях.

В то же время все минимально разумные классические модели должны удовлетворять неравенству Белла и его нарушение в квантовых моделях является истинным парадоксом. Возможны три основных объяснения факта нарушения неравенства Белла: *можно отрицать или понятие совместных вероятностей, или их положительность, или локальность.*

Итак, имеются три альтернативы:

- 1) отказ от совместных вероятностей,

2) совместные вероятности плюс возможность их отрицательных значений,

3) совместные вероятности плюс неизвестные сверхсветовые сигналы.

(Скрытые параметры, обеспечивающие детерминизм, подразумевают существование совместных вероятностей и являются поэтому частным случаем второго или третьего выбора.)

Действительно, нарушение неравенства Белла, имеющее место в квантовой теории, можно при желании объяснить и в рамках классической представлений о совместных вероятностях, но лишь ценой введения неизвестных дальнедействующих сил между измерительными приборами или отказа от неотрицательности вероятности. Отсюда часто делается вывод (противоречащий, по-видимому, правилам формальной логики), что квантовая теория и квантовые явления *нелокальны*. Иногда также говорят, что нарушение неравенств Белла свидетельствует о неприменимости *локального реализма*, т.е. реализм приравнивается к применимости понятия совместных вероятностей и априорных свойств.

Помимо общих соображений имеется конкретное возражение против нелокального объяснения парадокса Белла: ведь взаимодействие между удаленными приборами должно не просто снять ограничение $\langle S \rangle \leq 1$, но обеспечить точное квантовое значение $\langle S \rangle = \sqrt{2}$, причем независимо от деталей конструкции аппаратуры.

Принятие отрицательных вероятностей является чисто формальным приемом, не имеющим операционального смысла. Остается выбор между нелокальностью — возможностью влияния ручек в A на показания в B и т.д. — и отказом от априорного существования наблюдаемых — в соответствии с общепринятыми квантовыми постулатами.

Таким образом, из трех зол наименьшим представляется первое — отказ от понятия совместных вероятностей, от возможности приписывания квантовым объектам некоторых априорных свойств (соответствующих некоммутирующим операторам). Такое заключение непосредственно связано с принципом дополненности, т.е. оно уже входит в существующую парадигму квантовой физики, поэтому естественно считать нарушение неравенств Белла еще одним (возможно, наиболее непосредственным) свидетельством в пользу принципа дополненности, а не доказательством существования

неизвестных взаимодействий или не имеющих физического смысла отрицательных вероятностей.

Отметим, что вывод о неприменимости понятия совместных вероятностей можно сделать и вне связи с неравенством $|\langle S \rangle| \leq 1$, а исходя из формальных выражений для средних значений от произведений некоммутирующих операторов, приводящих к отрицательным и неоднозначным «вероятностям». Таким образом, квантовые ЭПР-модели обладают двумя существенными отличиями от классических: невыполнение в них неравенства $|\langle S \rangle| \leq 1$ и отрицательность совместных «вероятностей» для некоммутирующих наблюдаемых, вычисляемая по классическим правилам. Первое отличие можно непосредственно обнаружить в эксперименте, а второе — нет. Отказ от понятия совместных вероятностей разрешает оба противоречия.

Конечно, при выборе первой альтернативы остается «вечная» общая проблема интерпретации квантового формализма. Она включает преодоление позитивистского характера его копенгагенской трактовки, запрещающей задавать природе «лишние» вопросы. В контексте ЭПР-экспериментов эта проблема, по-видимому, обостряется: приходится примириться с тем, что хотя до измерения некоторые свойства реальности существуют лишь потенциально, но корреляция между ними все равно имеется. И все же при учете описанного выше простого классического аналога парадокс ЭПР-Боба–Белла представляется не более и не менее загадочным, чем, скажем, невозможность одновременного точного измерения координаты и импульса частицы.

Единственный экспериментально наблюдаемый статистический факт в случае квантовых моделей — косинусоидальная зависимость функции $M(\gamma)$ с экстремальными значениями ± 1 , изображенная на рис.2.2b. Именно такая зависимость наблюдается в опытах по интерференции интенсивности света в случае использования источников «неклассического» (двухфотонного) света. При использовании классического источника света можно на той же самой установке получить такую же косинусоидальную зависимость, но с экстремальными значениями $\pm 0,5$, что дает в два раза меньшее значение $\langle S \rangle$ ($\langle S \rangle = 1/\sqrt{2}$), т.е. не нарушает неравенства Белла.

ЗАДАЧА 2.1. Управляемые классические корреляции типа Эйнштейна–Подольского–Розена

Описание схемы ЭПР-имитатора

Схема ЭПР-имитатора, используемая в задаче, показана на рис.2.4. В принципиальном плане она состоит из передатчика **S** и двух приемников **A** и **B** с регулируемыми фазовыми задержками (см. рис.2.1). Передатчик включает в себя:

- генератор накачки ГН
- двухконтурные параметрические генераторы ПГ1, ПГ2.

Приемники (идентичные) состоят из:

- входных усилителей-ограничителей Д1, Д2 и Д3, Д4,
- цифровых линий задержки Л1 и Л2,
- перемножителей логических сигналов М1 и М2,
- фильтров низких частот Ф1 и Ф2,
- схем индикации СИ1 и СИ2 с индикаторными лампами (К — красной и З — зеленой).

Передатчик содержит два двухконтурных параметрических генератора ПГ1 и ПГ2 (см. Приложение 1), работающих в невырожденном режиме с общим генератором накачки. Каждый ПГ настроен на частоту $\omega_0 = 3$ МГц. Частоты $\omega_{a1,2}$ и $\omega_{b1,2}$ комбинационных параметрических колебаний на выходах ПГ некратны и близки к частотам порядка 1 и 2 МГц.

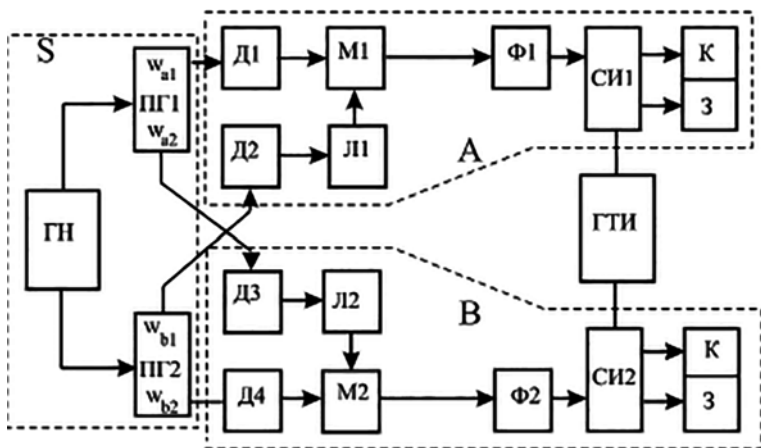


Рис. 2.4. Функциональная схема имитатора

В устройстве используется непрерывное напряжение накачки без случайной модуляции во времени, поскольку для моделирования ЭПР-корреляций стохастичность сигналов определяется свободной флуктуацией фаз. Действительно, поскольку фиксирована только сумма фаз комбинационных колебаний (которая в каждом ПГ равна фазе накачки $\varphi_{1,2} + \varphi'_{1,2} = \varphi_0 = 0$), то мгновенные значения разности фаз двух близких по частоте колебаний всегда одинаковы и противоположны по знаку: $\varphi = -\varphi'$.

Входные усилители-ограничители Д1–Д4 предназначены для преобразования входных гармонических сигналов в импульсы логических уровней со скважностью 2. При этом происходит устранение нежелательной амплитудной модуляции, а фазовая информация полностью сохраняется. После усилителей-ограничителей все четыре сигнала имеют одинаковые энергетические характеристики. Если логическому уровню «1» присписать значение +1, а логическому уровню «0» — значение –1, то преобразование для приемников А и В, соответственно, будет иметь следующий вид:

$$A: a(t) = \cos[\omega_a t + \varphi_{1,2}(t)] \rightarrow \text{sign}[a(t)] = \text{sign}\{\cos[\omega_a t + \varphi_{1,2}(t)]\}$$

$$B: b(t) = \cos[\omega_b t - \varphi_{1,2}(t)] \rightarrow \text{sign}[b(t)] = \text{sign}\{\cos[\omega_b t - \varphi_{1,2}(t)]\}$$

Использование сигналов логических уровней позволило применить простые и достаточно точные линии задержки Л1 и Л2 на цифровых логических элементах.

Цифровые линии задержки Л1 и Л2 включены на выходах компараторов сигналов в каждом приемнике и служат для внесения дополнительных фазовых сдвигов α и β . В устройстве, используемом в задаче, элементарный фазовый сдвиг составляет **0.16 радиан**.

Перемножители логических сигналов М1 и М2 работают по схеме антисовпадений («Исключающее ИЛИ»). На их выходах присутствуют сигналы суммарных и разностных частот. Например, для приемника А:

$$\begin{aligned} & \text{sign}[\cos(\omega_a t + \varphi_1(t) + \alpha)] \cdot \text{sign}[\cos(\omega_a t + \varphi_2(t))] = \\ & \text{sign}[\cos(\omega_a t + \varphi_1(t) + \alpha)] \cdot \cos(\omega_a t + \varphi_2(t)) = \\ & \text{sign}[\cos(\varphi_1 - \varphi_2 + \alpha) + \cos(2\omega_a t + \varphi_1 + \varphi_2 + \alpha)] = \\ & \text{sign}[\cos(\varphi(t) + \alpha) + \cos(2\omega_a t + \varphi_1 + \varphi_2 + \alpha)]. \end{aligned}$$

Аналогично, для сигнала в приемнике В:

$$\begin{aligned} & \text{sign}[\cos(\omega_b t - \varphi_1(t) + \beta)] \cdot \text{sign}[\cos(\omega_b t \varphi_2(t))] = \\ & \text{sign}[\cos(\varphi_2 - \varphi_1 + \beta) + \cos(2\omega_b t - \varphi_1 - \varphi_2 + \beta)] = \\ & \text{sign}[\cos(-\varphi(t) + \beta) + \cos(2\omega_b t - \varphi_1 - \varphi_2 + \beta)]. \end{aligned}$$

Сигналы разностных частот выделяются при помощи низкочастотных фильтров $\Phi 1$ и $\Phi 2$ со временем усреднения $\pi/\omega \ll \tau \ll 2\pi/(\varphi_1 - \varphi_2)$. При таком усреднении на выходах фильтров получают пилообразные сигналы вида

$$\langle \text{sign}[\cos(\varphi_1 - \varphi_2 + \alpha) + \cos(2\omega_a t)] \rangle = 1 - 2|\varphi_1 - \varphi_2 + \alpha|/\pi,$$

где $\varphi_1 - \varphi_2 + \alpha$ принимает значения от $-\pi$ до $+\pi$.

После усиления-ограничения на входных усилителях схемы индикации пилообразные сигналы (3) преобразуются в прямоугольные по уровню 0. Системы индикации (СИ) управляются общим генератором тактовых импульсов ГТИ (в задаче используется генератор Г5-54), частота следования которых задается при помощи ручки «ЧАСТОТА ПОВТОРЕНИЯ Hz».

$$\text{sign}[1 - 2|\varphi_1 - \varphi_2 + \alpha|/\pi] = \begin{cases} +1, & -\pi/2 < \varphi_1 - \varphi_2 + \alpha < +\pi/2, \\ 0, & \varphi_1 - \varphi_2 + \alpha = -\pi/2, +\pi/2, \\ -1, & +\pi/2 < \varphi_1 - \varphi_2 + \alpha < +3\pi/2. \end{cases}$$

Значению (+1) соответствует свечение зеленого индикатора, а значению (-1) — свечение красного индикатора. Таким образом, при регистрации мгновенной разности фаз сигналов в интервале $-\pi/2 - +\pi/2$ загорается зеленый индикатор, а при регистрации мгновенной разности фаз сигналов в интервале $+\pi/2 - +3\pi/2$ — красный.

Знак разности фаз (или косинуса разности фаз) определяется по фронту тактового импульса от внешнего генератора одновременно в обоих каналах, а затем данное состояние индицируется на протяжении тактового импульса в течение приблизительно 0.5 сек.

В задаче используется два режима работы ЭПР-имитатора:

— режим визуальной индикации. При этом устанавливается низкая частота повторения тактовых импульсов — порядка одного герца;

— режим индикации уровня корреляции при помощи частотомера. Дискретное изменение фазовой задержки α (и β) в каждом канале производится двумя многооборотными переключателями. Единичная фазовая задержка добавляется (вычитается) при повороте любого переключателя на один шаг, что составляет приблизительно 0.16 рад. Таким образом, для включения в канале А, например, задержки 0.32 рад. можно, используя переключатели канала А:

либо повернуть ручку большого диаметра на два шага по часовой стрелке ($2 \times 0.16 \text{ рад.} = 0.32 \text{ рад.}$),

либо повернуть ручку меньшего диаметра на два шага по часовой стрелке ($2 \times 0.16 \text{ рад.} = 0.32 \text{ рад.}$),

либо — на один шаг повернуть ручку большого диаметра, а затем — меньшего (или наоборот).

У п р а ж н е н и е 1

1.1 Установить частоту повторения ГТИ 10^5 Гц. При этом показания частотомера будут соответствовать уровню корреляции цвета светодиодов (красный или зеленый) в каналах А и В.

1.2 Внося фазовые задержки в канале А при неизменной задержке канала В измерить зависимость уровня корреляции от величины α . Результаты представить в виде графика $f = f(\alpha) = 1 - 2\gamma(\alpha)$, где γ — показания частотомера ($0.1 < \gamma < 0.9$). Определить положение переключателей, соответствующих $\alpha = -\pi$, $-\pi/2$, $\pi/2$, π и $\alpha' = \pi/2$. Измерения провести для полного периода функции f .

1.3 Для значений $\alpha = 0$ и $\alpha' = \pi/2$ найти задержки β и β' в канале В такие, для которых

$$\gamma_1 = \alpha + \beta = -\pi/4, \quad \gamma_2 = \alpha' + \beta = \pi/4, \quad \gamma_3 = \alpha + \beta' = \pi/4, \quad \gamma_4 = \alpha' + \beta' = 3\pi/4.$$

У п р а ж н е н и е 2

2.1 Установить минимальную частоту повторения ГТИ (≈ 0.5 Гц).

2.2 Визуально исследовать корреляцию, антикорреляцию и отсутствие корреляции показаний индикаторов каналов А и В для определенных в упражнении 1 задержек

$$\gamma = -\pi, -\pi/2, 0, \pi/2, \pi.$$

Упражнение 3

В таблицу протокола испытаний (выдается преподавателем) занести показания 50-ти измерений для каждой из четырех комбинаций фазовых задержек α , β , α' , β' . При этом в каждом измерении необходимо записать цвет загорающего светодиода для *обоих* каналов. Например:

Протокол $\gamma_1 = \alpha + \beta = -\pi/4$,

Номер испытания k	Канал А		Канал В	
	Красный	Зеленый	Красный	Зеленый
1	+		+	
2		+		+
.....				
50	+			+

В результате обработки протоколов испытаний (4 шт.) необходимо убедиться, что:

— вероятность загорания красного или зеленого светодиода в каждом канале одинакова и не зависит от выбора задержек γ ;

— выполняется неравенство Белла $|\langle S \rangle_{class}| \leq 1$, где величина $|\langle S \rangle_{class}|$ была введена выше.

ЗАДАЧА 2.2. Нарушение неравенства Белла

Описание схемы экспериментальной установки для приготовления состояний Белла

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 2.5. Она аналогична установке, описанной в работе [5]. Основная идея метода состоит в приготовлении состояний Белла в линейном поляризационном базисе:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1\rangle|H_2\rangle + |V_1\rangle|V_2\rangle) \quad (2.22)$$

Здесь нижние индексы обозначают номер детектора Ad1 и Ad2, а H и V — вертикальное или горизонтальное направление поляризации фотона.

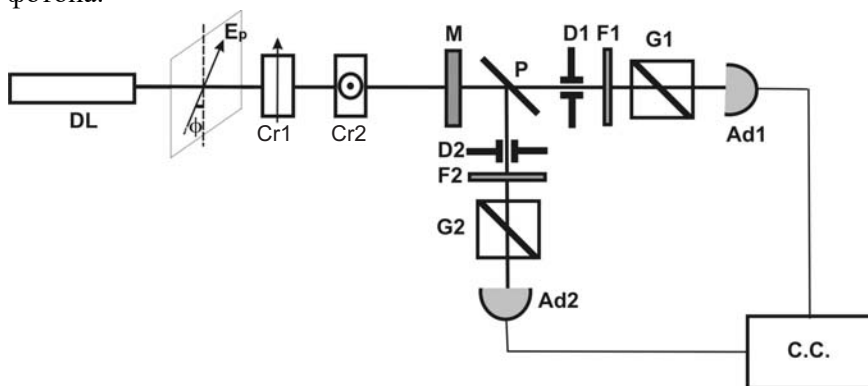


Рис. 2.5. Схема экспериментальной установки для проверки нарушения неравенств Белла

Состояние (2.22) представляет собой когерентную смесь двух состояний, генерируемых в двух специально вырезанных кристаллах ВВО. Приготовление состояний Белла осуществляется при помощи двух кристаллов с коллинеарным синхронизмом типа I. Излучение полупроводникового диодного лазера (DL) с длиной волны $\lambda_p = 408$ нм подается на два одинаковых кристалла бета-бората бария (ВВО) длиной 3 мм (Cr1 и Cr2), оптические оси которых ориентированы под углами $\phi = \pm 45^\circ$ к вектору напряженности накачки. Зеркало M служит фильтром, пропускающим бифотонное излучение и блокирующим накачку. Далее бифотоны попадают на светоделительную пластинку (P), перемешивающую сигнальные и холостые поляриза-

ционные моды излучения СПР, родившегося в разных кристаллах. В выходных модах светоделителя помещаются охлаждаемые лавинные диоды Ad1 и Ad2. Электрические импульсы, поступающие с лавинных диодов, регистрируются схемой совпадений С.С. Перед детекторами Ad1 и Ad2 установлены поляроиды G1 и G2, интерференционные фильтры F1 и F2 и ирисовые диафрагмы D1 и D2.

Если в одну из выходных мод светоделителя поместить полуволновую пластинку и с ее помощью повернуть поляризацию излучения на 90^0 , то можно получить и два других состояния Белла $\Psi^{(\pm)}$.

У п р а ж н е н и е 1

Включить диодный лазер, генерирующий на длине волны 408 нм, блок питания лавинных диодов, компьютер. Запустить программу Bell в среде Labview. Время окна схемы совпадений выбрать равным 60 с. Установить угол поворота поляризатора G1 в канале равным $\theta_1 = -\pi/4$. Поворачивая поляризатор G2 во втором канале на угол θ_2 с шагом 10° при неизменной ориентации поляризатора G1 измерить зависимость числа совпадений R_C от угла θ_2 . Убедиться, что зависимость может быть аппроксимирована формулой вида: $R_C(\theta_1, \theta_2) \propto \cos^2(\theta_1 - \theta_2)$. Результаты представить в виде графиков.

У п р а ж н е н и е 2

Алгоритм измерений при проверке нарушения неравенства Белла с помощью двух детекторов более сложный, чем при проверке с помощью четырех детекторов, поскольку требуется исключить из совпадений вклад от антикоррелированных сигналов. Превышение числа коррелированных сигналов в каналах А и В над антикоррелированными [6] дается выражением:

$$E = P_{AB}^{\uparrow\uparrow} + P_{AB}^{\downarrow\downarrow} - P_{AB}^{\uparrow\downarrow} - P_{AB}^{\downarrow\uparrow} \quad (2.23)$$

где P_{AB} — соответствующие совместные вероятности наблюдаемых поляризаций, обозначенных стрелками. Тогда, согласно [7], для функции $E(\theta_1, \theta_2)$ можно записать следующее выражение через числа совпадений R_c , измеренные при различных углах поворота поляризаторов:

$$E(\theta_1, \theta_2) = \frac{R_c(\theta_1, \theta_2) + R_c(\theta_1^\perp, \theta_2^\perp) - R_c(\theta_1, \theta_2^\perp) - R_c(\theta_1^\perp, \theta_2)}{R_c(\theta_1, \theta_2) + R_c(\theta_1^\perp, \theta_2^\perp) + R_c(\theta_1, \theta_2^\perp) + R_c(\theta_1^\perp, \theta_2)}, \quad (2.24)$$

где $\theta_1 = -22.5^\circ$, $\theta_1^\perp = 67.5^\circ$, $\theta_1' = 22.5^\circ$, $\theta_1'^\perp = 112.5^\circ$ и $\theta_2 = -45^\circ$, $\theta_2^\perp = 45^\circ$, $\theta_2' = 0^\circ$, $\theta_2'^\perp = 90^\circ$.

Составляя неравенство Белла, получим, что оно нарушается:

$$S = \frac{1}{2} \left[E(\theta_1, \theta_2) + E(\theta_1', \theta_2) + E(\theta_1, \theta_2') - E(\theta_1', \theta_2') \right] \geq 1. \quad (2.25)$$

Алгоритм проверки нарушения неравенства Белла

1) В таблицу каждого из четырех протоколов испытаний (выдается преподавателем) занести измеренные показания совпадений фотоотсчетов $R_{ci}[\theta_i, \theta_2] - R_{ci}[\theta_i, \theta_2]$ с детекторов G1 и G2 при указанных четырех комбинациях углов поворотов поляризаторов θ_1 и θ_2 в каналах согласно протоколам №1-4. Провести 5-10 измерений для каждой комбинации ориентаций поляризаторов $[\theta_1, \theta_2]$.

Протокол 1

№	$R_{c1}[-22.5^\circ, -45^\circ]$	$R_{c2}[67.5^\circ, 45^\circ]$	$R_{c3}[-22.5^\circ, 45^\circ]$	$R_{c4}[67.5^\circ, -45^\circ]$
1				
2				
...				
5				

Протокол 2

№	$R_{c1}[22.5^\circ, -45^\circ]$	$R_{c2}[112.5^\circ, 45^\circ]$	$R_{c3}[22.5^\circ, 45^\circ]$	$R_{c4}[112.5^\circ, -45^\circ]$
1				
2				
...				
5				

Протокол 3

№	$R_{c1}[-22.5^\circ, 0^\circ]$	$R_{c2}[67.5^\circ, 90^\circ]$	$R_{c3}[-22.5^\circ, 90^\circ]$	$R_{c4}[67.5^\circ, 0^\circ]$
1				
2				
...				
5				

Протокол 4

№	$R_{c1}[22.5^\circ, 0^\circ]$	$R_{c2}[112.5^\circ, 90^\circ]$	$R_{c3}[22.5^\circ, 90^\circ]$	$R_{c4}[112.5^\circ, 0^\circ]$
1				
2				
...				
5				

2) Для каждого из четырех протоколов вычислить функцию E_i ($i = 1, 2..4$) по формуле:

$$E_i = \frac{R_{c1} + R_{c2} - R_{c3} - R_{c4}}{R_{c1} + R_{c2} + R_{c3} + R_{c4}}. \quad (2.26)$$

3) Проверить нарушение неравенства Белла:

$$S = (E_1 + E_2 + E_3 - E_4) / 2 \geq 1. \quad (2.27)$$

4) Оценить ошибку измерений ΔS .

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Параметрические генераторы и управляемые корреляции

В нашей модельном эксперименте для получения классического радиочастотного аналога ЭПР-корреляции используются двухконтурные параметрические генераторы колебаний мегагерцового диапазона.

Такие генераторы в невырожденном (двухчастотном) случае имеют две особенности: фазы $\phi(t)$ и $\phi'(t)$ каждого из двух возникающих колебаний со средними частотами ω_a и ω_b сильно флуктуируют (по техническим причинам), но при этом имеет место их полная антикорреляция: $\phi(t) + \phi'(t) = \phi_0$. Здесь $\phi_0 = \text{const}$ — фаза генератора накачки (со средней частотой $\omega_0 = \omega_a + \omega_b$), которую для простоты полагаем стабильной и равной нулю, так что $\phi'(t) = -\phi(t)$. Иначе говоря, мгновенные частоты $\omega_a(t) = \omega_a + d\phi/dt$ и $\omega_b(t) = \omega_b + d\phi'/dt$ двух колебаний на выходе генератора всегда дрейфуют в противоположные стороны — если сигнальная частота возрастает, то холостая уменьшается, и наоборот.

В результате выходные колебания генератора имеют вид $X(t) = \cos[\omega_a t + \phi(t)]$ и $Y(t) = \cos[\omega_b t + \phi'(t)] = \cos[\omega_b t - \phi(t)]$. Таким образом, один и тот же случайный процесс $\phi(t)$ модулирует по фазе оба выходных колебания генератора. Далее они посылаются (для простоты — по проводам) к двум приемным схемам A и B . Различие знаков ϕ и ϕ' приводит к тому, что корреляция зависит от **суммы** параметров $\gamma = \alpha + \beta$, а не от их разности.

