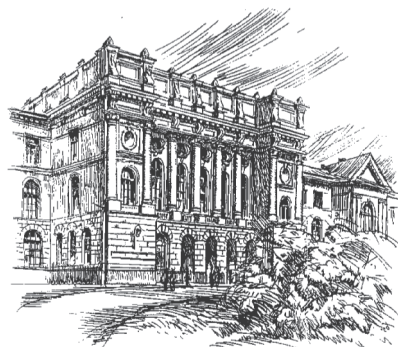


2(146)/2012



Научно-технические ведомости СПбГПУ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ

Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета

Министерство образования и науки РФ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбПУ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Васильев Ю.С., академик РАН, Президент СПбПУ — председатель;
Алферов Ж.И., академик РАН — зам. председателя; *Костюк В.В.*, академик РАН;
Лопота В.А., чл.-кор. РАН; *Окрепилов В.В.*, академик РАН;
Патон Б.Е., академик РАН и НАН Украины;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН; *Федоров М.П.*, академик РАН; *Фортков В.Е.*, академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Васильев Ю.С., академик РАН, Президент СПбПУ — главный редактор;
Арсеньев Д.Г., д-р техн. наук, профессор;
Бабкин А.В., д-р экон. наук, профессор — зам. гл. редактора;
Боронин В.Н., д-р техн. наук, профессор; *Глухов В.В.*, д-р экон. наук, профессор;
Дегтярева Р.В., д-р истор. наук, профессор; *Иванов А.В.*, д-р техн. наук, профессор;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор; *Козловский В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
Райчук Д.Ю., — зам. гл. редактора; *Юсупов Р.М.*, чл.-кор. РАН.

СЕРИЯ «ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ»

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ СЕРИИ

Алферов Ж.И., академик РАН — председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН — зам. председателя;
Рутберг Ф.Г., академик РАН;
Суриц Р.А., академик РАН;

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор — председатель;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент — отв. секретарь;
Кожеевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор — зам. председателя;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАН, профессор;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор — зам. председателя.

Журнал выходит под научно-методическим руководством Российской академии наук с 1995 г.

Журнал включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Журнал издается в пяти сериях:

Наука и образование;
Физико-математические науки;
Экономические науки;
Информатика, телекоммуникации, управление;
Гуманитарные и общественные науки.

Журнал зарегистрирован в Госкомпечати РФ.
Свидетельство № 013165 от 23.12.94.

Подписной индекс **18390** в каталоге «Газеты. Журналы» агентства «Роспечать».

Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Национальной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции серии (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2012



Содержание

Физика конденсированного состояния

Вейс А.Н., Ильин В.И., Тропина Н.Э. Особенности энергетического спектра и свойств поликристаллических пленок $Pb_{1-x}Cd_xSe$, сформированных на подложках из фтористого кальция и стекла	7
Зиминов В.М., Захарова И.Б. Выпрямляющие свойства структур на основе фуллерена C_{60}	18
Стукова Е.В., Королева Е.Ю., Трюхан Т.А., Барышников С.В. Изменение области существования несоразмерной фазы в сегнетоэлектрическом композите $(NaNO_2)_{1-x}(BaTiO_3)_x$	22
Трегулов В.В. Методика исследования поверхностных состояний в резких несимметричных гетероструктурах $CdS/p-Si$	27
Чернышева Е.А., Сахаров А.В., Черкашин Н.А., Лундин В.В., Цацульников А.Ф. Влияние давления в реакторе на оптические свойства структур $InGaN$, выращенных методом ГФЭ МОС	32
Котова М.С., Дронов М.А., Белогорохов И.А. Эффект резистивного переключения в полимерных материалах и энергонезависимая память на его основе	37
Филимонов А.В., Бурковский Р.Г., Бронвальд Ю.А., Вахрушев С.Б., Шаганов А.П., Фотиади А.Э. Ужесточение мягкой моды в эпитаксиальных тонких пленках сегнетоэлектриков релаксоров	41
Карасёв П.А., Титов А.И., Улла М.В., Джурабекова Ф., Куронен А., Нордлунд К. Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов при облучении GaN атомарными и молекулярными ионами	49
Карабешкин К.В., Карасёв П.А., Беляков В.С., Архипов А.В., Титов А.И. Влияние плотности каскадов смещений на топографию и сдвиг поверхности нитрида галлия, облучаемого атомарными и молекулярными ионами	55

Математическое моделирование физических процессов

Антипина Н.А., Пещеренко С.Н. Математическое моделирование движения твердых частиц в погружных сепараторах	62
---	----

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Шиляев А.В., Баженов Н.Л., Мынбаев К.Д., Зегря Г.Г. Энергетический спектр и оптические переходы в наногетероструктурах на основе твердых растворов теллурида кадмия и ртути ...	69
Курапцев А.С., Соколов И.М. Сравнение макро- и микроскопического методов расчета диэлектрической проницаемости плотных ультрахолодных атомных облаков	73
Ходорковский М.А., Мурашов С.В., Беляева А.А., Сердобинцев П.Ю., Ракчеева Л.П. Возбужденные состояния молекул аргон-ксенон в области далекого вакуумного ультрафиолета, исследованные методом $(3+1)$ REMPI	79
Дьячков П.Н., Бочков И.А. Наноантенна терагерцового диапазона на основе углеродных нанотрубок, химически модифицированных азотом или бором	85

Приборы и техника физического эксперимента

Сабанцев А.В., Побегалов Г.Е., Мурашов С.В., Мельников А.С., Ходорковский М.А. Модернизация флуоресцентного микроскопа для исследования биологических структур с субдифракционным разрешением	94
Кузнецов В.Е., Киселев А.А., Овчинников Р.В., Дудник Ю.Д. Электроды однофазных плазмотронов переменного тока и материалы для их изготовления.....	100
Мороз А.П., Серебряков А.С., Бердников Я.А. Влияние конструктивных особенностей кремний-литиевого детектора на форму амплитудного спектра	104

Физическая электроника

Копытов Г.Ф., Погорелов А.В. Энергетические характеристики заряженной частицы в плоской монохроматической электромагнитной волне и постоянном магнитном поле.....	112
--	-----

Физическая оптика

Кизеветтер Д.В., Савина А.Ю., Левин В.М., Баскаков Г.Г. Измерение затухания в полимерных оптических волокнах, активированных флуоресцирующим красителем.....	119
---	-----

Ядерная физика

Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Измерение свойств легких адронов во взаимодействиях ядер золота при энергиях 39,0 и 62,4 ГэВ.....	125
---	-----

Математика

Шемякина Т.А. Теорема существования ограниченного решения задачи Коши для системы Франкля гиперболического типа	130
Магомедов А.М., Магомедов Т.А. Вычисление подграфа максимальной псевдоплотности	140
Петриченко М.Р. Расщепляющие разложения в предельных задачах для обыкновенных квазилинейных дифференциальных уравнений.....	143

Механика

Тихомиров В.В. Антиплоская задача для трещины, проникающей в упругое включение при неидеальном контакте фаз	150
Нгуен Ван Тханг, Арсеньев Д.Г., Беляев А.К. Определение скорости вращения втулки в упорном подшипнике скольжения с учетом гидродинамики смазки и центробежных сил.....	156
Перминов А.В. Равновесные состояния обобщенной ньютоновской жидкости	163

Радиофизика

Денисов А.В. Доказательство эффекта экранирования волны вертикальной поляризации симметричным плазменным слоем.....	170
Сведения об авторах, контактные данные	175
Аннотации, ключевые слова	181

Contents

Condensed matter physics

Veis A.N., Ilyin V.I., Tropina N.E. <i>Features of energy spectra and properties of polycrystalline $Pb_{1-x}Cd_xSe$ films formed on calcium fluoride and glass substrates</i>	7
Ziminov V.M., Zakharova I.B. <i>The rectifying properties of C_{60} fullerene-based structures</i>	18
Stukova E.V., Koroleva E.Yu., Tryukhan T.A., Baryshnikov S.V. <i>A change in incommensurate phase existence in $(NaNO_2)_{1-x}(BaTiO_3)_x$ ferroelectric composite</i>	22
Tregulov V.V. <i>The technique of investigation of surface states in a sharp nonsymmetrical $CdS/p-Si$ heterostructures</i>	27
Chernysheva E.A., Sakharov A.V., Cherkashin N.A., Lundin V.V., Tsatsulnikov A.F. <i>Reactor pressure effect on optical properties of MOVPE-grown $InGaN$ heterostructures</i>	32
Kotova M.S., Dronov M.A., Belogorokhov I.A. <i>The resistive switching effect in polymer materials and nonvolatile memory based on this effect</i>	37
Filimonov A.V., Burkovski R.G., Bronwald Yu.A., Vakhrushev S.B., Shaganov A.P., Fotiadi A.E. <i>Tightening of the soft mode in epitaxial thin films of relaxor ferroelectric materials</i>	41
Karaseov P.A., Titov A.I., Ullah M.-W., Djurabekova F., Kuronen A., Nordlund K. <i>Molecular dynamic simulation of damage formation in GaN under atomic and molecular ion bombardment</i>	49
Karabeshkin K.V., Karaseov P.A., Belyakov V.S., Arkhipov A.V., Titov A.I. <i>The influence of collision cascade density on GaN surface topography and surface shift under atomic and molecular ion bombardment</i>	55

Simulation of physical processes

Antipina N.A., Peshcherenko S.N. <i>Mathematical modeling of solid particles motion in submersible separators</i>	62
--	----

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Shilyaev A.V., Bazhenov N.L., Mynbaev K.D., Zegrya G.G. <i>Energy spectrum and optical transitions in $CdHgTe$ nanoheterostructures</i>	69
Kuraptsev A.S., Sokolov I.M. <i>A comparison of macroscopic and microscopic methods of calculation of dielectric permittivity of dense ultracold atomic clouds</i>	73
Khodorkovskii M.A., Murashov S.V., Belyaeva A.A., Serdobintsev P.Yu., Rakcheeva L.P. <i>The excited states of argon-xenon molecules in the far ultraviolet area studied using the (3+1) REMPI method</i>	79
D'yachkov P.N., Bochkov I.A. <i>Terahertz nanoantenna based on carbon nanotubes modified chemically with boron or nitrogen</i>	85

Experimental technique and devices

Sabantsev A.V., Pobegalov G.E., Murashov S.V., Mel'nikov A.S., Khodorkovskii M.A. <i>The fluorescent microscope upgrading to investigate biological structures with subdiffractive resolution</i>	94
Kuznetsov V.E., Kiselev A.A., Ovchinnikov R.V., Dudnik Yu. D. <i>Electrodes of single-phase alternating current plasma torches and materials for its production</i>	100
Moroz A.P., Serebryakov A.S., Berdnikov Ya.A. <i>The influence of constructional features of Si(Li) detector on the amplitude spectrum form</i>	104

Physical electronics

Kopytov G.F., Pogorelov A.V. <i>Energy characteristics of a charged particle in a plane monochromatic wave and in a magnetostatic field</i>	112
--	-----

Physical optics

Kiesewetter D.V., Savina A.Yu., Levin V.M., Baskakov G.G. <i>The measurement of attenuation in polymer optical fibers doped with fluorescent dye</i>	119
---	-----

Nuclear physics

Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V.M. <i>The measurement of main characteristics of light hadrons in gold nuclei collisions at 39.0 and 62.4 GeV</i>	125
--	-----

Mathematics

Shemyakina T.A. <i>The theorem on existence of a bounded solution of the Cauchy problem for the Frankl system of hyperbolic type</i>	130
Magomedov A.M., Magomedov T.A. <i>The calculation of the subgraph with the maximal pseudo-density</i>	140
Petritchenko M.R. <i>Splitting expansions for the ordinary quasi-linear differential equations in the limiting problems</i>	143

Mechanics

Tikhomirov V.V. <i>An antiplane problem for a crack penetrating into an elastic inclusion provided the phase contact is imperfect</i>	150
Nguyen Van Thang, Arseniev D.G., Belyaev A.K. <i>The rotational speed determination for a bush in the floating ring bearing with allowance of lubrication hydrodynamics and centrifugal forces</i>	156
Perminov A.V. <i>Equilibrium states of integrated Newtonian fluid</i>	163

Radiophysics

Denisov A.V. <i>The proof of effect of shielding of a harmonious wave of vertical polarization by an isotropic plasma layer</i>	170
<i>About the authors, contact information</i>	175
<i>Abstracts, key words</i>	186

УДК 535.345:628.9.038:535.37

А.Н. Вейс, В.И. Ильин, Н.Э. Тропина

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА И СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК $Pb_{1-x}Cd_xSe$, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ ФТОРИСТОГО КАЛЬЦИЯ И СТЕКЛА

В настоящее время со стороны промышленности проявляется значительный интерес к полупроводниковым источникам излучения инфракрасного диапазона, применяемым для создания спектрально-аналитической аппаратуры различного назначения, в том числе мониторинга окружающей среды. Основные требования к указанным источникам при их разработке — это заданный спектральный диапазон генерируемого излучения (как правило, длина волны излучения $\lambda > 1,5$ мкм), возможность работы при температуре окружающей среды (т. е. без устройств термостатирования) и дешевизна. Этим требованиям удовлетворяют фотолюминесцентные излучатели, выпускаемые в настоящее время в ОАО «НИИ Гириконд» [1] на основе пленок твердых растворов селенида свинца и кадмия $Pb_{1-x}Cd_xSe$ ($x = 0,0 - 0,2$), созданных на стеклянных подложках. В процессе изготовления источников излучения применяются, в частности, высокотемпературный отжиг пленок в кислородсодержащей среде и обработка созданных структур в парах йода. Изготовленные таким образом структуры представляют собой гетерогенные системы, поверхность которых покрыта «стекловидной фазой», в составе которой обнаружен селенит свинца $PbSeO_3$ и соединения йода [2]. Эти обстоятельства существенно осложняют исследование физических процессов, обуславливающих достаточно высокую эффективность излучателей, и

затрудняют поиски путей улучшения их эксплуатационных характеристик. Поэтому представлялось целесообразным выполнить комплексное исследование морфологии и физических свойств структур, изготавливаемых в ОАО «НИИ Гириконд» на всех стадиях их формирования.

В качестве основных методов исследования было избрано изучение спектров оптического поглощения и фотолюминесценции, в качестве дополнительных — измерения коэффициента Холла, фотопроводимости, морфологии пленок и параметра решетки полупроводниковых материалов.

Объектами исследования служили пленки, сформированные на различных подложках. Все исследования, результаты которых представлены в настоящей работе, выполнены при комнатной температуре.

Свойства пленок, выращенных на ориентирующих подложках

Прежде чем приступить к исследованию пленок на стеклянных подложках, используемых при создании источников излучения, представлялось целесообразным изучить свойства пленок $Pb_{1-x}Cd_xSe$, $x = (0,0 - 0,2)$, созданных на ориентирующих подложках из фтористого кальция CaF_2 , выколотых по плоскости спайности (111). Для него значения температурного коэффициента линейного расширения α_T близки к величинам α_T для $PbSe$ (при $T = 300$ К в $PbSe$

$\alpha_T = 1,948 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, а в $\text{CaF}_2 - 1,838 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$). Пленки формировались в открытом вакууме из кварцевого испарителя с косвенным нагревом и представляли собой поликристаллические структуры с размерами отдельных кристаллитов, не превышающими 0,2 мкм. Шихтой для напыления всех исследованных в настоящей работе пленок служили синтезированные нами материалы с избытком селена.

Наибольшее внимание было уделено исследованию пленок, изготовленных из селенида свинца (причины этого изложены далее). Эти пленки обладали проводимостью p -типа, величина холловской концентрации дырок в них (p_H) составляла примерно $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (следует учитывать существование в p - PbSe температурной зависимости холловского коэффициента [3], поэтому действительная величина концентрации дырок должна быть выше p_H , измеренной при комнатной температуре), а величина параметра решетки, определенная при помощи дифрактометра «Дрон-2.0» по дифракционной линии (600), составляла $a_0 = (6,128 \pm 0,001) \text{ \AA}$. Поскольку в этих пленках не были обнаружены ни фотопроводимость, ни фотолюминесценция, основным методом исследования их свойств стало изучение спектров оптического поглощения.

Для определения коэффициента оптического поглощения α в исследуемых пленках были измерены спектры коэффициентов отражения и прозрачности при помощи Фурье-спектрометра ФСМ 1201. Расчет оптических констант пленок (показателя преломления n и коэффициента экстинкции $k = \alpha\lambda/4\pi$) был произведен по методике, изложенной в работе [4]. Полученные при этом спектральные зависимости коэффициента поглощения α в изучаемых пленках представлены на рис. 1 в координатах $(\alpha^{1/2}, h\nu)$ и $(\alpha^2, h\nu)$, обычно применяемых при анализе спектров $\alpha(h\nu)$ в халькогенидах свинца. На этом же рисунке представлены данные Скэнлона для селенида свинца, взятые из работы [5].

Видно, что край собственного поглощения в изученных твердых растворах $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ смещается в коротковолновую область спектра по мере увеличения содержания в них кадмия вплоть до $x = 0,1$. Это свидетельствует об увеличении в них ширины запрещенной зоны E_g при возрастании параметра x . Обращает на себя внимание также, что за-

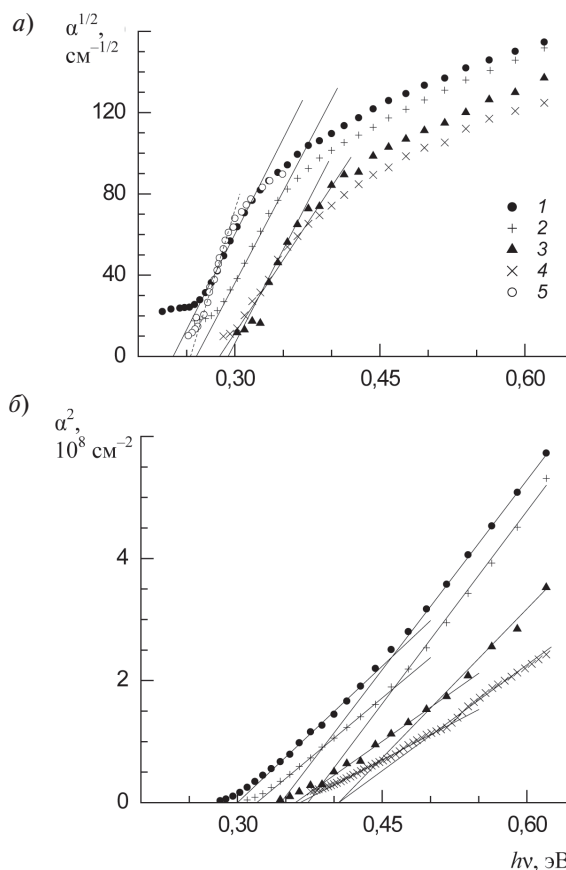


Рис. 1. Спектральные зависимости коэффициента оптического поглощения α в пленке $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ при $T = 300 \text{ K}$, построенные в координатах для непрямых (а) и прямых (б) межзонных оптических переходов. Значения x : 0 (1, 5); 0,04 (2); 0,1 (3); 0,2 (4). 1 – 4 – наши данные, 5 – данные Скэнлона [5]

висимости $\alpha(h\nu)$ в $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ спрямляются как в координатах $(\alpha^{1/2}, h\nu)$, так и $(\alpha^2, h\nu)$. При этом в коротковолновой области спектра (рис. 1, а), экспериментальные точки, построенные в координатах $(\alpha^{1/2}, h\nu)$, оказываются расположенными ниже прямых, экстраполирующих зависимости $\alpha^{1/2}(h\nu)$ в область высоких энергий квантов света. Ранее подобный эффект был обнаружен Скэнлоном при исследовании спектров $\alpha(h\nu)$ во всех трех халькогенидах свинца [5]. Согласно его данным, разница в энергиях между порогами прямых и непрямых межзонных переходов составляет 30 мэВ в PbTe и PbSe и 40 мэВ в PbS . Однако халькогениды свинца прямозонны. Это также было впервые установлено Скэнлоном, который обнаружил, что при $\alpha \geq 3000 \text{ см}^{-1}$ экспериментальные точки спрямляются в координатах $(\alpha^2, h\nu)$ для прямых раз-



решенных переходов (впоследствии это было подтверждено расчетами зонных спектров халькогенидов свинца; см., например, работу [5]). Для того, чтобы объяснить полученные данные, Скэнлон предположил, что в прямозонных полупроводниках не прямые межзонные переходы при $h\nu < E_g$ могут происходить с поглощением длинноволнового оптического фонона. Однако в рамках подобного предположения остается непонятным, почему скорость возрастания значений α в области не прямых переходов оказывается намного большей, чем в области прямых, тогда как хорошо известно, что вероятность реализации трехчастичных процессов (квант света + электрон + фонон) должна быть на порядки ниже, чем двухчастичных (квант света + электрон). Неясно также, каким образом могут реализовываться подобные переходы в селениде и теллуриде свинца, в которых энергии продольных оптических фононов составляют $(16,5 \pm 0,6)$ и $(13,6 \pm 0,4)$ мэВ соответственно.

Впоследствии были получены и другие экспериментальные результаты, не укладывающиеся в рамки предложенного Скэнлоном объяснения. Так, при исследовании теллурида свинца [6] было обнаружено, что значения коэффициента поглощения в области так называемых «не прямых переходов» и величины отсечек прямых $\alpha^{1/2}(h\nu)$ на оси абсцисс, определенные при исследовании различных образцов, варьируются в широких пределах, а частотные зависимости $\alpha(h\nu)$ в рассматриваемой спектральной области спрямляются также и в координатах $(\ln \alpha, h\nu)$. Учитывая изложенное выше, а также экспериментальные факты и аргументы, приведенные в работе [7], можно предполагать, что рассматриваемые участки спектральных зависимостей α связаны с «хвостами» плотности локализованных состояний, простирающимися в глубь запрещенной зоны. Отметим, что спрямление экспериментальных зависимостей коэффициента оптического поглощения в координатах для не прямых разрешенных переходов $\alpha^{1/2}, h\nu$ в прямозонных полупроводниках неоднократно наблюдалось и ранее [8], и поэтому может рассматриваться в качестве характерного признака, свидетельствующего о существовании в них «хвостов» плотности локализованных состояний, расположенных в запрещенной зоне.

Данные настоящей работы, полученные в системе твердых растворов $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ согла-

суются с этим предположением и могут рассматриваться в качестве его дополнительного экспериментального обоснования. В частности, видно (рис. 1,а), что в PbSe/CaF_2 отсечка прямой $\alpha^{1/2}(h\nu)$ на оси абсцисс расположена при более низких значениях энергий квантов света, чем в образце, исследованном Скэнлоном (0,26 эВ).

Из всего вышеизложенного следует, что при анализе спектров коэффициента поглощения в халькогенидах свинца и твердых растворах на его основе, выполняемом с целью определения ширины запрещенной зоны E_g и типа оптических переходов на пороге межзонного поглощения, должны рассматриваться именно те участки экспериментальных спектров, которые неаддитивны к экстраполяционным прямым $\alpha^{1/2}(h\nu)$. Учитывая это, на основании данных, представленных на рис. 1,б, можно заключить, что все исследованные в настоящей работе твердые растворы $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ прямозонны.

Однако в спектрах $\alpha^2(h\nu)$, представленных на рис. 1,б, наблюдаются особенности, которые свидетельствуют о сложности физических процессов, протекающих при формировании пленок. Особенно наглядно они проявляются в селениде свинца, монокристаллические образцы которого, обладающие невырожденным газом свободных носителей заряда, были подробно исследованы ранее [9].

Прежде всего следует отметить, что край собственного поглощения в исследованной пленке PbSe/CaF_2 расположен при более низких энергиях квантов света, нежели это должно быть в образце с концентрацией дырок $p_H = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Действительно, в случае реализации прямых межзонных переходов в легированных халькогенидах свинца, в которых эффективные массы электронов и дырок близки, определяется значение ширины запрещенной зоны E_g^N , отличающееся от ее значения E_g^0 в образце с невырожденным газом свободных носителей заряда на удвоенную величину химического потенциала μ ($E_g^N = E_g^0 + 2\mu$). Оценка величины μ была выполнена в рамках кейновской модели непараболичности согласно выражению

$$p_H = \frac{8\pi}{3h^3} (2m_{d0}kT)^{3/2} L_0^{3/2}(\mu^*, \beta^*), \quad (1)$$

в котором ${}^n L_k^m$ — обобщенный интеграл Ферми [5], m_{d0} — эффективная масса плотности со-

стояний в потолке валентной зоны, $\mu^* = \mu/kT$, $\beta^* = kT/E_g$. При этом были использованы параметры валентной зоны PbSe, приведенные в работе [5]. Оказалось, что в пленке PbSe/CaF₂ значение $\mu = 0,03$ эВ, следовательно, величина E_g^N должна быть равна 0,35 эВ. Это заметно превышает величину отсечки зависимости $\alpha^2(h\nu)$ на оси абсцисс (0,3 эВ). Отмеченное расхождение в величинах E_g^N , полученных в эксперименте (см. рис. 1,б) и при помощи расчета, позволяет заключить, что существенную роль в исследованной пленке играет обменное взаимодействие свободных дырок, приводящее к сужению запрещенной зоны PbSe. Этот эффект применительно к многодолинным полупроводникам был рассмотрен в работе [10]. Ее автором было показано, что в сильно легированных материалах с многодолинной структурой зон ширина запрещенной зоны за счет обменного взаимодействия свободных носителей заряда взаимодействия уменьшается. При этом поправка к величине E_g равна:

$$\Delta E_g = -2(3/\pi)^{1/3} \frac{e^2 p^{1/3}}{\varepsilon} \frac{(\gamma M)^{2/3}}{\sqrt{\gamma(1-\gamma)}} \arctg \frac{\sqrt{1-\gamma}}{\sqrt{\gamma}}, \quad (2)$$

где p – концентрация свободных дырок; $\gamma = m_t/m_l$ – величина отношения поперечной (m_t) и продольной (m_l) компонент тензора эффективных масс; M – число эквивалентных долин, в PbSe равное четырем; ε – диэлектрическая проницаемость, в качестве которой в селениде свинца, как это было показано в работе [11], следует использовать высокочастотную диэлектрическую проницаемость ε_∞ .

