

УДК 502/504

**Oleg I. Gerasymov**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of the Academy of High School of Ukraine, Head at the Department of General and Theoretical Physics

ORCID ID: 0000-0003-2999-9834 *e-mail*: gerasymovoleg@gmail.com

**Liudmyla M. Sidletska**, graduate student of the Department of General and Theoretical Physics

ORCID ID: 0000-0002-1458-011X *e-mail*: milapolonskaa@gmail.com

Odesa State Environmental University, Odesa, Ukraine

## DIAGNOSIS OF INHOMOGENEOUS ONE-DIMENSIONAL DISCRETE CHAINS BY PHOTON SCATTERING

*Summary.* Among the ways to reduce radiation doses (increasing the distance from the source to the person, reducing the time spent in radiation fields, reducing the radiation dose rate of the source) an important role is played by shielding the source of ionizing radiation.

Currently, the use of screens is limited by the small selection of materials and the inconvenience of their use, which complicates their operation, installation and replacement, or disassembly.

The propagation of a plane wave in a one-dimensional force chain with Hertzian contacts is analyzed in a linear approximation for cases with the presence of incorporated single and double impurities (defects). The algorithm of analytical solution of control equations and finding of reflection and transmission coefficients of incident radiation is determined. In terms of phase shifts, the frequency criterion of multi-modes of generation of transparent modes for inhomogeneous chains (with double impurities) similar to the Ramsauer-Townsend effect in the scattering of electrons by inert gas atoms is established. The obtained theoretical results are consistent with the data obtained from alternative sources. Possibilities of application of terahertz spectroscopy of radiation transmission for structural diagnostics and detection of inhomogeneities, impurities and defects in discrete micro-mechanical (granular) systems are discussed. In particular, preliminary experimental data on scattering of terahertz radiation on samples of granular materials with different degrees of packing, from low to densely packed, which clearly indicate the dependence of the transmittance on the degree of packing and the formation of the corresponding band structure of spectra. The obtained results are also discussed in terms of applications to the creation of the element base of photonic circuitry in the sub millimeter range using decorated with impurities and structured low-dimensional discrete power circuits.

**Keywords:** radiation shields; flat wave; inhomogeneous Hertz chain; transparency effect; THz in homogeneity spectroscopy; decorated waveguides

---

© O.I. Герасимов, Л.М. Сідлецька, 2022

О.І. Герасимов, Л.М. Сідлецька

Одеський державний екологічний університет, м. Одеса, Україна

## РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ПЛОСКОЇ ХВИЛІ В НЕОДНОРІДНОМУ ОДНОВИМІРНОМУ СИЛОВОМУ ЛАНЦЮЖКУ: ЕФЕКТ ПРОЗОРОСТІ

**Анотація.** Розповсюдження плоскої хвилі в одновимірному силовому ланцюжку із герцівськими контактами проаналізовано в лінійному наближенні для випадків із наявністю інкорпорованої одинарної та подвійної домішок (дефектів). Визначено алгоритм аналітичного розв'язку керуючих рівнянь та знаходження коефіцієнтів відбиття та пропускання падаючого випромінювання.

В термінах фазових зсувів встановлено частотний критерій мультирежимів генерації прозорих мод для неоднорідних ланцюжків (із подвійними домішками), аналогічних ефекту Рамзауера – Таунсенда у розсіянні електронів на атомах інертних газів. Отримані теоретичні результати узгоджуються із даними, отриманими з альтернативних джерел. Обговорюються можливості застосування террагерцівської спектроскопії пропускання випромінювання для структурної діагностики і виявлення неоднорідностей, домішок та дефектів в дискретних мікромеханічних (гранульованих) системах. Зокрема, проаналізовані попередні експериментальні дані з розсіяння террагерцівського випромінювання на зразках з гранульованих матеріалів із різними ступенями впакування, від низько- до щільновпакованих, які наочно вказують на залежність коефіцієнта пропускання від ступеня впакування та формування відповідної зонної структури спектрів. Отримані результати обговорюються також з точки зору застосувань до створення елементної бази фотонної схемотехніки у субміліметровому діапазоні із використанням декорованих домішками та структурованих низьковимірних дискретних силових ланцюжків.