В реализованной нами схеме вместо стабильных локальных гомодинных колебаний с частотами ω_a и ω_b используются сигналы от второго идентичного параметрического генератора, возбуждаемого той же накачкой. При этом на приемник A поступают два колебания $X_1(t) = \cos[\omega_a t + \phi_1(t)]$ и $X_2(t) = \cos[\omega_a t + \phi_2(t)]$, где $\phi_1(t)$ и $\phi_2(t)$ — независимые случайные фазы двух параметрических генераторов. К одному из колебаний добавляется регулируемая фаза α , после чего образуется их сумма и разность: $a_{\pm} \equiv a_1 \pm a_2$. Два квадратичных детектора дают низкочастотные сигналы, пропорциональные $|a_{\pm}|^2 = 2 \pm 2\cos[\phi(t) + \alpha]$, где $\phi(t) \equiv \phi_1(t) - \phi_2(t)$. Вычитая эти сигналы получаем после ограничения функцию нужного вида:

$$A(\alpha, t) = \text{sign} \{ \cos [\phi(t) + \alpha] \}. \quad (\text{П1a})$$

Аналогично, на приемнике B формируется второй случайный телеграфный сигнал:

$$B(\beta, t) = \text{sign} \{ \cos [-\phi(t) + \beta] \}. \quad (\text{П1b})$$

Здесь использовано свойство параметрических генераторов $\phi_k + \phi'_k = \phi_0$ (ϕ_0 — фаза накачки), дающее $\phi + \phi' = \phi_1 - \phi_2 + \phi'_1 - \phi'_2 = 0$.

Фактическая обработка сигналов производилась цифровым методом. Описание этой процедуры и некоторые технические подробности даны во второй части.

В нашей модели “скрытыми параметрами” λ является все множество переменных, описывающих мгновенное состояние всей схемы, включая источники питания. Эволюция этих переменных проявляется через флуктуации фаз параметрических генераторов $\phi_k(\lambda(t))$ с характерным временем t_f которая, в свою очередь, приводит в соответствии с (П1) к флуктуациям знаков сигналов a_i , и b_i , наблюдаемых в некоторые моменты времени t_i , разделенные интервалом, много большим t_f .

Характерное время t_f “естественной” смены знаков сигналов a , b , связанное с временем когерентности фазы параметрических генераторов, имеет порядок 1 мсек, причем моменты смены знака в a и b не всегда совпадают (см. рис. 2.3). В связи с этим для визуального наблюдения корреляции по цветам ламп использовался тактовый генератор с регулируемой низкой частотой (включая режим ручного запуска одиночными импульсами), который задавал периодичность опроса состояния выходных каскадов детекторных схем и соответствующего переключения ламп. При автоматическом измерении корреляции M использовалась более высокая частота опроса.

Отметим, что для еще большего сходства с квантовыми экспериментами лучше было бы применить посылку колебаний со случайной фазой по системе связи в случайные моменты времени в виде коротких импульсов с длительностью, меньшей времени когерентности фазы.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Доказательство инвариантности синглетного состояния Белла к смене базиса

Докажем это утверждение для поляризационного состояния Белла

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|B_x\rangle |C_y\rangle - |B_y\rangle |C_x\rangle], \quad (\text{П2.1})$$

где B и C обозначают частицы, а x и y — компоненты линейного поляризационного базиса. Запись $|B_x\rangle |C_y\rangle$ означает двукратное действие оператора рождения на вакуум (в разных поляризационных модах):

$$|B_x\rangle |C_y\rangle = b_x^\dagger c_y^\dagger |0\rangle. \quad (\text{П2.2})$$

Замечание. Формальная аналогия между состояниями частиц со спином $1/2$ и поляризационными состояниями света основывается на тождественности коммутационных соотношений операторов проекций момента количества движения j_k частицы со спином $J = (1/2)S_0$ (операторы Паули) и Стокса, подчиняющимися алгебре Ли (или $SU(2)$):

Для операторов Паули:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y.$$

Для операторов Стокса:

$$s_0 \equiv a^\dagger a + b^\dagger b, \quad (I)$$

$$s_1 \equiv a^\dagger a - b^\dagger b, \quad (HV)$$

$$s_2 \equiv a^\dagger b + ab^\dagger, \quad (+45^\circ, -45^\circ)$$

$$s_3 \equiv -i(a^\dagger b - ab^\dagger) \quad (RL).$$

$$[s_1, s_2] = is_3, \quad [s_2, s_3] = is_1, \quad [s_3, s_1] = is_2, \quad [s_0, s_m] = 0.$$

Пусть при произвольном преобразовании поляризационного базиса $B_{x,y} \rightarrow B_{1,2}$, $C_{x,y} \rightarrow C_{1,2}$ его компоненты определяются элементами эрмитовой матрицы:

$$D = \begin{pmatrix} t & r \\ -r^* & t^* \end{pmatrix}, \quad |t|^2 + |r|^2 = 1, \quad (\text{П2.3})$$

т.е. в матричном виде:

$$D \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix}, \quad D^\dagger \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{П2.4})$$

Тогда компоненты базисов преобразуются по правилам:

$$\begin{aligned} |B_x\rangle &= t|B_1\rangle + r|B_2\rangle, & |C_x\rangle &= t|C_1\rangle + r|C_2\rangle, \\ |B_y\rangle &= -r^*|B_1\rangle + t^*|B_2\rangle, & |C_y\rangle &= -r^*|C_1\rangle + t^*|C_2\rangle. \end{aligned} \quad (\text{П2.5})$$

Подставив эти выражения в (П2.1), получим:

$$\begin{aligned} |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|B_x\rangle |C_y\rangle - |B_y\rangle |C_x\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(t|B_1\rangle + r|B_2\rangle)(-r^*|C_1\rangle + t^*|C_2\rangle) - (-r^*|B_1\rangle + t^*|B_2\rangle)(t|C_1\rangle + r|C_2\rangle)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [-tr^*|B_1\rangle|C_1\rangle + |t|^2|B_1\rangle|C_2\rangle - |r|^2|B_2\rangle|C_1\rangle + rt^*|B_2\rangle|C_2\rangle] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} [r^*t|B_1\rangle|C_1\rangle + |r|^2|B_1\rangle|C_2\rangle - |t|^2|B_2\rangle|C_1\rangle - rt^*|B_2\rangle|C_2\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|B_1\rangle|C_2\rangle - |B_2\rangle|C_1\rangle]. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Доказательство неравенства Белла

Пусть $A(\alpha)$ и $B(\beta)$ — дихотомические наблюдаемые, зависящие от параметров α и β . Например, $A(\alpha)=+1$ означает появление фотона на входе в детектор D1, а $A(\alpha)=-1$ означает отсутствие фотона в этом плече. Следуя [8], введем функцию $C(\alpha, \beta)$, описывающую корреляции между этими двумя наблюдаемыми, усредненную по всем возможным исходам:

$$C(\alpha, \beta) = \langle A(\alpha)B(\beta) \rangle \quad (\text{П3.1})$$

Согласно критерию реальности Эйнштейна–Подольского–Розена, существуют элементы реальности, которые определяют исход измерения. Пусть они определяются некоторым скрытым параметром λ , характеризуемым плотностью вероятности $\rho(\lambda)$: $\int \rho(\lambda) d\lambda = 1$. Тогда корреляционную функцию можно записать в виде:

$$C(\alpha, \beta) = \int A(\alpha, \lambda)B(\beta, \lambda)\rho(\lambda)d\lambda. \quad (\text{П3.2})$$

Следовательно, так как $|A(\alpha, \lambda)| = 1$, можно записать неравенства:

$$\begin{aligned}
 |C(\alpha, \beta) - C(\alpha, \beta')| &\leq \int |A(\alpha, \lambda) [B(\beta, \lambda) - B(\beta', \lambda)]| \rho(\lambda) d\lambda \\
 |C(\alpha, \beta) - C(\alpha, \beta')| &\leq \int |B(\beta, \lambda) - B(\beta', \lambda)| \rho(\lambda) d\lambda
 \end{aligned}
 \quad (\text{ПЗ.3})$$

и

$$\begin{aligned}
 |C(\alpha', \beta) + C(\alpha', \beta')| &\leq \int |A(\alpha', \lambda) [B(\beta, \lambda) + B(\beta', \lambda)]| \rho(\lambda) d\lambda \\
 |C(\alpha', \beta) + C(\alpha', \beta')| &\leq \int |B(\beta, \lambda) + B(\beta', \lambda)| \rho(\lambda) d\lambda
 \end{aligned}
 \quad (\text{ПЗ.4})$$

Складывая (ПЗ.3) и (ПЗ.4), получаем неравенство:

$$\begin{aligned}
 |C(\alpha, \beta) - C(\alpha, \beta')| + |C(\alpha', \beta) + C(\alpha', \beta')| &\leq \\
 \int (|B(\beta, \lambda) - B(\beta', \lambda)| + |B(\beta, \lambda) + B(\beta', \lambda)|) \rho(\lambda) d\lambda
 \end{aligned}
 \quad (\text{ПЗ.5})$$

Каждое B может принимать значения только ± 1 , следовательно:

$$|B(\beta, \lambda) - B(\beta', \lambda)| + |B(\beta, \lambda) + B(\beta', \lambda)| = 2 \quad (\text{ПЗ.6})$$

Подставляя (ПЗ.6) в (ПЗ.5), учитывая условие нормировки для функции плотности вероятности $\rho(\lambda)$, получаем неравенство Белла [3]:

$$|C(\alpha, \beta) - C(\alpha, \beta')| + |C(\alpha', \beta) + C(\alpha', \beta')| \leq 2. \quad (\text{ПЗ.7})$$

Литература

1. *Einstein A., Podolsky B., Rosen N.* // *Physical Review*, v. 47, p. 777 (1935); *Успехи Физических Наук*, т. 16, с. 440 (1936).
2. *Бом Д.* Квантовая теория. М.: Физматгиз, 1961.
3. *Bell J.S.* // *Physics*, v.1, p. 195 (1964).
4. *Евдокимов Н.В., Клышко Д.Н., Комолов В.П., Ярочкин В.А.* // *Успехи Физических Наук*, т. 166, с. 91 (1996).
5. *Kim Y., Kulik S.P., Shih Y.* // *Physical Review A*, v.63, p.062301(R) (2001).
6. *Aspect A., Grangier P., Roger G.* // *Physical Review Letters*, v.49, p. 91 (1982).
7. *Kwiat P.G. et al.* // *Physical Review Letters*, v.75, p. 4337 (1995).
8. *Мандель Л., Вольф Э.* Оптическая когерентность и квантовая оптика. М.: Физматлит, 2000, с.896.

Часть 3. ОСНОВЫ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Теоретическое введение

Сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ) является одним из наиболее современных методов исследования микро- и нанорельефа (морфологии) и локальных свойств поверхности твердого тела и наноструктур на этой поверхности с высоким пространственным разрешением. Исследование наносистем ставит новые задачи, направленные на измерение и диагностику объектов и протекающих в них процессов в нанометровом диапазоне. Опираясь на объекты нанометровой геометрии, исследование наносистем должно учитывать специфику нанообъектов, обеспечивать полноту измерений их характеристик в нанометровом диапазоне опираясь на современные методики измерений и особенности технологических приемов подготовки образцов. Современные методы, позволяющие обеспечивать измерения в нанометровом диапазоне, во многом основаны на сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ), включающей сканирующую туннельную микроскопию и спектроскопию (СТМ/СТС), силовую микроскопию (ССМ), в частности — атомно-силовую микроскопию (АСМ), сканирующую оптическую микроскопию ближнего поля (СОМБП) и другие приборы этих типов. В большинстве методов СЗМ положен принцип одновременного измерения геометрических параметров объекта и пространственного распределения (картирования) его измеряемых физических характеристик в нанометровом диапазоне, получаемых на этих СЗМ. Методы СЗМ представляют собой обширную совокупность методик получения информации о различных локальных свойствах исследуемого объекта при помощи твердотельных зондов. При этом пространственное разрешение СЗМ определяется, в первую очередь, параметрами зонда. Измерения физических и физико-химических параметров веществ и материалов, элементов и устройств нанометровой геометрии, требуют понимания закономерностей взаимодействия зонда как измерительного средства с объектом измерений. Источником информации о локальных свойствах поверхности объекта является при этом ближайшая к поверхности часть зонда, имеющая нанометровые размеры. Построение изображения осуществляется дискретно при перемещении зонда по растру. Прецизионное перемещение зонда вдоль

поверхности осуществляется обычно с помощью пьезоманипуляторов точных перемещений. У всех разновидностей СЗМ существуют общие принципы действия и узлы соответствующего назначения, наличие которых обусловлено принципами работы СЗМ.

Общие черты, присущие различным СЗМ, можно представить следующим образом. Пусть взаимодействие зонда с поверхностью характеризуется некоторым параметром P . Если существует достаточно резкая и взаимно однозначная зависимость параметра P от расстояния Z между зондом и образцом $P = P(Z)$, то данный параметр может быть использован для организации системы обратной связи (ОС), контролирующей расстояние между зондом и образцом. На рис. 3.1 схематично показан общий принцип организации обратной связи СЗМ.

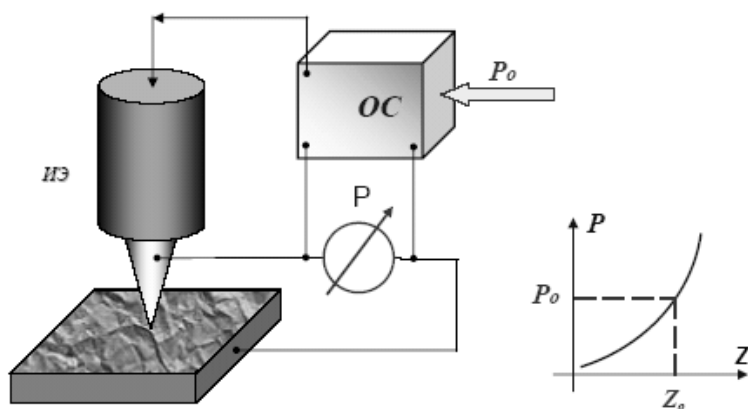


Рис. 3.1. Схема организации системы обратной связи зондового микроскопа

Система обратной связи поддерживает значение параметра P постоянным, равным величине P_0 , задаваемой оператором. Если расстояние зонд – поверхность изменяется (например, увеличивается), то происходит изменение (увеличение) параметра P . В системе ОС формируется разностный сигнал, пропорциональный величине $\Delta P = P - P_0$, который усиливается до нужной величины и подается на исполнительный элемент ИЭ. Исполнительный элемент отрабатывает данный разностный сигнал, приближая зонд к поверхности или отодвигая его до тех пор, пока разностный сигнал не станет рав-

ным нулю. Таким образом, расстояние между зондом и образцом поддерживается с высокой точностью. В существующих СЗМ точность удержания расстояния зонд-поверхность достигает величины ~ 0.001 нм. При перемещении зонда вдоль поверхности образца происходит изменение параметра взаимодействия P , обусловленное рельефом поверхности. Система ОС обрабатывает эти изменения, так что при перемещении зонда в плоскости X, Y сигнал на исполнительном элементе оказывается пропорциональным рельефу поверхности. При сканировании зонд вначале движется над образцом вдоль определенной линии (строчная развертка), при этом величина сигнала на исполнительном элементе, пропорциональная рельефу поверхности, записывается в память компьютера. Затем зонд возвращается в исходную точку и переходит на следующую строку сканирования (кадровая развертка), и процесс повторяется вновь.

Записанный таким образом при сканировании сигнал обратной связи обрабатывается компьютером, и затем СЗМ изображение рельефа поверхности $Z = f(X, Y)$ строится с помощью средств компьютерной графики. Наряду с исследованием рельефа поверхности, СЗМ позволяют изучать различные свойства поверхности: механические, электрические, магнитные, оптические и многие другие. Наиболее полная структурная схема, присущая большинству сканирующих зондовых микроскопов, показана на рис. 3.2.

В соответствии со структурной схемой последовательность работы СЗМ заключается в следующем. С помощью системы грубого позиционирования измерительный зонд подводится к поверхности исследуемого образца. При приближении образца и зонда на расстояние менее сотен нанометров последний начинает взаимодействовать с поверхностью. Перемещение зонда вдоль поверхности образца осуществляется с помощью сканирующего устройства, которое обеспечивает сканирование поверхности иглой зонда. Обычно оно представляет собой трубку из пьезокерамики, на поверхность которой нанесены три пары разделенных электродов. Под действием приложенных к пьезотрубке напряжений U_x и U_y она изгибается, обеспечивая тем самым перемещение зонда относительно образца по осям X и Y , под действием напряжения U_z — сжимается или растягивается, что позволяет изменять расстояние игла-образец. Датчик положения зонда непрерывно отслеживает позицию зонда относительно образца и через систему обратной связи передает данные о ней в компьютерную систему, управляющую движением сканера.

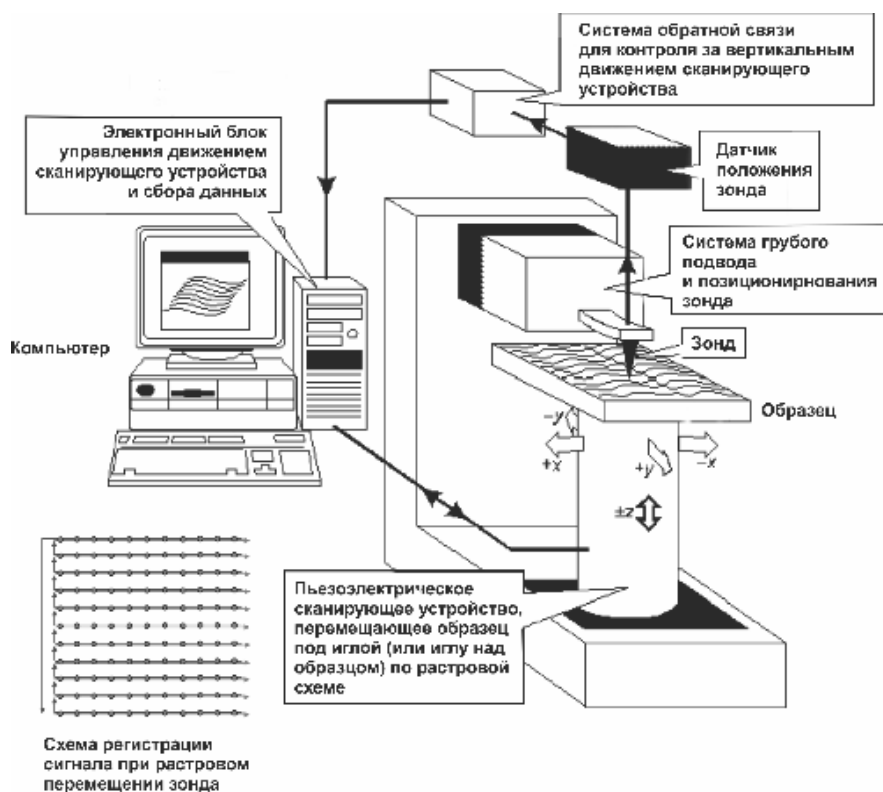


Рис. 3.2. Обобщенная структурная схема сканирующего зондового микроскопа

Информация, полученная с помощью СЗМ, хранится в виде двумерного массива целых чисел a_{ij} (матрицы). Физический смысл данных чисел определяется той величиной, которая регистрировалась в процессе сканирования. Каждому значению пары индексов ij соответствует определенная точка поверхности в пределах поля сканирования. Как правило, такие массивы чисел представляют собой квадратные матрицы, имеющие размер 256×256 , 512×512 , 1024×1024 или более элементов. Визуализация СЗМ данных производится средствами компьютерной графики, в основном – в виде трехмерных и двумерных яркостных (или цветowych) изображений. В последнем случае яркость или цвет однозначно связаны с представляемой величиной в данной точке поверхности.

Локальные СЗМ измерения, как правило, сопряжены с регистрацией зависимостей исследуемых величин от различных пара-

метров. Например, это зависимости величины электрического тока через контакт зонд-поверхность от приложенного напряжения, зависимости различных параметров силового взаимодействия зонда и поверхности от расстояния между зондом и образцом и др. Данная информация хранится в виде векторных массивов. Для их визуализации в программном обеспечении микроскопов предусматривается набор стандартных средств изображения графиков функций.

СЗМ изображения, наряду с полезной информацией, содержат также много побочной информации, искажающей данные о морфологии и свойствах поверхности. Искажения в СЗМ изображениях поверхности обусловлены неидеальностью аппаратуры и внешними паразитными воздействиями.

Как правило, СЗМ изображения содержат постоянную составляющую, которая не несет полезной информации о рельефе поверхности, а отражает точность подвода образца в середину динамического диапазона перемещений сканера по оси Z . Постоянная составляющая удаляется из СЗМ кадра программным способом. Изображения поверхности, получаемые с помощью СЗМ, как правило, имеют общий наклон. Это может быть обусловлено несколькими причинами. Во-первых, наклон может появляться вследствие неточной установки образца относительно зонда; во-вторых, он может быть связан с температурным дрейфом, который приводит к смещению зонда относительно образца; в-третьих, он может быть обусловлен нелинейностью перемещений пьезосканера. На отображение наклона тратится большой объем полезного пространства в СЗМ кадре и мелкие детали изображения становятся не видны. Для устранения данного недостатка производят операцию вычитания постоянного наклона. Неидеальность свойств пьезосканера приводит к тому, что СЗМ изображение содержит ряд специфических искажений. Частично неидеальности сканера, такие как неравноправность прямого и обратного хода сканера (гистерезис), крип и нелинейность пьезокерамики, компенсируются аппаратными средствами и выбором оптимальных режимов сканирования. Однако, несмотря на это, СЗМ изображения содержат искажения, которые трудно устранить на аппаратном уровне. В частности, поскольку движение сканера в плоскости образца влияет на положение зонда над поверхностью (по оси Z), СЗМ изображения представляют собой суперпозицию реального рельефа и некоторой поверхности второго (а часто и более высокого) порядка. Для устранения искажений такого рода методом наименьших квадратов находится аппроксимирующая по-

верхность второго порядка, имеющая минимальные отклонения от исходной функции $Z = f(X, Y)$, и затем данная поверхность вычитается из исходного СЗМ изображения. Еще один тип искажений связан с нелинейностью и неортогональностью перемещений сканера в плоскости X, Y . Это приводит к искажению геометрических пропорций в различных частях СЗМ изображения поверхности. Для устранения таких искажений производят процедуру коррекции СЗМ изображений с помощью файла коэффициентов коррекции, который создается при сканировании конкретным сканером тестовых структур с хорошо известным рельефом.

Шумы аппаратуры (в основном, это шумы высокочувствительных входных усилителей), нестабильности контакта зонд-образец при сканировании, внешние акустические шумы и вибрации приводят к тому, что СЗМ изображения, наряду с полезной информацией, имеют шумовую составляющую. Частично шумы СЗМ изображений могут быть удалены программными средствами.

В зависимости от локально измеряемой физической величины, используемой для получения информации о локальных свойствах исследуемого объекта, в СЗМ используются различные типы зондов, имеющие свои специфические особенности.

Методы СЗМ применяются в диагностике различных типов нанообъектов и материалов. При этом возможности и ограничения, присущие каждой из групп методов СЗМ, должны учитываться при выборе методики измерений для решения той или иной конкретной задачи исследований и диагностики. Вместе с тем, у всех разновидностей СЗМ существуют общие принципы действия и узлы соответствующего назначения, наличие которых обусловлено принципами работы СЗМ.

В зависимости от локально измеряемой физической величины, используемой для получения информации о локальных свойствах исследуемой поверхности, в СЗМ используются различные типы зондов. Одним из способов классификации СЗМ является разделение измеряемых в физических величин на следующие категории:

- силы, воздействующие на зонд и обусловленные силовыми взаимодействиями различной природы (межатомным, электростатическим, магнитостатическим и т. д.);

- электрические токи между зондом и исследуемой поверхностью;

- электромагнитное излучение;

- температура.

Согласно этой классификации можно разделить СЗМ на следующие основные, исторически сложившиеся методы:

— атомная силовая микроскопия (АСМ) и силовая спектроскопия, а также ее многочисленные разновидности, такие как магнитная силовая микроскопия, микроскопия электростатических сил, микроскопия сил трения и т. д.;

— сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия (СТМ/СТС);

— сканирующая оптическая микроскопия и поляриметрия ближнего поля (СОМБП).

Большинство СЗМ производят измерение геометрических параметров объекта и распределение характеристик других физических величин в нанометровом диапазоне: локальной плотности состояний или работы выхода в СТМ; констант межатомного (межмолекулярного) взаимодействия в АСМ; интенсивности или поляризационных характеристик оптического поля в СОМБП.

Анализ микрорельефа поверхности образцов и ее локальных свойств осуществляется с помощью сканирующей зондовой микроскопии с использованием специально приготовленных зондов в форме острий (рис. 3.3). Размер рабочей части таких зондов составляет порядка десяти нанометров. Характерное расстояние между зондирующим острием и исследуемой поверхностью в сканирующем зондовом микроскопе составляет 0.1 – 10 нанометров. Различные типы взаимодействия зонда с поверхностью используются в различных типах зондовых микроскопов.