Отметим, что формула (2) получена в приближении $\mu/kT \gg 1$, поэтому в материалах с промежуточной степенью вырождения газа свободных носителей заряда расчет, на ней основанный, может дать лишь приближенную оценку величины ΔE_g . Тем не менее, даже такой расчет показывает, что в исследованной пленке PbSe/CaF₂ влияние обменного взаимодействия свободных дырок может быть велико (сужение запрещенной зоны в ней, оцененное по формуле (2), составляет 37 мэВ).

Вторая особенность, наблюдаемая в спектрах оптического поглощения, представленных на рис. 1,б, состоит в появлении излома на зависимостях $\alpha^2(h\nu)$, представляющих собой совокупность двух прямолинейных участков. Эта

особенность спектров оптического поглощения свидетельствует о том, что исследованные пленки растянуты в плоскости подложки вследствие различий в коэффициентах линейного теплового расширения α_T материалов пленок и подложки.

Влияние одноосных деформаций на параметры энергетического спектра халькогенидов свинца было подробно изучено авторами [12, 13] при исследовании квантовых осцилляций в пленках Pb_{1-x}Sn_xTe, выращенных на подложках из фтористого бария, выколотых по плоскости (111). Было установлено, что за счет растяжения пленок в плоскости подложки происходит снятие многодолинного вырождения зон (рис. 2). Поскольку направление [111] является выделенным (вдоль него пленки сжимаются), один из экстремумов зоны проводимости, а именно [111], смещается в шкале энергий вниз на величину

$$\Delta E_1 = (\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u) \text{Spur } \varepsilon + \frac{2}{3}\Xi_u (\varepsilon_{[111]} - \varepsilon_{[110]}), \quad (3)$$

а три остальных – поднимаются. Их энергия возрастает на величину ΔE_2 , определяемую выражением

$$\Delta E_2 = (\Xi_d + \frac{1}{3}\Xi_u) \text{Spur } \varepsilon - \frac{2}{9}\Xi_u (\varepsilon_{[111]} - \varepsilon_{[110]}). \quad (4)$$

В формулах (3), (4) использованы обозначения: Ξ_d, Ξ_u – константы деформационного потенциала; $\varepsilon_{[111]}, \varepsilon_{[110]}$ – деформации вдоль

направлений $[111]$ и $[110]$ соответственно; $\text{Spur } \varepsilon$ – изменение объема при деформации.

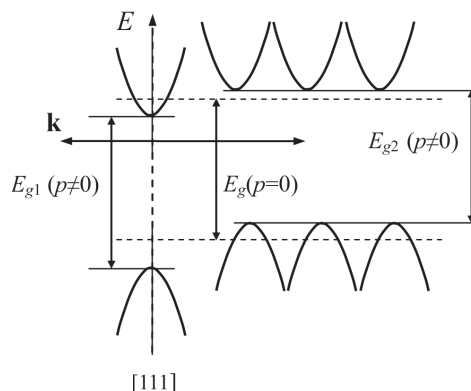


Рис. 2. Зонная схема пленок Pb_{1-x}Sn_xTe/BaF₂, растянутых в плоскости (111), по данным работ [12, 13]; E_{g1}, E_{g2} – пороги прямых межзонных переходов; p – давление



Соответствующие долины валентной зоны смещаются в результате деформации в тех же направлениях. Однако вследствие существенного различия в величинах сдвиговых констант деформационного потенциала для валентной зоны Ξ_{uv} и зоны проводимости Ξ_{uc} (в частности, в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ $\Xi_{uv} \approx 3\Xi_{uc}$) величины сдвигов ΔE_1 и ΔE_2 экстремумов в валентной зоне и зоне проводимости оказываются разными, что и должно приводить к различию в величинах порогов прямых межзонных переходов E_{g1} и E_{g2} (см. рис. 2).

К сожалению, значения констант Ξ_d и Ξ_u в PbSe неизвестны. Это обстоятельство не позволяет с достаточной степенью точности оценить ширину запрещенной зоны в исследованных пленках $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{CaF}_2$, соответствующую недеформированному состоянию пленок. Можно только предполагать, что она находится в промежутке между коротковолновым E_{g1} и длинноволновым E_{g2} порогами прямых разрешенных переходов. Если учесть, что величины обоих порогов (E_{g1} и E_{g2}) возрастают при увеличении содержания кадмия в твердых растворах вплоть до $x = 0,1$ по закону, близкому

к линейному (рис. 3), а их параметр идентичности при этом уменьшается, то можно считать, что при помощи использованной в работе технологии возможно создание однофазных пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{CaF}_2$ с содержанием кадмия вплоть до 10 мол.% CdSe . Экспериментальные результаты, полученные при исследовании пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{CaF}_2$, свидетельствуют также о том, что в качестве материала для создания длинноволновых источников излучения должен использоваться селенид свинца, обладающий наименьшей среди исследованных твердых растворов шириной запрещенной зоны.

Композитные пленки на стеклянных подложках

Для изготовления светоизлучающих структур, как уже указывалось выше, используются пленки, приготовленные на стеклянных подложках. В исходном состоянии они обладают мелкокристаллической структурой с размерами отдельных кристаллитов 0,05–0,20 мкм и произвольной ориентацией отдельных зерен относительно плоскости подложки. Ни фотопроводимости, ни фотолюминесценции в них обнаружено не было.

Высокотемпературный отжиг пленок (при $T = 600\text{--}800\text{ K}$) радикально изменяет их структуру и свойства. Морфология отожженных пленок была изучена при помощи растрового электронного микроскопа после растворения диэлектрической фазы, покрывающей пленку, в трилоне Б (данный растворитель, как известно [14], не взаимодействует с селенидом свинца и, следовательно, никоим образом не влияет на характеристики полупроводникового материала). Оказалось, что в процессе отжига происходит рекристаллизация селенида свинца, а пленки приобретают фрактальную структуру (рис. 4,а), представляющую собой цепочки плотно прижатых друг к другу кристаллитов PbSe с размерами, достигающими 1 мкм, разделенные сквозными отверстиями, углубленными в подложку приблизительно на 0,2 мкм (отметим, что в составе диэлектрической фазы был обнаружен алаомзит PbSiO_3 , поэтому обнаруженные в подложке углубления позволяют считать, что источником кремния, необходимым для образования указанного соединения, служил материал подложек). В дальнейшем пленки, созданные на стеклянных подложках и прошедшие высокотемпературную обработку в кислородсодержащей среде, будут для краткости называться композитными.

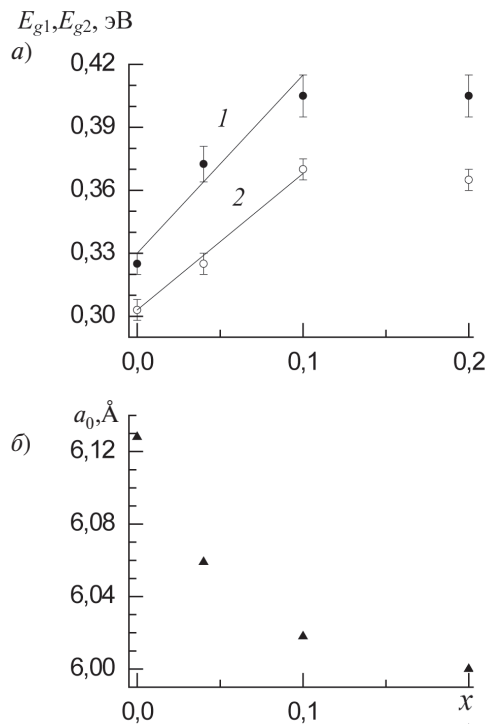


Рис. 3. Зависимости порогов прямых межзонных переходов E_{g1} (1), E_{g2} (2) (а) и параметра идентичности a_0 (б) в соединениях $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ от состава катионной подрешетки x

Основные характеристики исследованных пленок селенида свинца

Номер образца	Пленка		$p_H, 10^{18} \text{ см}^{-3}$	$a_0, \text{ \AA}$	E_g	μ
	Материал (подложка)	Обработка			эВ	
1	PbSe (CaF ₂)	—	5	$6,128 \pm 0,001$	$0,303 \pm 0,005 (E_{g2})$ $0,325 \pm 0,005 (E_{g1})$	0,03
2	Композит PbSe + PbSeO ₃ + PbSiO ₃ (Стекло)	—	1	$6,125 \pm 0,001$	$0,285 \pm 0,003$	$-0,003 \pm 0,015$
3		—	1		$0,284 \pm 0,003$	$-0,004 \pm 0,011$
4		В трилоне Б	—	—	$0,284 \pm 0,001$	$-0,002 \pm 0,012$
5		В парах йода	—	—	$0,294 \pm 0,003$	$-0,003 \pm 0,012$
6		В парах йода и трилоне Б	—	—	$0,283 \pm 0,003$	$0,009 \pm 0,005$

Обозначения: p_H — холловская концентрация дырок; μ — величина химического потенциала; E_g — ширина запрещенной зоны; E_{g1}, E_{g2} — пороги прямых межзонных переходов.

Примечание. Композитными называются пленки селенида свинца, созданные на стеклянных подложках и прошедшие высокотемпературную обработку в кислородсодержащей среде.

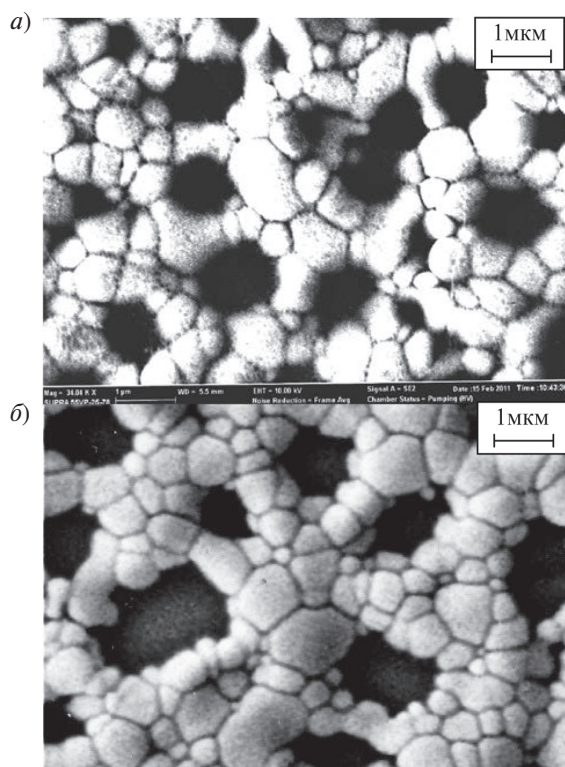


Рис. 4. Микрофотографии поверхности композитных пленок PbSe, приготовленных на стеклянных подложках, полученные в растровом электронном микроскопе до (а) и после (б) их обработки в парах йода. «Стекловидная фаза», покрывающая кристаллиты, была удалена в трилоне Б.

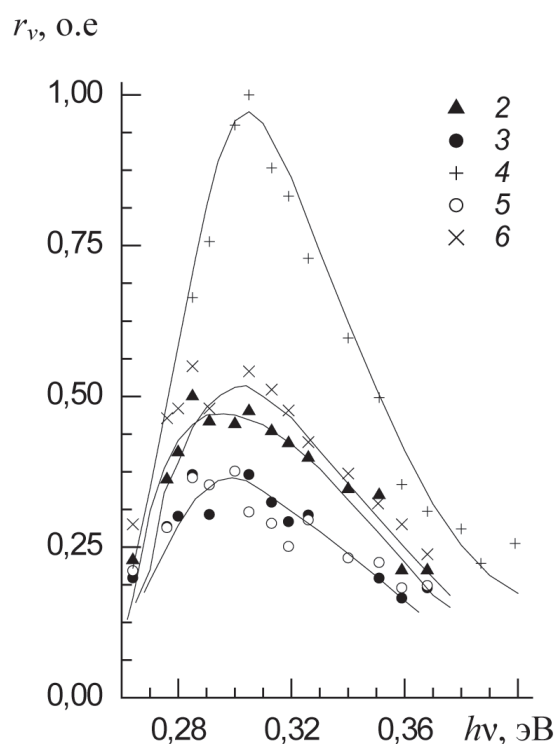


Рис. 5. Спектральные зависимости скорости спонтанной эмиссии r_v в композитных пленках PbSe, приготовленных на стеклянных подложках, полученные при комнатной температуре.

Номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице



Очевидно, что фрактальная структура композитных пленок полностью исключала возможность определения параметров энергетического спектра PbSe посредством исследования коэффициента оптического поглощения. Отметим, что неоднородным в подобных пленках должно быть и распределение элементного состава в пределах отдельных кристаллитов. На это указывают прямые экспериментальные исследования распределения элементов в пленках n -PbS, подвергнутых активационному отжигу в кислороде, выполненные авторами работы [15] методом Оже-анализа при непрерывном травлении поверхности пленок пучком ионов аргона Ar^+ . Оказалось, что в подобных пленках p — n -переход располагается на расстоянии $\sim 0,5$ мкм от их поверхности. Это может свидетельствовать о том, что кислород проникает в сульфид свинца на достаточно большую глубину. Очевидно, что подобное явление, но в меньшем масштабе, может иметь место и в композитных пленках селенида свинца (вследствие того, что значения коэффициентов диффузии примесей и собственных дефектов в PbSe на порядки ниже, чем в PbS). Однако и в этом случае неоднородность пленок по глубине может существенным образом осложнить интерпретацию экспериментальных данных, полученных при их изучении. Это связано с тем, что информация, извлекаемая при помощи исследования различных эффектов в пленках, может отражать свойства различных областей, расположенных даже в пределах отдельно взятого кристаллита.

После этих замечаний перейдем к рассмотрению экспериментальных данных, полученных в композитных пленках. Исследования показали, что величина холловской концентрации дырок в композитных пленках снижается до $p_H \approx 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, параметр идентичности a_0 уменьшается до $(6,125 \pm 0,001) \text{ \AA}$ (см. таблицу) и в них появляется фотолюминесценция (рис. 5, кривые 2, 3). Однако фотопроводимость в них по-прежнему отсутствует. Это свидетельствует об отсутствии в композитных пленках энергетических барьеров, обуславливающих пространственное разделение фотовозбужденных носителей заряда, а значит и появление фотопроводимости. Отсюда можно заключить, что композитная пленка в целом обладает проводимостью дырочного типа с неоднородным распределением дырок как по глубине, так и

по поверхности (последнее обстоятельство обусловлено существованием межкуристаллитных границ, сквозь которые также может диффундировать кислород). При этом спектры фотолюминесценции (ФЛ) должны отражать свойства областей с низкой концентрацией свободных дырок.

Характерной особенностью спектров ФЛ (см. рис. 5) является появление в них длинноволновых участков, расположенных при энергиях квантов света $h\nu$, существенно меньших ширины запрещенной зоны в селениде свинца. Это указывает на то, что спектры ФЛ композитных пленок формируются не только за счет оптических переходов электронов между зонными состояниями, но и за счет переходов электронов между распространяющимися и локализованными состояниями. Это могут быть те же самые состояния, которые ответственны за появление особенностей, наблюдавшихся в спектрах $\alpha(h\nu)$ пленок PbSe/CaF₂ вблизи края фундаментальной полосы, которые ассоциировались с «хвостами» плотности локализованных состояний. С целью проверки указанного предположения был выполнен расчет спектров ФЛ, при этом использовалось выражение, связывающее скорость спонтанной эмиссии r_v в прямозонных полупроводниках с коэффициентом поглощения α :

$$r_v = f_e f_h \frac{8\pi N^2 v^2 \alpha}{c^2}, \quad (5)$$

где f_e, f_h — фермиевские функции для электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне соответственно, N — коэффициент преломления полупроводника.

Использование выражения (5) позволяет рассчитать спектры ФЛ без каких-либо предположений относительно частотной зависимости функции плотности локализованных состояний. Подгоночными параметрами в расчете служили E_g , μ_n и μ_p , причем были учтены результаты, полученные в работе [16]; в ней было показано, что в твердых растворах $Pb_{1-x}Sn(Ge)_xSe$ ($x \leq 0,02$) незначительные вариации E_g (в пределах $\pm 0,02$ эВ), происходящие при изменении состава катионной подрешетки, не отражаются заметным образом на частотных зависимостях $\alpha(h\nu)$, вызывая лишь их смещение в шкале энергий относительно данных для селенида свинца. Этот вывод позволил исполь-

зовать в расчете зависимость $\alpha(h\nu)$, полученную в пленке PbSe/CaF_2 , перемещая ее в шкале энергий при вариациях параметра E_g параллельно самой себе. Помимо этого одно из значений химического потенциала в фермиевских функциях, а именно μ_n считалось постоянным и равным ($-0,05$) эВ. Такое допущение принято с учетом двух обстоятельств. Во-первых, концентрация неравновесных носителей заряда, возбуждаемых в исследованных пленках при помощи арсенид-галлиевого светодиода ($\delta n, \delta p \sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$), была существенно ниже равновесной концентрации дырок в исследованных пленках. Во-вторых, спектры ФЛ, как показали расчеты, не изменяются заметным образом в результате вариаций величин μ_n при условии, если $\mu_n \leq -0,04$ эВ. Таким образом, при выполнении расчетов использовалось только два подгоночных параметра: E_g и μ_p . При этом величину одного из них (ширину запрещенной зоны E_g) можно легко оценить из полученных экспериментальных данных — по положению максимумов в спектрах ФЛ ($h\nu_{\max}$), поскольку в невырожденных и слабо вырожденных образцах, как это следует из формулы (5), максимумы спектральных зависимостей $r_\nu(h\nu)$ смещены в коротковолновую область на 10 мэВ относительно E_g .

Результаты расчета зависимостей $r_\nu(h\nu)$ представлены линиями на рис. 5, а полученные с его помощью значения E_g и μ_p приведены в таблице. Величины погрешностей для найденных таким образом значений E_g и μ были определены посредством расчета спектров ФЛ после каждого измерения, принадлежащего в отдельности к данной серии, а полученные при этом результаты усреднены с использованием распределения Стьюдента с надежностью $s = 0,95$.

Следует отметить два обстоятельства. Первое (и наиболее важное) состоит в том, что при использовании спектра $\alpha(h\nu)$, полученного в поликристаллических пленках PbSe/CaF_2 , удастся достаточно точно описать частотные зависимости ФЛ во всех исследованных пленках, в том числе и в длинноволновой области спектра. Отсюда, учитывая данные, приведенные на рис. 1,б, можно заключить, что локализованные состояния, формирующие «хвосты» в запрещенной зоне, образуются уже на стадии синтеза материала и не претерпевают заметных изменений в процессе создания композитных пленок. И второе. Полученные при помощи расчета

значения E_g оказались ниже порога $E_{g2} = 0,3$ эВ, обнаруженного при анализе спектров оптического поглощения в пленках PbSe/CaF_2 . Это указывает на сжатие пленок под действием нарастающей вокруг них диэлектрической фазы, происходящее в процессе рекристаллизации селенида свинца. Об этом же свидетельствует и уменьшение параметра идентичности селенида свинца, находящегося в составе композитных пленок, по сравнению с его значением в пленках PbSe/CaF_2 .

В отличие от ширины запрещенной зоны, которая в композитных пленках может быть определена с достаточно большой точностью, для значений μ_p в них может быть получена только грубая оценка. Данные, приведенные в таблице, показывают, что в пределах экспериментальных ошибок величины μ_p не изменяются при переходе от пленки к пленке и находятся в пределах $-0,016 - +0,018$ эВ, что соответствует средней концентрации дырок в светоизлучающих областях, равной $(2,4 \pm 1,2) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, заметно более высокой, чем величина p_H . Однако этому различию не следует придавать слишком большого значения. С одной стороны, оно может быть связано с фрактальной структурой пленки и с существованием температурной зависимости холловского коэффициента в p - PbSe , скорость увеличения которого при повышении температуры возрастает по мере уменьшения концентрации дырок в материале [3]. Поэтому измеряемая при $T = 300$ К величина холловской концентрации дырок в композитных пленках может быть заметно ниже истинной (p). С другой стороны, оценка величины p при помощи формулы (1) с использованием параметров зонного спектра селенида свинца, взятых из работы [5], безусловно, груба. При этом не учитывается ни перестройка энергетического спектра этого соединения в условиях сжатия пленок, ни обменное взаимодействие свободных дырок. Оба названных эффекта должны приводить к смещению экстремума L_6^+ валентной зоны селенида свинца вверх в шкале энергий и к снижению, по причинам, изложенным в работе [11], эффективной массы плотности состояний в ее потолке. Поэтому оценка p , выполненная по формуле (1), дает *a priori* завышенную оценку концентрации дырок в композитных пленках. Однако степень влияния названных эффектов на параметры зонного



спектра селенида свинца в настоящее время невозможно оценить, и не только из-за недостатка экспериментальных данных, полученных в композитных пленках (это не позволяет получить представление о характере изменения зонного спектра PbSe в условиях сжатия), но и из-за неприменимости выражения (2) для расчета поправок к ширине запрещенной зоны в невырожденных образцах. Важно как раз другое: и данные по эффекту Холла, и данные по фотолюминесценции свидетельствуют о снижении концентрации дырок в светоизлучающих областях композитных пленок по сравнению с ее величиной в исходных поликристаллических пленках. Это означает, что в композитных пленках селенида свинца существуют области с пониженной концентрацией дырок и именно они обуславливают появление в них фотолюминесценции. Энергетический спектр композитной пленки, отвечающий экспериментальным данным, представлен на рис. 6, а.

Рассмотрим теперь возможную причину, вызывающую понижение концентрации дырок в приповерхностных областях композитных пленок и в области межкристаллитных границ. Этот вопрос применительно к сульфиду свинца уже давно является предметом дискуссии

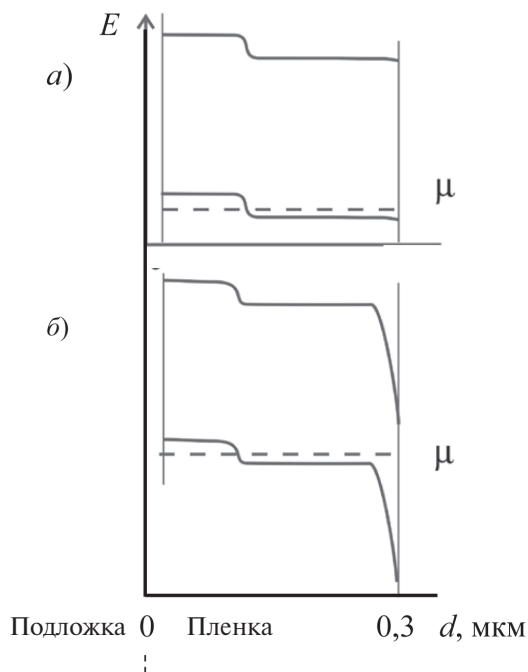


Рис. 6. Энергетические схемы селенида свинца, входящего в состав композитных пленок, до (а) и после (б) их обработки в парах йода (μ — химический потенциал, d — толщина пленки)

в литературе (см., например, работы [15, 17]). Считается, что в пленках сульфида свинца, отожженных на воздухе или в атмосфере кислорода, последний адсорбируется на их поверхности и в пределах межкристаллитных границ, где образует поверхностные акцепторные состояния; их появление обуславливает инверсию типа проводимости $n \rightarrow p$ в приграничных областях.

Очевидно, однако, что такая модель не в состоянии объяснить причину снижения концентрации дырок в люминесцирующих областях композитных пленок. Кроме того, трудно представить, каким образом кислород создает поверхностные состояния в композитных пленках, поскольку процесс их легирования протекает в условиях рекристаллизации селенида свинца и поэтому должен быть объемным. Для того чтобы доказать, что легирование композитных пленок кислородом представляет собой объемный эффект, было выполнено растворение диэлектрической фазы пленок в трилоне Б. Оказалось, что отсутствие диэлектрической фазы не снижает интенсивности фотолюминесцентного излучения и не влияет на частотную зависимость r_v (см. рис. 5, кривые 3, 5). Это означает, что легирование композитных пленок в процессе высокотемпературной обработки в кислородсодержащей среде действительно представляет собой объемный эффект.

Для того чтобы объяснить этот результат, следует обратиться к данным, полученным авторами работы [18], в которой были исследованы особенности энергетического спектра и свойств монокристаллического и прессованного n -PbSe, легированного кислородом методом ионной имплантации в сочетании с постимплантационным отжигом образцов в вакууме. Было установлено, что в приповерхностных, имплантированных слоях исследованных образцов также происходит инверсия типа проводимости от электронного к дырочному, при этом концентрация дырок в имплантированной области, толщина которой превышала 0,5 мкм, составляет $(1 - 2) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Имплантация ионов кислорода приводила также к изменениям в энергетическом спектре селенида свинца. В глубине валентной зоны имплантированного селенида свинца авторами работы [18] были выявлены два квазилокальных уровня, расположенные на расстояниях 0,14 и 0,20 эВ, связанные с примесью кислорода и вакансия-

ми селена, соответственно. Совокупность полученных результатов позволила авторам [18] предположить, что причиной появления низких концентраций дырок в отожженном PbSe : O⁺ является компенсация акцепторного действия кислорода анионными вакансиями, которые, как известно [5], обладают в халькогенидах свинца донорным действием.

Аналогичные процессы могут иметь место и в композитных пленках селенида свинца. В процессе рекристаллизации в них могут удерживаться лишь такие собственные дефекты, которые компенсируют акцепторное действие кислорода, захватываемого пленкой селенида свинца, а именно — вакансии селена, способствуя тем самым понижению полной энергии кристалла.