Бажаному підвищенню потужності перешикоджає поріг руйнування кварцу (порядку  $1\text{МВт}/\text{см}^2$ ), тому ключовим елементом схемотехнічного дизайну є збільшення діаметра волокна із збереженням одномодового режиму генерації. Спеціально підібрана структура кільцевих шарів приводить до резонансного згасання поля в оболонці світловода, що перешикоджає витіканню енергії. Цей ефект, аналогічний бреггівському відбиттю в кристалічних ґратках, дозволяє створювати високодобротні оптичні волокна з великою площею моди.

**Ключові слова:** радіаційні захисні екрани; плоска хвиля; неоднорідний ланцюжок Герца; ефект прозорості; ТГц спектроскопія неоднорідностей; декоровані хвильоводи

DOI: <https://doi.org/10.32347/2411-4049.2022.1.102-110>

### Вступ

Недеструктивний моніторинг домішок, або дефектів, інкорпорованих у однорідну систему, є водночас традиційною і й досі актуальною задачею в багатьох як фундаментальних, так і прикладних галузях науки і виробництва. Одним із інструментаріїв на цьому напрямі є розсіяння випромінювань різної природи на об'єкті, який містить домішкову (часто небажану) компоненту.

Детектування та моніторинг таких систем є, наприклад, вельми актуальною задачею в технологіях захисту навколишнього середовища від шкідливих зовнішніх впливів. Останні можуть полягати якраз у появі неоднорідностей, пов'язаних із появою домішкових компонентів в початкових однорідних системах. Задача розсіяння на трьохвимірних навіть слабо полідисперсних системах з метою детектування включень є досить складною і громіздкою завдяки багатократному процесу взаємодії зонда із складною речовиною. З іншого боку, зважаючи на анізотропний характер більшості систем, що складають практичний інтерес, вивчення навіть деяких окремих загальних закономірностей у розсіянні на низьковимірних системах із включеннями складає цілком практичний інтерес. Саме такою системою виступає періодичний одновимірний силовий ланцюг в якості анізотропної складової більш складної системи. Розповсюдження, скажімо, плоских хвиль (це може бути портретом відповідно поляризованої електромагнітної хвилі) в таких системах із зміненою симетрією за рахунок домішок чи дефектів є об'єктом чисельних досліджень, як теоретичних, так і експериментальних [1]. Незважаючи на значну кількість отриманих на цьому напрямі результатів, які полягають у описі динамічних змін зонної структури в таких системах, що відбуваються внаслідок домішок та відповідної зміни симетрії, актуальним залишається пошук закономірностей, які супроводжують такі процеси, та шляхів їх параметризації. Саме така задача, на прикладі транспортування хвиль у одновимірній силовій мікромеханічній неоднорідній періодичній ґратці, яка містить невелике число включень (домішок) буде розглянута нижче.

Одновимірний  $1D$  кристал із  $2N + 1$  сферичних частинок можна описати як ланцюжок нелінійно зв'язаних осциляторів із силовими (наприклад, герцівськими) взаємодіями між кожною парою сусідніх частинок [1–5]. Поведінка такої системи може бути змодельована за допомогою наступних рівнянь руху:

$$\ddot{u}_n = \frac{A_n}{m_n} [\Delta_n + u_{n-1} - u_n]_+^2 - \frac{A_{n+1}}{m_n} [\Delta_{n+1} + u_n - u_{n+1}]_+^2, \quad (1)$$

