

А. В. Тюрин

*д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой экономической кибернетики
и информационных технологий Одесского национального университета
имени И.И. Мечникова*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ СТРУКТУР В КРИСТАЛЛАХ С ПОМОЩЬЮ СВЕТОВОГО ПОЛЯ

Проблема разработки оптических методов создания регулярных трехмерных структур из наноразмерных объектов (носителей информации) в конденсированных средах и управления их свойствами, структурой и топологией является актуальной для потребностей информационных технологий. Оптический способ важен и перспективен, так как очень многие материалы хорошо откликаются на фотовоздействие. В связи с этим достаточно большой интерес представляет проблема создания нанообъектов в таких материалах, как аддитивно окрашенные щелочно-галоидные кристаллы (АОЩГК), содержащих F-центры оптическими методами. Преимущества этих сред перед остальными следующие. Прежде всего, формируемые под действием света нанообъекты весьма разнообразны по своим свойствам, что дает возможность создавать нанообъекты с довольно обширным спектром свойств. Помимо этого, пространственное распределение квазиметаллических X-центров (носителей информации), созданных в объеме АОЩГК в результате F-X преобразования центров окраски под действием интерференционного светового поля (ИСП) полностью отображает пространственную структуру ИСП [1]. Тем самым появляется возможность управлять пространственной структурой из X-центров в объеме АОЩГК путем изменения конфигурации интерференционного светового поля, формирующей данную структуру.

Сложность изучения механизма фототермического F-X преобразования центров окраски, стимулированное ИСП в АОЩГК заключается в том, что если в однородном световом поле коагуляция F-центров в X-центры происходит лишь за счет фотодиффузии

центров окраски, то в ИСП возникают локальные электрические поля, которые приводят также и к дрейфу центров окраски [2], что существенным образом изменяет процесс фототермического F-X преобразования центров окраски под действием ИСП по сравнению с однородным световым полем [3].

До настоящего времени механизм F-X преобразования центров окраски под действием ИСП в АОЩГК не изучался. Детальное изучение такого сложного механизма преобразования центров окраски требует не только экспериментального изучения, но и теоретического обоснования, который из-за сложности процесса существенно затруднен. Поэтому в настоящей работе для объяснения экспериментальных результатов фототермического F-X преобразования центров окраски под действием ИСП в АОЩГК мы использовали компьютерное моделирование этого процесса. Поскольку ранее [4] нами была показана полезность численного моделирования для изучения данных явлений, в данной работе мы продолжили развитие этого метода.

Компьютерное моделирование предполагает следующие модельные представления. Плоскопараллельную пластинку АОЩГК, содержащую только F-центры помещают в ИСП интенсивность света I , в котором изменяется лишь вдоль координаты x по закону

$$I = \frac{I_0}{2}(1 + \cos(kx)) , \quad (1)$$

где $k = \frac{2\pi}{d}$, d – период ИСП, I_0 – максимальная интенсивность света в ИСП.

Ребра пластинки АОЩГК располагаются вдоль координатных осей Ox , Oy и Oz . Толщина пластинки вдоль оси Oy и ее коэффициент поглощения настолько малы, что интенсивность света в объеме пластинки АОЩГК определяется формулой (1). Под действием света происходит высвобождение электронов из F-центров в зону проводимости АОЩГК. Процесс фотовозбуждения F-центров с высвобождением электронов является двухступенчатым и может

быть промоделирован следующими дифференциальными уравнениями:

$$\frac{dn}{dt} = \alpha^* N^* - \gamma_h n(n + n_i) - \frac{dn_i}{dt}, \quad (2)$$

$$\frac{dN^*}{dt} = \delta I(N - N^* - n_i - n) - N^*(\gamma_h^* + \alpha^*), \quad (3)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \gamma_i n(N_i - n_i) - \alpha_i n_i. \quad (4)$$

Здесь n, N, N^*, N_i, n_i – соответственно концентрации свободных электронов, F-центров, F*-центров, ловушек для свободных электронов и захваченных на них электронов; α^*, γ_h^* – вероятности термической ионизации и рекомбинации F*-центра, γ_h – вероятность рекомбинации электрона со свободной анионной вакансией, γ_i и α_i – вероятности захвата свободного электрона ловушкой и термического возбуждения его обратно в зону проводимости, δ – сечение захвата фотона F-центром, I – интенсивность возбуждающего света.

Высвободившиеся после фотовозбуждения F-центров электроны и анионные вакансии диффундируют из освещенных в неосвещенные области ИСП. Из-за различия коэффициентов диффузии у электронов D_n и анионных вакансий D_h между максимально и минимально освещенными областями ИСП возникают локальные электрические поля, максимальная величина напряженности E в которых определяется выражением:

$$E = \frac{kT}{\ell} \cdot \frac{D_n - D_h}{n_0 D_n + p_0 D_h} \cdot \frac{dn}{dx}$$

Здесь n_0 и p_0 – концентрации электронов и анионных вакансий в отсутствие освещения, ℓ – расстояние между максимумами и минимумами интенсивности света в ИСП.