Композитные пленки селенида свинца, обработанные в парах йода

Отжиг композитных пленок в парах йода составляет этап технологии изготовления излучателей; он сопровождается дальнейшим изменением морфологии пленок и их свойств. Исследования, выполненные при помощи растрового электронного микроскопа, показали, что размеры большинства кристаллитов уменьшаются, а площадь пор, разделяющих цепочки, образованные отдельными кристаллитами, возрастает (см. рис. 4, б). Изменяются и свойства композитных пленок, отожженных в парах йода: в них вдвое возрастает интенсивность люминесцентного излучения (см. рис. 5, кривая 4) и (что самое главное) появляется фотопроводимость. Это свидетельствует о том, что в процессе отжига композитных пленок в парах йода в их приповерхностном слое происходит инверсия типа проводимости от дырочного к электронному, в результате чего в кристаллитах возникают рекомбинационные барьеры, обуславливающие пространственное разделение фотовозбужденных носителей заряда, и как следствие этого, увеличение времени их жизни (см. рис. 6, б). Кроме того, в них образуются области, обедненные основными носителями заряда. Ввиду этого снижается концентрация дырок в светоизлучающих областях, расположенных в пределах отдельных кристаллитов, что сопровождается уменьшением вклада Оже-рекомбинации и в итоге возрастанием интенсивности люминесцентного излучения.

Как известно [5], примесь йода в халькогенидах свинца является донором и с ее помощью удастся получать материалы с высокими концентрациями свободных электронов, достигающими $3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Однако это вовсе не означает, что эффект легирования, наблюдаемый в композитных пленках, отожженных в парах йода, должен быть объемным, поскольку время их отжига в парах йода невелико и составляет единицы секунд. И действительно, удаление диэлектрической фазы в трилоне Б показало, что интенсивность люминесцентного излучения при этом возвращается к своему исходному значению, определенному до отжига пленок в парах йода (см. рис. 5, кривые б и 2). Это свидетельствует о том, что инверсия типа проводимости $p \rightarrow n$ в приповерхностном слое селенида свинца, входящего в состав композитных пленок, обусловлена донорными поверхностными состояниями, возникающими в нем в процессе отжига пленок в парах йода.

Таким образом, в результате выполненной работы установлено, что в твердых растворах Pb_{1-x}Cd_xSe ширина запрещенной зоны возрастает при увеличении содержания кадмия, поэтому для создания источников излучения, работоспособных в области длин волн $\lambda > 4 \text{ мкм}$ должен использоваться селенид свинца.

Показано, что высокотемпературная обработка пленок PbSe, выращенных на стекле, в кислородсодержащей среде приводит к образованию композита, состоящего из пленки селенида свинца, имеющей фрактальное строение и представляющей собой цепочки плотно прижатых друг к другу кристаллитов, разделенных сквозными порами, углубленными в подложку, и диэлектрической фазы, покрывающей всю поверхность пленки селенида свинца и углубляющейся в подложку сквозь поры.

Установлено, что процесс создания композитных пленок сопровождается уменьшением концентрации свободных дырок вблизи поверхности кристаллитов селенида свинца и межкристаллитных границ, вследствие чего в них появляется фотолюминесценция. Показано, что эффект легирования приграничных слоев кристаллитов является объемным.

Установлено, что при отжиге композитных пленок в парах йода в них возникает фотопроводимость и резко возрастает интенсивность



люминесцентного излучения. Показано, что эти эффекты могут быть связаны с инверсией типа проводимости $p \rightarrow n$ в приповерхностных слоях отдельных кристаллитов селенида свинца

в процессе отжига благодаря возникновению там поверхностных локализованных состояний, обладающих в селениде свинца донорным действием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тропин, А.Н. Полупроводниковые источники излучения для инфракрасной области спектра [Текст] / А.Н. Тропин, Н.Э. Тропина // Компоненты и технологии. — 2008. — № 11. — С. 152 — 153.
2. Пат. 2261502 Российская Федерация, МПК⁷ H 01 L 33/00, H 01 L 31/12. Фотолюминесцентный излучатель, полупроводниковый фотоэлемент и оптрон на их основе [Текст] / Горбунов Н.И., Варфоломеев С.П., Дийков Л.К., Марахонов В.М. Медведев Ф.К.; заявитель и патентообладатель ОАО НИИ ГИРИКОНД. — № 2004104374/28; заявл. 05.02.04; опубл. 07.09.05, Бюл. № 27. — 19 с.: ил.
3. Andreev, A.A. The band edge structure of the IV-VI semiconductors [Text] / A.A. Andreev // Journal de Physique. — 1969. — Vol. 29. Suppl. au n° 11-12. — P. C. 4-50 — C. 4-61.
4. Раков, А.В. Спектрофотометрия тонкопленочных полупроводниковых структур [Текст] / А.В. Раков. — М.: Сов. Радио, 1975. — 176 с.
5. Равич, Ю.И. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS [Текст] / Ю.И. Равич, Б.А. Ефимов, И.А. Смирнов. — М.: Наука, 1968. — 383 с.
6. Вейс, А.Н. Энергетический спектр $\text{PbTe} < \text{Zn}^{2+} >$ по данным оптического поглощения [Текст] / А.Н. Вейс, А.Ю. Рыданов, Н.А. Суворова // ФТП. — 1993. — Т. 27. — Вып. 4. — С. 701 — 707.
7. Вейс, А.Н. Исследование коэффициента поглощения в твердых растворах на основе теллурида висмута вблизи края фундаментальной полосы [Текст] / А.Н. Вейс, В.А. Кутасов, Л.Н. Лукьянова // Докл. XII Межгосударственного семинара «Термоэлектрики и их применения». СПб.: Изд-во РАН, 2010. — С. 127—132.
8. Бонч-Бруевич, В.Л. Электронная теория неупорядоченных полупроводников [Текст] / В.Л. Бонч-Бруевич, Н.П. Звягин, Р. Кайпер [и др.]. — М.: Наука, 1981. — 384 с.
9. Вейс, А.Н. Изменение типа оптических переходов на пороге межзонного поглощения в сильно легированном PbSe [Текст] / А.Н. Вейс // Матер. XII Всеросс. конф. «Фундаментальные исследования и инновации в технических университетах». СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. — С. 81—82.
10. Бонч-Бруевич, В.Л. Вопросы электронной теории сильно легированных полупроводников [Текст] / В.Л. Бонч-Бруевич // В сб.: Итоги науки. Физика твердого тела. — М.: ВИНТИ, 1965. — С. 127—224.
11. Вейс, А.Н. Влияние обменного взаимодействия электронов на параметры зонной структуры и примесных состояний в селениде свинца [Текст] / А.Н. Вейс // ФТП. — 1991. — Т. 25. — Вып. 11. — С. 1934 — 1940.
12. Гейман, К.И. Аномальные электрические свойства слоев $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ с примесью индия [Текст] / К.И. Гейман, И.А. Драбкин, А.В. Матвеев [и др.] // ФТП. — 1977. — Т. 11. — Вып. 5. — С. 846 — 854.
13. Шамшур, Д.В. Зонная структура гетероэпитаксиальных слоев PbTe n - и p -типа [Текст] / Д.В. Шамшур, Р.В. Парфеньев, Д.В. Машовец [и др.] // ФТП. — 1982. — Т. 16. — Вып. 7. — С. 1249 — 1255.
14. Медведев, Ф.К. Исследование свойств тонких пленок селенида свинца с целью разработки базовой групповой технологии изготовления фоторезисторов заданной топологии [Текст]: дисс. ... канд. техн. наук: защищена 21.12.1981, утв. 13.09.1982 / Медведев Федор Константинович. — Л.: НИИ «Гириконд», 1981. — 280 с. — Библиогр. : с. 257.
15. Ковалев, А.Н. Профиль распределения компонентов в приповерхностном слое поликристаллических пленок сульфида свинца [Текст] / А.Н. Ковалев, Ф.И. Маняхин, Ю.Н. Пархоменко, О.Д. Меньшиков // Поверхность. Физика, химия, механика. — 1987. — № 11. — С. 90 — 95.
16. Вейс, А.Н. Энергетический спектр вакансий халькогена в электронном селениде свинца по данным оптического поглощения [Текст] / А.Н. Вейс // ДАН СССР. — 1986. — Т. 289. — № 6. — С. 1355 — 1359.
17. Неустроев, Л.Н. К теории физических свойств фоточувствительных поликристаллических пленок типа PbS. Модель проводимости и эффект Холла [Текст] / Л.Н. Неустроев, В.В. Осипов // ФТП. — 1986. — Т. 20. — Вып. 1. — С. 59 — 65.
18. Вейс, А.Н. Энергетический спектр селенида свинца, имплантированного кислородом [Текст] / А.Н. Вейс, Н.А. Суворова // ФТП. — 1999. — Т. 33. — Вып. 10. — С. 1179 — 1182.

УДК 621.315.592

В.М. Зиминов, И.Б. Захарова

ВЫПРЯМЛЯЮЩИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Органические материалы вызывают большой интерес в микроэлектронике благодаря простоте и дешевизне их нанесения, так как для таких материалов возможно применение рулонной технологии (roll-to-roll), позволяющей «печатать» схемы с высокой скоростью. Одной из областей, получающей особое преимущество от сокращения стоимости квадратного метра элементов, является преобразование солнечной энергии, поскольку для создания солнечного элемента не требуется создания наноразмерных элементов.

Известно, что при поглощении некоторыми органическими веществами кванта света происходит образование связанного состояния электрона с дыркой – экситона Френкеля [1]. Для получения фотоэда такие экситоны необходимо искусственно разделять, причем эту функцию может выполнять гетерограница двух органических материалов [2]: донорного и акцепторного; а также молекулярный комплекс. Поскольку подвижность экситонов в органических полупроводниках мала, для их эффективного разделения была предложена структура взаимопроникающих донорных и акцепторных материалов, т. е. молекулярный объемный гетеропереход.

Было установлено, что фуллерен является сильным акцептором электронов и обладает *n*-типом проводимости [3]. К эффективным донорам электронов относятся полимеры с сопряженными связями, материалы из класса фталоцианинов и порфириновых комплексов с металлами (тетрафенилпорфирины меди, цинка или других металлов), а также неорганические полупроводники. Из неорганических полупроводников для образования композитов с фуллереном наиболее подходящими по ширине запрещенной зоны и температуре сублимации являются материалы A₂B₆. Поэтому контакты таких веществ с фуллереном представляют интерес для исследования как возможные материалы для создания эффективных солнечных элементов [4].

У органических полупроводников, в отличие от неорганических, существует целый ряд особенностей, которые значительно усложняют процесс создания элементов на их основе. Одна из них – это необходимость гораздо более точного контроля за температурами испарителя и подложки при вакуумном напылении органических веществ в связи с тем, что их молекулы распадаются при высоких температурах [5]. Другой важной особенностью, которую необходимо учитывать при использовании органических структур, является их быстрая деградация на воздухе под действием кислорода или паров воды, что приводит к сравнительно небольшому сроку службы таких устройств [6, 7]. Поэтому с целью увеличения долговечности органических солнечных элементов ведутся интенсивные исследования в области создания композитных органических-неорганических полупроводниковых структур [8, 9], к которым относятся исследуемые в данной статье композитные пленки фуллерен-сульфид кадмия (C₆₀-CdS).

Методика эксперимента

Пленки были получены методом термического испарения в вакууме смеси фуллерена C₆₀ (99,98 %) с тетрафенилпорфирином металла (MeTPP) или смеси фуллерена с сульфидом кадмия в квазизамкнутом объеме (КЗО) [10] на подложки стекло/оксид индия-олова (ITO) и кремния с ориентацией (111). Все они исследовались методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), оптической спектроскопии, а также были измерены вольтамперные характеристики (ВАХ) структур.

Отличие метода КЗО от напыления из точечного источника заключается в том, что процесс конденсации и реиспарения вещества у подложки происходит в квазиравновесном состоянии, при интенсивном взаимодействии паров осаждаемого вещества и образующихся кристаллов на поверхности подложки. Это приводит к образованию пленок высокой кристалличности и малой толщины без проколов.



К достоинствам этого метода также относятся большая однородность свойств пленок, полученных в результате одного процесса испарения, и хорошая воспроизводимость свойств пленок, полученных при разных процессах испарения, но в одинаковых технологических режимах. При этом время нанесения пленки данным методом не отличается от такового при использовании точечного источника и может быть успешно осуществлено при низком вакууме.

Значения температуры, при которых достигается одинаковое значение давления насыщенных паров, для исходных соединений отличаются не менее, чем на 100 °С и располагаются в такой возрастающей последовательности: порфирин — фуллерен — сульфид кадмия. Поэтому при одинаковой температуре испарителя скорость напыления сульфида кадмия из смеси CdS/C_{60} будет значительно ниже, чем скорость напыления фуллерена. При температуре 700 К испарение сульфида кадмия должно быть очень малым, тогда как скорость испарения фуллерена при такой температуре уже существенна. Аналогично, при температуре 600 К скорость испарения фуллерена мала, а порфиринов — достаточно высока. Таким образом, благодаря подбору температурного режима нанесения пленок можно получать образцы с различным распределением компонентов по толщине пленки, т. е. с градиентом состава.

Нанесение пленок на проводящую подложку оксида индия-олова позволило получать ВАХ пленок в «сэндвич»-геометрии. Для этой цели использовалась автоматизированная измерительная установка на постоянном токе с использованием пикоамперметра Keithley 6487. Контакты к образцам выполнялись в сэндвич-геометрии с использованием углеродной пасты SPI — на основе мелкодисперсного коллоидного графита в изопропанол. При этом контакты прикреплялись с помощью углеродной пасты сверху на органическую структуру и сбоку на проводящий прозрачный слой ИТО.

Экспериментальные результаты

В случае образцов, содержащих фуллерен и порфириновые комплексы с металлами, типичная ВАХ образца с наибольшим коэффициентом выпрямления, равным 4, приведена на рис. 1,а. Остальные образцы также имеют нелинейные характеристики, но полученные кривые

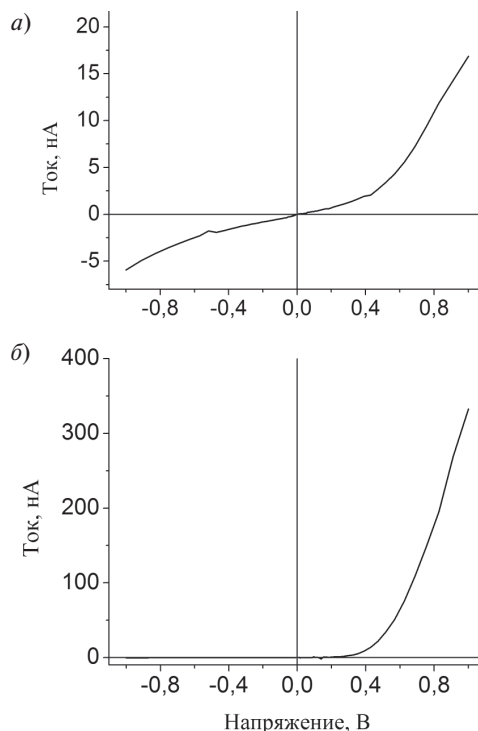


Рис. 1. Вольтамперные характеристики исследованных композитов фуллерена с CuTPP(а) и с CdS(б) с наибольшими коэффициентами выпрямления

симметричны относительно нуля, что указывает на отсутствие выпрямляющих свойств. Установлено, что ВАХ образцов, содержащих только порфириновую пленку (без фуллерена), имеют, как правило, симметричную форму кривых.

Вместе с тем, почти все образцы, полученные из смеси фуллерена и сульфида кадмия, проявляют несимметричный вид кривых. Наибольший коэффициент выпрямления (порядка 10^3 при напряжении 1 В) был достигнут в образце композита C_{60} -CdS (рис. 1,б).

Для всех образцов, содержащих порфириновые комплексы с металлами (CuTPP, ZnTPP и FeClTPP), морфология поверхности, полученная методом АСМ, демонстрирует сходные структуры и практически не зависит от наличия или отсутствия фуллерена. На рис. 2,а показана типичная топография пленки, полученной из смеси CuTPP и C_{60} . Следует отметить основные сходные особенности пленок порфиринов металлов:

значительный перепад высоты в топографии (вплоть до 1 мкм — толщины пленки);

порфириновые кристаллиты растут в виде вытянутых параллелепипедов (столбчатый облик), накладывающихся друг на друга;

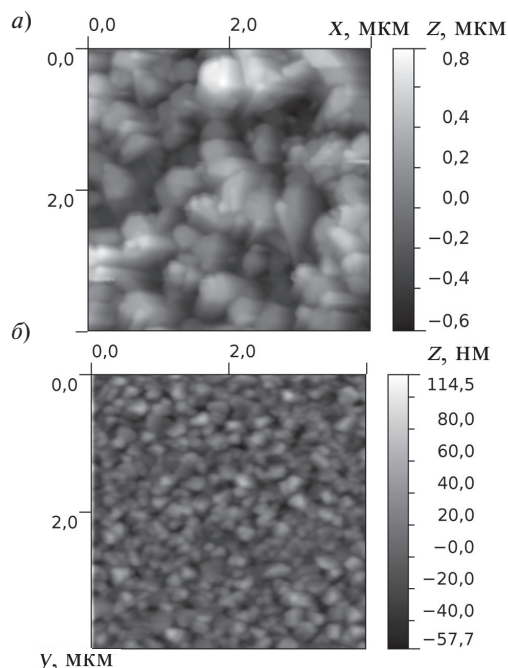


Рис. 2. Картины АСМ-топографии поверхности образцов композитов разного состава: *a* – C_{60} -CuTPP; *б* – C_{60} -CdS

добавление фуллерена практически не меняет структуру порфириновой пленки.

Пленки, содержащие фуллерен и сульфид кадмия, имеют выраженную поликристаллическую структуру. Их кристаллиты не имеют столбчатого облика, в отличие от порфирина. Поэтому перепад высоты в топографии таких пленок сравнительно мал (до 200 нм) и зависит от размеров поликристаллов. Типичная картина АСМ таких образцов представлена на рис. 2,б.

Для изучения временной стабильности характеристик были измерены ВАХ всех образцов через неделю выдержки на воздухе. Эти измерения показали, что коэффициент выпрямления остается неизменным, но значения токов снижаются на 1 – 2 порядка; это можно объяснить падением проводимости материала в результате интеркаляции кислорода в пленку. Таким образом, образцы сохраняют свои выпрямляющие свойства, но при этом частично теряют проводимость.

Анализ экспериментальных результатов

Органические тонкие пленки характеризуются относительно малоупорядоченными структурами, в которых вследствие молекуляр-

ного типа связи обычный зонный механизм протекания тока невозможен. В таких структурах расстояние между молекулами велико (порядка 1,4 нм) и происходит лишь слабое перекрытие «хвостов» волновых функций электронов, описывающих эти молекулы. Процесс «перескока» электрона с одной молекулы на другую по этим перекрытиям волновых функций рассматривается в рамках моделей прыжковой проводимости. Известно, что во многих случаях лучшим описанием прыжковой проводимости является модель Пула – Френкеля, хотя эта модель теоретически и не применима для органических полупроводников:

$$I = AU \exp(\sqrt{U}/t), \quad (1)$$

где I , U – ток и приложенное напряжение; A , t – подгоночные параметры.

Если принять A и t за некоторые константы аппроксимации экспериментальных данных, то можно допустить экспоненциальную зависимость проводимости от приложенного напряжения, причем оно входит в функцию экспоненты в виде квадратного корня от своей величины.

Другой возможный способ описания прыжковой проводимости при наличии анизотропии структуры и, следовательно, анизотропии электронных свойств – это механизм протекания тока через гетеропереход. Для анализа кривых нами использовался случай идеального гетероперехода с учетом только частичного падения напряжения на нем (механизм прыжковой проводимости обусловлен высоким сопротивлением и может конкурировать с сопротивлением гетероперехода):

$$I = A \left\{ \exp \left[\frac{Uf}{(1+f)kTn} \right] - \exp \left[\frac{-U}{(1+f)kTn} \right] \right\}, \quad (2)$$

где f определяет несимметричность гетероперехода, и изменяется от 0 до бесконечности, а n определяет долю падения напряжения на переходе.

В неидеальных случаях величина n должна изменяться с ростом напряжения как следствие нелинейности прыжковой проводимости, но в принятой нами упрощенной модели эти изменения не учитывались. С целью уменьшения количества параметров при аппроксимации кривых ВАХ величина n считалась постоянной.



Обработка полученных вольтамперных характеристик для всех порфириновых образцов, в том числе содержащего фуллерен и CuTPP (см. рис. 1,а), может быть успешно сделана с помощью модели прыжковой проводимости (1), которая хорошо описывает нелинейность ВАХ. Слабые выпрямительные свойства композитных пленок, содержащих порфирин и фуллерен, можно объяснить сильным перепадом высот кристаллитов и «рыхлостью» структуры порфириновой пленки (см. рис. 2,а), на которой в итоге изготовления не образуется поверхностного слоя чистого фуллерена. Проводимость при измерениях в сэндвич-геометрии таких пленок совершается по рыхлому слою порфирина, в пустотах которого находятся фуллереновые кристаллы, т. е. ток практически не протекает через гетеропереход.

В случае композитных пленок фуллерена с сульфидом кадмия аппроксимация ВАХ образцов может быть сделана как по механизму (1), так и по механизму (2) (в зависимости от выпрямительных свойств структуры). Для образцов с высоким коэффициентом выпрямления (10^3) (см. рис. 1,б) оптимальной является модель гетероперехода. Выпрямительные свойства таких пленок можно

объяснить гладким рельефом поверхности ниже лежащей фуллереновой пленки, на поверхности которой возможно образование непрерывного слоя сульфида кадмия (см. рис. 2,б). При измерении ВАХ указанных пленок ток протекает через гетерограницу между кристаллитами фуллерена и сульфида кадмия, откуда и возникают значительные выпрямляющие свойства образцов.

Таким образом, впервые показано, что в едином вакуумном цикле простым и эффективным методом КЗО возможно получение объемных композитных гетероструктур на основе C_{60} -CdS с коэффициентом выпрямления от 10 до 10^3 . В случае композитных структур C_{60} -MeTPP оказалось невозможным получить структуры с сильными выпрямляющими свойствами в связи с большим перепадом высот кристаллитов в порфириновых пленках.

При формировании объемного гетероперехода прямые и обратные ветви вольтамперных характеристик удастся удовлетворительно описать в рамках моделей прыжковой проводимости и гетероперехода. Относительный вклад каждой из этих моделей определяется составом и технологией получения образца.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Nelson, J.** Organic photovoltaic films [Text] / J. Nelson // Current Opinion in Solid State and Materials Science.— 2002.— Vol. 6. — № 1.— P. 87–95.
2. **Katz, E.A.** Nanostructured materials for solar energy conversion [Text] / E.A. Katz; ed. T. Soga.— Amsterdam: Elsevier, 2006.— 600 p.
3. **Dresselhaus, M.S.** Science of fullerenes and carbon nanotubes [Text] / M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund.— New York: Acad. Press, 1996.— 965 p.
4. **Yang, C.Y.** Morphology of composites of semiconducting polymers mixed with C_{60} [Text] / C.Y. Yang, A.J. Heeger // Synthetic Metals.— 1996.— Vol. 83. — № 2.— P. 85–88.
5. **Drechsel, J.** Deposition of functional organic thin layers by means of vacuum evaporation [Text] / J. Drechsel, H. Froeb // J. Vakuum in Forschung und Praxis.— 2008.— Vol. 20.— № 1.— P. 15–20.
6. **Konenkamp, R.** Carrier mobilities and influence of oxygen in C_{60} films [Text] / R. Konenkamp, G. Priebe, B. Pietzak // Physical Review B.— 1999.— Vol. 60.— № 16.— P. 11804–11808.
7. **Tapponnier, A.** Ultrapure C_{60} field-effect transistors and the effects of oxygen exposure [Text] / A. Tapponnier, I. Biaggio, P. Günter // Appl. Phys. Lett.— 2005.— Vol. 86.— № 11.— P. 112114–112117.
8. **Tsang, S.W.** Highly efficient cross-linked PbS nanocrystal/ C_{60} hybrid heterojunction photovoltaic cells [Text] / S.W. Tsang, H. Fu, R. Wang, [et al.] // Appl. Phys. Lett.— 2009.— Vol. 95.— № 18.— P. 183505–183508.
9. **Takeda, A.** Fabrication and characterization of inorganic-organic hybrid solar cells based on $CuInS_2$ [Text] / A. Takeda, T. Oku, A. Suzuki, [et al.] // Journal of the Ceramic Society of Japan.— 2009.— Vol. 117.— № 1369.— P. 967–969.
10. **Макарова, Т.Л.** Ориентированный рост бескислородных кристаллитов C_{60} на кремниевых подложках [Текст] / Т.Л. Макарова, И.Б. Захарова, Т.И. Зубкова, А.Я. Вуль // Физика твердого тела.— 1999.— Т. 41.— Вып. 2.— С. 178–183.

УДК 537.226

Е.В. Стукова, Е.Ю. Королева, Т.А. Трюхан, С.В. Барышников

ИЗМЕНЕНИЕ ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЫ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ КОМПОЗИТЕ $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$

В физике твердого тела значительное внимание уделяется исследованию длиннопериодических структур, к которым относятся магнитные структуры типа спиновых волн, волны плотности заряда в металлах, длиннопериодические фазы, возникающие при фазовых переходах (ФП). Если длина волны модуляции не кратна периоду решетки исходной высокосимметричной фазы, то имеет место несоразмерная фаза. Проблема изменения трансляционной симметрии при ФП впервые была рассмотрена Е.М. Лифшицем [1]. Применительно к сегнетоэлектрикам данная теория получила свое развитие в работах А.П. Леванюка и Д.Г. Санникова [2–4]. Существование несоразмерных фаз установлено в нескольких десятках сегнетоэлектрических кристаллов, и одно из таких веществ – нитрит натрия NaNO_2 [5, 6], для кристаллов которого исследовалось влияние дефектов [7, 8], примесей [9] и электрического поля [10] на переход в несоразмерную фазу. В работе [11] было показано, что для композитов на основе периодических структур свойства несоразмерной фазы будут зависеть от характеристик композита.

Композиты и нанокompозиты на основе сегнетоэлектриков в последнее время рассматриваются как перспективные материалы для электроники [12, 13]. В ряде работ [14, 15] было обнаружено, что для таких систем возможно взаимовлияние компонент на их свойства. Так, было показано, что для сегнетоэлектрических композитов $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaTiO}_3)_x$ и $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{KNbO}_3)_x$ [15] наблюдается расширение области существования сегнетофазы для нитрата калия.

В данной работе экспериментально исследуется влияние включений частиц BaTiO_3 на область существования несоразмерной фазы в образцах $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$ для двух значений x : 0,05 и 0,10.