де  $m_n$  – маса  $n$ -ої частинки ( $n \in \{-N, -N + 1, \dots, N\}$ ),  $u_n$  – зміщення  $n$ -ої частинки, яке вимірюється від положення рівноваги,  $A_n$  – амплітуда взаємодії, яка залежить від геометрії та пружності контактуючих сусідніх частинок, що знаходяться у  $n$ -й та  $(n-1)$ -й позиціях,

$$\Delta_n = \left( \frac{F_0}{A_n} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (2)$$

Фактично, рівняння (1) описує зміни зміщення між центрами сусідніх частинок у термінах статичного навантаження  $F_0$ , дужка  $[x]_+$  визначається, як:

$$[x]_+ = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}. \quad (3)$$

Розглянемо випадок, коли падаюча плоска хвиля в нескінченному ланцюжку періодично рухається в один бік (скажімо, зліва направо). Об'єктом нашого інтересу, на даному етапі, є неоднорідні (скажімо, збурені домішками або дефектами) одновимірні необмежені ланцюжки. Ми розглянемо, зокрема, два випадки, а саме: одиничної та подвійної домішок (умовно зображені на рис. 1a та 1b).

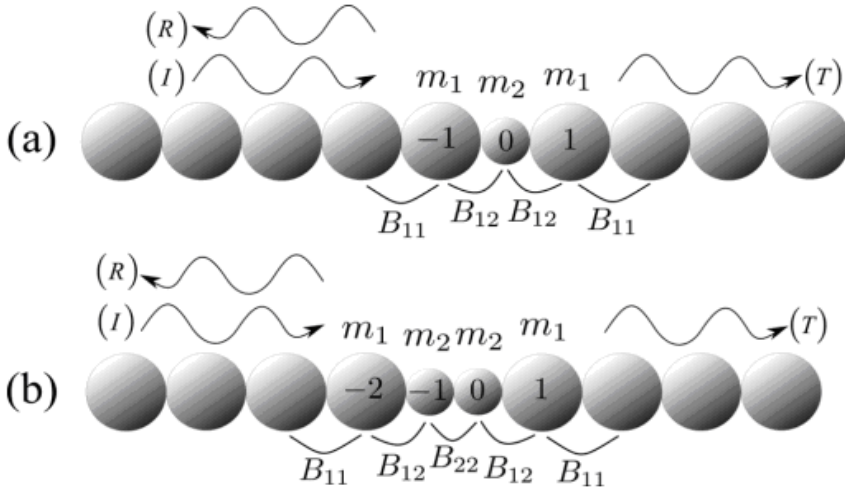


Рис. 1. Схематичне зображення ланцюжків з одинарними (a) і подвійними (b) домішками. Індеси 1 та 2 позначають сорт (вид) окремої частинки. Коефіцієнти  $I$ ,  $R$  та  $T$  позначають падаючу, відбиту та таку, що розповсюджується, хвилі, відповідно

Маси частинок складають  $m_1$  і  $m_2$ , відповідно. Припустимо, що механічні пружні властивості контактів обох типів частинок однакові. Радіус частинки домішки покладемо таким, що дорівнює  $r_2 = \alpha r_1$ , де  $\alpha > 0$  – відношення радіусів частинок ланцюжка та домішки. Якщо припустити, скажімо, що частинки типів 1 і 2 мають однакову щільність (тобто  $\rho_1 = \rho_2$ ), але різні розміри, і при цьому  $\alpha < 1$ , то це означає, що домішки легші за частинки в однорідному ланцюгу, тоді як при  $\alpha > 1$  – домішки важчі за частинки ланцюжка. В залежності від відносних значень  $u_n$  ефективна нелінійність в рівнянні (1) може бути сильною або слабкою. Зокрема, у випадку досить сильного статичного попереднього стиснення (або малої амплітуди коливань), ми маємо справу із системою із слабкою нелінійністю. Якщо, спираючись на вищесказане, ігнорувати нелінійність, то між частинками діє виключно гармонічна взаємодія, і в цьому випадку динаміку системи можна описати досить простим відомим рівнянням:

$$m_n \ddot{u}_n = B_n u_{n-1} + B_{n+1} u_{n+1} - (B_n + B_{n+1}) u_n, \quad (4)$$

