

ФОРМ-ФАКТОРИ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ НА СТРУКТУРОВАНИХ МІКРО-МЕХАНІЧНИХ КОНГЛОМЕРАЦІЯХ

О. І. Герасимов, д-р фіз.-мат. наук, професор

Кафедра екології та охорони довкілля

gerasymovoleg@gmail.com

Діагностика домішкових компонент у різних за агрегатним станом середовищах складає актуальну і не до кінця вирішену задачу в багатьох галузях, як фундаментальній так і прикладній науки.

В пропонуємій роботі запропонований метод класифікації та параметризації даних розсіяння електромагнітних хвиль у террагерцівському діапазоні на багаточастинкових мікро-механічних системах за допомогою постулювання неевклідовської (фрактальної) структури формфакторів розсіяння.

Такий підхід був обраний з урахуванням складної морфології гранульованих речовин (яка робить складним характер як поверхневого так і об'ємного розсіяння і незважаючи на можливість отримання формально точного розв'язку задачі багатократного розсіяння на багаточастинкових конгломераціях унеможливорює його практичне використання для параметризації даних експериментальних вимірів [1]).

Запропонована модель спрямована на визначення розмірності фрактального простору в якому визначається формфактор розсіяння на відповідних зразках мікро-механічних матеріалів із наступним калібруванням до референтних даних (не збурених домішками матеріалів). Фактично, розсіяння на зразках із складною морфологією моделюється як дифракція террагерцівського випромінювання на компактному зразку субміліметрового масштабу із фрактальною геометрією поверхні. При цьому ми не відмовляємося і від врахування в перерізах (інтенсивностях) розсіяння впливу просторових конфігурацій в положеннях частинок (гранул) ансамблю, які визначають структурні фактори розсіяння.

Запропонований підхід дозволяє встановити не тільки наявність домішок в системі, яка досліджується, але й визначити їх власні параметри (середній розмір, густину, координатне число, ступінь впакування).

Метод є достатньо універсальним і може з певними уточненнями бути ефективно застосований для структурної діагностики не тільки для мікро-механічних, але й для інших агрегатних станів конденсованих середовищ, рідин, розчинів, кристалів та полікристалів, запорошеної плазми, біологічної матерії деяких інших.

Діапазон терагерць вибраний тому, що саме цей тип випромінювання не іонізує середовище і є найменш руйнівним і найбільш безпечним зокрема для діагностики біологічної матерії. Саме він також дозволяє здійснювати контрастну прецизійну діагностику дрібно-дисперсних мульти-компонентних систем, які складають широкий спектр речовин, які використовуються у багатьох технологіях і підлягають контролю та захисту і мають, як природне так і антропогенне походження.

Спектроскопія терагерцового (ТГц) діапазону довжин хвиль електромагнітного випромінювання ($0,1\text{--}10\text{ ТГц}$; $3\text{--}300\text{ см}^{-1}$; $\sim 3\text{ мм} - 30\text{ мкм}$) в даний час отримує все більший розвиток [2]. Проникнення такого випромінювання в конденсоване (і, особливо, в органічне) середовище не викликає подальшої іонізації (як у випадку іонізуючого випромінювання), що стимулює активні дослідження можливостей використання приладів, дія яких базується на використанні терагерцового випромінювання в дослідженнях біологічної матерії.

Активно розширюється використання ТГц-технологій для контролю технологічних процесів виробництва продуктів, аналізу складу матеріалів, контролю безпеки, для дистанційного виявлення отруйних, вибухових, наркотичних речовин, для тестування напівпровідникових матеріалів.

Тому розробка відповідної теоретичної бази опису та параметризації розсіювання випромінювань у терагерцовому діапазоні довжин хвиль на складних, структурованих, декорованих домішками або таких, що містять різного роду дефекти, конденсованих системах є актуальним завданням.

В якості теоретичного підходу до використання терагерцової спектроскопії для детектування вищеописаних станів розглянемо метод, що полягає в порівнянні форм-факторів розсіювання.

Формфактор розсіювання – функція, що описує вплив форми розсіюючого об'єкта на перетин (інтенсивність) розсіювання зовнішніх випромінювань. Введення формфактора базується на тому, що розсіюючи об'єкти розподілені в просторі з певною щільністю $\rho(r)$.

Для конгломерації, яка складається з N монодисперсних частинок інтенсивність розсіяння задається формулою

$$I(q) = N^2 P(q) S(q), \quad (1)$$

де q -хвильовий вектор, $P(q)$ -формфактор, $S(q)$ -структурний фактор розсіяння.

Формфактор розсіяння $P(q)$ визначається за допомогою інтегрального перетворення функції густини розподілу частинок $\rho(r)$

$$P(q) = \left| \int \rho(r) \exp(i\vec{q}\vec{r}) d\vec{r} \right|^2. \quad (2)$$

Наприклад, у випадку монодисперсних частинок сферичної форми з радіусом r_0 , як неважко переконатися, він має наступний вигляд

$$P(q) = \{ [24(\sin(qr_0/2) - (qr_0/2) \cos(qr_0/2))] / (qr_0)^3 \}^2 \quad (3)$$

В загальному випадку на вид формфактору впливає характер густини розподілу $\rho(r)$.