Для проверки модели была построена компьютерная симуляция. Моделирование производилось в среде DELPHY методом Монте-Карло. Моделировались пространственное распределение

фотоЭДС Дембера, его динамика изменения в процессе перераспределения квазиметаллических центров и промежуточных продуктов их синтеза по объему кристалла в зависимости от пространственной частоты ИСП, температуры кристалла и др. внешних параметров (рис.1).

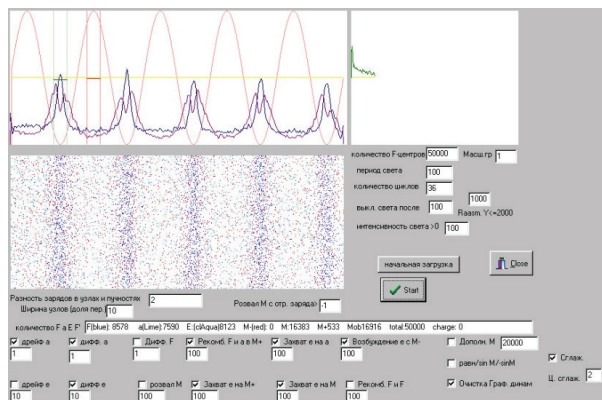


Рис. 1. Общий вид интерфейса программы

Слева сверху – пространственное распределение света (красный), F-центров (синий) и агрегатных центров (пурпурный) вдоль координаты x в кристалле.

Справа сверху – кинетики изменения модуляции концентрации агрегатных центров между максимумами и минимумами ИСП (зеленый) (места срезов показаны слева вертикальными линиями). Слева внизу – двумерный срез распределения F-центров, агрегатных центров, α -центров (F-центры, лишенные электрона), электронов.

При моделировании была поставлена и решена задача, воспроизвести наблюдаемые экспериментально факты: S-образное нарастание дифракционной эффективности, формируемой пространственно периодической структуры из наночентров и пороговый характер ее формирования; практически полное перемещение X-центров из областей максимумов освещенности в области минимумов; исполь-

зование подвижных световых структур для перемещения наночастиц по кристаллу и определить условия их проявления.

Описанные выше методы управления пространственным распределением Х-центров в АОЩГК посредством ИСП опробованы в голографической практике, подтверждены результатами моделирования и могут послужить прообразом для разработки методов создания объемных структур из наночастиц продуктов фотолиза в объеме кристалла. Поскольку они носят общий характер, то могут быть использованы в отношении других фотопроводящих фотохромных материалов.

Так как наночастицы концентрируются в минимумах интенсивности ИСП, то очень перспективно применение сингулярных пучков (оптических вихрей) поскольку в точке сингулярности амплитуда светового поля достигает абсолютного нуля. Такие пучки можно использовать для регистрации и воспроизведения оптической информации на принципиально новой основе [5].

Литература:

1. Белоус В. М. Определение амплитудной и фазовой модуляций в процессе трехмерной голографической записи / В. М. Белоус, В. Е. Мандель, А. Ю. Попов, А. В. Тюрин // Оптика и спектроскопия. – 1994. – Т.76, №1. – С.105-108.
2. Vladimirov D.A. Photothermal conversion of F-centers in additively coloured potassium chloride crystals with cationic and anionic impurities / D.A. Vladimirov, V.E. Mandel, A.Yu. Popov, A.V. Tyurin // Ukr. J. Phys. Opt. – 2004. – Vol. 5, № 4. – P. 131-135.
3. Popov A. Yu. 3-D structures from nanoparticles formation by light-gradient method. / A. Yu. Popov, A. V. Tyurin, V.A. Smyntyna, V.S. Grinevech // Advances in applied physics & material science APMAS 2011, 12-15 May 2011, Turkey, Antalya, book of abstracts, V.2, P.445.
4. Попов А. Ю. Компьютерное моделирование фотоиндуцированной диффузионно-дрейфовой неустойчивости в пространственно-периодических световых полях. / А. Ю. Попов, А. В. Тюрин, Д. А. Владимиров // Вісник Черкаського університету, Сер. фіз.-мат. науки. – 2003. – Вип. 53. – С.122-131.
5. Попов А. Ю. Використання сингулярних оптичних пучків для кодування та захисту інформації / А. Ю. Попов, А. Я. Бешкаев, А. В. Тюрин // V International Conference on Optoelectronic Information Technologies PHOTONICS-ODS 2010, abstracts, p. 36 (231).