де

$$B_n = \frac{3}{2} A_n \Delta_n^2 = \frac{3}{2} A_n^3 F_0^3. \quad (5)$$

Для вирішення задачі про розповсюдження плоскої хвилі в лінійному режимі зручно використовувати координати положень в ґратці. Запишемо в термінах координат вираз для плоскої хвилі в ґратці, яка містить домішку в положенні із індексом  $n$ :

$$u_n = \begin{cases} e^{i(kn-\omega t)} + \text{Re} e^{i(kn-\omega t)}, & n \leq 0, n > 0. \\ T e^{i(kn-\omega t)} \end{cases} \quad (6)$$

У околі домішок у лінійному наближенні можна записати систему рівнянь для визначення коефіцієнтів проходження та відбиття  $T$  і  $R$  у матричній формі [4]:

$$\begin{pmatrix} \beta_{(i),(ii)} & \delta_{(i),(ii)} \\ \eta_{(i),(ii)} & \gamma_{(i),(ii)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_{(i),(ii)} \\ R_{(i),(ii)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_{(i),(ii)} \\ \zeta_{(i),(ii)} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

де індекси  $(i)$  та  $(ii)$ , відповідно, позначають ланцюги з одинарними та подвійними домішками. Розв'язуючи рівняння (7), можуть бути отримані аналітичні вирази для коефіцієнтів відбиття та пропускання  $R$  та  $T$ . Аналіз вказаних аналітичних розв'язків показує наявність так званої «тіньової» області невідбитих мод, які відповідають плоским хвилям, що майже без змін проходять як через одну, так і через подвійну домішку, не помічаючи їх. Причому, у випадку ланцюжків із одиничними домішками коефіцієнт відбиття  $|R|^2$  зникає лише при  $\alpha = 1$  або  $k = 0$ . На відміну від цього, для ланцюжків із подвійними домішками  $|R|^2$  занурюється до нуля не тільки при  $\alpha = 1$  і  $k = 0$ , а й при деякому  $k = kr \neq 0$  при додатковій умові, що параметр асиметрії  $\alpha$  приймає значення більше за деяке критичне  $\alpha c$ . Для розглянутої нами моделі можемо записати  $kr$  в термінах фізичних параметрів системи, а саме:  $kr = \arccos(\phi)$ ,

$$\phi = \frac{B_{12} B_{22} m_1^2 - 2 B_{11} B_{22} m_1 m_2}{2 B_{11} m_2 [B_{11} m_2 - B_{12} m_1]} + \frac{B_{11} [m_1^2 - 2 m_1 m_2 + 2 m_2^2]}{2 m_2 [B_{11} m_2 - B_{12} m_1]}. \quad (8)$$

При значеннях  $k = kr$  хвиля може повністю проходити через домішки (тобто без розсіювання), відчуючи лише фазовий зсув. Таким чином, гранульовані силові ланцюжки, в лінійному наближенні, показують можливість існування режимів розсіювання, зовні аналогічних відомому ефекту Рамзауера – Таунсенда [6, 7], який у своїй традиційній формі виглядає як поява контрастного мінімуму в поперечному перерізі розсіювання електронів при низьких енергіях на атомах інертних газів (наприклад,  $Xe$ ,  $Kr$  і  $Ar$ ).

Із визначення (8) випливає, що  $\phi \in [-1, 1]$ . Звернемо увагу на те, що, формально,  $kr$  (як функція  $\alpha$ ) може приймати будь-яке значення в інтервалі  $[0, \pi]$ . Так, наприклад,  $kr = \pi$  при деякому  $\alpha = \alpha c$  і  $kr \rightarrow 0$  при  $\alpha \rightarrow \infty$ . Таким чином, резонансна частота може бути змінним, маніпулюємим параметром, визначаючи виділені (бажані) канали прозорості. З іншого боку, розрізняючи

і класифікуючи відповідні моди за допомогою параметра  $\alpha$ , отримуємо можливість відтворити параметри домішок (неоднорідностей).