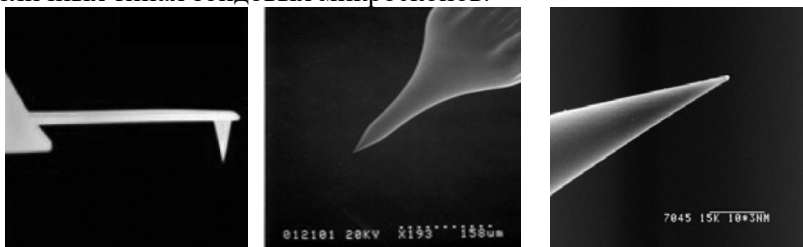


Рис. 3.3. Различные варианты зондов СЗМ

Принципы работы и функциональные схемы основных видов СЗМ

Общие принципы работы сканирующих силовых микроскопов. Сканирующая атомная силовая микроскопия была изобретена в 1986 г. Как следует из названия, сканирующая силовая микроскопия

и, в частности, АСМ основана на зондировании поверхности образца острием малого радиуса, закрепленным на плоской пружине (консоли, кантилевере). Изменение рельефа поверхности образца или вариации силового взаимодействия между острием и образцом в процессе сканирования вызывает отклонение пружины от первоначального положения, которое регистрируется электронным устройством микроскопа и выводится на экран монитора в виде изображения. В качестве силового взаимодействия между острием и образцом могут использоваться силы любой природы. В АСМ применяются силы межатомного (межмолекулярного) взаимодействия между атомами зондирующего острия и образцом. Полная сила взаимодействия между острием и образцом складывается из обменных сил отталкивания и сил притяжения Ван-дер-Ваальса. Обменные силы быстро спадают с расстоянием (на расстояниях 0.1–0.3 нм), поэтому силовой вклад от них вносится практически только ближайшими атомами, расположенными на расстояниях менее 0.1–0.3 нм от поверхности образца. Незапаздывающие силы притяжения Ван-дер-Ваальса распространяются до расстояний ~15–20 нм, соответствующих длине волны, характерной для спектров поглощения исследуемых веществ. Вклад сил от запаздывающего потенциала и релятивистских эффектов (который замечен для расстояний, больших, чем 15–20 нм) обычно пренебрежимо мал и не учитывается.

На рис. 3.4 схематически представлена кривая зависимости сил межатомного взаимодействия от расстояния между острием иглы и поверхностью образца. По мере приближения к поверхности атомы иглы начинают все сильнее притягиваться к атомам образца. Сила притяжения будет возрастать до тех пор, пока притяжение не уравновесится обменными силами отталкивания.

При дальнейшем уменьшении межатомного расстояния основной силой будет отталкивание. При получении изображения поверхности с помощью этого типа сил АСМ работает в контактном режиме. Исследование поверхности при использовании сил притяжения Ван-дер-Ваальса производится, как правило, в бесконтактном режиме.

Работа АСМ основана на зондировании поверхности образца острой иглой, которая сканирует вдоль плоскости образца. Острие находится на свободном конце кантилевера — гибкой пластины, закрепленной вторым концом на сканере. Острие взаимодействует с поверхностью, сила взаимодействия вызывает изменение механического состояния кантилевера, например, заставляет кантилевер от-

клоняться. При сканировании величина отклонения кантилевера от предварительно установленного значения измеряется при помощи регистрирующей системы.



Рис. 3.4. Зависимость силы межатомного взаимодействия от расстояния между острием и образцом

Сигнал, пропорциональный отклонению, поступает в систему управления сканером (исполнительным элементом на рис. 3.1). В каждой сканируемой точке поверхности система обратной связи при помощи сканера перемещает зонд по нормали к поверхности таким образом, чтобы вернуть значение параметра взаимодействия к предварительно установленной величине. Одновременно величина перемещения зонда по нормали к поверхности записывается в память компьютера и интерпретируется как рельеф образца.

Обычно в АСМ используются зонды кантилеверного типа. Такой зонд состоит из гибкого кантилевера, острой иглы и подложки. Кантилевер является балкой, один конец которой закреплен, а второй свободен. Острая игла находится на свободном конце кантилевера. Кантилевер закреплен на твердой подложке, которая вставляется в держатель зонда. Острие обычно имеет радиус кривизны около 10 нм и длину 3 – 15 микрон. Чем меньше радиус кривизны, тем большее разрешение может быть получено. Большинство кантилеверов имеет треугольную (V-образную) или прямоугольную форму. Обычно, кантилеверы имеют длину 80 – 350 микрон. Основными

материалами, из которых изготавливаются кантилеверы, являются кремний и нитрид кремния. Важными параметрами кантилевера являются коэффициент упругости (жесткость) и резонансная частота. Величина коэффициента упругости определяется геометрическими размерами и материалом кантилевера и для различных кантилеверов лежит в интервале от 0.01 до 100 Н/м.

При приближении острия кантилевера к поверхности образца на него начинает действовать сила ван-дер-ваальсового притяжения. Она достаточно дальнodelствующая и заметна с расстояния десятков ангстрем. Затем на расстоянии в несколько ангстрем начинает действовать сила отталкивания. Во влажном воздухе на поверхности образца присутствует слой воды. Возникают капиллярные силы, дополнительно прижимающие острие зонда к образцу и увеличивающие минимально достижимую силу взаимодействия. Достаточно часто может возникать электростатическое взаимодействие между зондом и образцом. Это может быть как отталкивание, так и притяжение. Ван-дер-Ваальсовы силы притяжения, капиллярные, электростатические силы, силы отталкивания в области касания иглы с поверхностью образца и силы, действующие на иглу со стороны деформированного кантилевера, в равновесии компенсируют друг друга.

Физической основой работы АСМ является силовое взаимодействие острия зонда и поверхности. В общем случае данная сила имеет как нормальную к поверхности, так и латеральную (лежащую в плоскости поверхности образца) составляющие. Реальное взаимодействие зонда с образцом имеет более сложный характер, однако основным является то, что зонд АСМ испытывает притяжение со стороны образца на больших расстояниях и отталкивание на малых. Получение АСМ изображений рельефа поверхности связано с регистрацией малых изгибов упругой консоли (кантилевера) зондового датчика. В АСМ для этой цели широко используются оптические методы (рис. 3.5). Оптическая система АСМ юстируется таким образом, чтобы излучение полупроводникового лазера фокусировалось на консоли зондового датчика, а отраженный пучок попадал в центр фоточувствительной области фотоприемника. В качестве позиционно-чувствительных фотоприемников применяются четырехсекционные полупроводниковые фотодиоды.

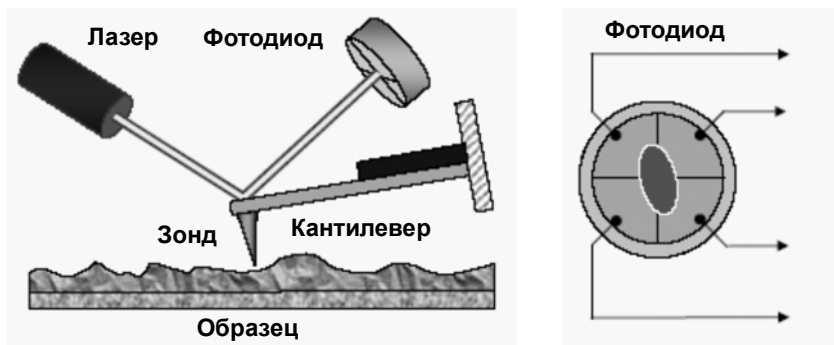


Рис. 3.5. Схема оптической регистрации изгиба консоли зондового датчика АСМ

С точки зрения типа и степени взаимодействия режимы работы АСМ можно разделить на контактный, бесконтактный и «полуконтактный», который является промежуточным между контактным и бесконтактным. В контактном режиме острие зонда непосредственно контактирует с поверхностью образца в процессе сканирования. Соответственно, в бесконтактном режиме острие зонда непосредственно не контактирует с поверхностью, а в «полуконтактном» контактирует частично. Бесконтактный и полуконтактный режимы работы АСМ реализованы на основе использования модуляционных методик.

Существует три метода измерения топографии поверхности при помощи атомно-силового микроскопа:

- контактная АСМ — измерение топографии поверхности в контактном режиме;

- бесконтактная АСМ — измерение топографии поверхности в бесконтактном режиме, основанном на использовании вибрационной методики;

- «полуконтактная» АСМ, называемая также «прерывисто-контактной», которая соответствует измерению топографии поверхности на основе вибрационной методики, при которой колеблющееся острие зонда слегка соприкасается с поверхностью образца.

Работа прибора в режимах контактной АСМ и «полуконтактной» АСМ является основой для других методик атомно-силовой микроскопии.

Основным недостатком контактных АСМ методик является непосредственное механическое взаимодействие острия зонда с поверхностью. Это часто приводит к поломке зондов и разрушению

поверхности образцов в процессе сканирования. Кроме того, контактные методики практически не пригодны для исследования образцов, обладающих малой механической жесткостью, таких как структуры на основе органических материалов и биологические объекты.

АСМ методики, основанные на регистрации параметров взаимодействия колеблющегося кантилевера с поверхностью, позволяют существенно уменьшить механическое воздействие зонда на поверхность в процессе сканирования. Кроме того, развитие колебательных методик существенно расширило арсенал возможностей АСМ по измерению различных свойств поверхности образцов. На практике чаще используется так называемый «полуконтактный» режим колебаний кантилевера (иногда его называют «прерывисто-контактный»). При работе в этом режиме возбуждаются вынужденные колебания кантилевера вблизи резонанса с амплитудой порядка 10 – 100 нм. Кантилевер подводится к поверхности так, чтобы в нижнем полупериоде колебаний происходило касание поверхности образца. При сканировании образца регистрируется изменение амплитуды и фазы колебаний кантилевера. Взаимодействие кантилевера с поверхностью в «полуконтактном» режиме состоит из вандер-ваальсового взаимодействия, к которому в момент касания добавляется упругая сила, действующая на кантилевер со стороны поверхности. Формирование АСМ изображения поверхности в «полуконтактном» режиме происходит следующим образом. С помощью пьезовибратора возбуждаются колебания кантилевера на частоте, близкой к резонансной частоте кантилевера. При сканировании система обратной связи АСМ поддерживает постоянной амплитуду колебаний кантилевера на уровне, задаваемом оператором. Напряжение в петле обратной связи записывается в память компьютера в качестве АСМ изображения рельефа поверхности. Одновременно при сканировании образца в каждой точке может регистрироваться изменение фазы колебаний кантилевера, которое записывается в виде распределения фазового контраста.

Общие принципы работы сканирующих туннельных микроскопов. Сканирующая туннельная микроскопия получила свое развитие в начале 1980 годов. За изобретение этого метода исследования поверхности G. Binnig и H. Rohrer были удостоены Нобелевской премии по физике в 1986 году.

Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия (СТМ/СТС) является в настоящее время наиболее совершенным методом исследования и диагностики локальных свойств различных материалов и наносистем, изучения единичных и связанных локализованных состояний и их взаимодействия. Важнейшей особенностью СТМ является возможность получать пространственное разрешение, достигающее сотых долей нанометра для проводящих систем, не обладающих регулярной структурой. Этот метод дает принципиальную возможность выявлять особенности атомной структуры и локальной плотности электронных состояний в пределах одной элементарной ячейки, осуществлять подповерхностную томографию (нанотомографию) непрозрачных проводящих веществ на глубину в несколько атомных слоев на поверхности материалов и позволяет идентифицировать даже единственную изолированную атомную примесь или дефект атомного масштаба по особенностям в спектре туннельной проводимости и СТМ изображению. Вместе с тем, особенности туннелирования в СТМ контактах, масштабы которых сопоставимы с межатомными расстояниями, приводят к сильному искажению невозмущенной плотности состояний исследуемой системы. В равновесных условиях это вызывается наличием в области контакта локализованных состояний (связанных, например, с обрывом периодической структуры на конце острия СТМ) и их взаимодействием с состояниями непрерывного спектра в берегах контакта. При неравновесных процессах такие искажения связаны с конечным временем релаксации туннелирующих частиц, изменяющих их равновесное распределение, а следовательно, и невозмущенную туннельную плотность состояний. В результате часто возникают значительные трудности в правильной интерпретации результатов измерений локальной туннельной проводимости, а в ряде случаев и получаемых СТМ изображений наносистем. Именно по этим причинам для адекватного представления результатов СТМ/СТС измерений требуется детальное описание процессов туннелирования в наноконтактах (в СТМ/СТС приборах), разработка методик измерений и приготовления образцов, необходимых для калибровки приборов и сопоставления результатов измерений.

Современное развитие СТМ/СТМ привело к необходимости описывать явления, часто не укладывающиеся в рамки стандартной теории туннелирования. В частности, в туннельных наноконтактах (типа СТМ) важную роль начинают играть локализованные состояния, обусловленные как самим острием, так и присутствием раз-

личных примесей, дефектов, тонких пленок и т.д., свойства которых требуется измерить. При исследовании образцов методом СТМ/СТС даже отдельные локализованные состояния существенно влияют на получаемое в эксперименте изображение в отличие от макроскопических контактов, где при низкой плотности локализованных состояний их вклад в туннельный ток мал. Поэтому измерение локальных свойств и геометрических параметров материалов и наносистем методом СТМ/СТС требует учета различных процессов релаксации.

В сканирующем туннельном микроскопе напряжение смещения прикладывается между металлическим острием малого радиуса и проводящим образцом. При сближении иглы и образца на расстояние порядка нанометра можно наблюдать ток, обусловленный квантово-механическим эффектом туннелирования.

Обычно для описания процессов в СТМ используют стандартную формулу для определения туннельного тока:

$$I \sim 2\pi e \int d\varepsilon T^2 v_p(\varepsilon) v_k(\varepsilon) [n_p^0(\varepsilon) - n_k^0(\varepsilon - eV)].$$

Вместе с тем многочисленные СТМ/СТС экспериментальные исследования показали, что туннельные процессы в структурах нанометровых размеров и, следовательно, их СТМ изображение не могут быть проанализированы в рамках ортодоксальной теории туннельных явлений, основанной на использовании равновесной функции распределения туннелирующих частиц. По этой причине была разработана самосогласованная теория, дающая наиболее полное описание туннелирования в наносистемах с учетом релаксационных процессов и получено выражение для туннельного тока, которые адекватно описывают процессы в СТМ/СТС измерениях:

$$I \sim 2\pi e \int \frac{T^2 v_p(\varepsilon) v_k(\varepsilon) [n_p^0(\varepsilon) - n_k^0(\varepsilon - eV)]}{T^2 v_p \Gamma_p + T^2 v_k \Gamma_k + \Gamma_p \Gamma_k} d\varepsilon.$$

В этих выражениях: $v_p(k)$ – плотность состояний, $n_p(k)$ — числа заполнения, Γ_p , Γ_k — скорости релаксации носителей.

Таким образом, при анализе результатов СТМ/СТС измерений необходимо существенно изменить привычное представление о туннельных процессах. Становится неверным вывод о том, что туннельный ток отражает исходную плотность состояний в исследуемом материале (электронной системе). За счет взаимодействия образца с близко расположенным острием в процессе туннелирования исходная плотность состояний искажается, появляются новые свя-

занные состояния, играющие особо важную роль при изучении примесей, атомных дефектов, диэлектрических материалов (тонких пленок), поверхностных зон в полупроводниках и т.д. При этом может наблюдаться отличный от нуля туннельный ток при такой разности потенциалов, когда исходные зоны не перекрываются, а сам туннельный ток возникает за счет присутствия в системе локализованных состояний. В результате требуется разработка адекватной методики СТМ/СТС измерений, основанной на современном представлении о туннельных процессах в наносистемах.

Вместе с тем принцип работы СТМ соответствует рис. 3.1, а более подробная схема устройства СТМ показана на рис. 3.6.

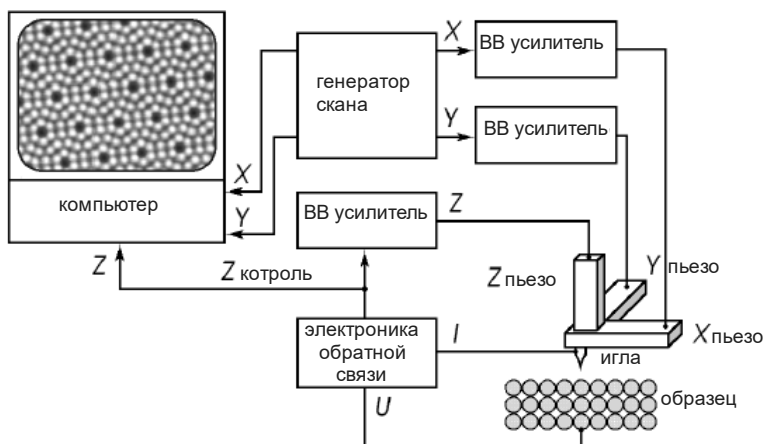


Рис. 3.6. Схематическая диаграмма принципа действия СТМ

В основу метода сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) положен квантово-механический эффект туннелирования электронов через барьер, образованный двумя электродами, одним из которых является проводящий исследуемый объект, другим — проводящее острие, приближенное к поверхности объекта на расстояние нескольких нанометров и сканирующее вдоль поверхности. Если к электродам приложена разность потенциалов (как правило, разность потенциалов в СТМ не превышает величины Φ/e , здесь Φ — высота туннельного барьера, а e — заряд электрона), то между электродами будет протекать туннельный ток, экспоненциально зависящий от расстояния. Изменение туннельного тока регистрируется с помощью приемных устройств, управляющих работой системы обратной связи СТМ (см. рис.3.1 и рис. 3.6).

Функционирование СТМ можно описать следующим образом. Зондирующее острие микроскопа помещается в непосредственной близости к зондируемой поверхности, так, что волновые функции проводящих электродов (зонда и образца) перекрываются. Характерное расстояние игла — образец при этом составляет $\sim 0,5\text{--}3$ нм. Если при этом приложить напряжение смещения между острием и образцом, в системе возникает туннельный ток, величина которого экспоненциально зависит от расстояния между острием зонда и образцом, что и определяет чрезвычайно высокое разрешение СТМ.

Можно определить пять главных изменяющихся параметров СТМ: латеральные координаты x и y , высоту z , напряжение смещения V и туннельный ток I . Три главных режима работы СТМ определяются, исходя из того, какие из этих параметров изменяются. В режиме постоянного тока ток I и напряжение V поддерживаются постоянными, x и y меняются вследствие сканирования иглы над поверхностью, а z измеряется. В режиме постоянной высоты z и V поддерживаются постоянными, x и y изменяются во время сканирования, а измеряется значение туннельного тока. Режим сканирующей туннельной спектроскопии (СТС) включает в себя серию различных мод, в которых измеряется туннельная проводимость. Измеряя туннельную проводимость можно определить распределение локальной плотности состояний исследуемого объекта.

Общие принципы работы оптических микроскопов ближнего поля. Оптическая микроскопия, в первую очередь традиционная, основанная на использовании линз, является лучше всего изученной и наиболее широко применяемой среди всех методов, объединяемых термином микроскопия. Кроме сравнительно небольшой стоимости коммерческих приборов и простоты работы, большим достоинством оптической микроскопии является то, что многие материалы активно взаимодействуют с излучением видимого диапазона, позволяя использовать для визуализации микрообъектов различия в локальных абсорбционных, поляризационных и спектральных свойствах.

В то же время, из теории Аббе следует, что использование линз принципиально ограничивает пространственное разрешение микроскопа. Это связано с тем, что световое поле объекта имеет, вообще говоря, произвольный спектр пространственных частот, в то время как линза из-за конечности своей апертуры способна уловить лишь конечную полосу частот из этого спектра. Лучи, соответствующие высоким пространственным частотам, проходят мимо линзы и, сле-

довательно, не принимают участия в формировании изображения. Поэтому изображение, формируемое линзой, не является точной копией самого объекта. В изображении отсутствуют наиболее мелкие детали структуры объекта (см. рис. 3.7).

Согласно теории Аббе предельное разрешение линзового микроскопа d_0 составляет

$$d_0 = \frac{1.22\lambda}{NA_{об} + NA_{конд}},$$

где λ — длина волны излучения, $NA_{об}$ и $NA_{конд}$ — числовые апертуры объектива и конденсора, соответственно. В свою очередь числовые апертуры NA определяются углом раскрытия объектива/конденсора α и показателем преломления среды, находящейся между объективом/конденсором и объектом n :

$$NA = n \sin \alpha.$$

В случае, когда осуществляется освещение по Келеру, из вышеприведенных выражений получается чаще всего применяемая формула для оценки разрешающей способности d_0 :

$$d_0 = \frac{\lambda}{2n \sin \alpha}.$$

Таким образом, минимальный размер объекта, различимого в оптический микроскоп, несколько меньше длины волны используемого света и принципиально ограничен дифракцией излучения.

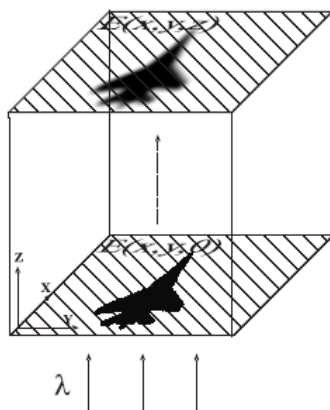


Рис. 3.7. Формирование оптического изображения объекта конечных размеров. Распределение интенсивности поля $E(x, y, z)$ за объектом на расстояниях $z = 0$ и z

В последнее время, однако, появилась и вызывает все больший интерес возможность изучения и формирования оптическими методами различных структур нанометровых размеров, которые во много раз меньше длины световой волны λ . Такая возможность возникла в связи с развитием оптики ближнего поля — нового и чрезвычайно перспективного направления физической и прикладной оптики. С физической точки зрения оптика ближнего поля основана на присутствии в дальней зоне излучения вполне идентифицируемых следов взаимодействия света с микрообъектом, находящимся в ближнем световом поле, которое локализовано на расстояниях много меньших λ . В техническом смысле оптика ближнего поля сочетает элементы обычной классической оптики и СЗМ.

В основе работы СОМБП лежит явление взаимодействие света с объектами субволновых размеров (т.е. размеров, во много раз меньших, чем длина волны). Само название «микроскоп ближнего поля» означает, что этот прибор способен извлекать информацию о локальных оптических свойствах образца из «ближнего поля». Особенностью ближнего поля является присутствие в нем затухающих волн (их называют также неоднородными в отличие от однородных или распространяющихся волн). Затухающие волны не способны распространяться в пространстве, а значит, не могут быть замечены удаленным наблюдателем. Необходим некий связующий элемент между ближним и дальним полями, преобразующий одну форму электромагнитной энергии в другую. Роль посредника может выполнять зонд субволновых размеров, приближаемый вплотную к образцу. Одним из примеров таких зондов является субволновая диафрагма в непрозрачном экране. При прохождении света через такое субволновое отверстие наблюдается ряд особенностей. Распределение электромагнитного поля вблизи такой диафрагмы показано на рис. 3.8.

Электромагнитное поле в области диафрагмы имеет сложную структуру, что видно из рис. 3.9.

Непосредственно за отверстием на расстояниях $Z < 100a$ (где a — диаметр отверстия) располагается так называемая ближняя зона, в которой электромагнитное поле существует, в основном, в виде эванесцентных (не распространяющихся) мод, локализованных вблизи поверхности диафрагмы. В области расстояний $Z > 100a$ располагается дальняя зона, в которой наблюдаются лишь излучательные мо-

ды. Мощность излучения за субволновой диафрагмой в дальней зоне может быть оценена по формуле

$$P_a = \frac{128}{27\pi} k^4 a^6 W_0$$

где k – волновой вектор, W_0 – плотность мощности падающего излучения.

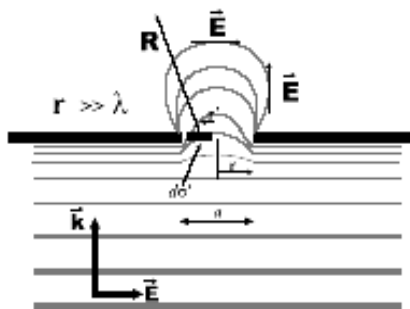


Рис. 3.8. Распределение электромагнитного поля вблизи субволновой диафрагмы в металлическом экране

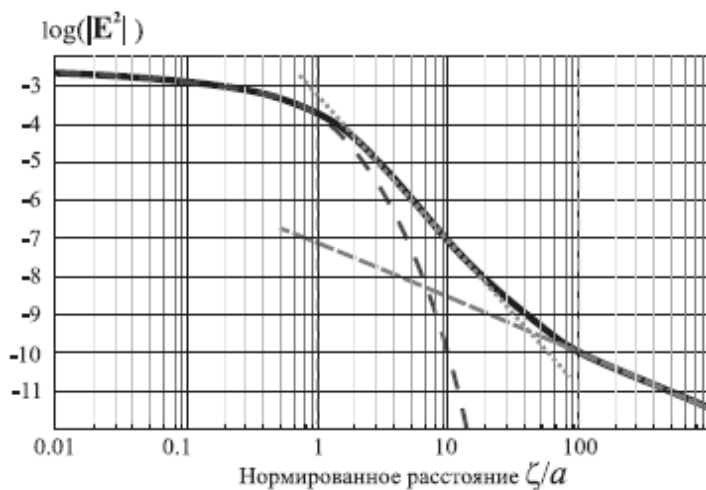


Рис. 3.9. Зависимость плотности энергии за металлическим экраном с субволновой апертурой от нормированного на a расстояния ζ от апертуры

Оценки показывают, что для излучения с длиной волны порядка 500 нм и диафрагмы с отверстием диаметром порядка 5 нм мощность излучения в дальней зоне составляет по порядку величин 10^{-10} от мощности падающего излучения. Однако если исследуемый объект поместить непосредственно за отверстием в ближней зоне, то вследствие взаимодействия эванесцентных мод с образцом часть энергии электромагнитного поля переходит в излучательные моды, интенсивность которых может быть зарегистрирована оптическим фотоприемником. Таким образом, ближнепольное изображение формируется СОМБП при сканировании исследуемого образца субволновой диафрагмой и регистрируется в виде распределения интенсивности оптического излучения в зависимости от положения диафрагмы $I(x,y)$. Контраст на изображениях, полученных с помощью СОМБП определяется процессами отражения, преломления, поглощения и рассеяния света, которые, в свою очередь, зависят от локальных оптических свойств образца (рис. 3.10).