Характеристика образцов и методика эксперимента

Нитрит натрия при комнатной температуре является сегнетоэлектриком со структурой, принадлежащей к объемно-центрированной ромбической группе. При $t_0 \approx 163^\circ\text{C}$ имеют место два близких фазовых перехода, выше которых кристаллическая структура неполярная и принадлежит к орторомбической системе. Особенность фазовых переходов в нитрите натрия заключается в том, что сегнетоэлектрическая упорядоченная фаза отделена от параэлектрической неупорядоченной фазы несоразмерной фазой, стабильной лишь в узком температурном интервале $1,0 - 1,5^\circ$ [5].

В кристаллах титаната бария наблюдается три фазовых перехода, сопровождающихся изменением структуры и свойств, которые относятся к переходам типа смещения. При температурах выше 120°C титанат бария имеет кубическую кристаллическую структуру типа перовскита. Эта параэлектрическая модификация относится к пространственной группе $Pm\bar{3}m$. Ниже 120°C (это температура Кюри для титаната бария) происходит фазовый переход, и вплоть до температуры 5°C титанат бария является сегнетоэлектриком с тетрагональной симметрией класса $P4mm$. При искажении формы ячейки скачком возникает спонтанная поляризация, величина которой плавно нарастает от $P_s = 18 \text{ мкКл/см}^2$ при точке Кюри до 26 мкКл/см^2 при комнатной температуре. Титанат бария имеет несколько равноправных направлений поляризации и является примером многоосного сегнетоэлектрика [6].

В ходе эксперимента исследовалось три вида образцов поликристаллического нитрита натрия с частицами титаната бария в разных концентрациях и различной степенью дисперсности (см. таблицу).

Составы исследованных композитов
 $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$

Номер образца	Содержание BaTiO_3 , x	Размер частиц, мкм
1	0,05	5 – 30
2	0,1	5 – 30
3	0,1	3 – 5

Порошки, взятые в соответствующих объемных процентах, тщательно перемешивались, и из приготовленной смеси под давлением 600 МПа прессовались образцы в виде таблеток диаметром 12 мм и толщиной около 1 мм.

Диэлектрические исследования проводились на широкополосном спектрометре Novocontrol BDS80 в диапазоне частот от 0,1 Гц до 10 МГц. Температурный интервал измерений составлял от 0 до 200 °С; амплитуда измерительного поля — 10 В/см; относительные погрешности измерения импеданса и емкости — около $3 \cdot 10^{-5}$. Измерения проводились в режиме нагрев-охлаждение, скорость изменения температуры составляла 1 град/мин. В качестве электродов использовалась серебряная паста. Для удаления адсорбированной воды образцы предварительно прогревались в течение 30 минут при температуре 120 °С.

Экспериментальные результаты

Как показали исследования, на температурной зависимости диэлектрической

проницаемости образца № 2 при нагреве присутствуют два максимума $\epsilon'(t)$: первый соответствует переходу из сегнетоэлектрической в несоразмерную фазу, второй — переходу из несоразмерной фазы в параэлектрическую (рис. 1). Температура перехода в параэлектрическую фазу практически не изменяется, по сравнению с чистым нитритом натрия, и соответствует 162 °С. Переход же в несоразмерную фазу при нагреве происходит при 146 °С, тогда как в чистом NaNO_2 — при 161 °С.

На рис. 2 представлены температурные зависимости диэлектрической проницаемости образца 2 на разных частотах. Видно, что наблюдается значительная низкочастотная дисперсия исследуемого композита.

Максимальное значение $\epsilon'(t)$ на частоте 0,1 Гц достигает $2 \cdot 10^6$, на частоте 10 Гц это значение уменьшается уже до $7 \cdot 10^4$. С ростом частоты аномалия размывается, и ее можно наблюдать до частот порядка $5 \cdot 10^4$ Гц, но на зависимости $\text{tg}\delta(t)$ эта аномалия заметна до частот порядка $5 \cdot 10^6$ Гц. При охлаждении максимум $\epsilon'(t)$ также размывается, но аномалия видна только до частот $2 \cdot 10^2$ Гц, тогда как на зависимости $\text{tg}\delta(t)$ — до частот порядка $5 \cdot 10^4$ Гц.

Из полученных экспериментальных данных следует, что температура перехода в несоразмерную фазу не зависит от процентного соотношения компонент в композите и от размеров частиц. На рис. 3 приведена температурная зависимость диэлектрической

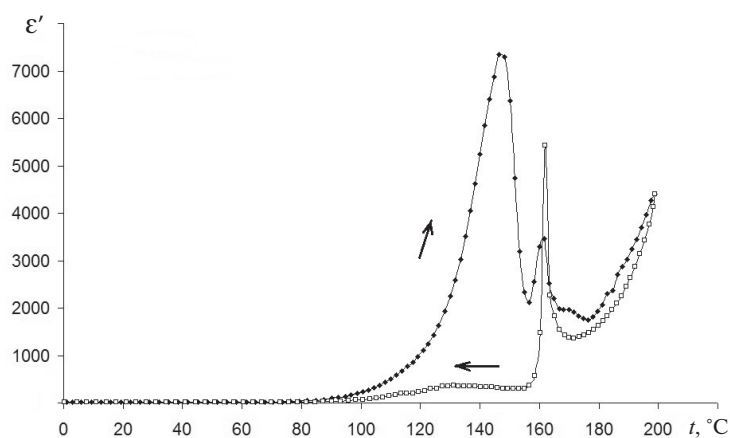


Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости композита $(\text{NaNO}_2)_{0.9}(\text{BaTiO}_3)_{0.1}$, полученные при нагревании и охлаждении, на измерительной частоте 10 Гц

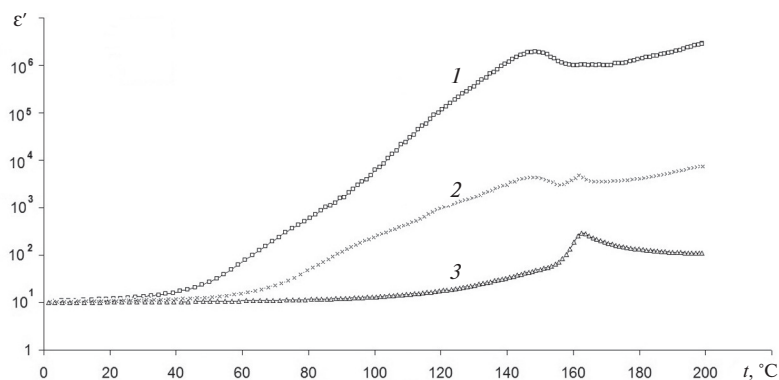


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости композита $(\text{NaNO}_2)_{0.9}(\text{BaTiO}_3)_{0.1}$ на разных частотах, Гц: 0,1 (1); 10 (2); 40000 (3)

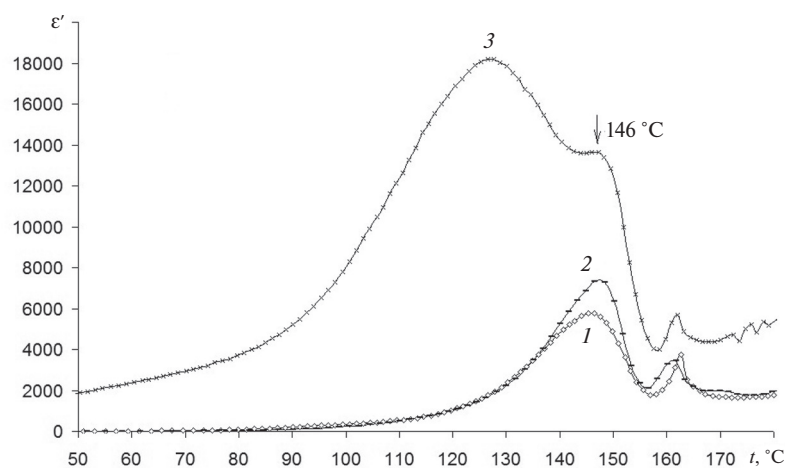


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости образцов разных составов на частоте 10 Гц (номера кривых соответствуют номерам образцов в таблице)

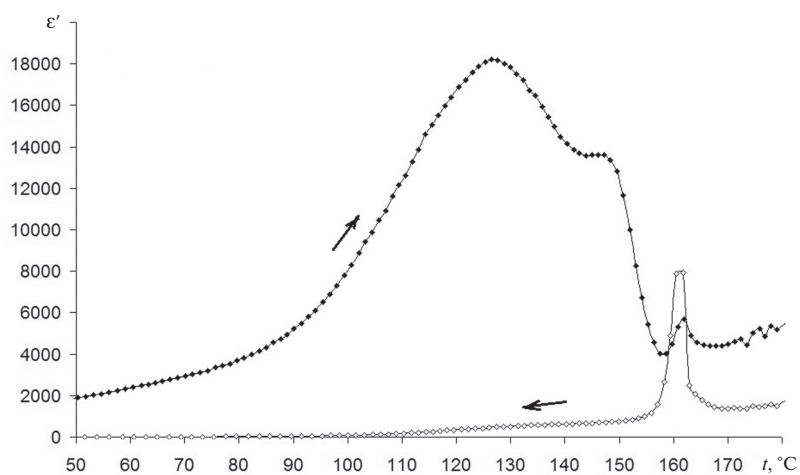


Рис. 4. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости образца 3 на частоте 10 Гц при нагреве и охлаждении



проницаемости для образцов разных составов и с разным размером частиц, из которого следует, что переход в несоразмерную фазу для всех образцов происходит при одной и той же температуре – 146 °С. Помимо этого, у образца 3, состоящего из поликристаллического нитрита натрия с частицами титаната бария размером 3 – 5 мкм, при $x = 0,10$ наблюдается дополнительный максимум диэлектрической проницаемости при 126 °С, соответствующий вкладу титаната бария.

Однако при охлаждении максимум диэлектрической проницаемости при 126 °С у образца 3 отсутствует (рис. 4)

Теоретическое обсуждение результатов

В феноменологической теории Ландау – Гинзбурга для описания сегнетоэлектриков с несоразмерной фазой [2 – 5, 16] используется неравновесный термодинамический потенциал вида

$$\Phi = \Phi_1[\eta_i(X_i)] + \Phi_2\left[\eta_i, \frac{\partial^n \eta_i}{\partial X_j^n}\right], \quad (1)$$

где Φ_1 имеет форму классического разложения Ландау по компонентам параметра порядка $\eta_i(X_j)$, а Φ_2 зависит от компонент и их производных по пространственным координатам X_j .

При этом главные особенности диаграммы $\Phi(X_j)$ определяются формой дисперсионной поверхности для жесткостей компонент параметра порядка в окрестности симметричной точки Лифшица $\mathbf{q}_c$ зоны Бриллюэна по одномерным представлениям точечной группы симметрии исходной фазы кристалла (для нитрита натрия – группы D_{2h}). При этом

$$\alpha(\mathbf{q}) = \alpha_0(T, y) + \sum_n \alpha_n(T, y)(\mathbf{q} - \mathbf{q}_c)^n, \quad (2)$$

где y – внешний параметр (давление, поле, состав смешанных кристаллов и т. п.).

При наличии однокомпонентного параметра порядка ($\eta \parallel X$) и одного направления модуляции ($\mathbf{q} \parallel Z$) плотность термодинамического потенциала (1) будет иметь вид [6, 19]:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{\delta}{2}\left(\frac{\partial \eta}{\partial Z}\right)^2 + \frac{g}{2}\left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial Z^2}\right)^2, \quad (3)$$

где $\alpha = \alpha_T(T - T_0)$; β, δ, g – константы, причем β и g – положительные.

В точке Лифшица с координатами T_L, y_L на фазовой диаграмме $T(y)$ [16] коэффициенты α и β одновременно равны нулю. В предположении линейной зависимости $\delta \sim (y_L - y)$ и $g = \text{const}$ в окрестности этой точки ожидается [17], что

$$q_0^2 \sim (y - y_L); \quad T_i - T_C \sim (y - y_L)^2, \quad (4)$$

где q_0 – волновой вектор модуляции, при котором происходит ФП в несоразмерную фазу; T_i – температура перехода в несоразмерную фазу.

Следовательно, область существования несоразмерной фазы должна зависеть от внешнего параметра y , который может характеризовать давление, электрическое поле, состав смешанных кристаллов и т. п.

Однако в случае композитов $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$ температура максимума $\epsilon'(t_c)$ почти не меняется от концентрации титаната бария, по крайней мере при переходе с $x = 0,05$ на $x = 0,10$, и не зависит от размера частиц, что не согласуется с данной теорией. Такое расхождение может указывать на то, что для NaNO_2 потенциал Гиббса при $t = 146^\circ\text{C}$ имеет некоторую особенность, отвечающую за фазовый переход соразмерная полярная – несоразмерная фаза. На это указывают и результаты, полученные в [18] для твердых растворов $\text{K}_x\text{Na}_{1-x}\text{NO}_2$, где для составов $x \leq 0,3$ на кривой $\epsilon'(t)$ наблюдалось два максимума, при этом $\Delta t = t_i - t_C$ достигала $16 - 17^\circ\text{C}$.

Для объяснения частотной зависимости диэлектрической проницаемости необходимо учитывать все поляризационные процессы, присутствующие в сегнетоэлектриках. На низких частотах вклад в диэлектрическую проницаемость дают следующие виды поляризации: доменная, ионная, за счет дефектов; в неоднородных системах существенный вклад может давать поляризация Максвелла – Вагнера. Суммарная поляризация P записывается в этом случае как

$$P = P_s(1 - s) + P_i + P_d + P_{\text{MW}} + \dots, \quad (5)$$

где $P_s(1 - s)$ – доменная поляризация; s – доля доменов, ориентированных против поля; P_i – ионная поляризация (обуславливает закон Кюри – Вейса); P_d – поляризация за счет дефектов и примесей; P_{MW} – поляризация Максвелла – Вагнера.

Каждый из перечисленных вкладов имеет свою величину, а также температурную и частотную зависимости. Соответственно выражение для диэлектрической проницаемости будет иметь вид

$$\varepsilon(t, \omega) = \varepsilon_1(t, \omega) + \varepsilon_2(t, \omega) + \varepsilon_3(t, \omega) + \varepsilon_4(t, \omega) + \dots, \quad (6)$$

где $\varepsilon_i(t, \omega)$ — вклады за счет спонтанной, ионной поляризации, вклад дефектов, вклад поляризации Максвелла — Вагнера и т. п.

На частотах 0,1 — 50 Гц основной вклад в диэлектрическую проницаемость дают доменная поляризация и поляризация Максвелла — Вагнера. С ростом частоты вклад этих механизмов быстро убывает, что приводит к низкочастотной дисперсии.

Присутствие аномалии $\varepsilon'(t)$ в районе 126 °С при нагреве и ее отсутствие при охлаждении можно объяснить тем, что при наличии хотя бы слабой проводимости установление спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических частицах титаната бария сопровождается накоплением компенсирующего заряда на границах. Заряд располагается либо на поверхностных уровнях, либо рассредоточивается в объеме частиц на донорных (акцепторных) уровнях, если плотность поверхностных уровней мала, с плотностью заряда, выражаемой, согласно [20], как

$$\rho = \text{div} \mathbf{D}. \quad (7)$$

Глубина проникновения характеризуется дебаевской длиной

$$l_D = \sqrt{\frac{\varepsilon k T}{8 \pi n e^2}}, \quad (8)$$

где n — плотность донорных уровней.

Вклад межслоевой поляризации в диэлектрическую проницаемость играет существенную

роль на частотах $f \leq 4\pi\sigma/\varepsilon$, где σ — удельная проводимость, ε — эффективная диэлектрическая проницаемость композита.

Величина вклада будет существенно зависеть от количества и размера частиц внедрения.

Межслоевая поляризация может возникать не только на границах зерен, но и на границе доменов. Если векторы поляризации соседних областей не параллельны, то ее не равный нулю скачок на границе между доменами порождает деполяризующие поля, которые в равновесном состоянии могут компенсироваться свободными зарядами на границе. Такая картина может объяснить и то, что при фазовом переходе из сегнетоэлектрической фазы в несоответствующую наблюдается большой скачок диэлектрической проницаемости, а при обратном переходе — малый.

Наличие только одного максимума на температурной зависимости диэлектрической проницаемости образца 3 при охлаждении может быть объяснено также тем, что нитрит натрия сразу переходит из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую, минуя несоответствующую. При этом частицы титаната бария переходят в сегнетоэлектрическое состояние вместе с нитритом натрия, так как титанат бария находится в поле частиц нитрита натрия, температура перехода которого в сегнетофазу выше.

Таким образом, в композитах, как и в твердых растворах, может происходить взаимовлияние компонент, приводящее к изменению свойств исходных сегнетоэлектриков. Механизм взаимодействия имеет электрическую природу, обусловленную, скорее всего, диполь-дипольным взаимодействием. Наибольший вклад в низкочастотную диэлектрическую проницаемость композита дает поляризация Максвелла — Вагнера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лифшиц, Е.М. К теории фазовых переходов второго рода [Текст] / Е.М. Лифшиц // ЖЭТФ. — 1941. — Т. 11. — № 2. — С. 255–268.
2. Леванюк, А.П. Теория фазовых переходов в сегнетоэлектриках с образованием сверхструктуры, не кратной исходному периоду [Текст] / А.П. Леванюк, Д.Г. Санников // ФТТ. — 1976. — Т. 18. — № 2. — С. 423–428.
3. Леванюк, А.П. Термодинамическая теория

- фазовых переходов с образованием несоответствующей сверхструктуры в сегнетоэлектриках NaNO_2 и $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ [Текст] / А.П. Леванюк, Д.Г. Санников // ФТТ. — 1976. — Т. 18. — № 7. — С. 1927–1932.

4. Санников, Д.Г. К термодинамической теории несоответствующих фазовых переходов в окрестности точки Лифшица на примере сегнетоэлектрика NaNO_2 [Текст] / Д.Г. Санников // ФТТ. — 1981. — Т. 23. — № 10. — С. 3140–3145.



5. **Смоленский, Г.А.** Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики [Текст] / Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов [и др.] — М.: Наука, 1971. — 476 с.
6. **Струков, Б.А.** Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах [Текст] / Б.А. Струков, А.П. Леванюк — М.: Наука, 1995. — 302 с.
7. **Yoon, J.-G.** Effects of defects on the incommensurate phase of sodium nitrite crystals [Текст] / J.-G. Yoon, S.-I. Kwun // Phys. Rev. B. — 1987. — Vol. 35. — P. 8591–8594.
8. **Choi, M.Y.** Domain-wall pinning in the incommensurate phase of sodium nitrite [Текст] / M.Y. Choi // Phys. Rev. B. — 1988. — Vol. 37. — P. 5874–5876.
9. **Tatsuzaki, I.** Dielectric behavior in incommensurate phase of NaNO_2 : Influence of NO_3 -impurities [Текст] / I. Tatsuzaki, H. Yamamoto, H. Yamashita, R. Kato // Ferroelectrics. — 1989. — Vol. 96. — Iss.1. — P. 59–62.
10. **Ahmed, S.A.** Electrical and thermal studies of NaNO_2 [Текст] / S. A. Ahmed, M.H. Ali // Physica status solidi (b). — 1996. — Vol. 194. — Iss. 2. — P. 517–524.
11. **Janssen, T.** Phase transitions in incommensurate composites [Текст] / T. Janssen // Ferroelectrics. — 2011. — Vol. 412. — Iss. 1. — P. 4–7.
12. **Tagantsev, A.K.** Ferroelectric materials for microwave tunable applications [Текст] / A.K. Tagantsev, V.O. Sherman, K.F. Astafiev [et al.] // Journal of Electroceramics. — 2003. — Vol. 11. — P. 5–66.
13. Ferroelectrics — applications [Текст] / Ed. by M. Lallart. — Published by InTech, 2011. — 119 p.
14. **Стукова, Е.В.** Стабилизация сегнетоэлектрической фазы в композитах $(\text{KNO}_3)_{1-x}-(\text{BaTiO}_3)_x$ [Текст] / Е.В. Стукова, С.В. Барышников // Перспективные материалы. — 2011. — № 2. — С. 28–33.
15. **Стукова, Е.В.** Диэлектрические исследования сегнетоэлектрических композитов на основе $(\text{KNO}_3)_{1-x}(\text{KNbO}_3)_x$ [Текст] / Е.В. Стукова, С.В. Барышников // Перспективные материалы. — 2011. — № 2. — С. 45–48.
16. **Высочанский, Ю.М.** Точка Лифшица на диаграммах состояний сегнетоэлектриков [Текст] / Ю.М. Высочанский, В.Ю. Сливка // УФН. — 1992. — Т. 162. — № 2. — С. 139–160.
17. **Michelson, A.P.** Phase diagrams near the Lifshitz point. I. Uniaxial magnetization [Текст] / A.P. Michelson // Phys. Rev. B. — 1977. — Vol. 16. — P. 577–584.
18. **Стукова, Е.В.** Диэлектрические свойства твердых растворов $\text{Na}_{1-x}\text{K}_x\text{NO}_2$ [Текст] / Е.В. Стукова, А.Ю. Милинский, В.В. Маслов // Известия РГПУ. — 2009. — С. 133–138.
19. **Виноградов, А.П.** Электродинамика композитных материалов [Текст] / А.П. Виноградов. — М.: УРСС, 2001. — 208 с.
20. **Фридкин, В.М.** Сегнетоэлектрики -полупроводники [Текст] / В.М. Фридкин. — М.: Наука. — 1976. — 408 с.

УДК 621.383.51

В.В. Трегулов

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕЗКИХ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $\text{CdS}/p\text{-Si}$

Гетероструктура $\text{CdS}/p\text{-Si}$ может успешно применяться в качестве фотоэлектрического преобразователя солнечной энергии. Теоретическая оценка максимальной эффективности преобразования фотоэлектрического преобразователя на основе этой гетероструктуры составляет 26 % [1]. В то же время на электрофизические характеристики гетероструктур существенное влияние оказывают дефекты на гетерогранице,

причинами возникновения которых являются несоответствие параметров кристаллических решеток контактирующих полупроводников, различие их коэффициентов термического расширения, химические примеси. При этом на гетерогранице возникают поверхностные состояния с глубокими энергетическими уровнями (ГУ), которые способствуют снижению контактной разности потенциалов гетероперехода. В результате эффектив-

ность фотоэлектрического преобразователя солнечной энергии падает [1, 2].

Таким образом, исследование поверхностных состояний в гетероструктурах фотоэлектрических преобразователей солнечной энергии является актуальной задачей.

Особенности применения метода вольт-фарадных характеристик для исследования поверхностных состояний в гетероструктурах

Для исследования гетероструктур широко используется метод вольт-фарадных характеристик, заключающийся в измерении зависимости барьерной емкости C от приложенного постоянного напряжения обратного смещения V . Зависимость $C^{-2} = f(V)$ для резкого гетероперехода имеет вид прямой линии. Экстраполяция этой зависимости к нулю позволяет определить эффективное значение контактной разности потенциалов Φ , которое изменяется под влиянием заряда поверхностных состояний Q_{ss} :

$$\Phi = V_d - \left[\frac{Q_{ss}^2}{2q\epsilon_0(\epsilon_A N_A + \epsilon_D N_D)S} \right], \quad (1)$$

где V_d — контактная разность потенциалов при отсутствии ГУ; q — заряд электрона; N_A — концентрация мелкой акцепторной примеси в области p -типа; N_D — концентрация мелкой донорной примеси в области n -типа; ϵ_0 — диэлектрическая постоянная; ϵ_A , ϵ_D — значения диэлектрической проницаемости контактирующих полупроводников p - и n -типа, соответственно; S — площадь гетероперехода [2].

При высоких частотах процессы перезарядки ГУ поверхностных состояний не успевают следовать за переменной составляющей измерительного сигнала и не дают вклад в измеряемую емкость. В этом режиме измеряется высокочастотная вольт-фарадная характеристика (ВЧ ВФХ). При низких частотах процессы перезарядки ГУ успевают следовать за измерительным сигналом, что приводит к возрастанию емкости [3]. Этот режим соответствует низкочастотным вольт-фарадным характеристикам (НЧ ВФХ). Таким образом, измеряя частотную зависимость вольт-фарадных характеристик

гетероструктуры, можно найти зависящую от частоты составляющую Φ , из которой определяется величина Q_{ss} [2].

Важно отметить, что такой способ исследования поверхностных состояний можно применять только в том случае, если величина заряда Q_{ss} не зависит от V [2].

Описание исследуемой гетероструктуры и особенностей вольт-фарадных характеристик

Исследуемая гетероструктура CdS/ p -Si предназначалась для использования в качестве фотоэлектрического преобразователя солнечной энергии и была изготовлена методом гидрохимического осаждения тонкой пленки сульфида кадмия CdS на поверхности монокристаллической кремниевой пластины p -типа проводимости с удельным сопротивлением 1 Ом·см. Пленка CdS имела проводимость n -типа и толщину 2,5 мкм. Технология изготовления гетероструктур CdS/ p -Si достаточно подробно описана в работе [4].

В исследуемой гетероструктуре слой сульфида кадмия играет роль оптического окна для солнечного излучения. Концентрация мелких доноров в этом слое составляет $1,00 \cdot 10^{18}$ см⁻³. Эта величина получена по результатам исследования ВЧ ВФХ изотипной гетероструктуры CdS/ n -Si, изготовленной на кремниевой пластине с удельным сопротивлением 0,01 Ом·см. Изотипная гетероструктура была изготовлена по той же технологии, что и анизотипная гетероструктура CdS/ p -Si, исследуемая в данной работе.

Таким образом, область пространственного заряда гетероструктуры CdS/ p -Si находится в p -Si, т. е. она является несимметричной и ее база находится в кремниевой области.

Для измерений вольт-фарадных характеристик гетероструктуры CdS/ p -Si использовался цифровой измеритель иммитанса Е7-20. Переменная составляющая измерительного сигнала напряжения имела синусоидальную форму с амплитудой 40 мВ.