Вибираючи конкретні співвідношення радіусів домішок і частинок ланцюга, можемо порівняти між собою результати, отримані шляхом теоретичних розрахунків на основі розглянутої моделі, та дані чисельного та фізичного експериментів із спостереження вищеописаних ефектів. На цьому шляху ми порівняли результати чисельних розрахунків коефіцієнтів пропускання та відбиття (в залежності від частоти) для однодомішкового та двохдомішкового ланцюгів, відповідно (для двох випадків, коли  $\alpha = 0,7$ ,  $\alpha = 1,5$ ), із даними чисельного та фізичного експериментів, проведених в альтернативних дослідженнях [5].

Для ланцюга з однією домішкою було виявлено, що коефіцієнт пропускання показує тенденцію до зменшення, при збільшенні частоти збудження. Характери зменшення залежать від коефіцієнта, що характеризує асиметрію. Коли  $\alpha = 0,7$ , зниження спочатку повільніше. Потім спостерігається швидке зменшення в околі частоти 7,25 кГц. Для  $\alpha = 1,5$  зменшення носить майже лінійний характер у всьому діапазоні частот. Для ланцюжків із подвійними домішками, при  $\alpha = 0,7$  має місце зниження ефективності пропускання зі збільшенням частоти (як у ланцюжку з однією домішкою). Тоді, як у випадку асиметрії  $\alpha = 1,5$  коефіцієнт прозорості має контрастно виражену форму подвійного піку (резонанс). При цьому повна передача плоских хвиль через неоднорідну одновимірну систему силових центрів із подвійними домішками, згідно із теоретичними прогнозами, має спостерігатися (у вибраному інтервалі калібрування) для частоти збудження близько 3,0 кГц. Саме такий резонансний режим у контрастній формі спостерігається також як у фізичних експериментах, так і в чисельному моделюванні [5]. Таким чином, аналітичний прогноз узгоджується з результатами чисельного моделювання та експериментів, зокрема, у визначеному частотному діапазоні від 1,0 до 4,0 кГц.

## **Структурна діагностика із застосуванням методів терагерцівської ТГц спектроскопії**

Вищеописані результати є практично важливими для структурної діагностики мікромеханічних (гранульованих) і, зокрема, низьковимірних систем, ланцюжків, які складаються з окремих дискретних частинок із силовими (часто нелінійними) взаємодіями.

Треба додати, що прямий перенос традиційних методів структурного аналізу за допомогою розсіювання зовнішніх випромінювань на випадок гранульованих середовищ є неможливим. Справа в тому, що згадані методи розсіювання (див., наприклад [9–11]) базуються на передачі середовищу імпульсу падаючої хвилі із подальшим вивченням кутової картини розсіювання. Розсіювання на щільних дискретних середовищах відрізняється, скажімо, від розсіювання рентгенівського і видимого світла на атомних або колоїдних комплексах. Відмінність полягає в тому, що в перших з них середній вільний пробіг випромінювання є порівняно коротким, а самі транспортні властивості залежать від власних параметрів ансамблю частинок. Зокрема, аналіз даних терагерцівської (ТГц) спектроскопії дійсно свідчить про те, що

транспортні властивості у випадку гранульованих середовищ стають чутливими до структури (симетрії) упаковки.