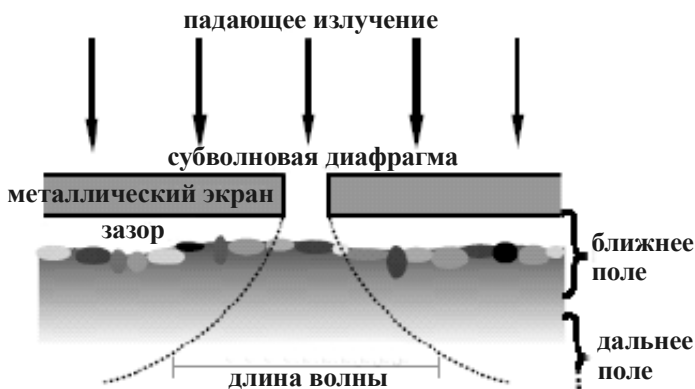


Рис. 3.10. Принцип действия микроскопа ближнего поля на основе субволновой диафрагмы

Термин СОМБП используют по отношению ко всем приборам ближнепольной оптики независимо от того, для решения каких задач они предназначены. К таким задачам относятся обнаружение малых неоднородностей в приповерхностном слое образца, их спектроскопический анализ, модификация рельефа поверхности оптическими методами и т.д.

Общая схема оптического микроскопа ближнего поля изображена на рис. 3.11.

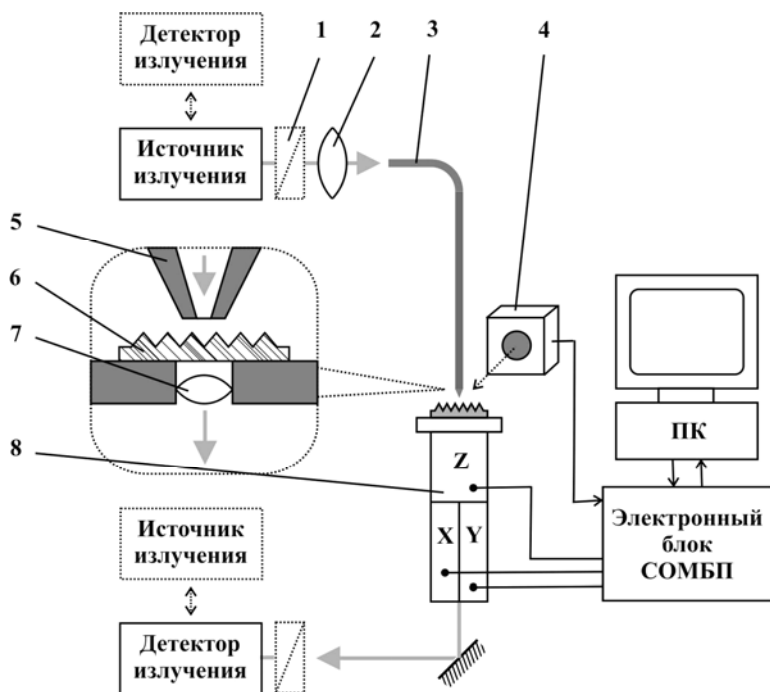


Рис. 3.11. Схематическое изображение устройства СОМБП:

1 — поляризатор; 2 — система ввода излучения в оптическое волокно; 3 — оптическое волокно со сформированным на его конце зондом; 4 — датчик расстояния между зондом и образцом; 5 — зонд; 6 — образец; 7 — оптическая система сбора излучения (обычно микрообъектив); 8 — пьезоманипулятор точных перемещений; ПК — персональный компьютер

Важнейшим элементом любого СОМБП является оптический зонд, локализирующий электромагнитное поле в области протяженностью существенно меньшей длины волны. Оптическое разрешение СОМБП напрямую зависит от типа и геометрии зондирующего острия. При работе с апертурными зондами оптическое разрешение СОМБП определяется диаметром апертуры, сформированной на вершине металлизированного кварцевого волокна, и в рутинных исследованиях не должно составлять менее 50 нм. Простейшим зондом является заостренное волокно, на конический отрезок которого

сбоку нанесен металлический слой так, чтобы прозрачной осталась только небольшая площадка на вершине. Зонд может переносить излучение от осветителя к образцу или от образца к детектору. В первом варианте луч лазера запускается в волокно через широкий торец и, проходя через коническую вершину, где он теряет основную часть мощности, освещает образец. За прозрачным образцом расположен детектор, например, фотодиод. Второй вариант отличается тем, что осветитель и детектор меняются местами. В этом случае освещен широкий участок образца, но через зонд проходит лишь излучение, рассеянное участком поверхности, ближайшим к вершине. Если образец неоднороден, то интенсивность рассеяния, а значит и ток, регистрируемый приемной схемой, изменяются в процессе сканирования, что позволяет связать положение неоднородности с тем или иным элементом растра на изображении.

Приготовление апертурных зондов осуществляется заострением кварцевого одномодового волокна с последующим напылением металла на боковую поверхность заостренного волокна.

Методы заострения оптического волокна делятся на две большие группы: группу методов, основанных на термической вытяжке и группу методов, основанных на химическом травлении оптического волокна.

Существуют различные методики заострения оптического волокна методом травления. Наибольшее распространение среди них получили метод термической вытяжки и метод химического травления. Принципиально различают два способа травления: метод травления на границе раздела двух сред и метод травления в цилиндрической трубке (рис. 3.12). Обычно трубкой служит полимерная оболочка, которой покрыта кварцевая часть оптического волокна. При изготовлении оптических зондов методом травления, типичный радиус кривизны заостренного участка равен 10-50 нм, а угол при вершине составляет 20–50° в зависимости от режимов травления. Таким образом, использование метода травления для заострения волокон может существенным образом увеличить энергетические характеристики получаемых зондов. Метод травления в цилиндрической трубке дает наиболее повторяемые результаты и более гладкую поверхность заостренного участка кварцевого волокна, что важно при последующем формировании металлической пленки на конической поверхности острия.

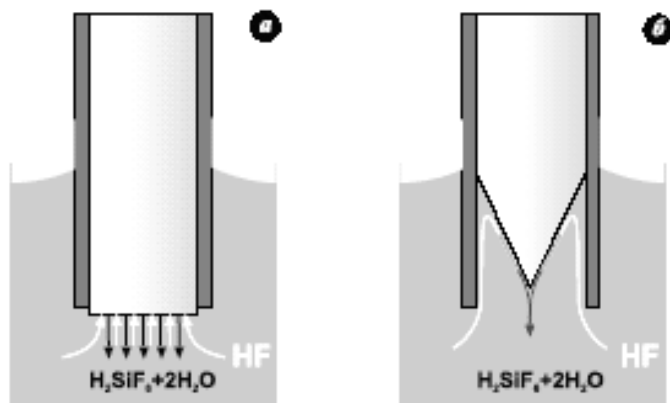


Рис. 3.12. Схематическое представление конвекционного травления кварцевого оптического волокна в защитной полимерной оплетке. (а) — начальная стадия травления; (б) — заключительная стадия травления, в процессе которой происходит самозатачивание оптического волокна

После заострения конца оптического волокна на его боковую поверхность наносится слой металла. Нанесение обычно осуществляется путем термического испарения металла в вакууме. При этом заостренное оптическое волокно располагается так, как показано на рис. 3.13.

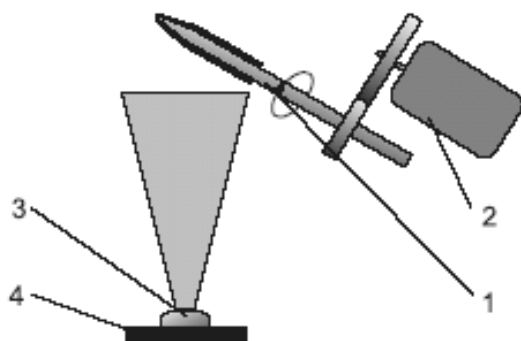


Рис. 3.13. Способ нанесения алюминиевой пленки на боковую поверхность оптического зонда. 1 — оптическое волокно. 2 — электромотор постоянного тока. 3 — источник паров алюминия. 4 — испаритель

В различных вариантах апертурного СОМБП оптический зонд может использоваться для освещения образца, для переноса излучения от образца к детектору и для двух этих целей одновременно.

Различные схемы работы апертурного зонда, применяющихся при исследовании поверхности в режиме ближнепольного оптического микроскопа, представлены на рис. 3.14.

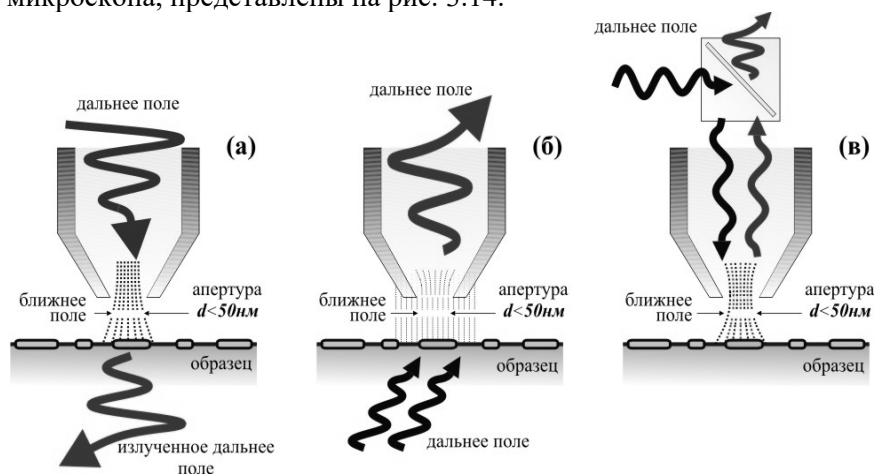


Рис. 3.14. Основные режимы исследования поверхности с помощью апертурного СОМБП. (а) и (б) — схемы работы в проходящем свете, (в) — комбинированный режим

Прецизионное перемещение зонда относительно образца осуществляется с помощью сканера. Обычно он представляет собой отрезок цилиндрической трубки из пьезокерамики, на который нанесено четыре электрода. Подавая в определенной последовательности напряжение на разные пары электродов, можно изгибать цилиндр в разные стороны, а также сжимать или растягивать его вдоль оси, осуществляя тем самым развертку в горизонтальной плоскости x и подвижку по оси z .

Наиболее часто используются схемы просвечивающего СОМБП (рис. 3.14): возбуждение исследуемого образца субдлинноволновой апертурой МБП (далее — апертурный излучающий СОМБП, рис. 3.14 (а)), сбор прошедшего излучения производится с помощью классической оптики; локальный сбор оптического излучения субдлинноволновой апертурой СОМБП (рис. 3.14 (б), далее — апертурный собирающий СОМБП), накачка осуществляется дальним полем.

Как правило, схема собирающего СОМБП (рис. 3.14 (б)) применяется для решения тестовых или биологических задач, когда подложка образца сравнительно прозрачна для используемого света. В случае непрозрачной подложки применяют схему излучающего

СОМБП, либо применяют модифицированную схему собирающего СОМБП, в которой накачка дальним полем осуществляется под углом к поверхности и направлена непосредственно в зазор между зондирующим острием и поверхностью.

Широко применяется и другая схема, в которой возбуждение и сбор оптического сигнала происходит с помощью одной и той же иглы (комбинированный режим, рис. 3.14 (в)). При возбуждении поверхности из оптического волокна (излучающий СОМБП) удастся достичь больших плотностей накачки, и область взаимодействия образца с накачкой хорошо локализована. Недостатком этой схемы при изучении фотолюминесцентных свойств полупроводников состоит в том, что возбужденные носители в чистом полупроводнике за время жизни до акта рекомбинации могут удалиться от острия на длину диффузии, которая составляет несколько микрон, так что спектр излучаемого сигнала не обязательно будет соответствовать точке, находящейся под иглой. Это существенно снижает разрешающую способность метода.

Режим собирающего СОМБП (рис. 3.14 (б)) при облучении близлежащей области поверхности излучением, сфокусированным с помощью линз системы накачки, более удобен при регистрации сигнала от заведомо локализованных источников (например, единичных молекул). Однако интенсивность возбуждения вокруг острия оказывается невысокой. Кроме того, возможные особенности фокусировки излучения накачки в ближнее поле иглы и микронеровности поверхности, учесть которые крайне сложно, затрудняют интерпретацию наблюдаемых результатов и оставляют сомнения в их однозначности. Однако, пользуясь методикой сканирования по плоскости над поверхностью исследуемого образца, удастся практически полностью избавиться от этого недостатка.

Наиболее просты для интерпретации изображения, полученные в комбинированном режиме (рис. 3.14 (в)) при локальном облучении поверхности и сборе сигнала с помощью одного и того же апертурного зонда. Данная схема позволяет также уменьшить паразитные сигналы, собираемые зондирующим острием помимо отверстия апертуры. Единственным недостатком следует считать определенную потерю сигнала при двукратном прохождении излучения через вершину острия, что при наличии высокочувствительного приемника излучения не является непреодолимым препятствием.

Несмотря на значительные различия в работе различных вариантов СОМБП, существует ряд общих физико-технических задач,

решение которых принципиально необходимо для полноценной реализации возможностей СОМБП. Среди этих задач — определение силы взаимодействия зондирующего острия с исследуемой поверхностью. Таким образом, одним из ключевых элементов СОМБП является система контроля расстояния между зондом и поверхностью, на которую возлагаются задачи по обеспечению: наименьшей возможной силы взаимодействия зондирующего острия с поверхностью; минимально возможной амплитуды колебания вершины зондирующего острия, и стабильности параметров системы при длительных измерениях.

Датчики силы взаимодействия зондирующего острия с исследуемой поверхностью в СОМБП обычно регистрируют изменения амплитуды или фазы колебаний, возбужденных на резонансной частоте зондирующего острия, колеблющегося, в большинстве случаев, параллельно плоскости поверхности образца. Сближение острия с образцом приводит к уменьшению размаха колебаний под действием тангенциальной составляющей сил атомного взаимодействия. Качественно ту же картину можно наблюдать, постепенно погружая в жидкость колеблющуюся иглу. Силы, тормозящие колебания острия, направлены преимущественно вдоль поверхности образца, как и силы сдвига в кристалле (*shear force*). В русскоязычной литературе эти силы называются силами квазитрения.

Исходя из этой аналогии, данный термин стали применять и для обозначения метода контроля расстояния между острием и образцом по изменению амплитуды и фазы колебаний острия, происходящих вдоль поверхности образца. Зная зависимость амплитуды колебаний от расстояния z до поверхности, можно остановить сближаемое с образцом острие на нужной высоте (обычно $1 \dots 10$ нм), не допуская его столкновения с поверхностью. Существуют чисто оптические схемы контроля z , в которых колеблющаяся игла помещается между вспомогательными источником и приемником света. Их взаимное расположение при юстировке подбирается таким образом, чтобы достигающая детектора часть светового потока уменьшалась при росте амплитуды колебаний. Использование оптических датчиков для регистрации амплитуды или фазы колебаний крайне нежелательно, так как эти датчики не свободны от таких недостатков, как наличие дополнительного источника оптического излучения (что неприемлемо в СОМБП, когда длина волны этого излучения попадает в полосу поглощения или люминесценции исследуемого объекта). Более того, оптические датчики требуют настройки оптической схе-

мы датчика и имеют достаточно большие размеры. К одному из неоспоримых преимуществ оптического датчика квазитрения можно отнести наименьшую минимально-детектируемую силу взаимодействия зондирующего острия с поверхностью. Однако более универсальными являются пьезоэлектрические датчики силы квазитрения (ПДКТ) на основе камертонного кварцевого резонатора (ККР). Датчики силы квазитрения на основе ККР (см. рис. 3.15) обладают несколько большей минимально-детектируемой силой взаимодействия зонда (в зависимости от ККР) с поверхностью, однако их миниатюрность и простота использования является важным аргументом при выборе концепции детектирования силы взаимодействия.

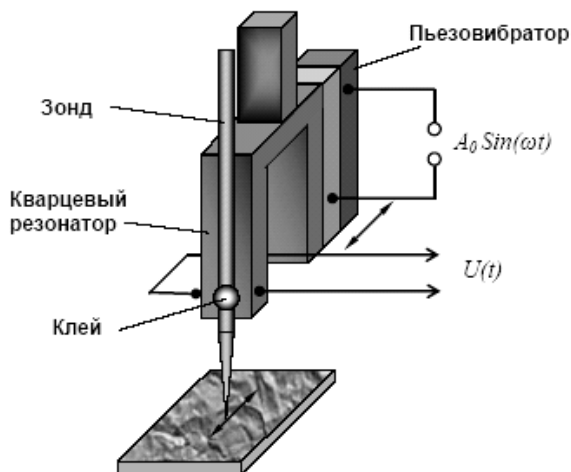


Рис. 3.15. Схема пьезоэлектрического датчика силы квазитрения на основе кварцевого камертонного резонатора

Теория силы квазитрения контроля достаточно сложна, однако качественно может быть описана следующим образом. При сближении зонда и образца наблюдаются несколько эффектов. Во-первых, появляется дополнительное диссипативное взаимодействие зонда с поверхностью за счет сил вязкого трения (в тонкой прослойке воздуха, прилегающего к поверхности, и в тонком слое адсорбированных молекул на поверхности образца). Это приводит к уменьшению добротности системы, а следовательно, к уменьшению амплитуды колебаний и уширению амплитудно-частотной и фазо-частотной характеристик системы зонд-резонатор на резонансной частоте. Во-вторых, при малых расстояниях зонд-поверхность происходит изме-

нение моды колебаний в системе зонд — резонатор. В свободном состоянии мода колебаний соответствует колебаниям стержня со свободным концом, а при сближении с образцом (в пределе при касании зонда поверхности) переходит в колебания стержня с закрепленным концом. Это приводит к увеличению резонансной частоты в системе зонд-резонатор, т.е. сдвигу амплитудно-частотной характеристики в сторону более высоких частот. Изменения амплитуды и фазы изгибных колебаний в системе зонд-резонатор используются в качестве сигналов обратной связи для контроля расстояния зонд-поверхность в ближнепольных оптических микроскопах.

Один из используемых ПДКТ на основе ККР представлен на рис. 3.16.

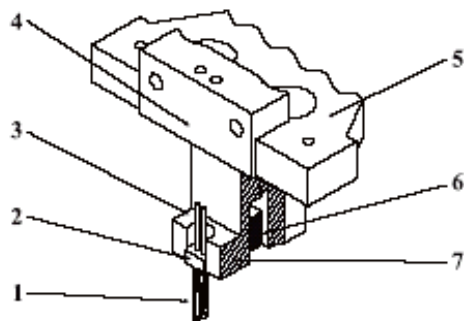


Рис. 3.16. Пьезоэлектрический датчик силы квазитрения на основе кварцевого камертонного резонатора: 1 — кварцевый камертонный резонатор; 2 — плоскость дополнительной фиксации зонда; 3 — электрические контакты; 4 — прижимная плоскость; 5 — основание датчика; 6 — пьезоэлемент; 7 — держатель камертона

ККР представляет собой кварцевый камертон общей длиной 4.5 мм, толщиной $W = 0.3$ мм, длиной ветви камертона $L = 3$ мм и шириной ноги камертона $t = 0.4$ мм. ККР (рис. 3.16) приклеивается к держателю камертона 7, а зондирующее волокно приклеивается к одной из ветви ККР параллельно последней. При этом за границы ветви ККР выступает участок с зондирующим острием длиной 0.3–0.7 мм. Для устранения механических нагрузок на место склейки ККР и зондирующего волокна, последнее дополнительно приклеивается к плоскости 2 у основания камертона 1 и прижимается за оптоволоконную защитную оплетку к плоскости держателя камертона 4 с помощью пружины. Держатель камертона 7 представляет собой деталь со специальной прорезью для пьезоэлемента 6.

Дополнительный пьезоэлемент служит для внешнего возбуждения вынужденных резонансных колебаний системы камертон-зонд. Для возбуждения резонансных колебаний ККР на пьезоэлектрический элемент подается гармонический сигнал амплитудой $U_{st} \sim 0.1 - 10$ мВ. С учетом пьезоэлектрического коэффициента преобразования $K_{st} \sim 0.3-1$ нм/В и добротности системы камертон-зонд, типичная амплитуда колебаний вершины зондирующего острия в резонансе составляет $x_0 \sim 0.13-1.3$ нм.

Лучшего, чем в режиме измерения сил квазитрения, разрешения можно добиться в режиме прерывистого контакта, когда острие периодически вплотную приближается к поверхности и удаляется от нее. При движении острия вдоль шероховатой поверхности система обратной связи меняет напряжение на сканере каждый раз, когда амплитуда колебаний отклоняется от заранее выбранного значения. Так как скачок напряжения пропорционален изменению ширины зазора, по его величине можно судить о высоте встреченной острием неоднородности рельефа. Соответствующая информация обрабатывается в канале АСМ и может быть представлена как карта топографического рельефа сканируемого участка поверхности. Одновременно в оптическом канале или канале СОМБП отслеживается изменение интенсивности светового потока, приходящего на детектор. Выступы или углубления на поверхности регистрируются одновременно в обоих каналах. Более интересна ситуация, когда инородное включение находится на небольшой глубине и может быть замечено только благодаря своим особым оптическим свойствам. Пусть, например, в образце содержатся частицы флуорофора, переизлучающие падающий свет с изменением частоты. Возможность локализации флуоресцентных меток весьма существенна при исследовании биологических тканей, что связано со способностью различающихся по составу меток осаждаться избирательно на различных участках клеток. Запись изображения в канале АСМ позволяет обнаружить выступ на поверхности, но не дает информации о том, отличается ли он по своим оптическим свойствам от соседних участков. Канал СОМБП, принимающий сигнал только на частоте флуоресценции, устраняет эту неопределенность. Более того, СОМБП, в отличие от АСМ, способен обнаружить и частицы, находящиеся на небольшой глубине под поверхностью.

Система поддержания расстояния между зондом и поверхностью позволяет использовать СОМБП для измерения рельефа поверхности, как это видно из рис. 3.17.

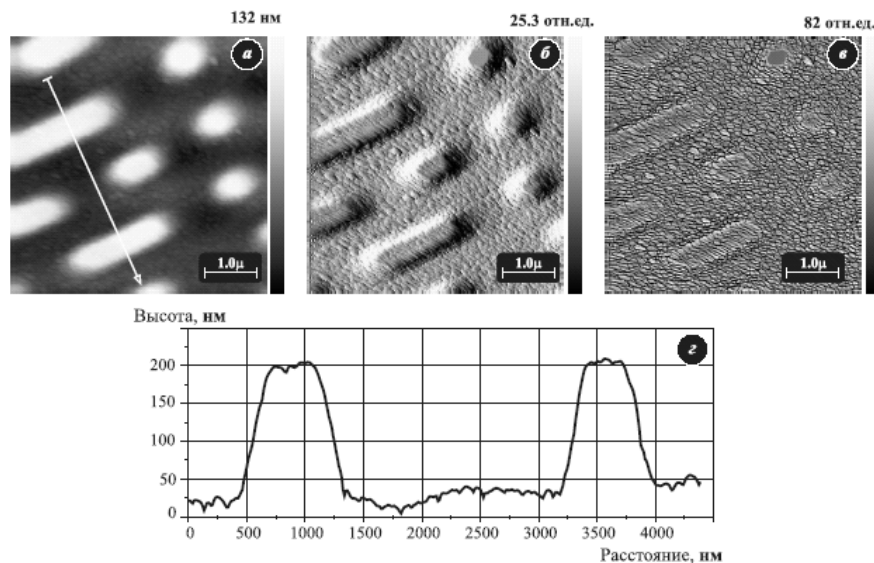


Рис. 3.17. Изображения поверхности никелевой матрицы для изготовления CD дисков: (а) — топографическое изображение в режиме стабилизации системой ОС фиксированного значения амплитуды колебания зондирующего острия; (б) — изменение фазы колебания; (в) — изменение амплитуды, в том случае когда система ОС стабилизирует значение фазы колебания. (г) — профиль сечения вдоль указанной на (а) линии

Сканирующий зондовый микроскоп Solver P47H и методика измерения. СЗМ ИНТЕГРА Прима (рис. 3.18) предназначен для количественных и качественных измерений приповерхностных характеристик различных объектов и сопутствующих им физических полей с разрешениями вплоть до атомарных.