Измерения ВЧ ВФХ производились при частоте измерительного сигнала 1 МГц, НЧ ВФХ — при частоте 1 кГц (рис. 1). Температура исследуемого образца поддерживалась постоянной и составляла 300 К. Видно, что ВЧ ВФХ (кривая 1) в координатах $C^{-2} = f(V)$

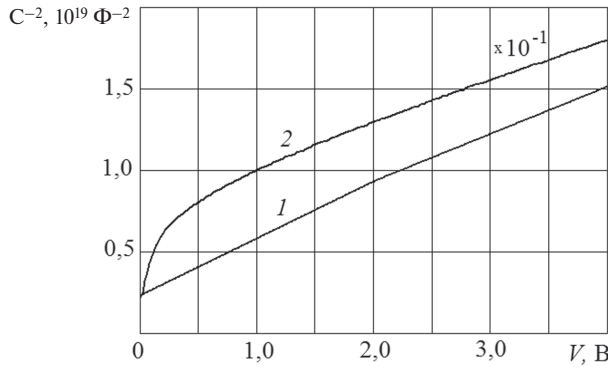


Рис. 1. Вольт-фарадные характеристики гетероструктуры CdS/p-Si в виде $C^{-2} = f(V)$ на частотах 1 МГц (1) и 1 кГц (2)

может быть представлена двумя отрезками прямых с разным наклоном. Наклон изменяется при напряжении обратного смещения около 2 В. Таким образом, можно считать, что гетеропереход является резким в области напряжений обратного смещения от 0 до 2 В.

Нелинейный вид НЧ ВФХ (кривая 2 на рис. 1) может быть объяснен влиянием ГУ поверхностных состояний. Изменение наклона данной характеристики $C^{-2} = f(V)$ свидетельствует о том, что заряд поверхностных состояний зависит от приложенного напряжения. Следовательно, метод исследования поверхностных состояний, основанный на применении выражения (1), использовать нельзя.

Вывод формулы для энергетической плотности поверхностных состояний с учетом зависимости $Q_{ss}(V)$

Поскольку исследуемая гетероструктура CdS/p-Si является несимметричной, для описания процессов перезарядки ГУ поверхностных состояний достаточно рассмотреть зонную диаграмму базовой области при обратном смещении (рис. 2).

При увеличении обратного напряжения смещения V возрастает изгиб энергетических зон и увеличивается ширина области пространственного заряда W (рис. 2). При изменении этого напряжения квазиуровень Ферми для дырок E_{Fp} «сканирует» ГУ поверхностных состояний E_{ss} на гетерогранице. Состояния, оказавшиеся ниже E_{Fp} , заполнены носителями заряда, а состояния выше E_{Fp} — от них свободны. Таким образом, изменяя значение V , можно

управлять заполнением ГУ поверхностных состояний (см. рис. 2).

Текущее положение ГУ E_{ss} на гетерогранице, отсчитанное от потолка валентной зоны, — $(E_{ss} - E_v)$, можно связать с напряжением обратного смещения V следующим образом [5]:

$$E_{ss} - E_v = q(\Phi - V). \quad (2)$$

Значение Φ определяется экстраполяцией НЧ ВФХ $C^{-2} = f(V)$ к нулю.

Из выражения (2) можно определить максимальное значение V , при котором НЧ ВФХ определяется процессами перезарядки ГУ поверхностных состояний:

$$V_{ss\max} = E_{g1} - \Phi, \quad (3)$$

где E_{g1} — ширина запрещенной зоны полупроводника базовой области гетероструктуры (в нашем случае кремния).

Величина заряда ионизированных состояний при низкой частоте переменной составляющей измерительного сигнала ($Q_{НЧ}$) связана с НЧ ВФХ $C_{НЧ}(V)$ следующим образом:

$$Q_{НЧ} = VC_{НЧ}(V). \quad (4)$$

С другой стороны, если V изменяется в пределах от 0 до $V_{ss\max}$, то $Q_{НЧ}$ определяется концентрацией мелкой акцепторной примеси в базовой области (N_A) и концентрацией ГУ поверхностных состояний N_{st} [3]:

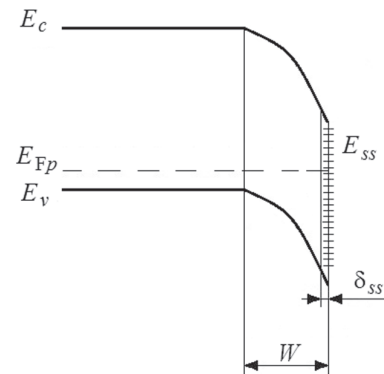


Рис. 2. Зонная диаграмма базовой части гетероструктуры CdS/p-Si с учетом ГУ поверхностных состояний E_{ss} при обратном смещении; W — ширина области пространственного заряда; δ_{ss} — часть области пространственного заряда, в которой происходит перезарядка ГУ поверхностных состояний; E_{Fp} — квазиуровень Ферми для дырок

$$Q_{\text{НЧ}} = qS(N_A + N_{st}) \cdot \delta_{ss} = Q_A + Q_{ss}, \quad (5)$$

где δ_{ss} — часть области пространственного заряда, в которой происходит перезарядка ГУ поверхностных состояний (см. рис. 2); Q_A — заряд, обусловленный мелкой акцепторной примесью. В формуле (5) N_{st} имеет смысл объемной концентрации ГУ в слое δ_{ss} .

Для резкого гетероперехода концентрация N_A в базовой области постоянна, следовательно Q_A — величина постоянная. Заряд Q_{ss} может зависеть от V , если концентрация N_{st} зависит от V . Такая ситуация имеет место при неравномерном распределении ГУ поверхностных состояний в области δ_{ss} . При этом НЧ ВФХ, представленная в виде $C^{-2} = f(V)$, будет нелинейной в диапазоне напряжений обратного смещения от 0 до $V_{ss\text{max}}$. В этом случае для определения концентрации N_{st} следует совместно использовать формулы (4) и (5).

Для описания распределения плотности поверхностных состояний вместо N_{st} традиционно используют функцию $D_{ss}(E)$ (распределение энергетической плотности поверхностных состояний). Последняя связана с зарядом Q_{ss} следующим образом [6]:

$$Q_{ss} = qSED_{ss}(E), \quad (6)$$

где E — значение энергии активации ГУ поверхностных состояний.

Учитывая формулу (6), запишем выражение (5) в следующем виде:

$$Q_{\text{НЧ}} = qS(N_A\delta_{ss} + D_{ss}(E) \cdot E). \quad (7)$$

Приравняв правые части в выражениях (4) и (7), получим формулу для определения $D_{ss}(E)$:

$$D_{ss}(E) = (E)^{-1} \cdot \left[\frac{1}{qS} C_{\text{НЧ}}(V) \cdot V - N_A\delta_{ss} \right]. \quad (8)$$

Значение энергии активации E определяется по формуле (2); причем для исследуемой гетероструктуры CdS/p-Si

$$E = E_{ss} - E_v.$$

Следует отметить, что выражение (8) позволяет корректно определять $D_{ss}(E)$ в случае, если заряд Q_{ss} зависит от V , то есть если НЧ ВФХ в координатах $C^{-2} = f(V)$ нелинейна в диапазоне значений V от 0 до $V_{ss\text{max}}$. Это

объясняется тем, что для вычисления $D_{ss}(E)$ в формуле (8) используются все экспериментальные точки НЧ ВФХ в диапазоне значений V от 0 до $V_{ss\text{max}}$. Благодаря этому учитывается конкретный вид энергетического распределения ГУ поверхностных состояний в области δ_{ss} . В то же время подход, основанный на формуле (1), использует только значение Φ ; при этом вид энергетического распределения концентрации ГУ поверхностных состояний не учитывается.

Если заряд Q_{ss} не зависит от V , то НЧ ВФХ в виде $C^{-2} = f(V)$ линейна и выражение (8) также можно применять для вычисления $D_{ss}(E)$.

Интегральное значение плотности поверхностных состояний N_{ss} можно определить, используя следующее выражение [7]:

$$N_{ss} = \int_{E_1}^{E_2} D_{ss}(E) dE, \quad (9)$$

где E_1, E_2 — границы исследуемого интервала энергий активации, причем $E_1 = q\Phi$, $E_2 = qV_{ss\text{max}}$ согласно формулам (2) и (3).

Для определения δ_{ss} используем выражение из [3] применительно к поверхностному ГУ E_{ss} в полупроводнике p -типа:

$$W - \delta_{ss} = \sqrt{\frac{2\epsilon_A\epsilon_0(E_{ss} - E_{Fp})}{q^2N_A}}, \quad (10)$$

где $(E_{ss} - E_{Fp})$ — энергетическое положение ГУ E_{ss} , отсчитанное от квазиуровня Ферми E_{Fp} для дырок.

Учитывая, что ширина области пространственного заряда W с учетом влияния ГУ поверхностных состояний связана с НЧ ВФХ зависимостью [3]

$$W = \frac{\epsilon_A\epsilon_0 S}{C_{\text{НЧ}}(V)}, \quad (11)$$

получим из (10) выражение для δ_{ss} в виде

$$\delta_{ss} = \frac{\epsilon_A\epsilon_0 S}{C_{\text{НЧ}}(V)} - \sqrt{\frac{2\epsilon_A\epsilon_0(E_{ss} - E_{Fp})}{q^2N_A}}. \quad (12)$$

Положение квазиуровня Ферми для дырок в полупроводнике p -типа E_{Fp} относительно потолка валентной зоны E_v определяется выражением



$$E_{Fp} - E_v = kT \ln \left(\frac{N_v}{N_A} \right), \quad (13)$$

где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – плотность состояний для дырок в валентной зоне [8].

Используя (13), свяжем энергетическое положение ГУ E_{ss} , отсчитанное от квазиуровня Ферми для дырок $(E_{ss} - E_{Fp})$, с его положением, отсчитанным от потолка валентной зоны $(E_{ss} - E_v)$:

$$(E_{ss} - E_{Fp}) = (E_{ss} - E_v) - kT \ln \left(\frac{N_v}{N_A} \right). \quad (14)$$

Объединяя формулы (12), (14) и (2), получим окончательное выражение для ширины области δ_{ss} , в которой происходит перезарядка ГУ поверхностных состояний:

$$\delta_{ss} = \frac{\epsilon_A \epsilon_0 S}{C_{Hc}(V)} - \sqrt{\frac{2\epsilon_A \epsilon_0}{q^2 N_A} \left(q(\Phi - V) - kT \ln \left(\frac{N_v}{N_A} \right) \right)}. \quad (15)$$

Методика исследования поверхностных состояний в гетероструктуре CdS/p-Si

Указанная методика врезкой несимметричной гетероструктуре CdS/p-Si, предлагаемая в данной работе, основана на следующей последовательности действий.

Сначала измеряются ВЧ ВФХ и НЧ ВФХ исследуемой гетероструктуры при постоянной температуре образца. Затем по наклону прямой ВЧ ВФХ, построенной в координатах $C^{-2} = f(V)$, определяется величина концентрации мелкой легирующей примеси в базовой области гетероструктуры N_A . Далее, экстраполируя к нулю НЧ ВФХ в виде $C^{-2} = f(V)$, определяем значение Φ . Затем по формуле (3) определяется величина V_{ssmax} . Зависимость $D_{ss}(E)$ вычисляется по формуле (8). При этом значения энергетического положения ГУ поверхностных состояний определяются по формуле (2). Значение δ_{ss} определяется по формуле (15). Следует помнить, что величина V изменяется в пределах от 0 до V_{ssmax} .

Интегральное значение плотности поверхностных состояний в исследуемом интервале энергий определяется по формуле (9).

Предложенная методика исследования поверхностных состояний может использоваться в случае, если НЧ ВФХ в виде $C^{-2} = f(V)$ нелинейна в диапазоне значений V от 0 до V_{ssmax} .

Результаты исследования поверхностных состояний в гетероструктуре CdS/p-Si

Значение концентрации N_A в базовой области гетероструктуры CdS/p-Si, полученное из ВЧ ВФХ, составило $1,62 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Величина эффективной контактной разности потенциалов Φ , полученная из анализа НЧ ВФХ, равна 0,11 В. Максимальное значение напряжения обратного смещения V_{ssmax} , при котором поверхностные состояния определяют вид НЧ ВФХ, составило 1,01 В.

Зависимость энергетической плотности поверхностных состояний от энергии активации ГУ поверхностных состояний для гетероструктуры CdS/p-Si, полученная расчетом по формуле (8), представлена на рис. 3.

Интегральное значение плотности поверхностных состояний N_{ss} , определенное по формуле (9), составляет $7,06 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. При этом значения пределов интегрирования в формуле (9) составили: $E_1 = 0,11 \text{ эВ}$, $E_2 = 1,01 \text{ эВ}$.

Достоинства, недостатки и область применения предложенной методики

Основным достоинством предложенной методики исследования поверхностных состояний является возможность ее применения

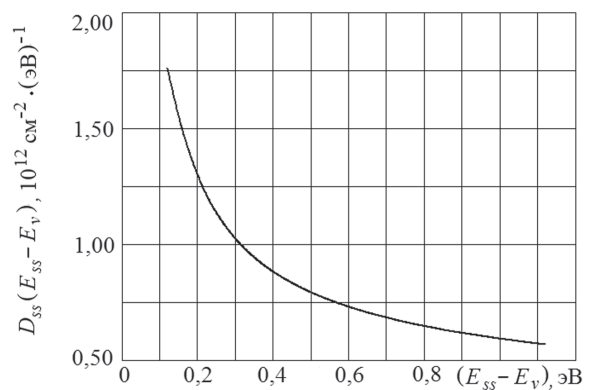


Рис. 3. Энергетическое распределение плотности поверхностных состояний для гетероструктуры CdS/p-Si

для различных видов резких гетеропереходов, в которых заряд поверхностных состояний зависит от приложенного напряжения. Другим важным достоинством являются условия измерения вольт-фарадных характеристик исследуемого образца: оно проводится при постоянной температуре. Также важно отметить, что для измерений НЧ ВФХ и ВЧ ВФХ могут использоваться стандартные измерители иммитанса, предназначенные для исследования характеристик полупроводниковых приборов. Такое оборудование имеется во многих исследовательских лабораториях и на производстве.

В качестве недостатка предложенной методики следует отметить невозможность разделить влияние ГУ поверхностных состояний и в объеме базовой области гетероструктуры при значениях V , близких

к V_{ssmax} . Такое разделение спектров ГУ возможно с помощью метода релаксационной спектроскопии глубоких уровней за счет селекции по постоянной времени релаксации. В то же время при исследовании поверхностных состояний методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней требуется производить многократные измерения спектра при разных значениях напряжения заполнения и опустошения ГУ [9]. Это снижает степень оперативности получения результата.

В заключение следует отметить, что предложенная методика исследования поверхностных состояний может найти применение прежде всего на производстве, при оптимизации технологии изготовления гетероструктур фотоэлектрических преобразователей солнечной энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шарма, Б.Л. Полупроводниковые гетеропереходы [Текст]: пер. с англ. / Б.Л. Шарма, Р.К. Пурохит. — М.: Сов. радио, 1979. — 232 с.
2. Фаренбух, А. Солнечные элементы: Теория и эксперимент [Текст]: пер. с англ. / А. Фаренбух, Р. Бьюб. — М.: Энергоатомиздат, 1987. — 280 с.
3. Берман, Л.С. Емкостная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках [Текст] / Л.С. Берман, А.А. Лебедев. — Л.: Наука, 1981. — 176 с.
4. Трегулов, В.В. Исследование гетероструктур CdS/p-Si, изготовленных методом гидрохимического осаждения CdS [Текст] / В.В. Трегулов // Вестник Рязанского гос. ун-та им. С.А. Есенина. — 2011. — Т. 32. — № 3. — С. 169–179.
5. Tataroglu, A. Effect of surface states on electrical characteristics of metal-insulator-semiconductor (MIS) diodes / A. Tataroglu, S. Altindal, I. Dokme // G.U. Journal of Science. — 2003. — Vol. 16. — № 4. — P. 677–685.
6. Зи, С.М. Физика полупроводниковых приборов [Текст]: в 2 т. — Т. 2. — М.: Мир, 1984. — 456 с.
7. Киреев, П.С. Физика полупроводников [Текст]: Учеб. пос. для вузов / П.С. Киреев. — М.: Высшая школа, 1975. — 584 с.
8. Орешкин, П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков [Текст] / П.Т. Орешкин. — М.: «Высшая школа», 1977. — 448 с.
9. Дорджин, Г.С. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней. Методические основы применения [Текст] / Г.С. Дорджин, В.Н. Лактешкин, М.В. Со- рокина // Обзоры по электронной технике. Сер. 7. Технология, организация производства и оборудование. — 1989. — Вып. 4 (1434). — 72 с.

УДК 621.315.592, 621.382

*Е.А. Чернышева, А.В. Сахаров, Н.А. Черкашин,
В.В. Лундин, А.Ф. Цацульников*

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ В РЕАКТОРЕ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР InGaN, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ГФЭ МОС

Известно, что при выращивании соединений нитридов III группы методом газовой

эпитаксии из металлоорганических соединений (ГФЭ МОС), от давления в реакторе суще-



ственно зависят как газофазные паразитные реакции, так и сам процесс синтеза материала [1, 2]. В то же время механизмы этого влияния все еще мало изучены, а оптимальное давление при выращивании должно экспериментально определяться для каждого слоя многослойной приборной гетероструктуры, что значительно затрудняет технологический процесс. В данной работе проводилось детальное исследование влияния давления в реакторе на структурные и люминесцентные свойства активной области светодиодов на основе InGaN/GaN.

Экспериментальная часть

Исследуемые светодиодные структуры выращивались на сапфировых подложках ориентации (0001) методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений на установке AIX2000HT с планетарным реактором. В качестве исходных соединений использовались триметилгаллий, триэтилгаллий, триметилиндий, триметилалюминий, аммиак, моносилан и биспентациклодиенил магния. При выращивании слоев *n*-GaN в качестве несущего газа использовался водород, при выращивании слоев *p*-(Al)GaN — азотоводородная смесь. В процессе роста активной области InGaN/GaN несущим газом был азот. Процедура роста более подробно описана в статье [3]. Исследуемые светодиодные структуры содержали активную область из пяти квантовых ям InGaN, разделенных барьерами нитрида галлия. Для обеспечения сохранности начальных условий выращивания активной области давление в реакторе при росте первой ямы для всех исследованных структур было 300 мбар. Эта яма зарастивалась барьерным слоем нитрида галлия без прерывания процесса роста. Исследовалось три режима роста остальных четырех квантовых ям (КЯ), и при их выращивании давление в реакторе составляло 100, 200 и 600 мбар. После выращивания каждой из этих четырех КЯ производилось 20-секундное прерывание роста с добавлением водорода в атмосферу несущего газа [4]. Значение номинальной толщины квантовых ям InGaN и барьеров нитрида галлия составляли 3 и 8 нм, соответственно.

Структурные свойства исследовались с помощью рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Изображения ПЭМ высокого разре-

шения были получены на микроскопе серии Теснаи, работающем при ускоряющем напряжении 200 кВ и оборудованном корректором сферической абберации. Далее эти изображения обрабатывались с помощью метода анализа геометрических фаз (GPA) [5], позволяющего получать двумерное распределение деформации в напряженных слоях относительно недеформированной матрицы GaN, и далее, используя закон Вегарда, рассчитывать распределение индия и алюминия в слоях твердых растворов.

Оптические свойства исследовались с помощью спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) в широком диапазоне температур от 10 до 300 К. Для возбуждения ФЛ использовался гелий-кадмиевый лазер с мощностью излучения 10 мВт на длине волны основной линии 325 нм, работающий в непрерывном режиме. Для регистрации ФЛ использовался монохроматор МДР-23 и фотоэлектронный умножитель ФЭУ-100. Для повышения чувствительности измерений и снижения шумов применялся синхронный детектор SR810-DSP. Для измерений спектров ФЛ при температурах ниже комнатной применялся гелиевый криостат замкнутого цикла.

Электролюминесцентные (ЭЛ) свойства выращенных структур исследовались в непрерывном режиме на неразделенных пластинах с выводом света через подложку. Спектры ЭЛ регистрировались установкой на основе монохроматора и фотоэлектронного умножителя. При измерении эффективности светодиодных структур интенсивность ЭЛ измерялась калиброванным фотодиодом.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены данные по просвечивающей электронной микроскопии с последующей обработкой методом анализа геометрических фаз для структур, выращенных при значениях давления 100 и 600 мбар. Отчетливо видны различия в формировании активной области. При низком давлении в реакторе (рис. 1,а) активная область представляет собой непрерывные в латеральном направлении квантовые ямы InGaN с толщиной 2,3 – 2,5 нм с мелкомасштабной флуктуацией состава, среднее содержание индия в КЯ составило $27 \pm 8\%$. При высоком ростовом давлении (рис. 1,б) структура активной области принципиально отличается.

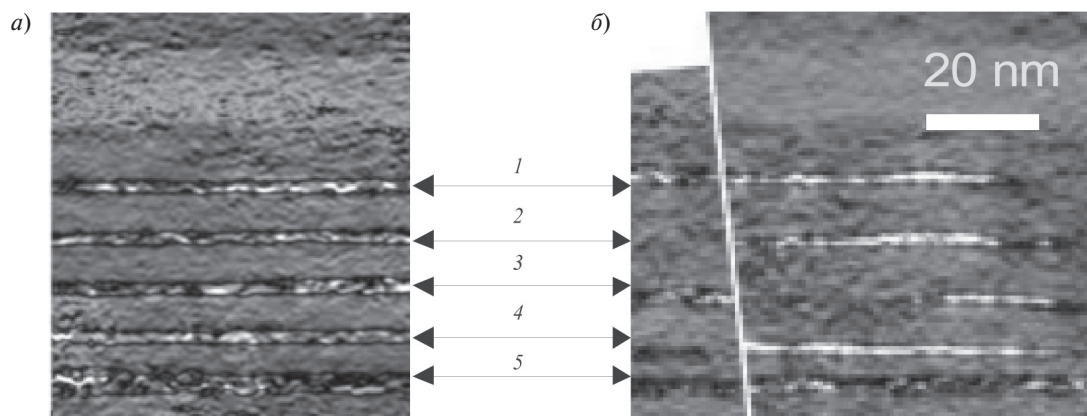


Рис. 1. Карты распределения локальных деформаций кристаллической решетки по отношению к ненапряженной матрице GaN в направлении роста [0001] для активной области, выращенной при значениях давления 100 мбар (а) и 600 мбар (б);

1–5 — квантовые ямы

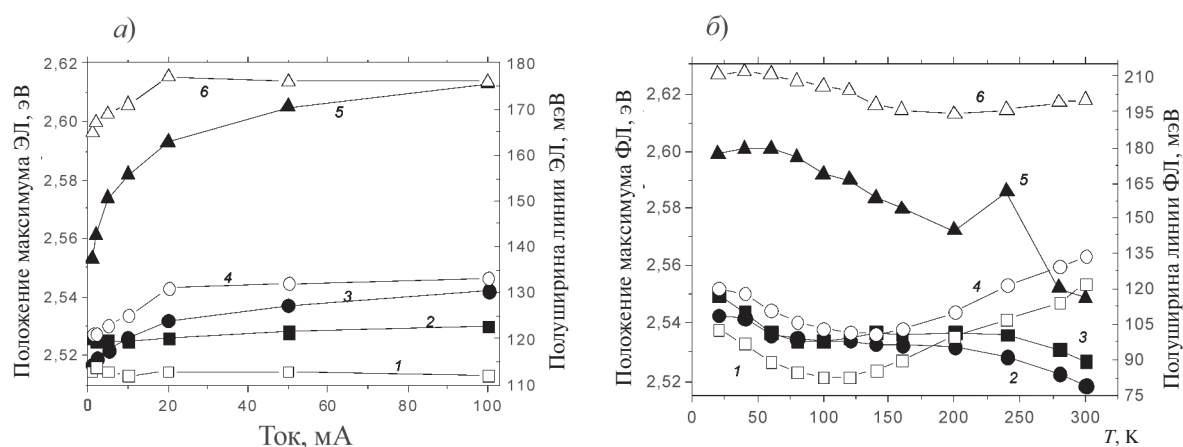


Рис. 2. Результаты анализа экспериментальных данных по электро-(а) и фото-(б) люминесценции для серии светодиодных структур, выращенных при различном давлении, мбар: 100 (1, 2), 200 (3, 4), 600 (5, 6); приведены зависимости положений максимумов люминесценции (2, 3, 5) и значений полуширины линий спектров (1, 4, 6) от тока (а) и температуры (б)

Вместо КЯ наблюдаются плоские островки с латеральными размерами от единиц до нескольких десятков нанометров и толщиной до 2,5 нм, среднее содержание индия составило $25 \pm 8\%$. Таким образом, при увеличении давления в реакторе при росте тонких слоев InGaN наблюдается ярко выраженный фазовый распад слоя и некоторое уменьшение среднего содержания индия. По степени неоднородности распределения индия структуры можно качественно разделить на два типа: слабо и сильно неоднородные. У структур первого типа флуктуации состава малы и трехмерная локализация выражена слабо, свойства близки к набору кван-

товых ям. У структур второго типа свойства близки к неоднородному массиву квантовых точек. На основании полученных данных структуры, выращенные при низком давлении (100, 200 мбар), можно отнести к первому типу, а при давлении 600 мбар — ко второму.

На рис. 2,а представлены данные, полученные из анализа спектров ЭЛ [6]. Увеличение давления приводит к коротковолновому сдвигу максимума ЭЛ, что связано с уменьшением максимального содержания индия в активных слоях. Кроме изменения положения максимума излучения, увеличение давления в реакторе приводит к изменению величины



коротковолнового сдвига максимума длины волны излучения от тока, которая также связана с флуктуациями состава по индию в слоях InGaN. С ростом давления коротковолновый сдвиг излучения с увеличением тока возрастает. Данный эффект связан с тем, что образование отдельных островков InGaN, имеющих значительную дисперсию как по размерам, так и по составу, приводит к уширению спектра состояний. Следовательно, при увеличении тока растет заселенность состояний с меньшей энергией локализации, что приводит к уширению линии излучения (рис. 2, *a*). Для структуры, выращенной при давлении 100 мбар, величина полуширины спектра с ростом тока не меняется. Для структур, выращенных при давлениях 200 и 600 мбар, существуют «хвосты» плотности состояний, которые заполняются уже при токах 20 мА. На рис. 3, *a* представлены зависимости эффективности ЭЛ от тока для светодиодных структур, выращенных при различных давлениях. Видно, что при увеличении давления от 100 до 200 мбар при выращивании структур значительно увеличивается эффективность излучения. Полученный результат может быть связан с тем, что образование островков приводит к подавлению латерального транспорта носителей к центрам безызлучательной рекомбинации, а это повышает эффективность ЭЛ. Особенно данный эффект заметен в области малых (менее 20 мА) токов. Изменения формы кривых зависимости эффективности излучения от тока для структур, выращенных при различных давлениях, связаны, скорее всего, с различием в плотности островков и, возможно, с увеличением латерального транспорта носителей при заселении состояний с меньшей энергией локализации.