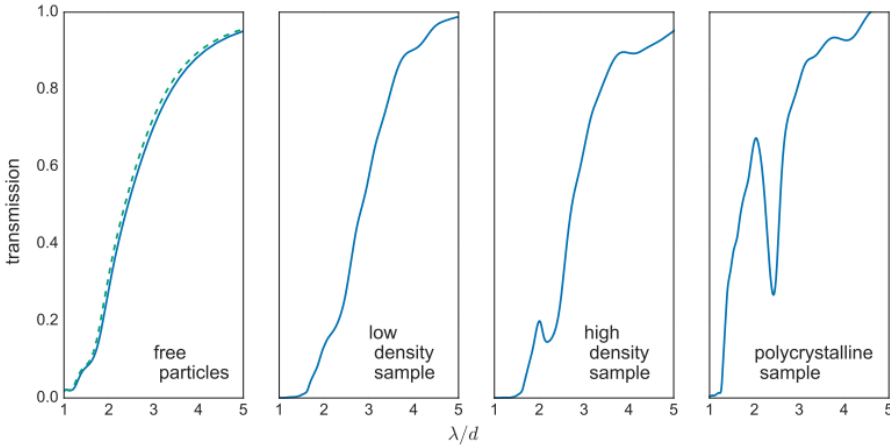


Рис. 2. Порівняльний аналіз даних ТГц спектроскопії дискретної конгломерації з твердих сфер в термінах коефіцієнта пропускання відносно довжини хвилі в одиницях діаметра частинок (за даними роботи [12])

Зразки для вимірювання в [12] вибирались в чотирьох станах із різними ступенями впакування, від станів із низькою щільністю і до полікристалічно впакованих сфер. Спостерігається зменшення пропускання із збільшенням щільності упаковки та появою брегівського розсіювання при  $\lambda \neq 2d$  і відповідним зменшенням передачі, починаючи від  $\lambda = 2d$  (через збільшення ефективного індексу заломлення, яке має місце із збільшенням щільності упаковки). Пунктирна лінія на лівому фрагменті на рис. 2 відображає характер пропускання через систему вільних частинок із заданою щільністю.

Як вже згадувалося вище, для щільних гранульованих середовищ характерним є вельми короткий середній шлях вільного пробігу у більшості областей спектру. При щільній упаковці гранульованого середовища частинки безпосередньо механічно контактують проміж собою. Вказане створює перешкоду застосуванню типової технології розсіювання до структурного аналізу гранульованих середовищ. На шляху вирішення вказаної проблеми ТГц спектроскопія пропускання є багатообіцяючим підходом до дослідження структурних властивостей гранульованої упаковки великих конгломератів мікромеханічних частинок методом розсіювання.

## Висновки та перспективи подальших досліджень

Використовуючи модель розсіювання плоскої хвилі на ланцюжку з одиночними та бінарними домішками, отримано теоретичні вирази для коефіцієнтів пропускання та відбиття, пропускання при спеціальних детермінованих параметрах падаючої хвилі ( $k = kr \in [0, \pi]$ ) та асиметрії частинок і домішок ланцюга. Ми порівняли наші аналітичні результати з чисельними розрахунками та лабораторними експериментами та спостерігали задовільну узгодженість.

У відповідних експериментах безконтактна лазерна доплерівська віброметрія була використана для візуалізації повного поля плоских хвиль, що поширюються в гранульованому ланцюжку. Це дозволило спостерігати резонанс у випадку подвійних домішок, безпосередньо вимірюючи коефіцієнт пропускання. Знайдений режим створює можливість безвідбиваючого (прозорого) режиму в системах з множинними (впорядкованими чи невпорядкованими) подвійними домішками. Можливість такого “невідбивного” розсіювання підтверджується також результатами чисельного моделювання. Дослідження відкриває шлях до систематичного вивчення та застосування ефектів, ізоморфних до резонансів Рамзауера – Таунсенда в гранульованих середовищах із кристалічним впорядкуванням.

Особливий інтерес представляють такі резонанси, коли кількість домішок велика та для різних (впорядкованих чи невпорядкованих) розподілів домішок (або дефектів). Одним із можливих застосувань є вбудовування сторонніх об’єктів, таких як датчики, у відповідні системи для моніторингу мінімальної межі збурень конструкцій. Також значний інтерес представляє вивчення сегментів неоднорідностей в невпорядкованих гранульованих системах. В одновимірних невпорядкованих гранульованих кристалах останні чисельні прогнози супер-дифузійного транспорту та інших специфічних режимів [8] є особливо цікавими для подальшого вивчення з точки зору їх зв’язку з резонансними модами.