Одним из основных элементов прибора ИНТЕГРА Прима является СЗМ головка, наиболее важными элементами которой являются зонд и система регистрации отклонения зонда. Кроме того, в состав СЗМ входит пьезосканер, основание с системой автоматического сближения зонда с поверхностью образца, оптическая система с видеомикроскопом, виброзащитный столик, электронный контроллер

и компьютер. Управление СЗМ, получение данных и их обработка осуществляются с помощью пакета программного обеспечения Nova Rx, внешний вид интерфейса которого показан на рис. 3.19.

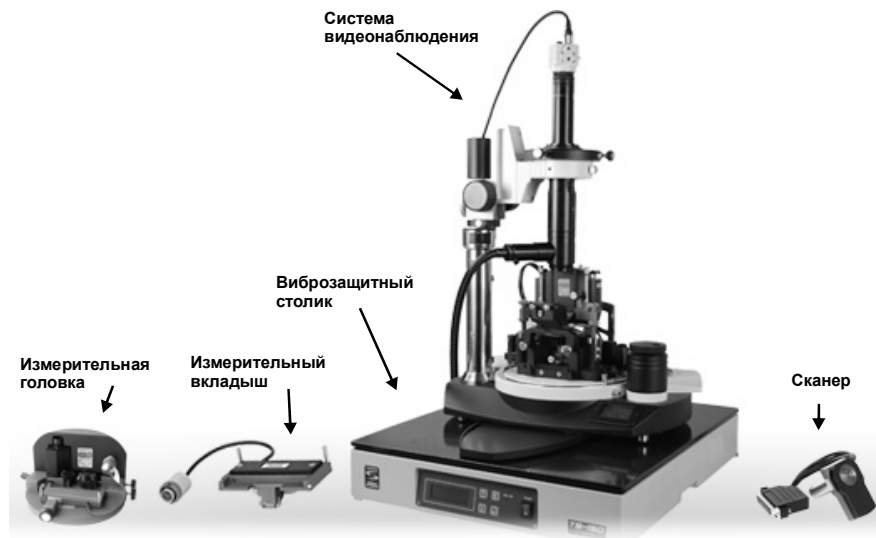


Рис. 3.18. Внешний вид измерительной головки, вкладыша, основания с системой автоматического сближения зонда с поверхностью образца, оптической системы с микроскопом, виброзащитного столика и снабженного датчиками перемещения сканера СЗМ ИНТЕГРА Прима. Электронный контроллер и компьютер не показаны

Схема регистрации отклонений кантилевера основана на оптической следящей системе типа «оптический рычаг» (см. рис. 3.5). Регистрирующая система позволяет определять угловое отклонение кантилевера с разрешением менее 0.1° , что обеспечивает разрешение по вертикали 0.05 нм . Регистрирующая система состоит из источника излучения, позиционно-чувствительного фотоприемника и оптической системы. Источником излучения является полупроводниковый лазер с длиной волны 670 нм и мощностью 0.9 мВт . Позиционно-чувствительным фотоприемником является четырехсекционный фотодиод.

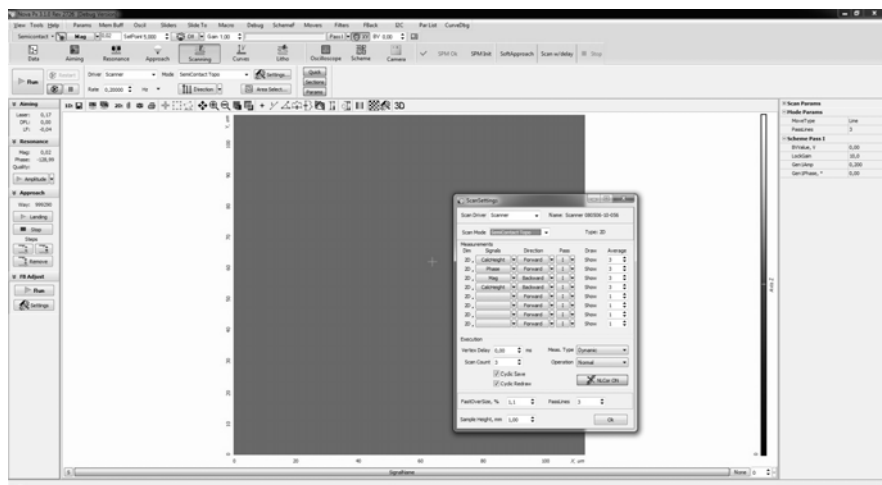


Рис. 3.19. Основное окно интерфейса пакета программного обеспечения Nova Px

Оптическая система состоит из фокусирующего объектива, зеркальной поверхности кантилевера и линзы. Луч лазера фокусируется объективом в эллиптическое пятно размером ~ 50 микрон на обратной стороне кантилевера в районе острия. Отраженный от кантилевера свет попадает на четырехсекционный фотодиод. Отклонение кантилевера вызывает перемещение лазерного пятна относительно сегментов (см. рис. 3.5) фотодиода, что вызывает изменение электрических сигналов, поступающих с этих сегментов. Сигналы предварительно обрабатываются (усиливаются, складываются и вычитаются) и с выхода регистрирующей системы поступают три сигнала:

— «DFL»-сигнал, пропорциональный отклонению кантилевера в вертикальном направлении. «DFL» является разностным сигналом между верхней и нижней половинами фотодиода;

— «LF»-сигнал, пропорциональный боковому отклонению луча. Регистрирующая система прибора позволяет измерять крутильную деформацию кантилевера, которую могут вызывать боковые силы. Крутильная деформация смещает отраженный луч в боковом направлении. «LF» является разностным сигналом между правой и левой половинами фотодиода;

— «LASER»-сигнал, пропорциональный суммарной интенсивности света, отраженного от кантилевера. «LASER» является

суммарным сигналом от всех четырех сегментов фотодиода. Данный сигнал используется при настройке оптической системы.

При сканировании пятно лазерного луча остаётся неподвижным относительно кантилевера.

В СЗМ головке используется сканер, обеспечивающий максимальное поле сканирования размером приблизительно 100 микрон на 100 микрон. Сканер состоит из двух пьезотрубок разного диаметра, вставленных одна в другую. Верхний конец большой трубки закреплен на головке, к нижнему концу крепится пьезотрубка, имеющая меньший диаметр. К верхнему концу последней крепится держатель образца. Пьезотрубка меньшего диаметра обеспечивает сканирование в плоскости образца, большего — перемещение образца по нормали к оси зонда.

В режиме «контактной» АСМ сканирование производится образом, перемещающимся относительно неподвижного кантилевера. Лазерный луч регистрирующей системы отражается от кантилевера, изгиб и кручение которого меняются в зависимости от локальной высоты поверхности в данной точке. Это приводит к появлению на выходе регистрирующей системы электрического сигнала, величина которого пропорциональна изгибу кантилевера. В нашем случае этим сигналом является сигнал «DFL». Таким образом, регистрирующая система измеряет величину силы взаимодействия острия зонда с поверхностью образца и преобразует ее в электрический сигнал. Далее производится обработка переменной составляющей сигнала «DFL» — фильтрация, усиление и детектирование. При работе в режиме «контактной» АСМ сигнал «DFL» используется в качестве входного сигнала системы обратной связи.

Работа прибора при измерении топографии поверхности в «контактном» режиме производится в режиме поддержания постоянным изгиба кантилевера, что обеспечивается поддержанием постоянного уровня сигнала «DFL». Предполагается, что именно этот сигнал («DFL») выбран в качестве сигнала обратной связи. Вначале, перед сканированием, оператор производит подвод образца к зонду на расстояние, при котором острие кантилевера начинает взаимодействовать с поверхностью. Оператор устанавливает начальную величину «DFL» посредством установки параметра «Set point», тем самым устанавливая определенную величину изгиба кантилевера и, соответственно, определенный уровень взаимодействия острия и поверхности. Установка и поддержание заданной величины «DFL», равной значению «Set point», происходит благодаря работе системы

обратной связи. Так как «DFL» является входным сигналом обратной связи, то при включении обратной связи этот сигнал поддерживается равным параметру «Set point», установленному оператором. При сканировании величина изгиба кантилевера изменяется в каждой точке из-за рельефа поверхности. Соответственно, текущее значение сигнала «DFL» в каждой точке поверхности изменяется относительно уровня «Set point». Это отклонение от «Set point» при работе с обратной связью воспринимается как сигнал ошибки. В каждой точке поверхности система обратной связи при помощи сканера перемещает зонд по нормали к поверхности таким образом, чтобы вернуть текущую величину «DFL» к значению «Set point», т.е. текущую величину изгиба кантилевера к исходной величине. Одновременно, сигнал, пропорциональный вертикальному перемещению сканера, подается на усилитель с регулируемым коэффициентом усиления. После усилителя сигнал поступает на аналого-цифровой преобразователь и далее через интерфейсную плату записывается в память компьютера, формируя топографический образ поверхности образца.

Регистрируемым сигналом, отображающим рельеф поверхности образца, является «Height».

Кроме сигнала «DFL» взаимодействие зонда с поверхностью образца (особенно — при движении образца) приводит к появлению латеральных сил, действующих в плоскости образца, приводящих к закручиванию кантилевера и появлению сигнала «LF», который может детектироваться одновременно с сигналом «Height».

Подготовку прибора к работе в режиме АСМ можно разделить на следующие основные операции:

- включение прибора, запуск программы управления;
- подготовка зонда (выбор и установка кантилевера);
- подготовка и установка образца;
- установка измерительной головки, настройка лазера, настройка фотодиода (наведение лазерного луча на кантилевер, установка максимального значения сигнала «LASER», нулевых значений сигналов «DFL» и «LF»);
- установка СЗМ головки на основание;
- предварительный подвод образца к зонду;
- выбор конфигурации работы СЗМ;
- автоматический подвод образца к зонду;

- установка параметров сканирования;
- настройка параметров в процессе сканирования;
- сохранение полученных данных;
- завершение измерений.

Литература

1. *Миронов В.Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии: Учебное пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. Нижний Новгород: ИФМ РАН, 2004. Разделы 1.1, 1.5, 2.2.
2. *Либенсон М.Н.*, Преодоление дифракционного предела в оптике // Соросовский образовательный журнал, т.6, №2, с. 99-104 (2000).
3. *Ежов А.А., Магницкий С.А., Музыченко Д.А., Панов В.И.*, Применение сканирующей оптической микроскопии ближнего поля для изучения субмикро- и нанообъектов, а также распределения электромагнитного поля // Научные технологии, №1, с. 34-40 (2005).
4. *Жданов Г.С., Либенсон М.Н., Марциновский Г.А.* Ближне-польная оптика: Учебное пособие. СПб.: СПбГУ ИТМО, 2007, с.98.

ЗАДАЧА 3.1. Изучение поверхностных наноструктур методом атомно-силовой микроскопии

Цель работы:

Изучение основ работы сканирующих зондовых микроскопов на примере изучения двумерных наноструктур методом атомно-силовой микроскопии.

Применяемое оборудование:

Сканирующий зондовый микроскоп ИНТЕГРА Прима.

Задание:

Освоить порядок работы на сканирующем зондовом микроскопе, исследовать поверхности тестового образца, получить изображения исследованных образцов.

Подготовка к выполнению работы:

Ознакомиться с правилами техники безопасности, изучить принцип работы сканирующего зондового микроскопа в режиме атомно-силовой микроскопии, ознакомиться с порядком включения сканирующего зондового микроскопа и порядком работы на нем, изучить разделы, рекомендованные в библиографическом списке.

Порядок выполнения работы:

Внимание! Строго запрещается при установке и замене кантилевера использовать отвертку или другие подручные инструменты для отгиба зажима кантилевера. Это может привести к ослаблению зажима кантилевера, что может вызвать некачественную работу прибора.

Прибор в конфигурации «Сканирование образцом» позволяет исследовать образцы, удовлетворяющие следующим параметрам: диаметр — до 40 мм; высота — до 15 мм; вес — до 100 г.

Для выполнения задачи следует выполнить следующие действия:

1. Включение прибора

1.1 Открыть дверцу промышленной стойки, в которой установлены контроллер СЗМ и управляющий компьютер, открыть дверцу компьютера, включить компьютер и мониторы, дождаться загрузки операционной системы.

1.2 Включить контроллер СЗМ тумблером на передней панели.

1.3 Запустить программу управления при помощи ярлыка программы «NOVA_Px», расположенного на рабочем столе. Дождитесь появления в рабочем окне программы зелёной надписи «SPM OK».

1.4 Загрузить конфигурационный файл. Для этого в главном меню последовательно выбрать «Tools» → «Calibrations» → загрузить файл «100мкм_recalibration» → «Apply» → «OK».

1.5 Включить виброизоляционный столик. Для этого нажать последовательно три кнопки на передней панели столика.

1.6 Запустить программу видеонаблюдения с помощью видеомикроскопа с помощью ярлыка «AverTV6».

2. Установка зондового датчика

2.1 Отвести в сторону систему видеонаблюдения. Для этого ослабить винт фиксации углового положения штатива, повернуть держатель видеомикроскопа, зафиксировать винт.

2.2 Аккуратно двумя руками снять защитный колпак и положить его на ровную поверхность.

2.3 Снять измерительную головку (рис. 3.20).

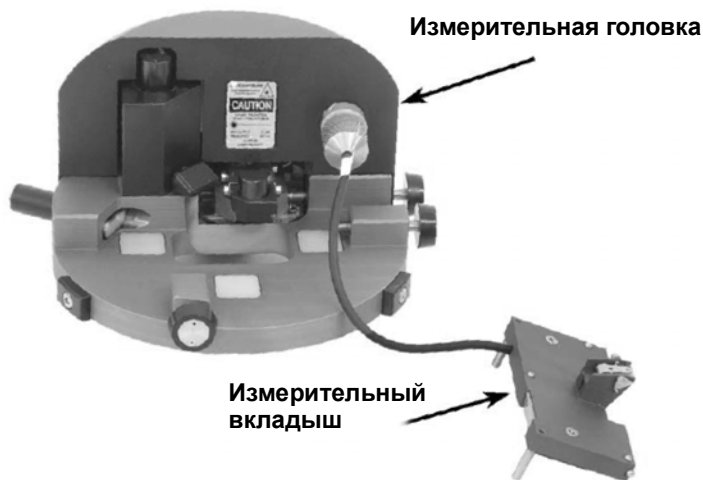


Рис. 3.20. Измерительная головка и измерительный вкладыш

2.4 Извлечь вкладыш с измерительной головки и поместить его в перевернутом положении рядом с измерительной головкой. Чтобы снять вкладыш, отвести прижим, повернув ручку прижима по часовой стрелке.

2.5 Отжать пружину держателя зондового датчика. Для этого при помощи острого пинцета повернуть вниз поворотный рычажок, расположенный на внешней стороне корпуса держателя (см. рис. 3.21).

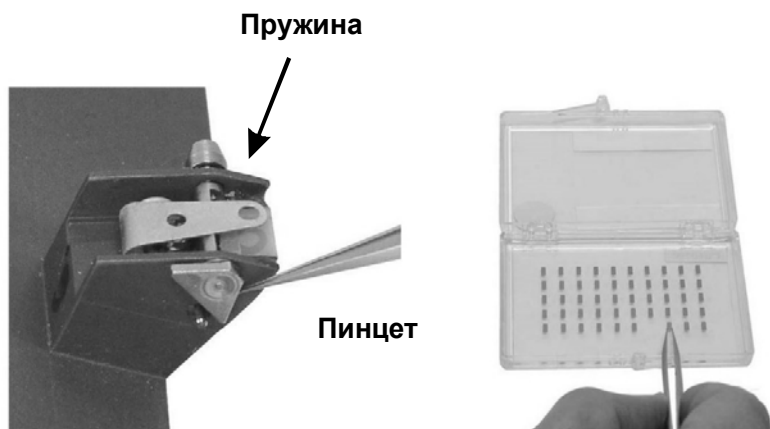


Рис. 3.21. Ослабление пружины держателя зондового датчика и упаковочная коробка с зондовыми датчиками

2.6 Взять зондовый датчик из упаковочной коробки пинцетом с учётом того, что рабочая грань чипа с кантилевером при установке будет обращена к Вам. Не переворачивать чип, т.к. в коробочке зондовые датчики лежат остриями вверх.

2.7 Перенести зондовый датчик на поликоровую подставку и поместить его слева от рабочего места, которое находится в углу столика под прижимной пружиной (см. рис. 3.22).

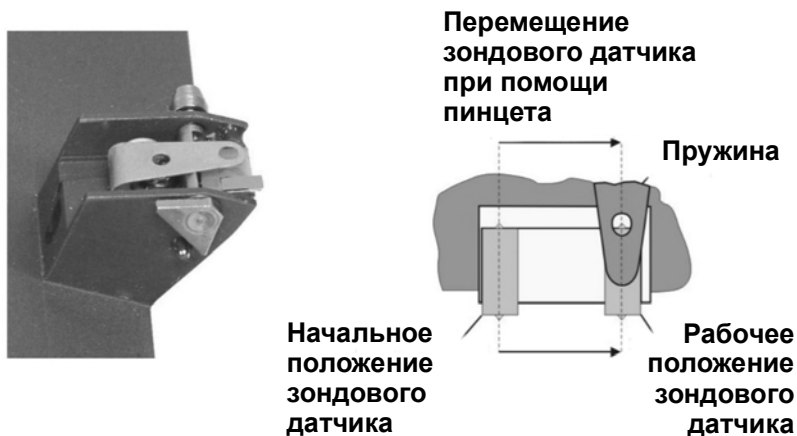


Рис. 3.22. Последовательность установки зондового датчика

2.8 Передвинуть зондовый датчик на рабочее место пинцетом. После установки зондового датчика на рабочее место зафиксировать его прижимной пружиной. Для этого при помощи пинцета повернуть рычажок в прижимное положение.

2.9 Установить измерительный вкладыш в измерительную головку. Прижать измерительный вкладыш к винтовым упорам, повернув винт прижима против часовой стрелки.

3. Установка образца

3.1 Ручкой подвода максимально отвести сканер с датчиками, вращая ручку по часовой стрелке, чтобы избежать удара кантилевом по образцу в момент установки измерительной головки.

3.2 Установить предметный столик на сканер. Так как предметный столик магнитится к сканеру, избегайте удара столика по сканеру. В противном случае сканер будет поврежден.

3.3 Установите на предметный столик образец, закрепленный двухсторонней липкой лентой на специальной поликоровой подложке так, чтобы он полностью опирался на три шарика предметного столика.

Помните, что перемещение сканера микровинтами возможно в пределах 5 мм × 5 мм, поэтому заведомо установите образец так, чтобы интересующая область сканирования была вблизи кантилевера.

4. Установка измерительной головки

4.1 Установить измерительную головку опорами в посадочные гнезда сменного основания так, чтобы измерительный вкладыш был направлен к оператору.

4.2 Заправить кабель головки в держатель кабеля.

5. Настройка оптической системы регистрации изгиба и кручения кантилевера

5.1 Включить систему освещения видеомикроскопа, повернув ручку на передней панели осветителя. Отрегулировать яркость. Не рекомендуется устанавливать яркость на максимум, это приведёт к преждевременному выходу из строя лампы освещения.

5.2 Навести систему видеонаблюдения на образец. Осуществляйте контроль за всеми манипуляциями в окне программы AverTV6. Сфокусируйтесь на кантилевере, вращая ручку механизма

грубой фокусировки. Чтобы выбрать нужное увеличение, поверните регулятор увеличения на трансфокальном модуле.

5.3 Запустите в управляющей программе осциллоскоп (кнопка «Oscilloscope»). В окне осциллоскапа нажмите кнопки «DFL», «LF», «Laser».

5.4 Винтами X- и Y-перемещений измерительного вкладыша добейтесь попадания лазерного луча на кончик кантилевера, глядя на его изображения в окне программы AverTV6. По осциллоскопу максимизируйте сигнал «Laser» (рис. 3.23).

5.5 Винтами позиционирования фотодиода добейтесь, чтобы сигналы DFL и LF были близки к нулю, а сигнал Laser максимален по показаниям осциллоскапа.

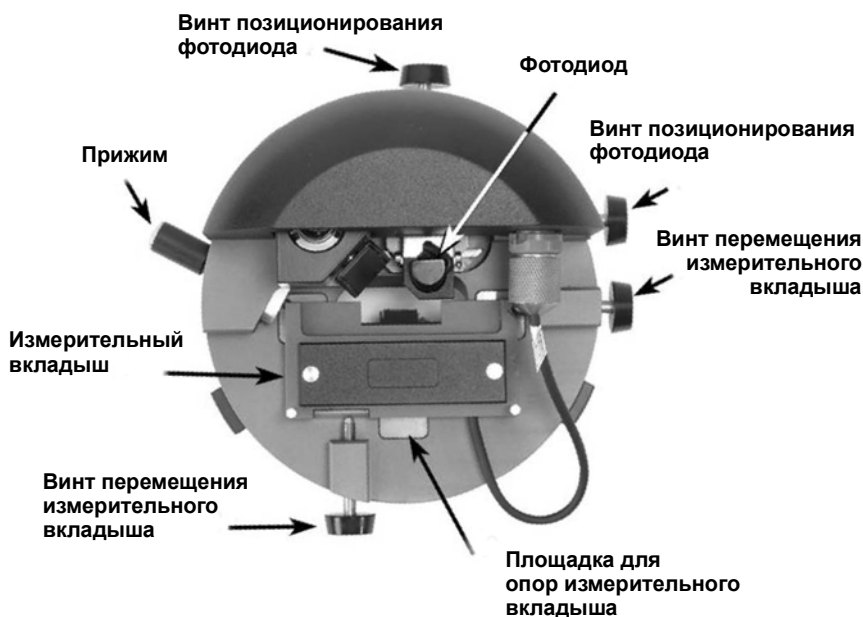


Рис. 3.23. Винты перемещения вкладыша и фотодиода измерительной головки

6. Предварительный подвод образца к зонду

6.1 Глядя сбоку и вращая ручку подвода против часовой стрелки, подвести образец к зонду на расстояние $0.5 \div 1$ мм.

6.2 Проверить настройку системы регистрации изгибов кантилевера при помощи сигналов «DFL», «LF», «Laser» программного ос-

цилоскопа и при необходимости произвести подстройку оптической системы.

6.3 Проверить, что образец находится под кантилевером, и он достигает всей области сканирования.

7. Выбор конфигурации

7.1 Переключить прибор для работы по контактным методам, выбрав пункт «Contact» в списке выбора конфигурации контроллера на панели основных параметров.

8. Автоматический подвод образца к зонду

8.1 Перейти на вкладку «Approach» (кнопка «Approach» на панели основных операций).

8.2 Установить значение

$$\langle \text{SetPoint} \rangle = \langle \text{DFL} \rangle + (0.05 \div 0.1) * \langle \text{Laser} \rangle.$$

8.3 Запустить процедуру подвода кнопкой «Landing». После окончания подвода сигнал «DFL» увеличится до значения параметра «SetPoint», длина линии индикатора уменьшится и займет некоторое промежуточное положение, шаговый двигатель отключится, увеличение сигнала «DFL» до значения параметра «SetPoint» будет отображено на зависимости «DFL» от времени на программном осциллографе, в журнале появится сообщение «...Approach Done.»

8.4 Если наблюдается генерация сигнала «DFL», то необходимо уменьшить коэффициент усиления «Gain».

8.5 Если в процессе подвода область сканирования сдвинулась относительно кантилевера, то пододвиньте образец. Для этого отключите обратную связь, нажав кнопку обратной связи, и микровинтами пододвиньте образец в нужном направлении.

8.6 Установить защитный колпак. Настроить систему видеонаблюдения, как это описано в разделе 5. Убедиться в том, что область сканирования не изменилась во время этих манипуляций.

9. Установка параметров сканирования

9.1 Перейти на вкладку «Scan» (кнопка «Scan» на панели основных операций).

9.2 На панели управления в списке «Mode» выбрать метод «Contact Topography» («Constant Force»)

9.3 Включить обратную связь, нажав кнопку «FB».

9.4 Зайдите в «Area Select» → Чтобы изменить размер и выбрать область сканирования включите опцию изменения размера и выбора области. Установите размер сканированного изображения,

число точек, шаг сканирования. Число точек по осям X и Y («Point Number»), размер сканированного изображения (параметр «Scan Size») и шаг сканирования («Step Size») задаются при помощи кнопки со списком выбора параметра. При установке параметров «Point Number», «Scan Size», «Step Size» следует иметь ввиду следующее:

- при изменении «Point Number» «Scan Size» изменяется, а «Step Size» не меняется;
- при изменении «Scan Size» «Step Size» изменяется, а «Point Number» не меняется;
- при изменении «Step Size» «Scan Size» изменяется, а «Point Number» не меняется.