Анализ спектров ФЛ, измеренных в диапазоне температур от 20 до 300 К (рис. 2, *b*), показал, что для структур, выращенных при давлениях 100 и 200 мбар, характерна малая ширина спектров ФЛ при низких температурах (20 К), что свидетельствует об относительно однородном распределении индия в активной области, хотя повышение давления до 200 мбар привело к росту указанной ширины. Для структур, выращенных при давлении 600 мбар, в спектрах ФЛ наблюдалось значительное неоднородное уширение при низких температурах, что объясняется значительной дисперсией по размеру островков и содержанию индия.

Зависимость полуширины спектров ФЛ от температуры на графиках, представленных на рис. 2, *b*, можно разделить на три характерных участка. При малых температурах наблюдается слабое влияние температуры на полуширину спектра, что характерно для структур с квантовыми точками, т. е. с неоднородным распределением индия в активных слоях (второй тип по степени неоднородности). При высоких температурах поведение рассматриваемой зависимости характерно для структур с квантовыми ямами (первый тип), т. е. с однородным распределением индия в активной области. Малый (23 мэВ) немонотонный сдвиг максимума ФЛ в сторону меньших энергий (рис. 2, *b*) наблюдался для серии структур, выращенных при малых давлениях. Такое поведение характерно для структур с равномерным распределением индия в активных слоях. Вид аналогичной зависимости для структуры, выращенной при высоком давлении, принципиально отличается. Значительный (52 мэВ) монотонный длинноволновый сдвиг характерен для неоднородного распределения индия в активной области.

С увеличением температуры для всех структур наблюдалось падение интенсивности ФЛ, что связано с термоактивационным характером транспорта носителей к центрам безызлучательной рекомбинации. Измерения при комнатной температуре показали, что с увеличением давления при выращивании структур интенсивность ФЛ уменьшалась. При этом интегральная интенсивность (рис. 3, *b*) также уменьшалась; это может быть следствием подавления транспорта носителей к центрам безызлучательной рекомбинации.

Таким образом, после анализа данных ФЛ в диапазоне температур от 20 до 300 К можно сделать вывод, что рост давления при формировании активной области приводит к значительному изменению морфологии и оптических свойств выращиваемых структур.

Была также проведена оценка энергий активации температурного гашения ФЛ путем аппроксимации интегральной интенсивности ФЛ для исследуемой серии образцов. Для структуры, выращенной при давлении 100 мбар, энергия активации составила (41 ± 10) мэВ, при 200 мбар — (52 ± 10) мэВ, при 600 мбар — (72 ± 10) мэВ. Следовательно, локализация наи-

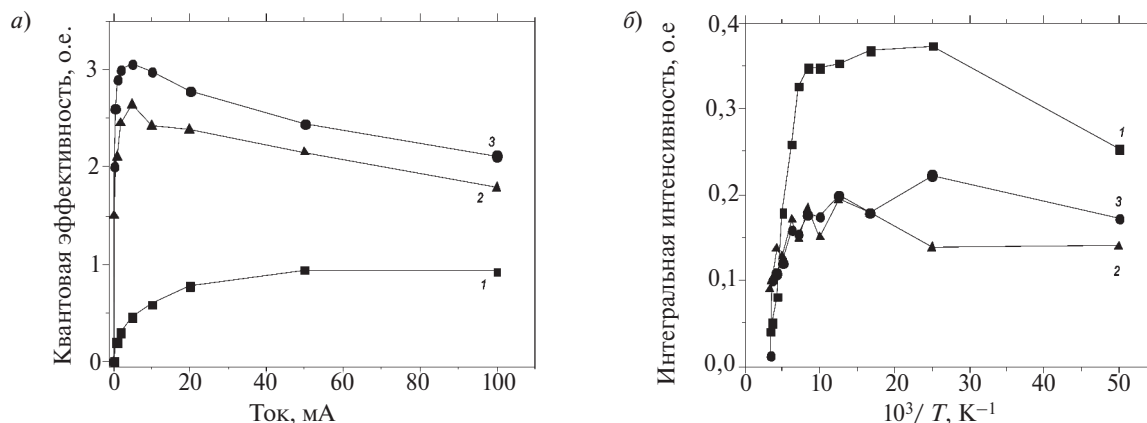


Рис. 3. Результаты обработки экспериментальных данных по электро-(а) и фото-(б) люминесценции для серии светодиодных структур, выращенных при различном давлении, мбар: 100 (1), 200 (3), 600 (2); приведены зависимости квантовой эффективности ЭЛ от тока (а) и интегральной интенсивности ФЛ от обратной температуры (б)

более ярко выражена для структуры, выращенной при давлении 600 мбар, что согласуется со всеми предыдущими экспериментальными результатами.

Таким образом, было проведено исследование влияния давления в реакторе при эпитаксии на оптические свойства структур InGa_{0.5}N/GaN. В ходе исследований было выяснено, что увеличение давления ведет к значительному фазовому распаду InGa_{0.5}N и уменьшению максимального содержания индия в активных слоях. Данная морфологическая трансформация сло-

ев InGa_{0.5}N в активной области сопровождается увеличением эффективности ЭЛ. Оптические свойства структур, выращенных при высоком давлении, характерны для структур с квантовыми точками. Следовательно, меняя давление в реакторе, можно контролировать морфологию активной области и тем самым управлять оптическими свойствами светодиодной структуры непосредственно в процессе роста.

Работа проведена при поддержке Государственного контракта с Министерством образования и науки РФ № 16.513.12.3018 от 4 октября 2011г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Creighton, J. R. Observations of gas-phase nanoparticles during InGa_{0.5}N metal-organic chemical vapor deposition [Text] / J.R. Creighton, M.E. Coltrin, J.J. Figiel // Appl. Phys. Lett. — 2008. — Vol. 93. — Iss. 17. — P. 1906 (3 p.).
2. Iida, D. Growth of GaInN by raised — pressure metal-organic vapor phase epitaxy [Text] / D. Iida, K. Nagata, T. Makino [et al.] // Appl. Phys. Express. — 2010. — Vol. 3. — Iss. 7. — P. 5601 (2 p.).
3. Сахаров, А.В. Влияние релаксации напряжений на формирование активной области гетероструктур InGa_{0.5}N/(Al)Ga_{0.5}N для светодиодов зеленого диапазона [Текст] / А.В. Сахаров, В.В. Лундин, Е.Е. Заварин [и др.] // ФТП. — 2009. — Т. 43. — Вып. 6. — С. 841 (7 с.).
4. Sakharov, A.V. Influence of growth interruptions and gas ambient on optical and structural properties of InGa_{0.5}N/GaN multilayer structures [Text] / A.V. Sakharov, W.V. Lundin, I.L. Krestnikov, [et al.] // Proceedings of IWN2000, Nagoya, September 24–27, 2000 — IPAP Conference series 1. — P. 241–243.
5. Hytch, M.J. Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs [Text] / M.J. Hytch, E. Snoeck, R. Kilaas // Ultramicroscopy. — 1998. — Vol. 74. — P. 131–146.
6. Лундин, В.В. Влияние давления в реакторе на свойства активной области InGa_{0.5}N/GaN светодиодов [Текст] / В.В. Лундин, Е.Е. Заварин, М.А. Синицын [и др.] // ФТП. — 2010. — Т. 44 — Вып. 1. — С. 126–129.



ЭФФЕКТ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ И ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМАЯ ПАМЯТЬ НА ЕГО ОСНОВЕ

В настоящее время интенсивно развиваются новые технологии создания устройств памяти. Приоритетными являются задачи, связанные с улучшением быстродействия, увеличением объема памяти, созданием компактных энергонезависимых устройств, обладающих низкой стоимостью. Имеющиеся элементы памяти не способны сочетать в одном устройстве все перечисленные характеристики. Флэш-память является энергонезависимой, но при этом обладает низкой скоростью записи и удаления информации. DRAM — динамическая память с произвольным доступом обладает высокой скоростью записи, но не является энергонезависимой. В качестве памяти, совмещающей в себе все перечисленные преимущества, может использоваться резистивная, в основе которой лежит эффект переключения между состояниями с различающимися сопротивлениями [1].

Эффект резистивного переключения заключается в возможности переходов образца из одного состояния в другое с различными сопротивлениями. Обычно различают два состояния: с высоким и низким сопротивлениями; первое принято принимать за логический ноль (состояние «off»), а второе — за логическую единицу (состояние «on»). Сохранение информации в памяти соответствует переходу образца из состояния 0 в 1, ее считывание — определению текущего состояния, а удаление — переключению ячейки памяти из состояния 1 в 0. Этот эффект наблюдался во многих органических и неорганических материалах [1, 2]. Использование первых может быть более предпочтительным, поскольку для изготовления органической памяти не требуется применения сложных технологий, например высокого вакуума или высоких температур. Органические устройства памяти могут быть изготовлены методами центрифугирования, ламинирования или струйной печати. Несмотря на интенсивные исследования в этой

области, вопрос о механизмах, ответственных за переключения, остается открытым [1].

Одним из материалов, в которых наблюдался эффект резистивных переключений, является полистирол [3]. Это доступный термopластичный полимер, что позволяет изготавливать простые и дешевые устройства на его основе методом ламинирования. Нами были проведены исследования резистивных переключений в образцах, изготовленных методом ламинирования из коммерчески доступного полистирола. При этом нами была показана возможность изготовления быстрой энергонезависимой памяти на основе этого материала и изучены характеристики резистивных переключений при комнатной температуре и температуре жидкого гелия.

Исследованные образцы и методика эксперимента

Исследованные образцы были изготовлены в «сэндвич»-геометрии из коммерчески доступного полистирола (рис. 1). В качестве нижнего контакта брался твердый материал: стеклянная подложка, покрытая ИТО (оксид индия, допированный оловом), либо медная пластина. На эту основу методом ламинирования наносился полистирол. Толщина полученной пленки варьировалась в интервале от 5 до 25 мкм для различных образцов. В качестве верхнего контакта нами использовались как стекло, покрытое ИТО, так и тонкие серебряные провода, прикрепленные к образцу с помощью серебряного клея. Площадь верхнего контакта варьировалась в интервале от 100 (мкм)² до нескольких квадратных миллиметров. Площадь поверхности пленки всегда превышала площадь верхнего контакта.

Для регистрации тока в цепи образца был использован двухканальный источник-измеритель Keithley 2612A, позволяющий проводить

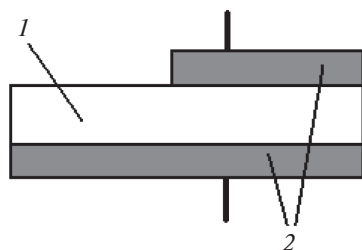


Рис. 1. «Сэндвич-геометрия» исследованных образцов:
1 – полимер, 2 – контакты

измерения при электрических напряжениях до 400 В и токах от 1 пА до 10 А. Для изучения кинетики процессов переключения использовался цифровой осциллограф Tektronix DPO 3054 с эффективным временным разрешением 2 нс. Для измерения электрических свойств при различных температурах образец помещался в измерительную камеру, которая затем опускалась в жидкий гелий. Все проводимые измерения были автоматизированы нами в среде LabView.

Результаты экспериментов

В исследованных нами образцах переключение в непроводящее состояние происходит при протекании в цепи образца тока выше критического. Обратное переключение в проводящее состояние осуществляется при напряжении, превышающем критическое. Измерения проведены в режиме ограничения тока в цепи. Критические значения напряженности поля $E_{кр}$ и плотности тока $j_{кр}$ при комнатной температуре были следующими:

	$E_{кр}$, кВ/см	$j_{кр}$, мА/мм ²
Максимальное	400	8
Минимальное	50	2

Указаны максимальные и минимальные значения, полученные для нескольких образцов с различной геометрией. Нами было установлено, что эффект переключения не зависит от материала контакта, и, следовательно, обусловлен процессами в объеме образца. Важно, что даже максимальные поля $E_{кр} \approx 0,4$ МВ/см, при которых наблюдаются переключения, не превышают пробивных значений для полистирола – 3 МВ/см.

Типичная вольтамперная характеристика (ВАХ) образцов при комнатной температуре представлена на рис. 2. Переключение из непроводящего в проводящее состояние происходит

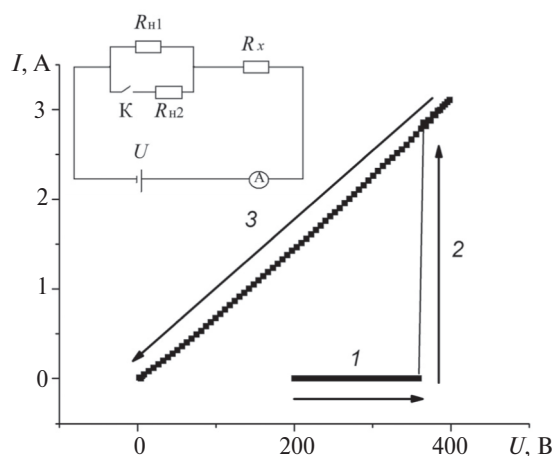


Рис. 2. Вольтамперные характеристики проводящего (3, «on») и непроводящего (1, «off») состояний образца стекло ИТО – полистирол – стекло ИТО при комнатной температуре с нагрузочным сопротивлением 121 кОм; 2 – переключение между состояниями

при напряжении в цепи 360 В ($R_{н} = 121$ кОм). ВАХ проводящих и непроводящих состояний сильно отличаются между собой, что говорит о различных механизмах проводимости в этих состояниях. ВАХ проводящего состояния в определенном диапазоне напряжений хорошо аппроксимируется линейной зависимостью, что соответствует омическому характеру проводимости. Для непроводящего состояния ВАХ является нелинейной.

Для различных образцов сопротивление проводящего состояния лежит в интервале $20 \text{ Ом} \leq R_{он} \leq 100 \text{ кОм}$, а сопротивление непроводящего состояния – $R_{off} \geq 1 \text{ Мом}$.

При изменении температуры T от 300 до 4,2 К сопротивление $R_{он}$ изменяется сравнительно слабо, а R_{off} изменяется более чем на три порядка величины. В качестве примера приведем данные для одного из образцов:

T , К	$R_{он}$, кОм	R_{off} , МОм
300	2,10	5,00
4,2	2,44	$9 \cdot 10^3$

Характерные времена переключений при $T = 300$ К достигали нескольких наносекунд, при этом получена высокая воспроизводимость данных. В ходе эксперимента наблюдалось до 1 млн. переключений без заметной деградации образцов, т. е. значения сопротивления как в проводящем, так и в непроводящем состояниях были стабильны. В отсутствие внешних воз-



действий оба состояния образцов сохранялись более трех месяцев.

Обсуждение результатов

Полученное нами количество стабильных переключений в полистироле более чем на два порядка превышает данные, имеющиеся в литературе [3, 4]. При этом характерные времена переключений существенно ниже типичных значений для органической резистивной памяти, лежащих в диапазоне единиц микросекунд, и редко — десятков наносекунд [5].

Существует несколько теорий, объясняющих механизмы резистивных переключений между состояниями, в том числе возникновение металлических или углеродных проводящих каналов, туннелирование носителей заряда между электродами, накопление заряда на металлических частицах или других примесях в органических материалах [2].

Анализ ВАХ и температурных зависимостей сопротивлений проводящего и непроводящего состояний позволяют сделать некоторые выводы о возможных механизмах переключений в полистироле. Так, омический характер проводимости в низкоомном состоянии и ее слабая зависимость от температуры соответствуют модели возникновения проводящих каналов между электродами. Устойчивости проводящего и непроводящего состояний, сохраняющихся длительное время, противоречат представлениям о накоплении заряда как в объеме, так и в приконтактной области образца. Омический вид вольтамперной характеристики в проводящем состоянии также противоречит ее ожидаемому виду для модели переключений, связанной с туннелированием носителей заряда в объем образца. На основании проведенного анализа перечисленных моделей мы считаем наиболее вероятной модель, согласно которой происходит образование проводящих каналов, несмотря на то, что прямых подтверждений этому получено не было.

Для непроводящего состояния полученные ВАХ наилучшим образом спрямляются в координатах моделей Пула — Френкеля [6] и Шоттки [7] (рис. 3). Корректность привлечения этих представлений для интерпретации данных, относящихся к органическим материалам, не является очевидной [8, 9]. Тем не менее, эти подходы использованы рядом авторов для интерпретации полученных результатов [10],

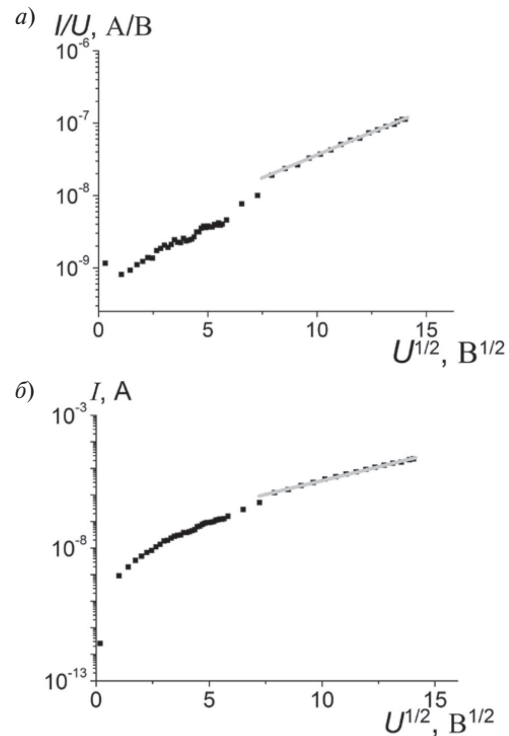


Рис. 3. Результаты спрямления полученных ВАХ в координатах моделей Пула — Френкеля (а) и Шоттки (б) для образца *стекло ИТО — полистирол — серебро* при комнатной температуре

поскольку их экспериментальные данные соответствовали аналитическим зависимостям.

ВАХ для эффекта Шоттки описываются следующим соотношением:

$$J = AT^2 \exp\left(\frac{-\varphi_s}{kT}\right) \exp\left(\frac{\beta_s V^{1/2}}{kTd^{1/2}}\right).$$

В случае эффекта Пула — Френкеля справедливо другое соотношение:

$$J = J_0 V \exp\left(-\frac{q\varphi_s - \frac{\beta_{PF} V^{1/2}}{d^{1/2}}}{kT}\right);$$

$$\beta_{PF} = 2\beta_s; \beta_{PF} = \left(\frac{e}{\pi\epsilon_r}\right)^{1/2},$$

где d — толщина образца, k — постоянная Больцмана, T — температура образца, φ_s — контактная разность потенциалов для перехода металл — полимер, ϵ_r — диэлектрическая проницаемость материала (полимера).

Для наших данных значения экспериментальных и теоретических коэффициентов эффекта Пула — Френкеля оказались достаточно близки:

$$\frac{\beta_{PFtheory}}{kTd^{1/2}} = 0,35 \text{ В}^{1/2};$$

$$\frac{\beta_{PFexp}}{kTd^{1/2}} = 0,29 \text{ В}^{1/2},$$

где $kT = 26 \text{ мэВ}$, $d = 10 \text{ мкм}$, $\epsilon_r = 2,24$.

Рассматривая возможность образования проводящих каналов при переключении, есть основания предположить, что в качестве источников заряда выступают отдельные проводящие островки, оставшиеся после разрыва проводящих каналов. Наличие таких проводящих участков может также объяснить и устойчивые переключения в электрических полях, более чем на порядок меньших, чем пробойные.

Итак, нами были изучены резистивные переключения в образцах с «сэндвич»-геометрией,

изготовленных методом ламинирования из коммерчески доступного полистирола. Наблюдавшиеся характерные времена переключений достигали нескольких наносекунд, а количество переключений достигало 1 млн., что значительно превосходит ранее опубликованные результаты. Определены критические значения напряжений и токов, характерные времена переключений и амплитуда эффекта (измерения сопротивлений проведены при температурах 4,2 и 300 К). Переключения наблюдались при значениях напряженности электрических полей существенно ниже пробойного. В связи с этим в полимере не происходят разрушительные процессы и изучаемый эффект отличается высокой стабильностью и повторяемостью. Таким образом, полученные результаты могут лечь в основу создания новых резистивных устройств памяти, способных работать в широком диапазоне температур.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ № 16.120.11.4663-МК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Scott, J.C.** Nonvolatile memory elements based on organic materials [Text] / J.C. Scott, L.D. Bozano // *Advanced Materials*. — 2007. — Vol. 19. — P. 1452–1463.
2. **Prime, D.** Overview of organic memory devices [Text] / D. Prime, S. Paul // *Philosophical Transactions of Royal Society A*. — 2009. — Vol. 367. — P. 4141–4157.
3. **Carchano, H.** Bistable electrical switching in polymer thin films [Text] // *Applied Physics Letters*. — 1971. — Vol. 19. — P. 414–415.
4. **Sakai, Y.** Switching in polystyrene and polymethylmethacrylate thin films: effect of preparation conditions of the polymers [Text] / Y. Sakai, Y. Sadaoka, G. Okada // *Journal of Materials Science*. — 1984. — Vol. 19. — P. 1333–1338.
5. **Lee, T.** Organic resistive nonvolatile memory materials [Text] / T. Lee, Y. Chen // *MRS Bulletin*. — 2012. — Vol. 37. — P. 144–149.
6. **Frenkel, J.** On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors [Text] / J. Frenkel // *Phys. Rev.* — 1938. — Vol. 54. — P. 647–648.
7. **Лебедев, А.И.** Физика полупроводниковых приборов [Текст]: А.И. Лебедев. — М.: Физматлит, 2008. — С. 84–95.
8. **Gill, W.D.** Drift mobilities in amorphous charge-transfer complexes of trinitrofluorenone and poly-*n*-vinylcarbazole [Text] / W.D. Gill // *Journal of Applied Physics*. — 1972. — Vol. 43. — P. 5033–5040.
9. **Teyssedere, G.** Charge transport modeling in insulating polymers: from molecular to macroscopic scale [Text] / G. Teyssedere, C. Laurent // *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*. — 2005. — Vol. 12 — P. 57–875.
10. **Hamadani, B.H.** Gated nonlinear transport in organic polymer field effect transistors [Text] / B.H. Hamadani, D. Natelson // *Journal of Applied Physics*. — 2004. — Vol. 95. — P. 1227–1232.



УДК 538.975:620 – 022.53

*А.В. Филимонов, Р.Г. Бурковский,
Ю.А. Бронвальд, С.Б. Вахрушев,
А.П. Шаганов, А.Э. Фотиади*

УЖЕСТОЧЕНИЕ МЯГКОЙ МОДЫ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ РЕЛАКСОРОВ

Тонкопленочные сегнетоэлектрики интересны как с прикладной, так и с чисто научной точек зрения. Среди перспективных применений можно указать электрооптические элементы, микроскопические электромеханические сенсоры. В последнее время значительное внимание уделяется возможности интеграции тонкопленочных сегнетоэлектриков в металлополупроводниковые наногетероструктуры в качестве пассивных (диэлектрические прослойки) и активных (сегнетоэлектрическая память) элементов [1]. Также тонкопленочные сегнетоэлектрики являются составляющими элементами магнитоэлектрических композитов, на основании которых планируется создание концептуально нового типа энергонезависимой памяти с высокой плотностью записи [2]. Особый интерес вызывают эпитаксиальные пленки, которые обладают существенно лучшими характеристиками по сравнению с поликристаллическими. За последние десятилетия стало очевидным, что наиболее перспективны для вышеозначенных применений пленки из упорядоченных сегнетоэлектриков, в которых одна или несколько подрешеток случайным образом заполнены ионами различного типа. Рекордными по достигаемым значениям диэлектрического и пьезоэлектрического откликов среди этих материалов являются цирконат-титанат свинца и сегнетоэлектрики релаксоры. В последних, в отличие от классических сегнетоэлектриков, не наблюдается характерного фазового перехода, сопровождаемого понижением симметрии кристалла. В то же время локально, что следует из широкого спектра экспериментальных данных, такое понижение симметрии все же происходит. Согласно общепринятой на сегодня точке зрения, данное локальное понижение симметрии приводит к возникновению системы полярных нанобластей, поведение

которых определяет основные свойства материала. Пленки релаксоров (помимо известных технологических применений) представляют собой широкое поле для изучения влияния как внешних эффектов, например эпитаксиального растяжения, так и размерных, — на свойства релаксоров. В частности, на данных объектах можно проследить изменение микроскопических характеристик при уменьшении толщины вплоть до характерных размеров полярных нанобластей.

Данная работа посвящена изучению коллективной атомной динамики в эпитаксиальных тонких пленках релаксора магнониобата свинца толщиной 120 нм методом неупругого рассеяния синхротронного излучения.

Тонкопленочные сегнетоэлектрики

На сегодняшний день опубликован ряд работ, посвященных изучению макро- и микроскопических свойств релаксорных пленок, выращенных на различных подложках. В большей части публикаций, посвященных исследованию структуры [3, 4] и диэлектрических характеристик [5 – 8] пленок PMN, а также родственных составов, использовались гетероструктуры типа PMN/LSCO/MgO, в которых эпитаксиальные пленки выращивались методом лазерного распыления [9] на поверхности проводящего буферного слоя из $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$, служащего одним из электродов. В экспериментах по инфракрасной спектроскопии обычно используются пленки, выращенные на сапфировой подложке [10], прозрачные в инфракрасной области; можно также использовать подложки из оксида магния [11].