Привабливе поле застосувань отриманих результатів лежить в царині застосувань ТГц спектроскопії для задач структурної діагностики мікромеханічних систем.

Безумовно, що важливою складовою, необхідною для подальшого практичного застосування підходу, який базується на використанні ТГц спектроскопії, є розробка надійної моделі ефективного показника заломлення, придатного до застосування у широкому діапазоні значень  $\lambda$ . Розв’язання цієї проблеми дозволить використовувати ТГц спектроскопію пропускання для дослідження фотонних властивостей невпорядкованих мікромеханічних середовищ у їх власних масштабах [12].

## REFERENCES

1. Nesterenko, V. F. (2001). Nonlinear impulses in particulate materials. Dynamics of Heterogeneous Materials. Springer-Verlag, NY, 1-136. [https://doi.org/10.1007/978-1-4757-3524-6\\_1](https://doi.org/10.1007/978-1-4757-3524-6_1).
2. Man, Y., Boechler, N., Theocharis, G., Kevrekidis, P. G., & Daraio, C. (2012). Defect modes in one-dimensional granular crystals. *Phys. Rev. E*, 85(3). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.037601>.
3. Achilleos, V., Theocharis, G., & Skokos, Ch. (2016). Energy transport in one-dimensional disordered granular solids. *Phys. Rev. E*, 93(2). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.022903>.
4. Zhang, Y., Hasan, M. A., Starosvetsky, Y., McFarland, D. M., & Vakakis, A. F. (2015). Nonlinear mixed solitary–shear waves and pulse equi-partition in a granular network. *Physica D*, 291, 45-61. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2014.10.005>.
5. Miroshnichenko, A. E., Flach, S., & Kivshar, Yu. S. (2010). Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.* 82(3). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.2257>.
6. Kauppila, W. E., Stein, T. S., & Jesion, G. (1976). Direct Observation of a Ramsauer–Townsend Effect in Positron–Argon Collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 36(11) 580 <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.36.580>.



7. Gianturco, F. A. & Thompson, D. G. (1976). The Ramsauer – Townsend effect in methane. *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 9(12).
8. Zakeri, S. S., Lepri, S., & Wiersma, D. S. (2015). Localization in onedimensional chains with Levy-type disorder. *Phys. Rev. E*, 91(3). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.91.032112>.
9. Glatter, O. & Kratky, O. (1982). *Small Angle X-ray Scattering* (Academic Press, Boston).
10. Xu, Renliang (2002). *Particle Characterization: Light Scattering Methods*. Kluwer Springer Netherlands, Heidelberg. [https://doi.org/10.1007/0-306-47124-8\\_6](https://doi.org/10.1007/0-306-47124-8_6).
11. Brown, W. (1996). *Light Scattering: Principles and development*. Clarendon Press, Oxford. V 53.
12. Born, P., & Holldack, K. (2017). Analysis of granular packing structure by scattering of THz radiation. *Review of Scientific Instruments*, 88(5) <https://doi.org/10.1063/1.4983045>.

*Стаття надійшла до редакції 16.12.2021 і прийнята до друку після рецензування 02.03.2022*

**Герасимов Олег Іванович**

доктор фізико-математичних наук, професор, академік АН ВШ України, завідувач кафедри загальної та теоретичної фізики Одеського державного екологічного університету

**Адреса робоча:** Україна, 65016, м. Одеса, вул. Львівська, 15

ORCID ID: 0000-0003-2999-9834 **e-mail:** gerasymovoleg@gmail.com

**Сідлецька Людмила Михайлівна**

аспірант кафедри загальної та теоретичної фізики Одеського державного екологічного університету

**Адреса робоча:** Україна, 65016, м. Одеса, вул. Львівська, 15

ORCID ID: 0000-0002-1458-011X **e-mail:** milapolonskaa@gmail.com