9.5 Нажать кнопку . Проверить, что в пределах выбранной области сканирования зонд всюду достает до поверхности и нигде не «врезается» в нее. Для этого нажав левую клавишу мыши и удерживая ее, перемещайте курсор в пределах выбранной области сканирования. Перемещение курсора отражает реальное перемещение зонда относительно поверхности образца.

9.6 При помощи мыши изменить размер и положение области сканирования.

9.7 Во вкладке «Settings» установить регистрируемые сигналы, щелкнув на кнопке «Settings» панели управления вкладки «Scan».

9.8 Установить скорость сканирования «Rate» в пределах $0.5 \div 2$ Гц.

9.9 Запустить сканирование нажатием на кнопку «RUN».

10. Настройка параметров в процессе сканирования

10.1 Чтобы наблюдать в процессе сканирования получающиеся сечения, нажмите кнопку «S» во всех окнах.

10.2 Чтобы учесть наклон профиля сканирования, нажмите кнопку «None» и выберите любой способ вычитания наклона плоскости сканирования.

10.3 Параметры «Set Point» и «FB Gain» можно свободно изменять в процессе сканирования, улучшая качество получаемого изображения и устраняя артефакты.

10.4 Чтобы изменить размер и положение области сканирования, нажмите кнопку «Pause», перейдите в «Area Select», подкорректируйте область и нажмите «Restart». Кнопка «Restart» осуществляет повторный запуск сканирования сначала с новыми параметрами.

11. Сохранение полученных данных

11.1 В главном меню выберите «Data». В открывшемся диалоговом окне выберите каталог, в котором будут храниться полученные данные. Введите название файла и сохраните его с расширением *.mdt.

12. Завершение измерений

12.1 Разомкните цепь обратной связи (кнопка «FB» не нажата).

12.2 Отведите образец от зонда, для этого перейдите на вкладку «Approach». Нажмите несколько раз «Moving» для «Backward».

12.3 Отведите образец, вращая ручку подвода по часовой стрелке.

12.4 Выключите СЗМ контроллер.

12.5 Выключите виброзащитный стол.

12.6 Выключите блок осветителя.

12.7 Закройте программу управления.

13. Обработка и представление результатов измерений

13.1 В отчете представить АСМ изображения поверхности тестового образца.

13.2. Определить средний размер нанообъектов и среднее расстояние между ними, используя АСМ изображения, используя программу Image Analysis P9 (рис. 3.24).

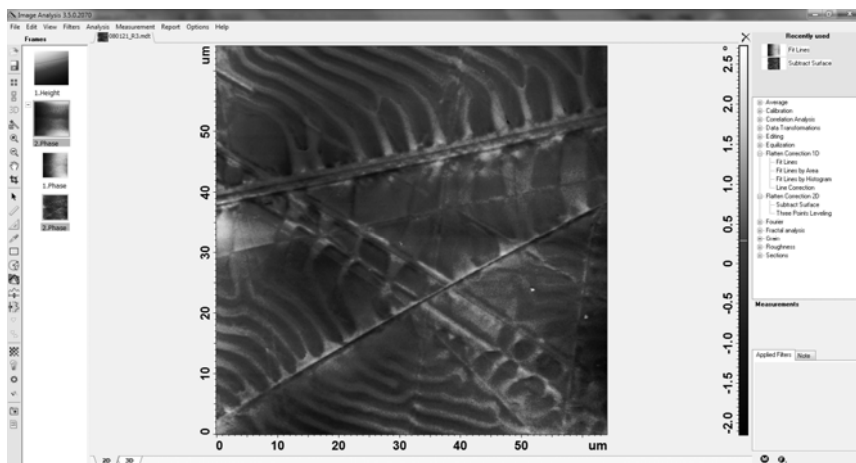


Рис. 3.24. Основное окно интерфейса пакета программного обеспечения Image Analysis P9

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте общий принцип работы сканирующего зондового микроскопа.
2. Обоснуйте необходимость наличия системы обратной связи в сканирующем зондовом микроскопе.
3. Какова физическая основа работы сканирующего силового микроскопа и, в частности, атомно-силового микроскопа?
4. На чем основана работа оптической системы детектирования силы взаимодействия острия зонда атомно-силового микроскопа с поверхностью? В чем заключается принцип «оптического рычага»?
5. Назовите основные характеристики зондов кантилеверного типа.
6. Опишите основные режимы работы атомно-силового микроскопа: контактный, бесконтактный и «полуконтактный».
7. Перечислите источники побочной информации, искажающей данные о морфологии и свойствах наноструктур, получаемые методом атомно-силовой микроскопии.
8. Опишите принцип действия медианной фильтрации, применяемой при обработке изображений, полученных с помощью сканирующей зондовой микроскопии.
9. Качественно опишите влияние конечного размера и формы острия зонда на изображения, получаемые методом атомно-силовой микроскопии.

Литература

1. *Миронов В.Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии: Учеб. пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. Нижний Новгород: ИФМ РАН, 2004. Разделы 1.1, 1.5, 2.2.
2. *Галлямов М.О., Яминский И.В.* Сканирующая зондовая микроскопия нуклеиновых кислот. М.: УНЦ по физике и химии полимеров, Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, ЦПТ, 1998. Раздел 1.
3. <http://www.ntmdt-si.ru/spm-basics>
4. <http://www.ntmdt-si.ru/modular-afm/prima>
5. Управляющая программа Nova Px. Справочное руководство. М.: ЗАО «Нанотехнологии-НТ», 2012. Разделы 1.1, 1.2, 1.4, 3.1 – 3.7, 5.1 – 5.8, 5.10.

ЗАДАЧА 3.2. Ознакомление с работой апертурного сканирующего оптического микроскопа ближнего поля

Цель работы:

Изучение основ работы сканирующих оптических микроскопов ближнего поля на примере изучения наноструктур с помощью апертурного микроскопа ближнего поля в конфигурации проходящего света.

Применяемое оборудование:

Экспериментальный сканирующий оптический микроскоп ближнего поля на основе зондового микроскопа Solver PRO47H.

Задание:

Освоить порядок работы на сканирующем оптическом микроскопе ближнего поля, исследовать тестовый образец, получить изображения исследованного образца в режимах измерения топографии и ближнепольной микроскопии.

Подготовка к выполнению работы:

Ознакомиться с правилами техники безопасности, изучить принцип работы сканирующего оптического микроскопа ближнего поля в режиме измерения топографии и ознакомиться с порядком включения сканирующего зондового микроскопа и порядком работы на нем, изучить разделы, рекомендованные в библиографическом списке.

Порядок выполнения работы:

Внимание! Строго запрещается при установке и замене держателя зонда прилагать чрезмерные усилия – это может привести к поломке пьезоманипулятора точных перемещений.

Категорически запрещается вручную подводить и отводить зонд во избежание необратимой поломки сканера. Это связано с особенностями устройства подвода сканера. Для обеспечения жесткости конструкции в ней использован червячный механизм с большим коэффициентом передачи. В результате легкое усилие пальцев, в конечных точках, приводит к необратимым разрушениям конструкции. Во избежание поломки требуется использовать программный подвод или отвод сканера.

Категорически запрещается соединять или отсоединять разъемы прибора при включенном приборе во избежание необратимых поломок электронного блока.

Для выполнения задачи следует выполнить следующие действия:

1. Включить блок управления (контроллер) СЗМ.
2. Запустить программу управления СЗМ.
3. Установить тестовый образец исследуемой поверхностью вниз на головку СОМБП в место, показанное на рис. 3.25, и зафиксировать его пружинными прижимами.
4. Отпустив контргайки, винтами установить расстояние между зондом и образцом 3-4 мм, после чего завернуть контргайки.

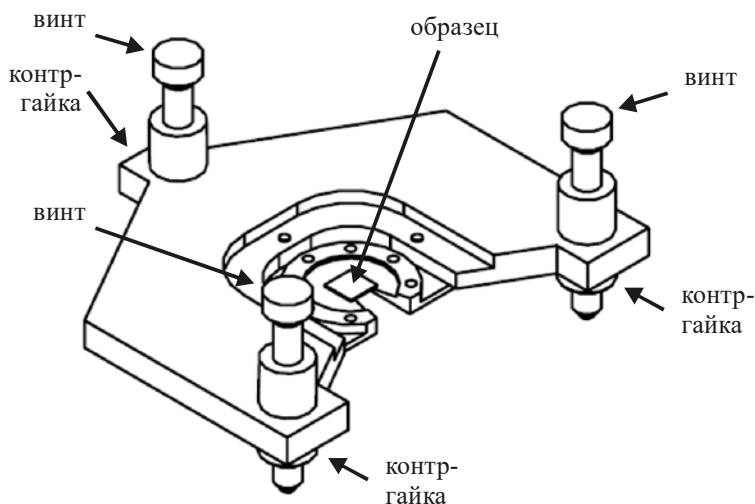


Рис. 3.25. Головка СОМБП с винтами грубой регулировки расстояния между зондом и образцом и угла наклона образца

5. Снять головку МБП с основания СЗМ.
6. Установить держатель зонда (рис. 3.26 и рис. 3.27) на место образца на пьезоманипуляторе точных перемещений (рис. 3.28) основания СЗМ (рис. 3.29). Установку производить таким образом, чтобы зонд располагался как можно ближе к центру круглой посадочной площадки.
7. Установить головку МБП на основание СЗМ, убедившись, что расстояние между зондом и поверхностью составляет не менее 2 мм.
8. Измерить амплитудно-частотную характеристику кварцевого камертонного резонатора с прикрепленным к нему зондом.
9. Установить значение «Set point» равным приблизительно 50% от значения «MAG» в отведенном состоянии.

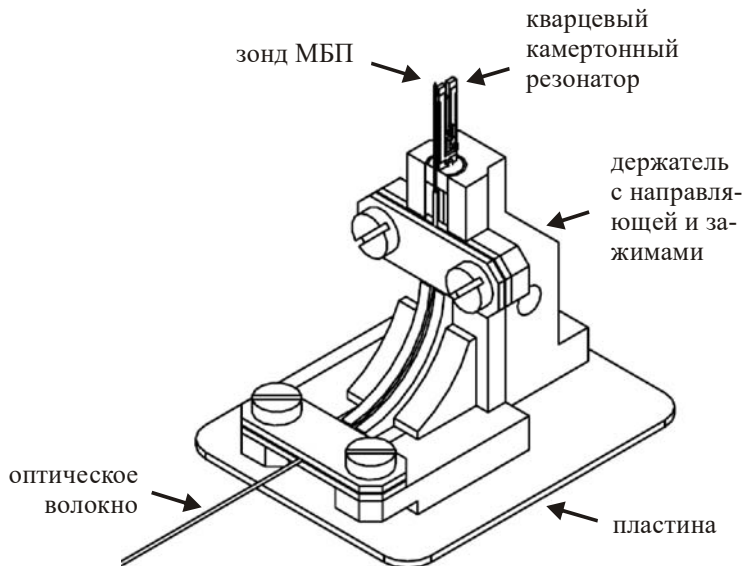


Рис. 3.26. Держатель зонда СОМБП, устанавливаемый на пьезоманипулятор точных перемещения СЗМ «Солвер ПРО»

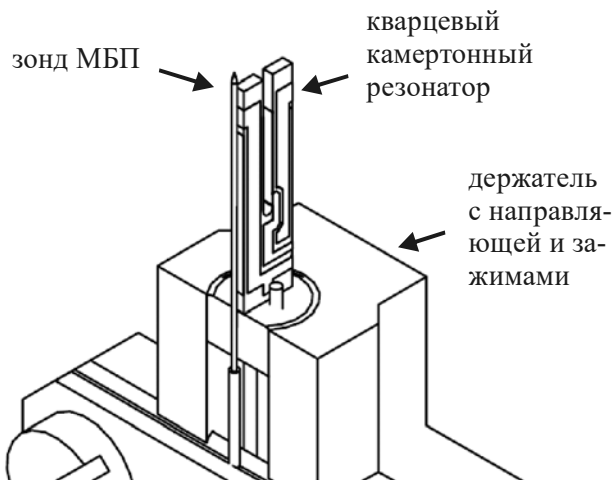


Рис. 3.27. Кварцевый камертонный резонатор с прикрепленным к нему апертурным зондом сканирующего оптического микроскопа ближнего поля

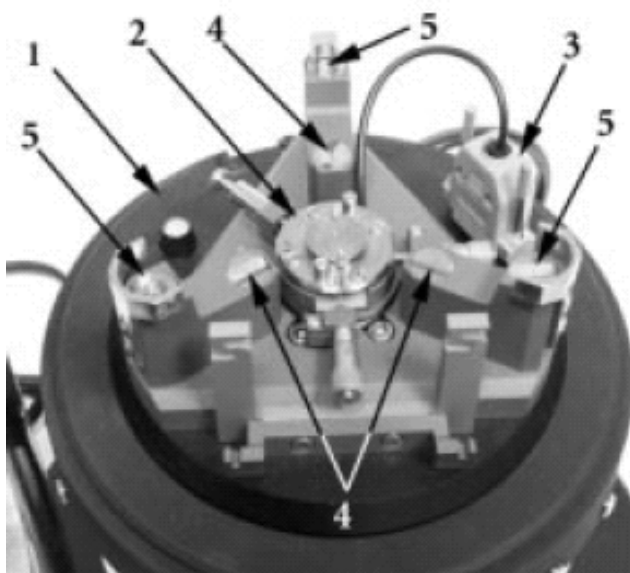


Рис. 3.28. Изображение основания СЗМ «Солвер ПРО»:

1 – основание; 2 – сканер; 3 – разъем подключения сканера;
4 – посадочные места для головки СТМ; 5 – посадочные места для головок АСМ и СОМБП

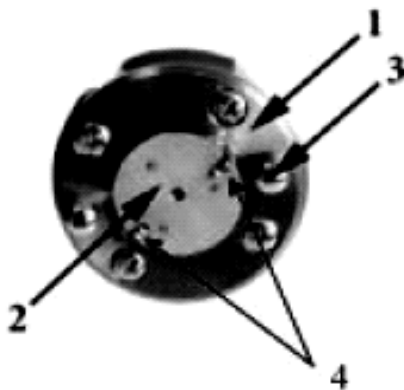


Рис. 3.29. Изображение верхней части сканера СЗМ «Солвер ПРО»: 1 – фланец; 2 – столик; 3 – защитные штифты; 4 – прижимы

10. Запустить процедуру автоматического подвода зонда к образцу. Процедура автоматического подвода начинается при нажатии кнопки «Landing». При этом включается шаговый двигатель, который начинает перемещать зонд в направлении образца. Одновременно происходит автоматическое включение обратной связи. В результате включения обратной связи пьезосканер (а вместе с ним и зонд) выдвинется на максимальную величину по оси Z в направлении образца. В исходном состоянии зонд находится на достаточно большом расстоянии от образца (около 2 мм) по сравнению с величиной максимально возможного перемещения пьезосканера (около 2 микрон) по оси Z. Хотя зонд и приближается к зонду в результате полного выдвижения сканера, расстояние между зондом и образцом остается еще достаточно большим для того, чтобы между ними возникло какое-либо взаимодействие. Поэтому уровень текущего сигнала «MAG» не меняется, разница между уровнем «MAG» и «Set Point» остается большой. Выдвижение сканера регистрируется по показаниям аналогового индикатора удлинения сканера.

11. Выбрать с помощью оптической системы (см. рис. 3.30) участок сканирования.

12. Настроить параметры сканирования: значение «Set Point» — около 50% от значения «MAG» в отведенном состоянии, область сканирования 2 мкм × 2 мкм, количество точек 512×512, частота сканирования 0.5-0.75 Гц.

13. Запустить сканирование, подбирая (при необходимости) параметры сканирования для получения наиболее качественного изображения. Получить топографическое изображение поверхности тестового образца.

14. Отвести зонд от образца с помощью пьезоманипулятора.

15. Заменить в оптической системе ПЗС-камеру на фотоприемник микроскопа ближнего поля.

16. Настроить параметры сканирования: включить двухпроходный режим, установить значение «Set Point» — около 50% от значения «MAG» в отведенном состоянии, область сканирования 2 микрона на 2 микрона, количество точек 512×512, частота сканирования 0.5–0.75 Гц.

17. Запустить сканирование, подбирая (при необходимости) параметры сканирования для получения наиболее качественного изображения. Получить топографическое и ближнепольное оптическое изображения поверхности тестового образца.

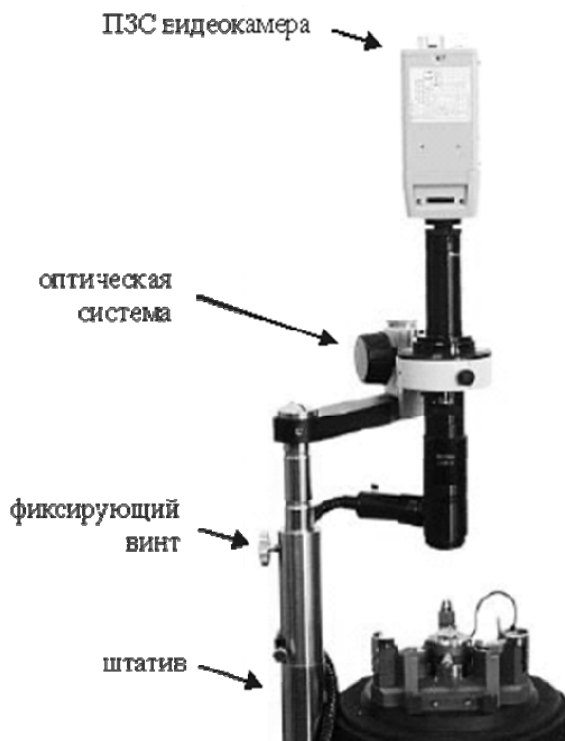


Рис. 3.30. Изображение оптической системы ближнепольного микроскопа. Для получения СОМБП сигнала ПЗС видеокамера заменяется на модуль ФЭУ

18. Отвести с помощью шагового двигателя образец от зонда на расстояние 0.5–1 мм, снять СОМБП головку с основания.

19. Снять держатель зонда с пьезоманипулятора точных перемещений основания СЗМ.

20. После получения СОМБП изображений сохранить их в файле для дальнейшей обработки.

21. Выключить прибор (контроллер СЗМ выключается тумблером, находящимся на нем).

22. Обработать топографическое и ближнепольное оптическое изображения тестового образца.

Обработка и представление результатов измерений

1. В отчете необходимо представить топографическое изображение тестового образца и ближнепольное оптическое изображение того же образца. Изображения должны быть представлены в одинаковых масштабах.

2. Используя ближнепольное оптическое изображение тестового образца определите оптическое разрешение, которое можно получить при использовании данного конкретного апертурного оптоволоконного зонда.

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте общий принцип работы сканирующего оптического микроскопа ближнего поля.

2. Какова физическая природа увеличения оптического разрешения в микроскопе ближнего поля?

3. Дайте определение оптического ближнего поля в рамках модели субволнового отверстия в плоском металлическом экране.

4. Опишите влияние свойств металла, из которого изготовлен экран, на разрешающую способность апертурного оптического микроскопа ближнего поля.

5. Перечислите оптические конфигурации апертурных сканирующих микроскопов ближнего поля.

6. Опишите процедуру изготовления апертурного зонда микроскопа ближнего поля на основе оптического волокна.

7. Опишите работу системы обратной связи для поддержания постоянного расстояния между концом апертурного зонда и поверхностью образца на примере датчика силы квазитрения (shear force) на основе кварцевого камертонного резонатора.

8. Перечислите основные узлы, необходимые для работы апертурного оптического микроскопа ближнего поля в конфигурации проходящего света при использовании апертуры в качестве субволнового источника.

Литература

1. *Мионов В.Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии: Учеб. пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. Нижний Новгород: ИФМ РАН, 2004. Разделы 1.1, 1.5, 2.2.

2. *Либенсон М.Н.* Преодоление дифракционного предела в оптике, Соросовский образовательный журнал, т.6, №2, с. 99-104 (2000).

3. *Ежов А.А., Магницкий С.А., Музыченко Д.А., Панов В.И.* Применение сканирующей оптической микроскопии ближнего поля для изучения субмикро- и нанообъектов, а также распределения электромагнитного поля, Научные технологии, №1, с.34-40 (2005).

4. *Жданов Г.С., Либенсон М.Н., Марциновский Г.А.* Ближнепольная оптика. Учебное пособие, СПб, СПбГУ ИТМО, 2007, с.98.

5. *Дряхлушин В.Ф., Вейко В.П., Вознесенский Н.Б.* Сканирующая ближнепольная оптическая микроскопия и ближнепольные оптические зонды: свойства, изготовление и контроль параметров, Квантовая электроника, т.37, №2, с.193-203 (2007).

6. Solver P47H. Руководство пользователя. 845 версия программы для Windows 95/98 – М.: НИИФП, ЗАО «НТ-МДТ», 2004, разделы 1.1, 1.2, 1.4, 3.1 – 3.7, 5.1 – 5.8, 5.10.

ЗАДАЧА 3.3 Исследование поверхностных наноструктур методом сканирующей туннельной микроскопии

Цель работы:

Изучение основ работы сканирующих туннельных микроскопов на примере изучения реконструкции 7×7 поверхности кремния Si(111) с помощью сверхвысоковакуумного сканирующего туннельного микроскопа.

Применяемое оборудование:

Экспериментальный сверхвысоковакуумный сканирующий туннельный микроскоп СТМ 1, изготовленный компанией Omicron, Германия (рис. 3.31).

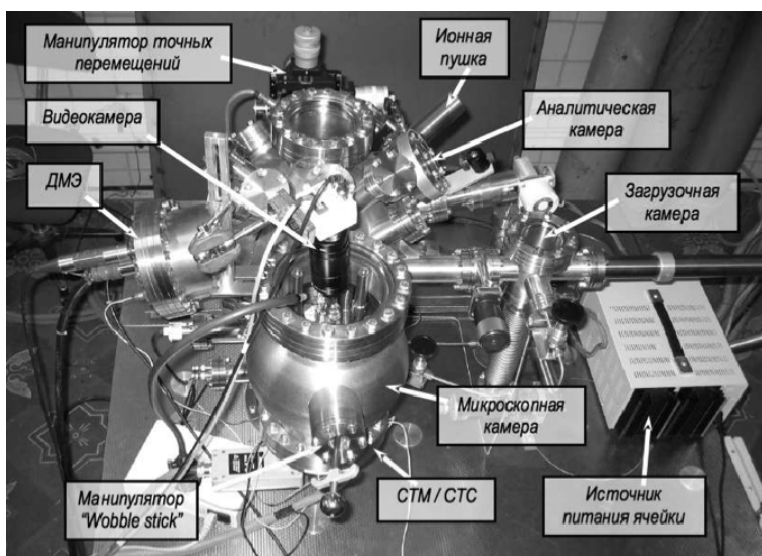


Рис. 3.31. Общий вид сверхвысоковакуумной установки

Задание:

Освоить порядок работы на сканирующем туннельном микроскопе, исследовать тестовый образец Si(111)-(7 $\times$ 7). Получить СТМ изображение заполненных и незаполненных электронных состояний при различных значениях напряжения смещения. Получить СТМ изображение высокого разрешения в режиме постоянного тока и определить параметр элементарной ячейки поверхностной структуры Si(111)-(7 $\times$ 7) из пяти независимых измерений с доверительной вероятностью $P = 0.95$.

Подготовка к выполнению работы:

Ознакомиться с правилами техники безопасности, изучить принцип работы сканирующего туннельного микроскопа в режиме постоянного тока и порядок работы на нём, изучить необходимые разделы сопутствующего описания: The SCALA PRO Software Manual.

Порядок выполнения работы:

Внимание! Строго запрещается при установке держателя образца в микроскоп и манипулятор точных перемещений (для отжига образца) прилагать чрезмерные усилия. **При всех операциях со сканирующим туннельным микроскопом, он должен быть зафиксирован с помощью нижнего штока на микроскопной камере!**

Для выполнения задачи следует выполнить следующие действия:

1. Переместить держатель с образцом из сканирующего туннельного микроскопа с помощью манипулятора “Wobble stick” в манипулятор точных перемещений (внешний вид измерительной головки СТМ/СТС показан на рис. 3.32).

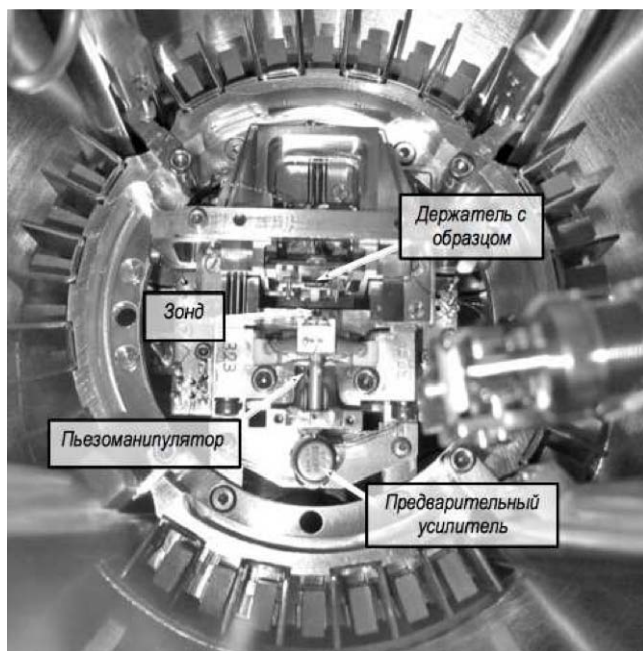


Рис. 3.32. Внешний вид измерительной головки СТМ/СТС

2. На стойке управления установкой найти блок прогрева образца и включить тумблер в положение “ON” (см. рисунок 3.33).