Для тонких пленок релаксоров, вплоть до толщины $l = 45$ нм, характерны те же особенности диэлектрического спектра, что и для объемных (массивных) образцов. Наблюдается

широкий максимум на температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\epsilon(T)$, при этом положение и амплитуда этого максимума изменяются в зависимости от частоты измерения. При высоких температурах соблюдается закон Кюри–Вейса для обратной величины диэлектрической проницаемости. Ниже некоторой температуры, близкой к температуре Бёрнса в объемных (массивных) образцах, происходит отклонение от данного закона аналогично объемным образцам. Проницаемость релаксационных пленок может быть описана теми же эмпирическими соотношениями, которые оказались применимы для соответствующих свойств массивных образцов (количественно параметры при этом различаются) [5, 6]. В то же время между пленками и объемными образцами наблюдаются существенные различия. В работе [5] была прослежена зависимость основных диэлектрических свойств пленок PMN от толщины образца. Показано, что с ее уменьшением происходит существенное снижение абсолютной величины диэлектрической проницаемости и смещение максимума $\epsilon(T)$ в сторону меньших температур. Но авторы не обнаружили прямой взаимосвязи между величиной эпитаксиального растяжения $s = a/a_0 - 1$ и параметрами диэлектрического спектра пленок, характерной, например, для пленок перовскитоподобных квантовых параэлектриков [12]. В широком интервале значений толщины пленки ($100 \text{ нм} < l < 1000 \text{ нм}$) величина растяжения остается на практически постоянном низком уровне — $s \approx 5 \cdot 10^{-4}$, в то время как температура максимума в этом интервале толщин сдвигается более, чем на 50 К при изменении высоты пика $\epsilon(T)$ более, чем на порядок. Авторами [5] была выдвинута гипотеза, согласно которой наблюдаемые трансформации диэлектрического спектра при уменьшении толщины связаны с изменением параметров случайных полей, которое предсказывается теорией [13]. В работе [8] было обнаружено, что при температурах, находящихся вдали от температуры максимума $\epsilon(T)$, диэлектрическая проницаемость пленки толщиной 750 нм превосходит соответствующую величину для объемных образцов; в то же время максимальное значение ϵ_{max} для пленки ниже, чем для массива, что авторы связали с увеличением количества диполей в неполярной матрице, для кото-

рых характерны малые времена релаксации во внешнем поле.

Параметры фононов в пленках магнитообита свинца были исследованы методом инфракрасной спектроскопии в работе [10]. По результатам анализа спектров пропускания гетероструктуры PMN/Al₂O₃ были выявлены две моды. Одна из них интерпретирована как ТО1-мода, наблюдавшаяся ранее в массивных образцах. Другая является релаксационной, и авторы предложили для нее название «центральная мода» по аналогии с центральным пиком, характерным для неупругих нейтронных спектров в массивных релаксаторах. Согласно представленным данным, частота ТО1-моды в пленках весьма незначительно зависит от температуры при $T > 500 \text{ К}$, однако демонстрирует заметный рост при меньших температурах, в соответствии с законом Кюри – Вейса для квадрата частоты. Авторы предположили, что различие между тонкими пленками и массивными образцами в значениях частоты ТО1-моды при высоких температурах обусловлено невысокой точностью определения частоты из неупругих нейтронных спектров. При помощи модельных расчетов авторы также показали, что «центральная мода» может быть неразличимой на нейтронных экспериментах в силу малых значений частоты.

Методика эксперимента

Изучение фононных дисперсионных кривых в кристаллах проводится уже более полувека методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН) и около 15 лет — методом неупругого рассеяния рентгеновского излучения (НРРИ). Эти методы позволяют экспериментально определить дисперсионные зависимости элементарных возбуждений исследуемого материала во всей зоне Бриллюэна. До недавнего времени методы неупругого рассеяния применялись только для исследования объемных образцов; использование рассеяния нейтронов для изучения структур меньшей размерности затруднено большой глубиной их проникновения в твердые тела. Кроме того, использованию синхротронного излучения в этих целях препятствовал недостаточный технический уровень доступного экспериментального оборудования. Единственным инструментом изучения динамики решетки тонких пленок служил комплекс оптических



методов, позволяющих исследовать фононы в центре зоны Бриллюэна. В работе [14] мы показали, что применение неупругого рассеяния синхротронного излучения с использованием самых современных установок позволяет извлекать информацию о фононных дисперсионных кривых в образцах толщиной менее 100 нм. В данной работе методика усовершенствована и использована для выявления ключевых особенностей динамики коллективных колебаний решетки с изменением температуры в пленках модельного релаксора магнониобата свинца толщиной 120 нм.

Для проведения опытов по неупругому рассеянию синхротронного излучения была использована экспериментальная линия BL35XU синхротронного источника третьего поколения Spring-8 (префектура Хиого, Япония). На сегодняшний день она лидирует в мире в плане достижимого энергетического разрешения и интенсивности потока рентгеновского излучения. Для формирования монохроматического пучка синхротронного излучения используется монохроматор обратного рассеяния, представляющий собой монокристалл кремния со сколом в плоскости (1 1 1). Для монохроматизации пучка предусмотрено использование отражений кремния от плоскости (5 5 5) до (15 15 15), обеспечивающих энергии падающего пучка в интервале от 9,8 до 29,6 кэВ. В отличие от трехосных нейтронных спектрометров, где изменение энергии падающего на образец пучка нейтронов осуществляется путем изменения угла падения пучка на монохроматор, в спектрометре неупругого рассеяния рентгеновского излучения сканирование по энергии осуществляется за счет изменения температуры монохроматора, расположенного по отношению к падающему пучку под углом, близким к прямому. Для обеспечения энергетического разрешения порядка 1 мэВ необходимо, чтобы температура монохроматора поддерживалась с точностью до 10^{-3} К. При этом относительное разрешение $\Delta E / E$ составляет величину порядка 10^{-8} .

Анализ фононных дисперсионных кривых

При изучении фононных дисперсионных кривых было использовано отражение (11 11 11) монохроматора обратного рассеяния, соответствующее длине волны падающего излучения

$\lambda = 0,057$ нм и энергии $E = 21,75$ кэВ. При таком выборе отражения разрешение по энергии составляет $\Delta E \approx 1,2$ мэВ, что сопоставимо с энергетическим разрешением современных трехосных спектрометров на тепловых нейтронах. Перед проведением измерений неупругого отклика в пленке была проведена экспериментальная оценка энергетического разрешения. Характерный спектр рассеяния на упруго рассеивающем модельном образце приведен на рис. 1. Следует отметить, что несмотря на малость величины $\Delta E \approx 1,2$ мэВ, вычисляемой как полная ширина пика на половине его высоты (FWHM), форма линии является лоренцевой, что обуславливает медленное спадание интенсивности при отдалении от центра пика в соответствии с законом $1 / (E - E_0)^2$, в отличие от рассеяния нейтронов, где функция разрешения имеет форму Гаусса. При малых значениях энергии фононов гауссова форма функции разрешения трехосных нейтронных спектрометров более выгодна, поскольку позволяет эффективно отсекают вклады от рассеяния с передачей энергии E , отстоящей от точки настройки E_0 более, чем на величину ΔE . Однако с увеличением энергии E_0 , соответствующей точке настройки нейтронного спектрометра, ширина энергетического разрешения ΔE значительно увеличивается за счет изменения геометрии трехосного спектрометра. Неупругое рассеяние

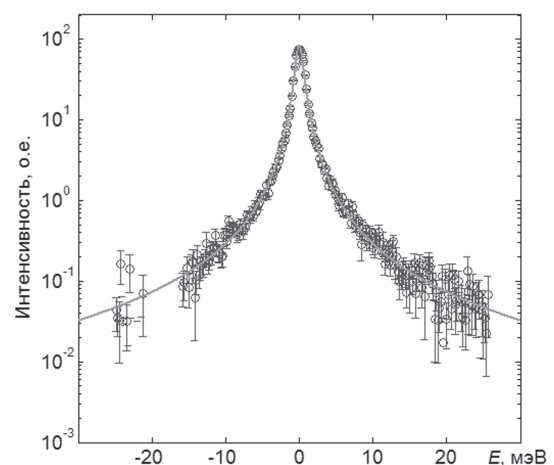


Рис. 1. Спектр неупругого рассеяния рентгеновского излучения на монокристалле Si, полученный с целью определения энергетического разрешения спектрометра.

Сплошная линия соответствует аппроксимации функцией $I(E) = A(E^2 + \gamma^2)$

синхротронного излучения лишено данного недостатка, поскольку параметр разрешения ΔE не зависит от энергии точки настройки E_0 . Таким образом, при измерении высокочастотных фоновых мод неупругое рассеяние синхротронного излучения — это более информативный метод.

При помощи метода рентгеновской дифракции было установлено, что ориентации главных кристаллографических направлений в пленке и подложке совпадают, то есть вблизи каждого из отражений MgO присутствует отражение PMN с теми же индексами Миллера, а расстояние между этими отражениями в обратном пространстве определяется разницей между величинами постоянной решеток пленки и подложки, составляющими соответственно $d_{\text{PMN}} = 0,405$ нм и $d_{\text{MgO}} = 0,420$ нм. Структура оксида магния соответствует пространственной группе $Fm-3m$, вследствие чего для него существуют правила систематического погасания рефлексов, согласно которым присутствуют только отражения, для которых $h+k$, $h+l$, $k+l = 2n$. Для PMN, структура которого соответствует структуре кубического перовскита, характеризуемой пространственной группой $Pm-3m$, правил систематического погасания не существует и наблюдаются все рефлексы. Таким образом, для изучения фононов магнониобата свинца вблизи центра зоны Бриллюэна наиболее удобными оказываются зоны, в которых нет отражения от подложки, такие как $(0 -1 3)$ и $(0 0 3)$. Тем не менее, в данной работе был также исследован неупругий отклик в зоне $(0 0 2)$, в которой присутствует брэгговское рассеяние от подложки и неупругое рассеяние на акустических фононах MgO. Направление $[1 0 0]$ совпадало с направлением нормали к поверхности пленки. Соответственно, для всех исследованных зон компонента вектора рассеяния в направлении вдоль нормали к поверхности равнялась нулю, регистрировалась передача импульса в направлениях, параллельных поверхности пленки.

На рис. 2 приведены спектры неупругого рассеяния, снятые вблизи узла обратной решетки $(0 -1 3)$ при $\mathbf{Q} = (0; -0,85; 3)$ в интервале температур $250 \text{ K} < T < 800 \text{ K}$. На спектрах присутствуют вклады от рассеяния на поперечных акустических фононах и сильный центральный пик. Как и в массивных релаксорах, энергетическая ширина квазиупругого пика полностью

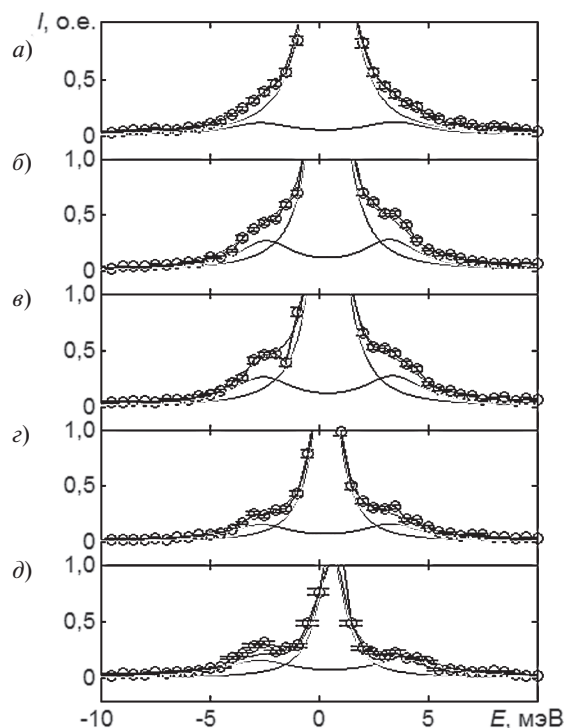


Рис. 2. Температурная эволюция спектров НРРИ в пленке $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$, соответствующих вектору рассеяния $\mathbf{Q} = (0, -0,85, 3)$. Температура образца, К: 350(a), 600(б), 650(в), 700(г), 800(д)

определяется энергетическим разрешением прибора. Для описания спектров неупругого рассеяния применялось выражение

$$I(E) = S_{\text{cp}}^2 \cdot f(E, 0, \gamma_{\text{cp}} + \gamma_{\text{res}}) + \sum_i S_i^2 \frac{E_i^0}{1 - e^{-E_i^0/kT}} \frac{f(E, E_i^0, \gamma_i + \gamma_{\text{res}})}{(E_i^0)^2} + \sum_i S_i^2 \frac{E_i^0}{1 - e^{-E_i^0/kT}} \frac{f(E, -E_i^0, \gamma_i + \gamma_{\text{res}})}{(E_i^0)^2}, \quad (1)$$

где S_{cp} — структурный фактор для квазиупругого диффузного рассеяния; S_i , E_i^0 и γ_i — неупругий структурный фактор, энергетическое положение и величина затухания для i -ой фононной моды.

В данном выражении присутствуют члены, соответствующие рассеянию как с рождением фононов i -ой моды, так и с их уничтожением. Величина γ_{res} соответствует энергетическому разрешению спектрометра, ее включение в выражение (1) позволяет при оптимизации параметров модели получать значения затуханий



фононов, скорректированные с учетом параметров экспериментального разрешения, определенных независимо. Для описания формы линии отдельных фононов использована функция Лоренца $f(E, E^0, \gamma)$, определяемая выражением

$$f(E, E^0, \gamma) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\gamma}{(E - E^0)^2 + \gamma^2}. \quad (2)$$

С точностью до погрешности определения параметров энергетическое положение $E^0_{\text{ТА}}$, величина затухания $\gamma_{\text{ТА}}$ и неупругий структурный фактор SFTA поперечного акустического фонона не зависят от температуры при данном значении вектора рассеяния $\mathbf{Q} = (0; -0,85; 3)$. В то же время интенсивность центрального пика растет с понижением температуры (рис. 3). При уменьшении температуры от $T = 650$ К, соответствующей температуре Бёрнса для массивных релаксоров, до $T = 350$ К интенсивность центрального пика, пропорциональная квадрату структурного фактора, увеличивается на 46 %. Это существенно отличается от ситуации в массиве, где выше температуры Бёрнса центральный пик пропадает [15]. В пленках же наблюдается сильное квазиупругое рассеяние при температурах, превышающих $T = 650$ К. Природа этого эффекта на данный момент не ясна. Вполне вероятно, что наличие центрального пика при температурах выше температуры Бёрнса обусловлено присутствием скоррелированных ионных смещений в пленках при столь высоких температурах, хотя возможно и альтернативное объяснение, в соответствии с которым квазиупругое рассеяние при $T > 650$ К вызвано зеркальным отражением пучка рентгеновского излучения и является, таким образом, экспериментальным артефактом.

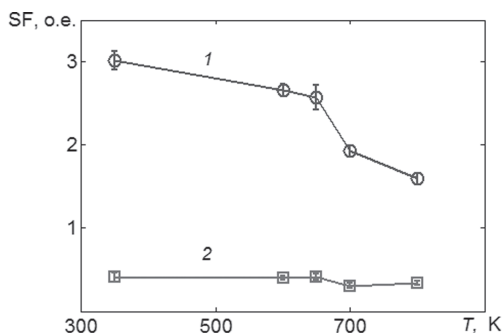


Рис. 3. Температурные зависимости структурного фактора для центрального пика (1) и ТА-фононов (2) в точке настройки спектрометра $\mathbf{Q} = (0, -0,85, 3)$

При отдалении от центра зоны Бриллюэна на величину $q = 0,25 a^*$ (рис. 4) величина затухания ТА-фононов перестает быть температурно-независимой, наблюдается существенное уширение фоновых резонансов при охлаждении образца от значения $\gamma_{\text{ТА}} = 0,4$ мэВ при $T = 800$ К до $\gamma_{\text{ТА}} = 1,1$ мэВ при $T = 650$ К (рис. 5). Аналогичный эффект присутствует в массивных релаксорах. В интервале температур $T_f < T < T_d$ наблюдается увеличение затухания ТА-фононов в 1,5 раза [16], что интерпретируется рядом авторов [16, 17] как следствие наличия в данном температурном диапазоне полярных нанодоменов, которые за счет присутствия в соответствующих ионных смещениях сдвиговой компоненты [18] сильно взаимодействуют с ТА-фононами [19].

В зонах Бриллюэна $(0 - 1 3)$ и $(0 0 3)$ рассеяние на поперечной оптической моде наблюдается, но его интенсивность сравнима с ха-

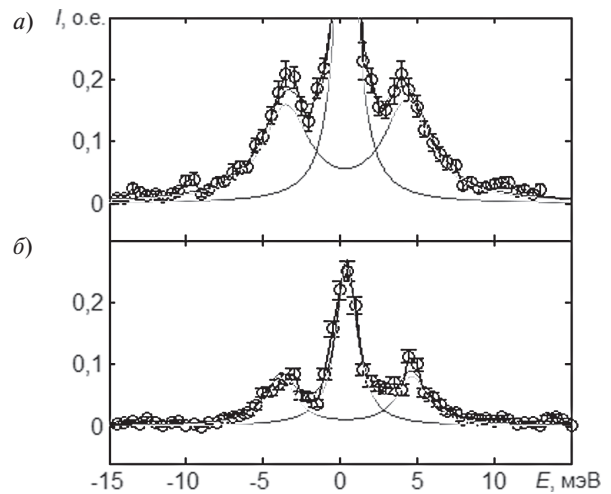


Рис. 4. Спектры НРПИ в пленке $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$, соответствующие вектору рассеяния $\mathbf{Q} = (0, -0,75, 3)$, при температурах $T = 650$ К (а) и 800 К (б)

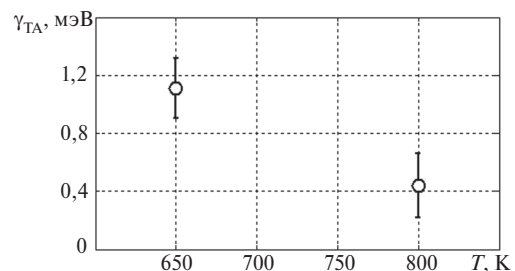


Рис. 5. Энергетическая ширина ТА-фонона в зоне $(3 0 0)$ при $\mathbf{q} = (0, 0,25, 0)$

ракторной величиной погрешности измерений. Интенсивность рассеяния на ТО-моды в пленке PMN достаточно высока для количественного анализа в зоне (0 0 2).

Данная зона Бриллюэна в PMN сильно перекрывается в обратном пространстве с зоной Бриллюэна (0 0 2), однако положения центров зон в пленке и подложке не совпадают. Расстояние между ними в обратном пространстве составляет

$$2(2\pi/d_{\text{PMN}} - 2\pi/d_{\text{MgO}}) = 0,12\text{\AA}^{-1},$$

что эквивалентно $0,077 a^*_{\text{PMN}}$. Спектры неупругого рассеяния в точке $\mathbf{Q} = (0; 0,1; 2)$, соответствующие температурам 250, 550 и 800 К приведены на рис. 6. Интенсивность рассеяния на ТО-фононах в пленке PMN существенно ниже интенсивности рассеяния на ТА-фононах подложки, с одной стороны, из-за малого объема пленки, в котором происходит неупругое рассеяние излучения, а с другой — из-за больших значений частоты ТО-моды по сравнению с ТА-модами в силу соотношения $I(\omega) \propto 1/\omega^2$. Для того, чтобы существенно различные по интенсивности вклады в неупругий спектр могли быть представлены на одном графике, данные на рис. 6 приведены в логарифмическом мас-

штабе. Энергетические положения двух ТА- и одной ТО-ветви помечены стрелками.

В зоне (0 0 2) была исследована температурная эволюция параметров всех отмеченных на рис. 6 фоновых резонансов для значений приведенного волнового вектора $q = 0,10; 0,15$ и $0,25$ в интервале температур $250\text{ К} < T < 800\text{ К}$. Каких-либо существенных изменений для энергетических положений и величин затухания исследованных фононов в данном температурном интервале обнаружено не было. На рис. 7 представлены температурные зависимости частот ТА- и ТО-фононов в пленке PMN для точки настройки $\mathbf{Q} = (0; 0,1; 2)$, а также для ТА-фононов в подложке в той же точке обратного пространства. Видно, что частота ТО-моды практически не зависит от температуры. Это весьма неожиданный факт, поскольку в массивных релаксорах низкоэнергетическая ТО-мода является мягкой и ее частота уменьшается с понижением температуры при $T > T_d$ [20 – 22]. Сходная ситуация наблюдается в пленках сегнетоэлектриков и квантовых параэлектриков, где частота мягкой моды вблизи критической температуры существенно выше, чем соответствующая частота в массивных образцах, а зависимость частоты мягкой моды от температуры в пленках становится более слабой [23 – 25].

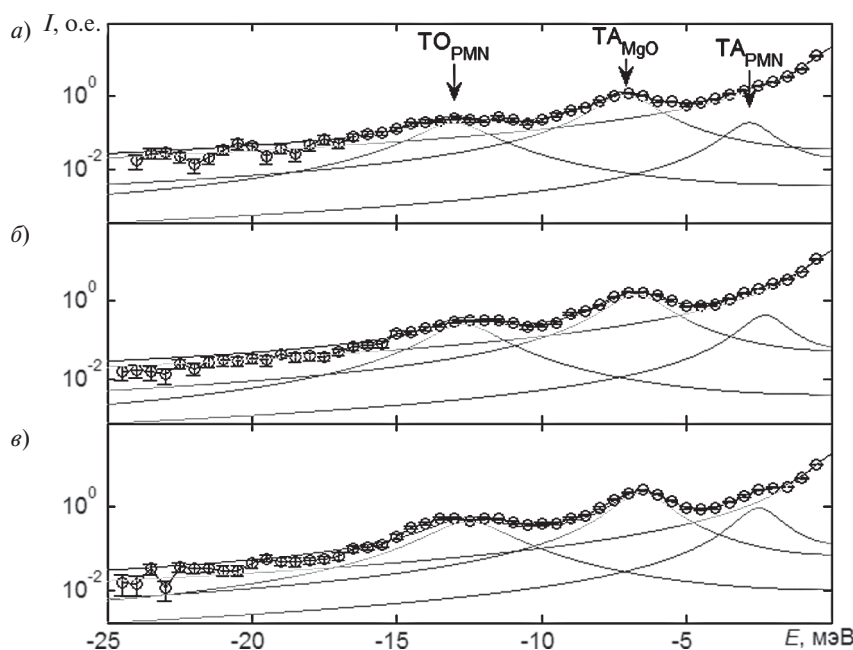


Рис. 6. Спектры НРПИ в пленке $\text{RbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$, соответствующие вектору рассеяния $\mathbf{Q} = (0; 0,1; 2)$, при температурах $T = 250\text{ К}$ (а), 550 К (б) и 800 К (в)

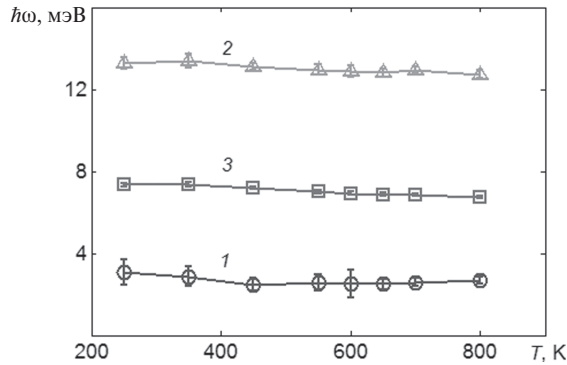


Рис. 7. Температурные зависимости частот ТА-(1) и ТО-(2) фононов в пленке PMN, а также ТА-фонона в подложке MgO (3), соответствующие вектору рассеяния $\mathbf{Q} = (0; 0,1; 2)$, выраженному в долях ячейки обратной решетки магнониобата свинца

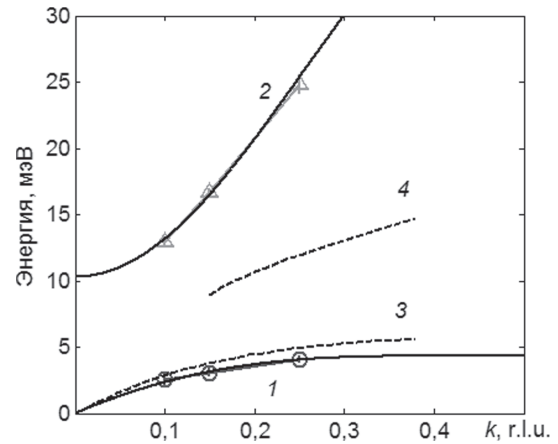


Рис. 8. Дисперсионные кривые для фононов в пленке толщиной 120 нм (1, 2) и в массивном образце (3, 4) PMN. Приведены поперечные акустические (1, 3) и оптические (2, 4) моды

Если исходить из того, что низкоэнергетическая мода в PMN не является мягкой, то следует предположить, что формирование полярных нанодоменов в тонких пленках происходит в результате механизмов, отличных от механизма конденсации поперечной ТО1-моды. Также возможно, что как и в массивных образцах [21, 22], в тонких пленках присутствует дополнительное ТО-возбуждение, определяющее диэлектрический спектр тонких пленок; конденсация такого возбуждения приводит к формированию устойчивых полярных корреляций при низких температурах. На экспериментах по НРРИ в пленках указанного возбуждения не было обнаружено, возможно, вследствие малости соответствующего неупругого структурного фактора в исследованных зонах.

На основании анализа спектров, полученных в зоне (2 0 0) при значениях $q = 0,10; 0,15; 0,20$ определены дисперсионные зависимости для ТА- и ТО-фононов в пленке и ТА-фонона в подложке (рис. 8). Для спектров неупругого рассеяния, снятых при $q < 0,1$, ввиду неидеальности экспериментального разрешения по импульсу и энергии присутствует сильный вклад от брэгговского рассеяния, интенсивность которого существенно выше интенсивности рассеяния на фононах. Вследствие этого частоты фононов не были определены для малых значений. При построении дисперсионных кривых в области малых значений приведенного волнового вектора использовалась экстраполяция экспериментальных зависимостей при помощи соотношений

$$\begin{aligned} \omega_{\text{ТА}} &= A \sin(\pi q) + B \sin^2(\pi q); \\ \omega_{\text{ТО}}^2(q) &= \omega_0^2 + Dq^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Результаты аппроксимации при помощи соотношений (3) представлены на рис. 8 в виде сплошных линий. Там же для сравнения представлены дисперсионные зависимости в массивном магнониобате свинца при температуре $T = 550$ К [20]. Видно, что наряду с весьма существенным различием между дисперсионными зависимостями, для ТО-фонона в пленке и в массивном PMN имеется заметное различие в дисперсии для акустических фононов. Частота ТА-фонона в пленке оказывается ниже, чем в массиве.