Для великих значень хвильового вектору розсіювання формфактори стають практично незалежними від форми частинок і майже повністю залежать від розсіювання на поверхні. Останнє особливо контрастно проявляється коли має місце слабка полідисперсність у розмірах частинок, що в значній мірі є притаманним реальним умовам. Саме такі ефекти відображає відомий закон Порода [3]:

$$P(q) = 2\pi r^2 S / q^4, \quad (4)$$

де S позначає площу поверхні розсіювання.

Якщо вважаємо, що поверхня є фрактальним об'єктом розмірності d_f :

$$S = (r/r_0)^{d_f} \quad (5)$$

отримуємо наступний вираз для формфактора розсіювання:

$$P(q) = \pi r^2 S \Gamma(5 - d_f) \times \sin[\pi(d_f - 1)/2] q^{-(6-d_f)}, \quad (6)$$

де $\Gamma(5-d_f)$ – Гама-функція.

Очевидно, що коли $d_f=2$ вираз (6) переходить у форму закону Порода.

Структурний фактор розсіювання визначається співвідношенням:

$$S(\vec{q}) = (1/N^2) \sum_j^N \sum_i^N \exp[i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)] \quad (7)$$

а також за допомогою інтегрального перетворення кореляційної функції $H(r)$

$$S(\vec{q}) = (1/N) [1 + \int H(r) \exp(i\vec{q}\vec{r}) d\vec{r}], \quad (8)$$

де $H(r)$ – кореляційна функція.

Приймаючи фрактальний характер та постулюючи $H(r)$ у вигляді

$$H(r) \sim r^{d_f-3} h\left(\frac{r}{R_g}\right) \quad (9)$$

де $h(x)$, так звана “обрізаюча” функція, яку вибираємо наступним чином:

$$h(x) = \exp(-x^2), \quad x = r d_f^{1/2} / 2R_g \quad (10)$$

та користуючись визначенням, отримуємо вираз для структурного фактору, який відповідає об’ємному фрактальному розподілу розсіювачів:

$$S(q) = \exp[(-qR_g)/d_f] F_1[(3-d_f)/2; 3/2; (qR_g)^2/d_f] \quad (11)$$

де $F_1[(3-d_f)/2; 3/2; (qR_g)^2/d_f]$ – гіпергеометрична функція, R_g – так званий радіус інерції (фактично, масштаб, який визначає область малокутового розсіювання).

Справа в тому, що в методах статичного розсіювання інтенсивність зазвичай вимірюють не у всьому доступному діапазоні кутів розсіювання, а тільки в області, яка визначає так зване малокутове розсіювання : $a < q^{-1} < R_g$. При цьому, інтенсивність розсіювання змінюється за законом:

$$I(q) \sim (qR_g)^{-d_f}. \quad (12)$$

Користуючись (12), за вимірами інтенсивності розсіювання можна визначати, як фрактальну розмірність об’ємного розподілу розсіювачів так і радіус інерції (тобто границю інтервалу в якому відбувається малокутове розсіювання).

Таким чином в роботі розглянуто модельний підхід в якому метод фрактального моделювання розсіювання само узгоджено застосовується до опису як поверхневих, так і об’ємних ефектів. Це дозволяє здійснити, як аналіз форми так і об’ємного розподілу розсіювачів та виконати відповідну класифікацію.

Метод практично без ускладнень розповсюджується на полідисперсні системи, що відкриває можливості його застосування для детектування дефектів та домішкових компонентів у однорідних та квазі-однорідних системах, що є актуальною задачею багатьох технологій, як в фундаментальних, так і прикладних галузях науки і виробництва.

Треба зауважити, що строго кажучи монодисперсні системи зустрічаються на практиці досить не часто. Але і в цьому випадку викладений вище підхід опису розсіяння на компактній конгломерації може бути корисним якщо ввести скажімо, усереднений по розподілу частинок за розмірами структурний фактор [4, 5].

Структурна діагностика складних структурованих компактних конгломерацій за допомогою розсіяння на об'єкті з фрактальною інфраструктурою може бути застосована для вивчення структурних властивостей пін, кластеризації біологічно активних молекул іммобілізованих у низько вимірному просторі(на поверхні),структуризації нуклеотидів в молекулах ДНК, стадій радіаційного охрупчування та дефектоутворень у полікристалах, та деяких інших.

Важливо підкреслити, що хоча фізичний зміст самої фрактальної розмірності не є, строго кажучи, послідовно визначеною за змістом величиною(хоча й знаходиться явно!), вона надає можливість розрізняти (і фактично вводити відповідну класифікацію)різні за структурою(локальною симетрією)стани складних систем на підставі експериментальних вимірів інтенсивностей розсіяння зовнішніх випромінювань.

Перелік посилань

1. Borghese F., Denti P., Saija R., Toscano G., Sindoni O. I. Multiple Electromagnetic Scattering from a Cluster of Spheres. I. *Theory, Aerosol Science and Technology*. 1984. 3:2, P. 227-235. DOI: <https://doi.org/10.1080/02786828408959010>
2. Peiponen KE, Zeitler JA, Kuwata-Gonokami M (eds) (2013) Terahertz spectroscopy and imaging, *Springer Series in Optical Sciences*, vol 171. Springer, Berlin. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-29564-5>
3. Martin J.E., Hurd A.J. Scattering from Fractals. *Journal Application Crystallographie*. 1987. Vol. 20. P. 61-78. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0021889887087107>
4. Герасимов О.І. *Функції розподілу груп частинок у статистичній фізиці*: монографія. Одеса: Екологія, 2008. 84 с.
5. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії*: монографія. Одеса: Видавничий дім «Гельветика», 2020. 200 с.