3. Переключатель режимов установить из положения “Ground” в положение “Direct current”.

4. Разомкнуть синие провода и ручкой установки тока при нажатой кнопке “Display CV/CC Setting” установить значение тока равным 5.5 А.

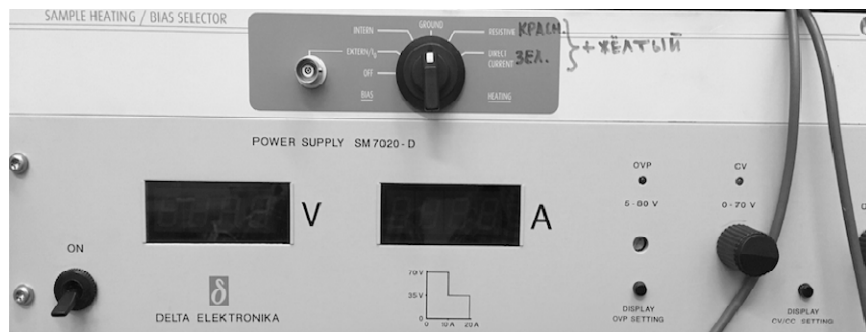


Рис. 3.33. Внешний вид блока прогрева образца

5. Замыкая синие провода между собой для протекания прямого тока через образец, следить за показаниями давления в вакуумной камере. Давление в системе в процессе отжига образца не должно превышать значения 8.0×10^{-10} Торр.

6. При достижении критичного уровня давления в системе следует остановить прогрев образца, разомкнув синие провода. Следует провести не менее пяти циклов отжига при таких параметрах. Во время последнего, шестого цикла следует плавно уменьшать ток при замкнутых синих проводах до значения 0.4 А с помощью ручки регулировки тока. При таком токе необходимо выдержать образец в течение 3 минут. Затем плавно уменьшить ток до нуля, повернуть ручку регулировки тока в положение “Ground” и выключить блок прогрева.

7. Запустить на управляющем компьютере программу TeamViewer и записать “login” и “password” для удаленного доступа.

8. Спустя 30 минут необходимо перенести образец из манипулятора точных перемещений в микроскоп (см. рисунок 3.32).

9. Включить контролер управления СТМ. Запустить на управляющем компьютере программу “SCALA”. Из четырех возможных

режимов выбрать режим, позволяющий проводить измерения в реальном масштабе времени.

10. В главном меню программы выбрать последовательно опции “Measurement” и далее “Measurement Control”. В открывшемся окне установить значение туннельного напряжения (Gap Voltage) равным -2.0 В. Значение туннельного тока (Feedback Set) должно быть равным 0.1 нА. Начальный размер кадра 70 нм×70 нм. В режиме “Frame Mode” выбрать режим “up and down”. Показания “Loop Gain” выставить равными 3.00%.

11. В главном меню программы выбрать последовательно опции “Measurement” и далее “Topography Preset”. Выбрать число линий и число точек равными 400. Поставить галочки в окошках “Forward Z” и “Backward Z”. Нажать “Close” для закрытия окна.

12. Привести видеокамеру над микроскопной камерой в положение, позволяющее однозначно фиксировать расстояние между исследуемым образцом и зондирующим острием на мониторе справа на рис. 3.31. СТМ при этом должен быть разарретирован (шток внизу микроскопной камеры в нижнем положении). Включить питание видеокамеры, используя два блока, представленных на рис. 3.34.



Рис. 3.34. Блоки управления питанием видео камеры

13. Используя пульт управления, изображенный на рис. 3.35, произвести подвод образца к зондирующему острию. Для начала можно осуществить подвод вручную для предварительного сближения, удерживая нажатой клавишу F3+. После предварительного сближения, следует нажать клавишу “AUTO”. Контроль за подводом образца к зондирующему острию осуществляется визуально на мониторе и по сигналу туннельного тока на осциллографе.



Рис. 3.35. Пульт управления подводом образца к зондирующему острию

14. После подвода, следует выключить все освещение в комнате и переместиться к удаленному компьютеру.

15. На удаленном компьютере запустить программу TeamViewer и используя записанные ранее “login” и “password” осуществить соединение для удаленного доступа.

16. В окне “Measurement Control” нажать кнопку “Start” для начала сканирования и кнопку “Store All” для записи СТМ изображений.

17. Скорость сканирования не должна превышать утроенного численного значения стороны кадра. В начальное время после старта СТМ изображения, записанные при сканировании снизу, и при сканировании сверху, могут отличаться за счет теплового дрейфа.

18. Смещение области сканирования можно осуществлять использованием ползунков “X-Offset” и “Y-Offset” при нажатой левой клавише мыши.

19. Выбрать нужный участок сканирования можно выполнив следующую процедуру: поставить галочку рядом с опцией “Mouse Control: Zoom/Offset” и затем, указав мышкой нужную точку на СТМ изображении и удерживая левую клавишу мыши нажатой, выделить на изображении интересующую область.

20. Общие рекомендации: найти на СТМ кадре большую область без дефектов и ступеней, сделать на ней несколько измерений с целью оценки теплового дрейфа, сконцентрироваться на меньших

по площади областей для получения высококачественных СТМ изображений.

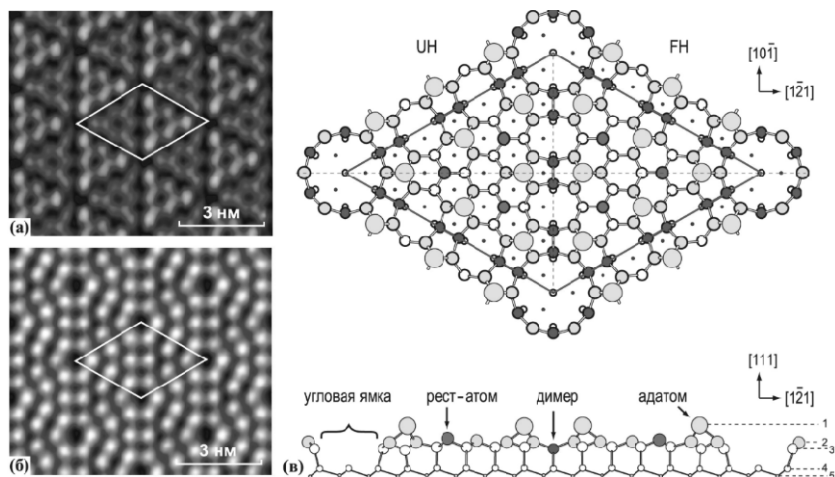


Рис. 3.36. Атомарно-чистая поверхность Si(111)7×7: СТМ-изображения (а) заполненных и (б) незаполненных электронных состояний поверхности, (в) схематическое изображение поверхности (вид сверху и вид сбоку) в соответствии с DAS-моделью (dimer-adatom-stacking fault) Такаянаги. Желтыми кружками показаны адатомы Si, красными – димеризованные атомы Si, голубыми – рест-атомы Si второго слоя. Ромбом обведена элементарная ячейка 7×7. Половина элементарной ячейки, содержащая дефект упаковки, помечена как FH (faulted half); половина без дефекта упаковки помечена как UH (unfaulted half). Видно, что на СТМ-изображении заполненных состояний (а) половина ячейки с дефектом упаковки выглядит более яркой. Максимумы на СТМ изображении соответствуют адатомам

На рис. 3.36 представлены типичные СТМ изображения заполненных и незаполненных электронных состояний поверхности и соответствующая модель, объясняющая формирование Si(111)-(7×7) реконструкции поверхности.

Обработка и представление результатов измерений

Обработку СТМ изображений целесообразно проводить, используя программу WSxM, расположенную на удаленном компьютере. Оценку параметра элементарной ячейки Si(111)-(7×7) можно проводить с использованием двумерного Фурье-преобразования или построения профиля поверхности. С целью повышения точности

результатов измерения рекомендуется проводить измерения параметра элементарной ячейки для различных СТМ изображений, полученных в результате сканирования вверх и сканирования вниз.

В отчете необходимо представить топографическое изображение Si(111)-(7×7) в заполненном и незаполненном электронных состояниях. Изображения должны быть представлены в одинаковых масштабах.

Используя полученные СТМ изображения поверхности, определите среднее значение параметра элементарной ячейки структуры Si(111)-(7×7) из пяти независимых измерений при доверительной вероятности $P=0.95$. Абсолютную ошибку следует определять с использованием распределения Стьюдента, руководствуясь следующими выражениями:

$$S_{n,t} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \{x\})^2}{n(n-1)}},$$
$$\Delta = t(P, n) \times S_{n,t}.$$

При заданном числе измерений, равном пяти и доверительной вероятности, равной $P = 0.95$, значение коэффициента Стьюдента $t(0.95, 5) = 2.8$.

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте общий принцип работы сканирующего туннельного микроскопа.
2. Каково наилучшее разрешение СТМ в плоскости образца и в направлении нормали к поверхности образца?
3. Какие образцы можно исследовать с помощью СТМ?
4. Как получить СТМ изображения незаполненных (заполненных) электронных состояний образца?
5. Информацию о каких физических величинах можно получить, используя сканирующий туннельный микроскоп?
6. Что такое реконструкция и релаксация поверхности?
7. Опишите работу обратной связи в режиме постоянного тока.
8. Нарисуйте элементарную поверхностную ячейку Si(111)-(7×7) и рассчитайте численное значение вектора $\mathbf{a}_{\text{Si(111)-(7}\times\text{7)}}$, зная объемную постоянную решетки кремния $a_0 = 5.431 \text{ \AA}$.

Литература

1. *Миронов В.Л.* Основы сканирующей зондовой микроскопии: Учеб. пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. Нижний Новгород: ИФМ РАН, 2004.
2. *Oura K., Lifshits V.G., Saranin A.A., Zotov A.V., Katayama M.* Surface Science – An Introduction, 2004.
3. *Wolf E.L.* Principles of electron tunneling spectroscopy. Oxford University Press, 1985.
4. *Julian Chen C.* Introduction to Scanning Tunneling Microscopy. Oxford Science Publications, 2008.
5. *Wiesendanger R.* Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy. Cambridge University Press, 1994.
6. *Sakurai T., Watanabe Y.* Advances in Scanning Probe Microscopy. Springer, 1999.

ЗАДАЧА 3.4 Квантово-механическое моделирование свойств нанообъектов

Аннотация

Задача посвящена изучению современных численных методов описания вещества на атомных масштабах, а также на масштабах, переходных к макроскопическим. В рамках данной задачи студенты знакомятся с численными методами квантовомеханического описания атомов, молекул и поверхности твердого тела, а также с методами численного моделирования электронных свойств вещества в конденсированном состоянии и поверхностных наноструктур на атомном уровне.

Введение

Задача квантовомеханических вычислений из первых принципов состоит в решении уравнений квантовой механики и расчете поверхности потенциальной энергии системы, межмолекулярных связей, электронной конфигурации. Потенциал взаимодействия между частицами соответствует закону Кулона и не содержит подгоночных параметров. Во многих случаях достаточно решить стационарную задачу для уравнения Шредингера. В приближении Борна—Оппенгеймера ядра считаются неподвижными или движущимися по классическим законам динамики. При моделировании электронной структуры молекул характерный пространственный масштаб $\sim 10^{-10}$ м и масштаб времени $\sim 10^{-15}$ с.

С точки зрения математических формулировок, необходимо решить задачу на собственные значения для оператора второго порядка – уравнение Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\mathbf{r})]\psi = 0.$$

Собственные значения определяют уровни энергии электронных состояний, а собственные функции – электронную конфигурацию системы. Потенциал взаимодействия электронов и ядер определяется законом Кулона и ничем больше. Уравнение линейное, но его решение есть функция очень многих переменных – координат электронов и координат ядер

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_e} | \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_{N_i}).$$

Понятно, что прямое решение этого уравнения если и возможно, то только статистическими методами с соответствующей точностью. Поэтому вся дальнейшая теория и вычисления основаны на массе

предположений относительно формы решения. Однако, сама специальная форма решения (даже найденного с высокой точностью) не гарантирует того, что нет другого решения. Представление решения в факторизованном виде – в виде произведения одноэлектронных волновых функций, приводит к уравнениям Хартри–Фока. Это уже нелинейные самосогласованные задачи, традиционно решаемые вариационными методами, методом Галеркина. Вычислительная сложность при этом масштабируется как $O(N^4)$ и возможен расчет лишь системы, содержащей порядка 200 атомов. Использование теории функционала плотности (в англ. литературе: density functional theory) позволяет рассчитывать плотность электронов в основном состоянии.

В последнее время появились методы расчета, масштабируемые как $O(N)$ в рамках различных аппроксимаций. Их реализации на терафлопсных компьютерах линейно масштабируются с числом атомов. Создание и использование многомасштабных вычислительных моделей определяет успех моделирования наносистем. Степень подробности описания определяется пространственным масштабом элементов и их массой. Моделирование отдельных атомов позволяет рассчитать электронную структуру и понять возможность образования химических связей в молекуле, составленной из отдельных атомов. Взаимодействие различных электронных облаков разных атомов зависит от расположения ядер. Молекула соответствует такому расположению ядер, при котором потенциальная энергия системы минимальна, что соответствует устойчивому положению ядер. Получение поверхности потенциальной энергии как многомерной функции координат ядер

$$U = U(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_{N_l})$$

последовательными расчетами есть основная, но трудновыполнимая задача на квантовом уровне вычислений. Стационарные точки этой функции, расстояния между минимумами, высота барьеров полностью определяют молекулярную структуру в этом приближении. Как только рассчитаны сильные связи атомов в молекуле, описание молекулярной системы может быть проведено на более крупном временном масштабе, где действует классическая динамика сложной молекулы, связи атомов в которой определены квантовыми законами. Расчеты твердых тел осуществляются в рамках методов плоских волн и псевдопотенциалов вместо самосогласованного поля. Для таких постановок задач успешно применяются параллельные вычис-

ления. Квантовые модели существенно используются для анализа создания новых материалов, полупроводниковых гетероструктур, квантовых точек и квантовых проволок.

Цель работы:

Овладение теоретическими и практическими знаниями в области квантово-механических численных методов расчета электронных свойств наносистем с большим числом атомов на примере компьютерного эксперимента по моделированию атомной и электронной структуры поверхностной реконструкции Ge(111)-c(2x8).

Применяемое оборудование:

Эксперименты по численному моделированию производятся на многоядерном (CPUx8) персональном компьютере, работающем под управлением операционной системы Linux. Для реализации алгоритмов первопринципных вычислений, в рамках теории функционала плотности, используется параллельная реализация программного пакета SIESTA версии 3.2. Для визуализации атомных структур, зарядовой и электронной плотности, а также волновых функций используется графический пакет XCrySDen версии 1.6. Для моделирования аналогов СТМ изображений на базе матрицы электронной плотности и набора волновых функций используется программный пакет STM версии 1.0.1.

Подготовка к выполнению работы:

Ознакомиться с порядком и синтаксисом запуска программных пакетов для численного моделирования (SIESTA) [9], для визуализации результатов моделирования (XCrySDen) [11] и для расчета аналогов СТМ изображений (STM) [10]. Внимательно изучить описания используемых программных пакетов, рекомендуемые в библиографическом списке. Ознакомиться с синтаксисом fdf формата (flexible data format), используемого для задания квантово-механических параметров рассчитываемой наносистемы. Используя библиографическую ссылку [7] ознакомиться с общепринятой атомной моделью для поверхностной реконструкции Ge(111)-c(2x8), а также с примерами визуализации этой атомной реконструкции с помощью сканирующего туннельного микроскопа [6,7]. Ознакомиться с путями доступа к инструментам расчета, к программе визуализации, к вспомогательным утилитам и к упражнениям (см. приложение к задаче 3.4).

Порядок выполнения работы:

Для успешного выполнения лабораторной задачи необходимо последовательно выполнить 5 упражнений и представить по результатам их выполнения отчет в соответствии с заданием к упражнениям №3-5. Упражнения №1-2 являются подготовительными, а их результаты демонстрируются преподавателю по ходу выполнения; впоследствии эти результаты используются для выполнения упражнений №3-5. Каждое упражнение выполняется в своей директории (см. приложение к задаче 3.4).

Упражнение 1.

«Элементарная поверхностная суперячейка»

а) Определить базисные вектора **a** и **b** для поверхностной реконструкции (2x8) на плоскости (111) и записать эти вектора в декартовом координатном пространстве XY.

б) Используя найденные значения **a** и **b** дополнить блок «LatticeVectors» в конфигурационном файле «ge111.fdf». При заполнении блока «LatticeVectors» необходимо учесть, что координаты атомов внутри суперячейки (2x8) заданы в формате: «AtomicCoordinatesFormat=ScaledCartesian» (см. стр. 30-32 описания SIESTA-3.2 [10].

(информация для справки: постоянная решетки германия $a_0=5.641\text{\AA}$)

в) Запустить тестовый расчет и по результатам расчета визуализировать сконструированную суперячейку геометрии (2x8), а также и нереконструированную атомную структуру Ge(111)-(1x1) внутри суперячейки (файл «ge111.XV») с помощью программы «XCrySDen». По результатам визуализации атомной структуры Ge(111) убедиться в правильности выбора векторов **a** и **b** путем определения длины химической связи для Ge-Ge (2.44Å).

(Конвертация формата «.XV» в формат «*.XSF» осуществляется с помощью утилиты «xv2xsf».)*

Упражнение 2.

«Адатомы на поверхности»

а) Определить количество и положение адатомов Ge, необходимых для формирования на нереконструированной поверхности Ge(111)-(1x1) реконструкции c(2x8).

(Информация для справки: воспользоваться классической моделью Ge(111)-c(2x8) [7].)

b) Внести необходимое число дополнительных атомов Ge в конфигурационные файлы «ge2x8.fdf» и «Ge111_2x8.xyz» в соответствии с пунктом (а) данного упражнения.

с) Запустить расчет и визуализировать атомную структуру (файл «ge2x8.XV») в программе «XCrySDen». По результатам визуализации атомной структуры Ge(111) убедиться в правильности выбора количества атомов Ge и корректности задания их пространственных координат.

(Конвертация формата «.XV» в формат «.XSF» осуществляется с помощью утилиты «xv2xsf».)

Упражнение 3.

«Молекулярная динамика»

a) Минимизировать энергию атомных связей для подготовленной в упражнении №2 суперячейки Ge(111)-c(2x8) методами молекулярной динамики (МД) с целью достижения равновесной атомной конфигурации. Для этой цели необходимо внести требуемые параметры (см. раздел 7.3 стр. 87 [9]) в конфигурационный файл «ge2x8_md.fdf», после чего запустить численный расчет.

b) Визуализировать результат МД (файл «ge2x8_md.MD») в программе «XCrySDen». По результатам визуализации оценить начальную, конечную и промежуточные стадии молекулярной динамики. Определить положение образовавшихся рестатомов в поверхностной реконструкции Ge(111)-c(2x8) и сравнить полученные результаты с общепринятой моделью [7]. Включить в отчет по задаче графическое изображение атомной структуры расчетной суперячейки Ge(111)-c(2x8) после завершения МД.

(конвертация формата «.MD» в формат «.AXSF» осуществляется с помощью утилиты «md2axsf»)*

с) Определить число шагов МД и сравнить это число с максимально-допустимым значением этого параметра в файле «ge2x8_md.fdf», убедившись тем самым, что достигнуто значение минимально заданной силы, действующей на «свободные» атомы Ge. Построить график зависимости энергии системы от номера шага молекулярной динамики. Включить полученный график в отчет по задаче.

Упражнение 4.

«Электронная структура поверхности Ge(111)-c(2×8)»

а) Рассчитать полную плотность электронных состояний (DOS) в зависимости от энергии для реконструированной суперячейки Ge(111)-c(2×8) в диапазоне энергий от -2 эВ до +2 эВ. Для этой цели необходимо использовать реконструированную суперячейку Ge(111)-c(2×8) полученную в результате выполнения упражнения №3. Прежде чем запускать расчет, необходимо включить запись на диск волновых функций, зарядовой плотности, и собственных значений уравнения Кона–Шэма, внося соответствующие изменения в конфигурационный файл «ge2x8_WFSX.fdf» в соответствии с пунктами 6.13, 6.19 и 6.14 описания [9], соответственно. После этого необходимо запустить численный расчет.

б) Построить график зависимости DOS от энергии. Сравнить полученный результат с экспериментальными результатами исследования поверхности Ge(111)-c(2×8) методами ARPES, IPES и CTC [6,7]. Определить значения энергии, соответствующие поверхностным состояниям, локализованным на адатомах и рестатомах. Включить в отчет по задаче график DOS(E) с указанием энергетических пиков, соответствующих адатомам и рестатомам.

(конвертация формата «.EID» в формат «*.dat» осуществляется с помощью утилиты «eig2dosf»)

в) Визуализировать с помощью «XcrySDen» зарядовую плотность для суперячейки Ge(111)-c(2×8). Показать преимущественную локализацию электронной плотности в области предполагаемых химических ковалентных связей Ge-Ge для объемных атомов Ge, а также определить зоны локализации электронного заряда на поверхностных атомах. Включить в отчет по задаче графическое изображение поверхности Ge(111)-c(2×8), на котором будут наглядно видны области локализации поверхностного электронного заряда.

Упражнение 5.

«Визуализация волновых функций и моделирование СТМ изображений»

а) Визуализировать с помощью «XcrySDen» волновую функцию, соответствующую энергии 0.8 эВ собственного значения решения уравнения Кона–Шэма для суперячейки Ge(111)-c(2×8).

Включить в отчет по задаче графическую визуализацию выбранной волновой функции.

(воспользоваться утилитой «denchar» для конвертации формата «.WFSX» в формат «.cube». Визуализация формата «.cube» осуществляется в программе «XCrySDen»)

b) Смоделировать аналоги СТМ изображений для заполненных и незаполненных электронных состояний в диапазоне энергий от -1.5 эВ до +1.5 эВ. Для этой цели, в соответствии с описанием к программному пакету STM 1.0.1 [10], необходимо скорректировать конфигурационный файл «stm.fdf», подготовить требуемые данные для расчета (необходимо скопировать в текущую директорию требуемые результаты расчета, полученные в ходе выполнения упражнения №4), и запустить расчет. Расчет проводится два раза, для заполненных электронных состояний и для незаполненных электронных состояний.

с) По окончании работы программы STM 1.0.1 производится выборочная визуализация рассчитанных аналогов СТМ изображений в программе «XCrySDen», и производится их сравнение с экспериментальными СТМ изображениями [6,7]. Исходя из анализа графика DOS(E) (полученного в упражнении №4б) и серии экспериментальных СТМ изображений [6,7], делается вывод об энергиях, при которых наблюдается преимущественная локализация заполненных и незаполненных электронных состояний над адатомами и рестатомами Ge. Для отчета по задаче выбираются два наиболее показательных смоделированных СТМ изображения, на которых наглядно видны области локализации заполненных и незаполненных электронных состояний.

Контрольные вопросы:

1. Что такое Шредингеровские волновые функции?
2. Привести примеры точных решений уравнения Шредингера для модельных потенциалов.
3. Что такое «экспоненциальная стенка»? Сравнить системы с несколькими электронами с многоэлектронными системами.
4. Что такое вычислительные квантовые модели «из первых принципов»?
5. Какие существуют методы решения уравнения Шредингера для систем многих частиц?

6. В чем заключаются общие принципы теории функционала плотности?
7. В чем состоит основная лемма Кона–Шема?
8. В чем заключается вариационный принцип Хоэнберга–Кона?
9. Самосогласованные уравнения Кона–Шема являются многочастичными или одночастичными?
10. Нарисуйте блок-схему интегрирования уравнений Кона–Шема.
11. Что такое поверхностная реконструкция и поверхностная релаксация твердого тела?
12. Каковы основные особенности поверхностной реконструкции Ge(111)-c(2x8)? Что такое адатомы и рестатомы?
13. На каких атомах в системе Ge(111)-c(2x8) преимущественно локализируются заполненные и незаполненные электронные состояния?

Литература

1. Кон В. Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук, т.172, №3, с.336—348 (2002).
2. Hohnberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Physical Review A, v.136, p.B864 (1964).
3. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Physical Review A, v.140, p.1133 (1965).
4. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород, 2009, 64 с.
5. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. Москва, 2014, с.312.
6. Paz Ó. and Soler J.M.. Efficient and reliable method for the simulation of scanning tunneling images and spectra with local basis sets // Phys. stat. sol. (b), v. 243(5), pp.1080–1094 (2006).
7. Razado-Colambo I., He J., Zhang H.M., Hansson G.V. and Uhrberg R.I.G., Electronic structure of Ge(111)c(2x8): STM, angle-resolved photoemission, and theory, Physical Review B, V. 79, 205410, (2009).
8. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., Garcia A., Junquera J., Ordejon P., Sanchez-Portal D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation // J. Phys. Cond. Matt., v.14, p.2745 (2002).

9. Artacho E., Cella J.M., Gale J.D., Garcia A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. and Soler J.M. User's Guide SIESTA 3.2. Copyright © The Siesta Group, (<http://www.uam.es/siesta>), 147 p., 1996-2016.

10. Lorente N., User's Guide STM 1.0.1. IRSAMC, Université Paul Sabatier 118 route de Narbonne 31062 Toulouse, cedex France, 8p., (2004).

11. Kokalj A.. User's Guide XCrySDen: a crystalline and molecular structure visualisation program. Dept. of Physical and Organic Chemistry, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia, 1996-2016.

Расположение инструментов

Домашняя директория:

`/home/students/DFT_Lab/`

Программа SIESTA, реализующая алгоритм ТФП:

`/home/students/DFT_Lab/siesta/siesta`

Утилиты для конвертации результатов расчета:

`/home/students/DFT_Lab/utils/`

Локализация упражнений

Упражнение 1.

`/home/students/DFT_Lab/01_LatticeVectors_for_Ge(111)2x8/`

Упражнение 2.

`/home/students/DFT_Lab/02_Adatoms_on_Ge(111)2x8/`

Упражнение 3.

`/home/students/DFT_Lab/03_MD_of_Ge(111)2x8`

Упражнение 4.

`/home/students/DFT_Lab/04_Electronic_structure_of_Ge(111)2x8`

Упражнение 5.

`/home/students/DFT_Lab/05_Electronic_structure_of_Ge(111)2x8`

Часть 4. МЕТОД ОПТИЧЕСКОГО ПИНЦЕТА

Теоретическое введение

Высокая степень пространственной когерентности лазерного излучения дает возможность сфокусировать лазерный пучок в пятно, размеры которого сравнимы с длиной световой волны этого излучения. Пространственно неоднородное распределение электромагнитного поля световой волны в перетяжке жестко сфокусированного лазерного пучка создает эффективную потенциальную яму для частиц, обладающих большей диэлектрической проницаемостью по сравнению с окружающей их средой. Захват в такую потенциальную яму единичных микрообъектов и управление их положением известен как *метод оптического пинцета*.

Упрощенная схема, иллюстрирующая принцип работы оптического захвата, представлена на рис. 4.1. При попадании в область перетяжки лазерного пучка прозрачная микрочастица преломляет и рассеивает падающее на нее излучение. Если эта частица изготовлена из материала с показателем преломления большим, чем у окружающей ее среды, то существует положение, в котором направление и величина суммарного импульса после прохождения через нее светового пучка не меняется, и микрочастица находится в положении равновесия. Это положение является центром оптической ловушки. Если же в результате какого-либо внешнего возмущения или броуновского движения частица смещается в любом направлении из центра ловушки, то происходит изменение направления суммарного импульса света после прохождения света через частицу.

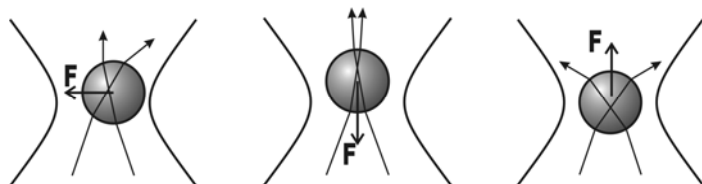


Рис. 4.1. Иллюстрация принципа работы оптического пинцета. F — возвращающая сила при смещении частицы перпендикулярно оси падающего оптического пучка (левая панель), параллельно этой оси (средняя и правая панели)

Вследствие закона сохранения импульса возникают действующие на микрочастицу силы, возвращающие ее в положение равновесия. Если же материал частицы имеет меньший по сравнению с окружающей средой показатель преломления (например, воздушный пузырь в воде), то под действием лазерного пучка частица будет выталкиваться из перетяжки. При более строгом описании следует учитывать поглощение света в частице и отражение от ее границ, что приводит к возникновению дополнительной силы, направленной вдоль распространения светового пучка. Если эта добавка велика, ловушка в области перетяжки не образуется, и частица выталкивается из нее. По этой причине при захвате частиц, особенно для тех частиц, размер которых имеет порядок длины волны и более, существенно требование прозрачности материала частицы на длине волны захватывающего излучения. Такой принцип действия оптического пинцета является универсальным для любых размеров частиц и любых мод лазерного пучка. Точный расчет сил, действующих на микрочастицу в реальной оптической ловушке, является довольно сложной задачей. Для этих целей можно использовать численные методы, которые в большинстве случаев вычисляют профиль потенциальной ямы ловушки посредством расчета картины интенсивности излучения до и после прохождения лазерного пучка через микрочастицу (поля рассеяния). Как правило, оптические ловушки характеризуются набором полуэмпирических параметров, таких как жесткость ловушки и ее размер, определяемых по анализу статистики движения захваченной микрочастицы в оптической ловушке.

Существует множество различных реализаций установок оптического пинцета. Самой простой и распространенной является установка однолучевого оптического пинцета, собранная на базе оптического микроскопа. Для достижения наибольшей фокусировки луча используются объективы с большой числовой апертурой. Принципиальная схема такой экспериментальной установки оптического пинцета приведена на рис. 4.2. Свет от лазера (1) проходит через формирователь пучка (2). Таким образом пучок расширяется, отражается от диэлектрического зеркала (3), подобранного под длину волны лазера, и поступает на вход объектива с большой числовой

апертурой (4). Кювета с исследуемым образцом (5) помещается на предметный столик, позволяющий перемещать образец относительно лазерной перетяжки по трем направлениям. Наблюдение захваченных частиц осуществляется, как правило, на просвет. Свет от осветителя (6) проходит через кювету с образцом, затем собирается объективом (4), проходит почти без отражения диэлектрическое зеркало (3) и с линзы (7) направляется на цифровую камеру (8). Формирователь пучка (2) в простейшем случае представляет собой коллимирующую систему линз, настроенную таким образом, чтобы диаметр лазерного луча увеличивался до размеров входного отверстия объектива. Это необходимо для создания максимально возможного при данном объективе градиента электромагнитного поля (т.е. жесткой перетяжки лазерного пучка).

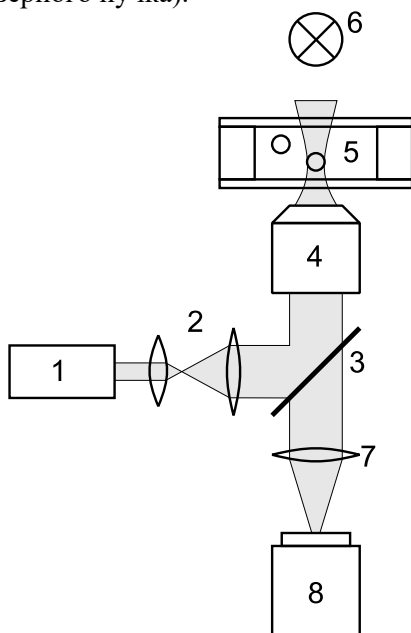


Рис. 4.2. Принципиальная схема реализации метода оптического пинцета.

(1) — захватывающий лазер, (2) — формирователь пучка, (3) дихроничное зеркало, (4) — рабочий объектив, (5) — кювета с исследуемым образцом, (6) — осветитель, (7) — линза, (8) — цифровая камера

В более сложных экспериментах, для изучения взаимодействия между микрообъектами необходимо иметь большое количество од-

новременно работающих ловушек. Этого можно достичь, используя несколько источников лазерного излучения, разбиение одного лазерного луча на два по поляризации. Применяют акустооптические дефлекторы, осуществляющие развертку и временную модуляцию лазерного луча с высокой частотой, что позволяет разделять лазерное излучение во времени на несколько ловушек. Также применяют дифракционные оптические элементы, например, жидкокристаллические пространственные модуляторы света, с их помощью лазерное излучение можно разбить на несколько лучей в пространстве.

Для оценки величин сил, действующих на микрочастицу в оптическом пинцете, рассмотрим водную суспензию микрочастиц диоксида кремния SiO_2 диаметром $d = 3$ мкм и плотностью $\rho_{\text{particle}} = 2,22$ г/см³. $\Delta\rho = \rho_{\text{particle}} - \rho_{\text{water}} \approx 1,22$ г/см³. На микрочастицу в суспензии действует сила тяжести F_{grav} , частично скомпенсированная силой Архимеда F_{Arch} . Оценка разности этих сил дает:

$$\Delta F = -F_{\text{grav}} + F_{\text{Arch}} = -\Delta\rho Vg = -\Delta\rho \frac{1}{6}\pi d^3 g = -1,69 \cdot 10^{-13} \text{ Н} \approx 0,2 \text{ пН}.$$

Оценим действие давления света на частицу. Благодаря преломлению, отражению или поглощению падающего на частицу света импульс этого света за промежуток времени dt изменяется на величину $d\vec{p}_{\text{light}}$. Вследствие закона сохранения импульса эта частица должна приобрести импульс $d\vec{p}_{\text{light}} = -d\vec{p}_{\text{particle}}$. Тогда из второго закона Ньютона следует, что на частицу со стороны светового излучения действует сила

$$\vec{F}_{\text{light}} = \frac{d\vec{p}_{\text{particle}}}{dt} = -\frac{d\vec{p}_{\text{light}}}{dt}.$$

В приближении рассмотрения плоской волны и полностью поглощающей свет частицы, зная выражение для объемной плотности импульса света $G = I / c^2$, можем найти эту силу как $F_{\text{light}} = SI / c$, где I – интенсивность излучения, S – площадь освещенной поверхности. Так, для падающего на частицу излучения мощностью 15 мВт оценка величины светового давления дает $F_{\text{light}} \approx 50$ пН, что на два

порядка превышает силу тяжести, действующую на частицу. Разумеется, это оценка сверху, ввиду принятого приближения о полностью поглощающей частице, но она позволяет сделать вывод о возможности управления микрообъектами посредством оптического излучения.

Метод оптического пинцета обычно применяется для захвата частиц с характерными размерами 0,1–10 мкм. Однако захват возможен как для более крупных, так и для частиц меньшего размера. Верхняя граница для значений сил в ловушке определяется конечностью потока импульса в лазерном луче, в то время как вес и сила вязкого трения непрерывно растут при увеличении размера частицы. Сила захвата частицы пропорциональна площади частицы, а сила тяжести — объему. Поэтому метод оптического пинцета становится неприменим для частиц сравнительно большого размера. К тому же для управления большими частицами можно использовать более грубые методы, например, микропипетки. Принципиальное ограничение на размер частицы снизу практически отсутствует, перетяжка жестко сфокусированного лазерного луча может быть использована даже как ловушка для отдельных атомов. Однако для реальных исследований свойств частиц и силовых взаимодействий между ними методом оптического пинцета необходима визуализация этих частиц, а значит, их размер не должен быть меньше длины волны излучения. По критерию Рэлея разрешающая способность объектива определяется как

$$R = \frac{\lambda}{2n \sin \theta},$$

где $n \sin \theta$ — числовая апертура объектива. Для объектива с числовой апертурой 1.4 на длине волны 500 нм методом светлопольной микроскопии можно различать объекты с характерным размером

$$d \sim R \sim \frac{150}{2 \cdot 1.4} \sim 150 \text{ нм.}$$

Для визуализации меньших частиц необходимо применять специальные контрастирующие методы (темное поле, поляризационное, фазовое и интерференционное контрастирование, люминесцентная микроскопия и т.п.).

В установках оптического пинцета длину волны выбирают таким образом, чтобы вещество захватываемых объектов не поглощало на этой длине волны. Это позволяет избежать перегрева и разрушения образцов. Как правило, рассматривается раствор микрочастиц, это позволяет изучать сами микрочастицы, а не их взаимодействие с подложкой, зондом и т.п. Уникальной особенностью оптического пинцета является возможность изучения свойств одиночных частиц без учета влияния ближайшего окружения. Поэтому среда, в которой находятся частицы, должна быть однородной, а силы, действующие на частицы со стороны среды, минимальными. Существуют различные методы приготовления образцов для оптического пинцета. Наиболее распространенным является помещение исследуемых объектов в жидкую среду. В биологических приложениях, к примеру, это позволяет наблюдать живые биологические микрообъекты в их естественной среде обитания. Существуют, однако, и разновидности оптических пинцетов, позволяющих захватывать частицы в газовой среде под низким давлением, но они гораздо менее распространены и области их применения ограничены.

ЗАДАЧА 4.1. Оптический захват и манипулирование одиночными микро- и наночастицами в двойном оптическом пинцете

Цель работы:

Изучение принципов оптического пинцета и двойного оптического пинцета, изучение физических основ оптического захвата и манипулирования одиночными микро- и наночастицами в водной суспензии.

Применяемое оборудование:

Установка для оптического захвата и манипулирования одиночными микро- и наночастицами (двойной оптический пинцет); оборудование для изготовления оптических микрокувет; оборудование для визуализации оптического захвата.

Задание:

Освоить порядок работы на установке двойного оптического пинцета, осуществить оптический захват одиночной микрочастицы, исследовать возможность трехмерного манипулирования одиночной частицей, осуществить оптический захват пары микрочастиц, исследовать возможность контролируемого изменения расстояния между ними на микроуровне.

Подготовка к выполнению работы:

Ознакомиться с правилами техники безопасности при работе с непрерывным лазером инфракрасного диапазона, изучить принцип работы установки, изучить разделы, рекомендованные в библиографическом списке.

Схема установки оптического пинцета и методика изготовления образцов микрочастиц. Схема экспериментальной установки оптического пинцета приведена на рис. 4.3. В установке реализуется двухлучевая модификация оптического пинцета. Используются два непрерывных инфракрасных диодных лазера с длиной волны излучения 980 нм (элементы 1, 2 на рисунке), мощность лазеров может устанавливаться в пределах 0–330 мВт. Лазеры имеют выходы в поляризационно-сохраняющие одномодовые оптические волокна, поэтому для получения параксиальных лучей используются асферические линзы (3,4). Луч одного из лазеров проходит через систему

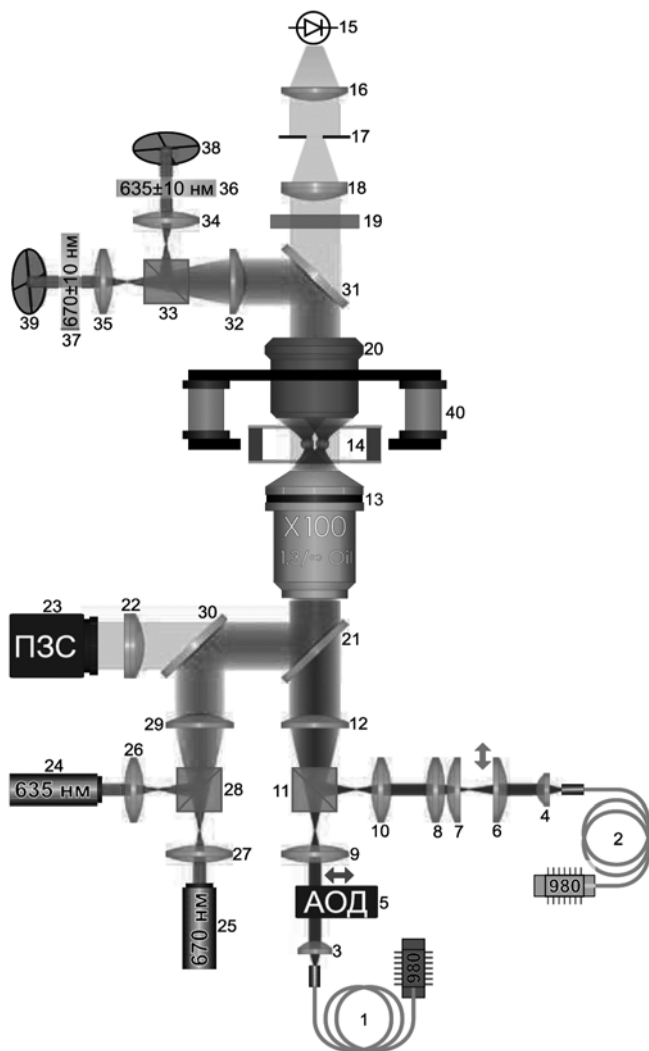


Рис. 4.3. Схема экспериментальной установки оптического пинцета. 1,2 – диодные лазеры с волоконным выходом; 3,4 – асферические линзы, коллимирующие пучки лазеров; 5 – акусто-оптический дефлектор; 6–8 – система линз для смещения ловушки; 9–12 – система заведения лазерных пучков в объектив 13; 14 – кювета с суспензией исследуемых микрочастиц; 15–19 – осветитель; 21, 30, 31 – дихроичные светоделители; 22 – ахроматический дуплет; 23 – видеокамера; 26–30 – система заведения излучения лазеров 24, 25 в объектив 13; 32–39 – система регистрации малых смещений микрочастиц на основе квадрантных фотодиодов 38, 39

конфокально расположенных линз (6–8), которая позволяет управлять положением оптической ловушки внутри образца путем перемещения линзы (6) перпендикулярно оптической оси. Положение другой ловушки управляется акусто-оптическим дефлектором, или АОД (5). После прохождения через поляризационный делительный кубик, который предназначен для сведения лучей обоих инфракрасных лазеров, и далее через систему линз (9, 10, 12) для расширения лазерных пучков до полной входной апертуры объектива лазерные пучки попадают на полу-апохроматический масляно-иммерсионный объектив (13) с числовой апертурой 1,3. С помощью данного объектива лазерные лучи фокусируются внутри кюветы с суспензией частиц (14). Суспензии микрочастиц необходимо растворить в воде до такой концентрации, чтобы в поле зрения микроскопа ($\sim 50 \text{ мкм} \times 50 \text{ мкм} \times 5 \text{ мкм}$) попадала примерно одна частица. Необходимая концентрация частиц подбирается эмпирически. Для создания микрокюветы небольшой объем раствора частиц (около 20 микролитров) помещается на стекло толщиной 0,1 мм. Затем по периметру капли раствора частиц наносится герметизирующий гель, резиновая прокладка и еще один слой герметизирующего геля. Сверху плотно прижимается второе покрывное стекло, что должно обеспечивать герметичность ячейки, предохранить от высыхания образцов и позволить проводить длительные эксперименты. Резиновая прокладка и слой герметизирующего геля обеспечивают зазор между стеклами около 0,15 мм. Наилучшие условия захвата должны наблюдаться вблизи нижнего покрывного стекла. Это связано с возникновением сферических аберраций при прохождении сходящегося пучка через границу раздела стекло–вода, которые приводят к увеличению размера перетяжки при ее удалении от стекла вглубь жидкости. В ходе работы можно проводить захват как одиночных частиц, так и пары частиц.

Освещение для визуализации образца проводится в геометрии «на просвет». Система осветителя состоит из светодиода (15), коллекторной линзы (16), полевой ирисовой диафрагмы (17), ахроматического дуплета (18), светофильтра (19) и объектива-микрофлюара (20) с числовой апертурой 0,85. Свет, проходящий через образец, собирается объективом (13) и ахроматической линзой

(22) на матрице ПЗС-камеры (23), подключенной к персональному компьютеру. Для заведения видимого излучения на ПЗС-камеру используется диэлектрическое зеркало (21), имеющее хорошее пропускание для инфракрасного излучения и высокий коэффициент отражения для видимого диапазона.

Регистрация малых смещений захваченных в оптические ловушки микрочастиц осуществляется с помощью системы на основе квадрантных фотодиодов (38, 39) и дополнительно установленных лазеров (24, 25) с излучением на длинах волн 635 и 670 нм. Квадрантные фотодиоды – это четыре независимых фотодиода, рабочая поверхность которых представляет собой квадранты одного круга. Рассеянное исследуемыми объектами излучение лазеров заводится на квадрантные фотодиоды с помощью делительных поляризационных кубов (28, 33) и дихроичных зеркал (30, 21, 31). Сигнал с фотодиодов собирается с помощью АЦП и позволяет определять смещения частиц из центра соответствующих ловушек в реальном времени.

Порядок выполнения работы

Внимание! При выполнении действий с микрокюветой необходимо использовать перчатки. Лазерный пинцет собран с использованием лазера инфракрасного диапазона. Все работы по юстировке пинцета проводятся с применением защитных очков.

В ходе работы нужно выполнить следующую последовательность действий:

1. Развести в дистиллированной воде суспензии микрочастиц диоксида кремния или полистирола диаметром 2-4 мкм и наночастиц диаметром 200-300 нм.
2. Сделать два образца микрокюветы с водным раствором микро- и наночастиц.
3. Ознакомиться с устройством установки двойного оптического пинцета, определить назначение каждого из узлов.
4. Включить установку оптического пинцета согласно прилагаемой инструкции (захватывающий лазер на этом этапе остается выключенным). Поместить микрокювету в установку оптического пинцета. Получить на экране монитора изображение

микрочастиц в микроювете, снятое ПЗС-матрицей, записать в файл полученное изображение.

5. Включить питание захватывающих лазеров, слабыми перемещениями основного объектива увидеть на экране монитора интерференционные картины при прохождении фокуса луча захватывающего лазера через нижнюю и верхнюю границы микроюветы. Записать в файл полученные изображения.

6. Вращением микровинтов двухкоординатного столика крепления микроюветы подвести микрочастицу к области перетяжки первого захватывающего лазера. Осуществить оптический захват микрочастицы в оптическую ловушку.

7. Перемещением микровинтов продемонстрировать возможность контролируемого перемещения захваченной микрочастицы. Записать в файл видеоролик, иллюстрирующий захват и управление пространственным положением микрочастицы.

8. Вращением микровинтов двухкоординатного столика крепления микроюветы подвести вторую микрочастицу к области перетяжки второго захватывающего лазера. Осуществить оптический захват микрочастицы во вторую оптическую ловушку.

9. Перемещением микровинтов 10 и 11 столиков крепления линз продемонстрировать возможность контролируемого перемещения одной микрочастицы относительно второй. Записать в файл видеоролик, иллюстрирующий контролируемое управление расстоянием между захваченными частицами.

10. Включить питание квадрантного фотодиода (КФД) и измерить с помощью АЦП временную зависимость сигнала КФД при захвате микрочастицы. Записать несколько зависимостей при различных реализациях захвата.

Обработка и представление результатов измерений

1. С использованием предлагаемого программного обеспечения провести анализ полученных временных зависимостей и оценить основные параметры оптической ловушки – жесткость и средний размер.

2. В отчете представить:

- 1) фотографии микрочастиц в микрокувете, снятые ПЗС-матрицей микроскопа,
- 2) фотографии интерференционных картин при прохождении фокуса луча захватывающего лазера через нижнюю и верхнюю границы микрокуветы,
- 3) фотографии из видеоролика, иллюстрирующие захват и управление пространственным положением микрочастицы,
- 4) фотографии из видеоролика, иллюстрирующие контролируемое управление расстоянием между захваченными частицами,
- 5) оценки основных параметров оптической ловушки — жесткости и ее среднего размера.

Контрольные вопросы

1. Что такое пондеромоторные световые силы?
2. Что такое броуновское движение? Какими физическими параметрами частиц и раствора определяется величина флуктуаций положения микро- и наночастицы при броуновском движении?
3. Чем определяется размер перетяжки сфокусированного лазерного луча?
4. Что такое световое давление?
5. Почему оптическое манипулирование микрочастицами проводится в растворе?
6. Как влияет числовая апертура микроскопа на процесс оптического захвата микрочастиц?
7. Какие требования на размер микро- и наночастиц накладываются в методике оптического пинцета?
8. Как подготавливается микрокувета? Каковы требования на толщину покровных стекол и концентрацию микрочастиц?
9. С какой целью применяют иммерсирование микрокуветы?
10. Изобразите устройство оптического пинцета и укажите роль отдельных его частей.

Литература

1. *Ashkin A.* Acceleration and trapping of particles by radiation pressure // *Physical Review Letters*, v.24, pp.156–159 (1970).

2. *Ashkin A., Dziedzic J.M., Bjorkholm J.E., Chu S.* Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles // *Opt. Lett.* v.11(5), pp.288–290 (1986).

3. *Neuman K.C., Block S.M.* Optical trapping // *Rev. Sci. Instrum.* v.75(9), pp.2787–2809 (2004).

3. *Thusty Tsvi, Meller Amit, Bar-Ziv Roy.* Optical gradient forces of strongly localized fields // *Physical Review Letters*, v. 81, pp.1738–1741 (1998).

4. *Novotny L., Bian R.X., X. Xie S.* Theory of nanometric optical tweezers // *Physical Review Letters*, v. 79, pp. 645–648 (1997).

Учебное издание

Специальный практикум по квантовой электронике

Подписано в печать 12.03.2018.

Формат 60х90/16. Объем 10 п.л. Тираж 100 экз.

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр. 2