В данной работе исследованы пленки толщиной 120 нм, что не является пределом, судя по получаемой на эксперименте интенсивности рассеяния на фононах в пленке. В отношении интенсивности рассеяния толщина пленки, как ожидается, может быть уменьшена в несколько раз; при этом сохраняется возможность определения параметров фононных резонансов на основе полученных спектров с приемлемой точностью для широкого круга задач. Возможное ограничение по толщине пленки связано с тем, что высокоэнергетическое рентгеновское излучение, необходимое для получения разрешения по энергии порядка 1 мэВ, характеризуется большой глубиной проникновения в образец. При малой толщине пленки, несмотря на то, что интенсивность рассеяния на фононах

в пленке будет достаточно высокой, будет присутствовать вклад от рассеяния на подложке, существенно превышающий данную интенсивность, на фоне которого вклад от рассеяния на пленке будет трудно различим. Для преодоления связанных с этим ограничений необходим выбор материала подложки, для которого в интересующем диапазоне значений переданной энергии и импульса сечение рассеяния является малым.

Таким образом, проведенное в данной работе исследование тонких пленок магнониобата свинца показало, что микроскопические особенности структуры и динамики решетки в данных объектах во многом сходны с соответствующими особенностями в массивных релаксорах, в частности – присутствует температурно-зависимое квазиупругое рассеяние, интенсивность которого демонстрирует сильный рост при понижении температуры. Такое поведение может свидетельствовать в пользу

возможности формирования полярных нанообластей в пленках PMN толщиной, сравнимой по порядку величины с размерами полярных нанообластей. Параметры же фонованого спектра в тонких пленках оказываются существенно другими: поперечная ТО-мода, в отличие от массивных образцов, не является сильно затухающей, а ее частота практически не зависит от температуры. Сходные эффекты наблюдались в тонких пленках простых сегнетоэлектрических перовскитов, но эти явления в них не так сильно выражены, как в пленках магнониобата свинца. На основании полученных результатов можно предположить, что в тонких пленках релаксоров формирование полярных нанообластей обусловлено механизмами, отличными от конденсации поперечной оптической моды. В частности, можно предположить, что аналогично массивным релаксорам ключевую роль в образовании полярных нанообластей в пленках играет дополнительное низкоэнергетическое возбуждение.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Министерства образования и науки РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Scott, J.F. Application of modern ferroelectrics [Text] / J.F. Scott // Science.— 2007.— Vol. 315.— P. 954–959.
2. Eerenstein, W. Giant sharp and persistent converse magnetoelectric effects in multiferroic epitaxial heterostructures [Text] / W. Eerenstein, M. Wiora, J. Prieto, [et al.] // Nature Materials.— 2007.— Vol. 6, No. 5.— P. 348–35.
3. Lemee, N. Temperature dependent structural properties of $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ thin films [Text] / N. Lemee, H. Bouyanfif, F.I. Marrec, [et al.] // Ferroelectrics.— 2003.— Vol. 288.— P. 277–285.
4. Levoska, J. Structural characterization of relaxor ferroelectric $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ - PbTiO_3 thin film heterostructures deposited by pulsed laser ablation [Text] / J. Levoska, M. Tyunina, A. Sternberg, S. Leppavuori // Applied Physics A: Materials Science & Processing.— 2000.— Vol. 70.— P. 269–274.
5. Tyunina, M. Intrinsic dipolar glass behavior in epitaxial films of relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / M. Tyunina, M. Plekh, J. Levoska // Phys. Rev. B.— 2009.— Vol. 79, No. 5.— P. 054105 (11).
6. Tyunina, M. Dielectric anomalies in epitaxial films of relaxor ferroelectric $(\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3)_{0.68}-(\text{PbTiO}_3)_{0.32}$ [Text] / M. Tyunina, J. Levoska // Phys. Rev. B.— 2001.— Vol. 63, No. 22.— P. 224102 (8).
7. Tyunina, M. Polarization relaxation in thin-film relaxors compared to that in ferroelectrics [Text] / M. Tyunina, J. Levoska, I. Jaakola // Phys. Rev. B.— 2006.— Vol. 74, No. 10.— P. 104112 (10).
8. Tyunina, M. Enhanced relaxor behavior in epitaxial $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ films [Text] / M. Tyunina, J. Levoska, D. Nuzhnyy, S. Kamba // Phys. Rev. B.— 2010.— Vol. 81, No. 13.— P. 132105 (4).
9. Tyunina, M. Phase diagram of thin-film relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / M. Tyunina, J. Levoska // Journal of Applied Physics.— 2005.— Vol. 97.— P. 114107 (7).
10. Kamba, S. Soft and central mode behaviour in $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ relaxor ferroelectric [Text] / S. Kamba, M. Kempa, V. Bovtun, [et al.] // Journal of Physics. Condensed Matter.— 2005.— Vol. 17.— P. 3965 (10).
11. Yang, T. Infrared properties of single crystal MgO , a substrate for high temperature superconducting films [Text] / T. Yang, S. Perkowitz, G. Carr, [et al.] // Applied Optics.— 1990.— Vol. 29, No. 3.— P. 332–333.
12. Haeni, J. Room-temperature ferroelectricity in strained SrTiO_3 [Text] / J. Haeni, P. Irvin, W. Chang, [et al.] // Nature.— 2004.— Vol. 430, No. 7001.— P. 758–761.
13. Eliseev, E.A. Random field based model for calculation of the properties of relaxor ferroelectric thin films [Text] / E.A. Eliseev, M.D. Glinchuk // Ferroelectrics.— 2005.— Vol. 316.— P. 167–175.
14. Филимонов, А.В. Возможность формирования полярных нанообластей в тонких пленках магнониобата свинца [Текст] / А.В. Филимонов, С.Б. Вахрушев, Р.Г. Бурковский, А.И. Рудской // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.— 2009.— Т. 4 (88).— С. 99–106.



15. **Naberezhnov, A.** Inelastic neutron scattering study of the relaxor ferroelectric $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ at high temperatures [Text] / A. Naberezhnov, S. Vakhrushev, B. Dorner [et al.] // *Eur. Phys. J. B.*— 1999.— Vol. 11.— P. 13–20.
16. **Wakimoto, S.** Ferroelectric ordering in the relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ as evidenced by low-temperature phonon anomalies [Text] / S. Wakimoto, C. Stock, R. Birgeneau [et al.] // *Phys. Rev. B.*— 2002.— Vol. 65, No. 17.— P. 172105 (4).
17. **Gehring, P.M.** Reassessment of the Burns temperature and its relationship to the diffuse scattering, lattice dynamics, and thermal expansion in relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / P.M. Gehring, H. Hiraka, C. Stock [et al.] // *Phys. Rev. B.*— 2009.— Vol. 79, No. 22.— P. 224109 (14).
18. **Hirota, K.** Neutron diffuse scattering from polar nanoregions in the relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / K. Hirota, Z. Ye, S. Wakimoto [et al.] // *Phys. Rev. B.*— 2002.— Vol. 65, No. 10.— P. 104105 (7).
19. **Stock, C.** Strong influence of the diffuse component on the lattice dynamics in $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / C. Stock, H. Luo, D. Viehland [et al.] // *Journal of the Physical Society of Japan.*— 2005.— Vol. 74, No. 11.— P. 3002–3010.
20. **Gehring, P.** Soft mode dynamics above and below the Burns temperature in the relaxor $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Text] / P. Gehring, S. Wakimoto, Z. Ye, G. Shirane // *Phys. Rev. Lett.*— 2001.— Vol. 87, No. 27.— P. 277601 (4).
21. **Burkovsky, R.** Inelastic and quasielastic neutron scattering in $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ above the Burns temperature [Text] / R. Burkovsky, S.B. Vakhrushev, K. Hirota, M. Matsuura // *Ferroelectrics.*— 2010.— Vol. 400.— P. 372–386.
22. **Вахрушев, С.Б.** Двухмодовое поведение в релаксоре $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ [Текст] / С. Б. Вахрушев, Р.Г. Бурковский, С. Шапиро, А. Иванов // *Физика твердого тела.*— 2010.— Т. 52.— С. 838–841.
23. **Sun, L.** Phonon-mode hardening in epitaxial PbTiO_3 ferroelectric thin films [Text] / L. Sun, Y. Chen, L. He [et al.] // *Phys. Rev. B.*— 1997.— Vol. 55, No. 18.— P. 12218–12222.
24. **Ostapchuk, T.** Origin of soft-mode stiffening and reduced dielectric response in SrTiO_3 thin films [Text] / T. Ostapchuk, J. Petzelt, V. Zelezny [et al.] // *Phys. Rev. B.*— 2002.— Vol. 66, No. 23.— P. 235406 (12).
25. **Hao, J.** Dielectric properties of pulsed-laser-deposited calcium titanate thin films [Text] / J. Hao, W. Si, X. Xi [et al.] // *Appl. Phys. Lett.*— 2000.— Vol. 76.— P. 3100 (3).

УДК 539.21

П.А. Карасёв, А.И. Титов, М.В. Улла,
Ф. Джурабекова, А. Куронен, К. Нордлунд

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ GaN АТОМАРНЫМИ И МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ИОНАМИ

Проводимые в течение последних десятилетий интенсивные исследования нитрида галлия GaN позволили существенно продвинуться как в понимании фундаментальных свойств данного материала, так и в очень широком диапазоне его возможного практического использования. Это касается как процессов выращивания, так и способов модификации свойств при создании тех или иных приборов. Однако комплексный состав GaN и высокая степень ионности химических связей обуславливает сложность процессов, происходящих как при его получении, так и при обработке.

Ионная имплантация является важнейшей составляющей полупроводниковой технологии, поскольку она используется для контролируемого введения атомов примеси. Однако облучение кристаллических веществ ускоренными ионами всегда приводит к формированию структурных нарушений, которые в свою очередь также изменяют свойства материала. Образуемые в результате ионного воздействия дефекты структуры чаще всего нежелательны, поскольку снижают электропроводность, вводят уровни рекомбинации и т. п. В то же время

последнее может играть и положительную роль, так как модификация материала через введение радиационных дефектов может приводить к существенному росту скорости работы электронных и оптоэлектронных полупроводниковых приборов [1, 2]. Таким образом, бомбардировка ускоренными ионами позволяет не только легировать, но и решать задачи инженерии дефектов путем варьирования массы и энергии ионов. Дополнительным инструментом на этом пути является использование молекулярных и кластерных ионов, поскольку в этом случае большую роль должны играть коллективные нелинейные эффекты.

Интенсивные исследования ионного повреждения поверхностных слоев GaN начались в 90-е годы, когда были разработаны технологии получения образцов достаточно высокого качества. К настоящему времени накоплен уже сравнительно обширный экспериментальный материал (см., например, обзор [3]). В частности, оказалось, что в этом случае даже при температуре жидкого азота большую роль играет динамический отжиг, то есть рекомбинация дефектов в процессе облучения. Так например, вследствие этого явления в GaN не наблюдается формирования разупорядоченных областей при попадании одного иона (даже при самых плотных каскадах смещений), то есть он обладает высокой радиационной стойкостью. Что же касается закономерностей образования дефектов кристаллической структуры при имплантации в нитрид галлия молекулярных и кластерных ионов, то полученные нами ранее данные [4, 5] свидетельствуют о проявлении сверхлинейности дефектообразования вблизи поверхности, где вероятно перекрытие индивидуальных каскадов смещений, создаваемых компонентами молекулы. Кроме того, в работе [5] показано, что при большой плотности каскада смещений, созданного атомарным ионом, формирование стабильных дефектов также нелинейно растет. Однако несмотря на довольно интенсивные исследования дефектообразования в нитриде галлия, происходящие процессы во многом еще не поняты.

Настоящая работа посвящена численному моделированию взаимодействия атомарных (F, P, Ag) и молекулярных (PF₂, PF₄) ионов с нитридом галлия методом молекулярной динамики.

Методика расчетов

Для моделирования решетки мишени взаимодействие между атомами галлия и азота описывались предложенным в работе [6] многочастичным Терсофф-потенциалом. Связи атомов в молекулах PF₂ и PF₄ моделировались при помощи потенциала Леннарда–Джонса

$$V(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6].$$

Параметры подбирались таким образом, чтобы корректно описать длины, энергии и углы связей между атомами. В соответствии с данными работ [7–9], энергии диссоциации ϵ составляли 4,60 и 1,66 эВ, а длины связей σ – 1,408 и 2,131 Å для взаимодействия между атомами P–F и F–F соответственно. Универсальный потенциал Зиглера–Бирзака–Литтмарка [10] гладко сшивался с каждым из них для описания взаимодействия частиц с большими энергиями. Электронные потери рассчитывались кодом SRIM [10] (версия 2008.04) и учитывались как сила трения для частиц с энергией выше 1 эВ.

Расчеты проводились разработанным ранее кодом PARCAS с адаптивным шагом по времени [11, 12]. Перед началом облучения созданная расчетная ячейка нитрида галлия со структурой вюрцита размерами 111 × 110 × 109 Å (120 000 атомов) выдерживалась при 300 К. Ионы направлялись на открытую поверхность (0001) под углом 7° к нормали для подавления эффектов каналирования. Место падения очередного иона выбиралось случайным образом путем сдвига ячейки в поперечных направлениях. На боковых гранях использовались периодические граничные условия. Нижние атомы ячейки жестко закреплялись, чтобы избежать дрейфа. Избыток тепла, принесенный падающим ионом, удалялся применением контроля температуры по Берендсену [13] на периодических границах. Контроль давления не осуществлялся, поскольку в системе присутствовала открытая поверхность. Количество точечных дефектов определялось путем сравнения текущего состояния с исходной решеткой по методике анализа полиэдров Вороного. Пустые полиэдры считались вакансиями, полиэдры с двумя и более атомами – междоузлиями, и полиэдры с одним атомом, тип которого не совпадает с исходным, – антисайтами [14, 15]. Для набора статистики было промоделировано



20 независимых событий падения каждого из рассматриваемых ионов. После каждого события образец возвращался в исходное состояние, выполнялся поперечный сдвиг, и начиналось моделирование следующего события. Энергии всех падающих ионов составляли 50 эВ/а.е.м. (0,95; 1,55; 5,35; 3,45 и 5,35 кэВ для ионов F, P, Ag, PF₂ и PF₄ соответственно).

Результаты и обсуждение

Зависимости среднего количества вакансий в мишени от времени для всех рассмотренных ионов представлены на рис. 1, а. Ход кривых для междоузельных атомов и дефектов замещения практически повторяет уже приведенные и имеет все те же особенности, поэтому они не представлены. Видно, что с ростом массы иона увеличивается и максимальное количество дефектов, возникающих в ходе взаимодействия. После остывания каскада полное количество вакансий, созданных ионами серебра или PF₄ уменьшается примерно в 10 раз, а для более легких ионов — приблизительно в 5 — 7 раз. Это значение доли рекомбинации меньше, чем на-

блюдалось ранее в расчетах для металлических мишеней (около 50) [16], но больше, чем получено для кремния, в котором она составляет около 2 — 3 [14]. Из экспериментов известно (см., например, [16] и ссылки в ней), что металлы обладают высокой радиационной стойкостью и их невозможно перевести ионным облучением в аморфное состояние ввиду сильного динамического отжига генерируемых ионами точечных дефектов. В кремнии, наоборот, динамический отжиг довольно слаб, поэтому он легко аморфизуется [17]. В нитриде галлия по имеющимся экспериментальным данным [3] динамический отжиг проявляется сильнее, чем в кремнии, но слабее, чем в металлах. Таким образом, этот результат нашего моделирования находится в соответствии с экспериментальными данными.

Из экспериментов также известно [4, 5], что существенную роль в формировании радиационных нарушений в нитриде галлия играет плотность каскадов смещений, формируемых падающим ионом. В частности, при превышении некоторого критического значения этой плотности возникает нелинейный рост скорости дефектообразования по сравнению с величинами, следующими из приближения парных столкновений. Полученные нами расчетные данные тоже показывают нелинейный рост генерации точечных дефектов. На рис. 1, б, в представлены зависимости числа сгенерированных вакансий от времени для молекулярных ионов и количества вакансий, полученных из линейных комбинаций генерации ионами фтора $N_{vac}(F)$ и фосфора $N_{vac}(P)$:

$$N_{vac}(PF_n) = N_{vac}(P) + n \cdot N_{vac}(F).$$

Если нелинейности образования первичных дефектов в каскадах нет, то кривые на обоих рисунках должны совпадать. Однако видно, что для более тяжелой молекулы PF₄ генерация вакансий приблизительно в три раза выше при временах менее 2,5 пс. Для молекулы PF₂ она лишь незначительно превышает суперпозицию генераций компонентов, причем поскольку в максимальную величину может давать вклад рассмотренный ниже эффект упругих колебаний решетки, можно сказать, что нелинейности в этом случае не наблюдаются. После момента 2,5 пс кривые совпадают, что дополнительно иллюстрируется данными таблицы, где также приведены статистические погрешности рас-

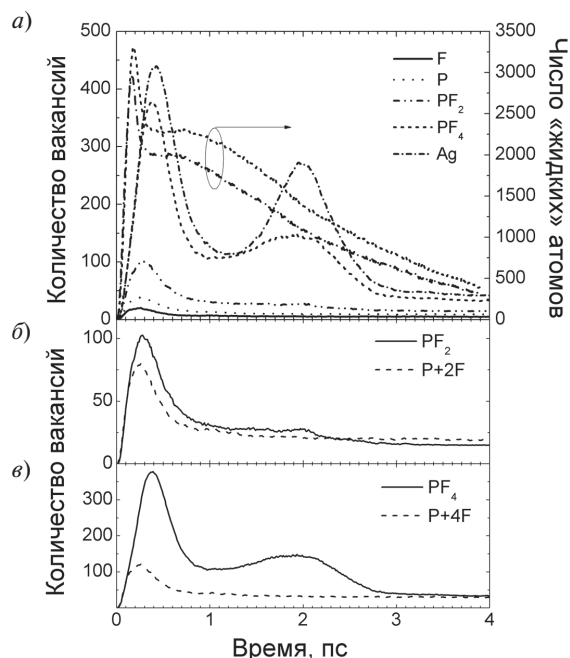


Рис. 1. Кинетика интегральной генерации вакансий при бомбардировке GaN различными ионами, а также количество атомов мишени в жидкой фазе при ее бомбардировке ионами Ag и PF₄ (а). Кинетика генерации вакансий для ионов PF₂ (б) и PF₄ (в) и соответствующие линейные комбинации

**Результат анализа образования простейших дефектов различными ионами
(усреднение по 20 независимым событиям) после термализации каскада (20 пс)**

Ион	Масса, а.е.м.	Энергия, кэВ	Финальное количество			
			вакансий	междоузель- ных атомов	антисайт- дефектов	распыленных атомов
F	19	0,95	5±1	5±1	4±1	1
P	31	1,55	9±2	8±1	8±1	1
Ag	107	5,35	37±5	32±3	33±3	2
PF ₂	69	3,45	14±1	16±1	17±1	4
PF ₄	107	5,35	29±3	28±2	32±3	7

четов. Таким образом, несмотря на обнаруженный нами для иона PF₄ нелинейный рост генерации точечных дефектов на начальном этапе взаимодействия, вклада в их полное окончательное количество этот эффект не вносит. В то же время нелинейность в эволюции каскада молекулярного иона должна иметь наибольшее значение вблизи поверхности, где атомы, составлявшие молекулу, еще не успели далеко «разбежаться». Помимо финального количества всех дефектов в таблице приведены средние коэффициенты распыления, которые, как это следует и из экспериментальных данных [18], показывают, что распыление молекулярными ионами более эффективно по сравнению с суммарным воздействием ее компонентов.

Рис. 1,а также показывает, что для тяжелых ионов Ag и PF₄ наблюдается появление еще одной особенности – дополнительного максимума примерно через 2 пс после падения иона на мишень. Моделирование нескольких событий на ячейках с утроенными линейными размерами показало, что этот максимум не является расчетным артефактом, вызванным размерными эффектами и/или жестко зафиксированной нижней границей. Еще одной причиной подобного поведения может быть обратный переход потенциальной энергии, накопленной атомами решетки, в кинетическую, что будет сопровождаться ростом числа смещенных атомов. Однако поскольку температура системы монотонно убывает в ходе всего взаимодействия, этот эффект в наших расчетах также не играет роли. Визуальная проверка динамики структуры позволяет предположить, что появление второго максимума вызвано локальными упругими колебаниями

решетки. Последние приводят к выходу части атомов в изгибающихся как целое цепочках из исходных полиэдров. Этот эффект может также давать вклад и в величину первого максимума, приводя к завышению количеств дефектов и коэффициентов рекомбинации. В то же время для более легкого иона PF₂ видимая амплитуда колебаний чрезвычайно мала, а для атомарных ионов фтора и фосфора колебаний вообще не видно. Максимальные концентрации дефектов для легких атомарных ионов достигаются быстрее, чем для тяжелого иона серебра, и тем более для молекулярного иона PF₄. Причем момент максимальной концентрации вакансий для легких ионов (около 0,18 пс) практически совпадает с моментом образования наибольшего количества атомов в жидкой фазе для тяжелых ионов (см. рис. 1,а). Представляется разумным предположить, что именно этот момент и следует рассматривать как наиболее подходящий для сравнения результатов наших расчетов с данными, получаемыми в рамках модели бинарных взаимодействий, например кодом TRIM.

На рис. 2 символами представлены полученные нами распределения вакансий по глубине нитрида галлия для различных ионов в моменты 0,18 и 20 пс, то есть при максимальном развитии каскада смещений и после его полного остывания. Кроме того, там же приведены соответствующие кривые, полученные кодом TRIM (версия TRIM 2003.26) с пороговой энергией смещения 25 эВ для обеих подрешеток. Генерация вакансий для молекул в этом случае определялась как линейная комбинация генераций их компонентов. Видно, что во всех случаях большую роль играет динамический от-

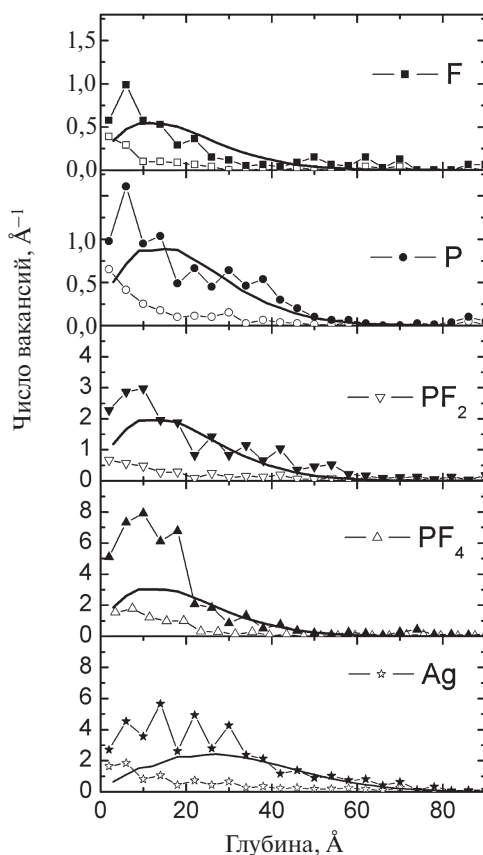


Рис. 2. Распределения по глубине вакансий, созданных различными ионами, в момент максимального развития (0,18 пс, закрытые символы) и после полного остывания каскада (20 пс, открытые символы). Сплошными линиями показаны распределения, рассчитанные программой TRIM

жиг внутри каскада, в ходе которого сформированные на начальном этапе точечные дефекты рекомбинируют. Причем распределения дефектов, оставшихся после термализации каскада, сильно сдвинуты к поверхности мишени по сравнению с распределением потерь в упругих столкновениях. Поскольку эти оставшиеся дефекты будут участвовать в процессах вторичного дефектообразования, распределения устойчивых дефектов также будут сдвинуты к поверхности по сравнению с первоначальной генерацией. Это может быть одной из причин наблюдаемого в экспериментах формирования аморфного слоя на поверхности нитрида галлия.

Из рис. 2 нетрудно заметить, что для ионов F, P и даже PF_2 распределения вакансий в момент 0,18 пс неплохо согласуются с расчетами в приближении парных взаимодействий,

за исключением приповерхностной области протяженностью примерно до 10 Å, где нами получены чуть более высокие значения. В то же время концентрации дефектов, создаваемых тяжелым атомарным ионом серебра, по нашим данным существенно (приблизительно в 2 раза) выше, чем следует из TRIM, вплоть до глубин около 25 Å. То есть для этого иона обнаружен нелинейный (по сравнению с приближением бинарных столкновений) рост генерации. Еще более ярко обнаруженный эффект иллюстрируется распределением вакансий для молекулы PF_4 , имеющей такую же массу и энергию, что и ион Ag. До глубин ~20 Å мы видим почти вдвое более высокие количества вакансий, а на больших глубинах кривые практически совпадают, причем «выключение» режима нелинейности происходит скачком, в очень малом диапазоне глубин. Отметим существенную разницу в распределениях дефектов, остающихся после попадания в GaN ионов PF_4 и Ag. Из рис. 2 видно, что атомарный ион создает протяженное вглубь мишени распределение, в то время как для молекулярного иона генерация велика вблизи поверхности и мала на глубине. Этот факт объясняется тем, что молекула диссоциирует вблизи поверхности, после чего количество как мгновенных, так и остаточных дефектов резко снижается. То есть нами обнаружено проявление молекулярного эффекта.

Рис. 3 дополнительно иллюстрирует особенности генерации дефектов молекулярными ионами. На нем приведены распределения по

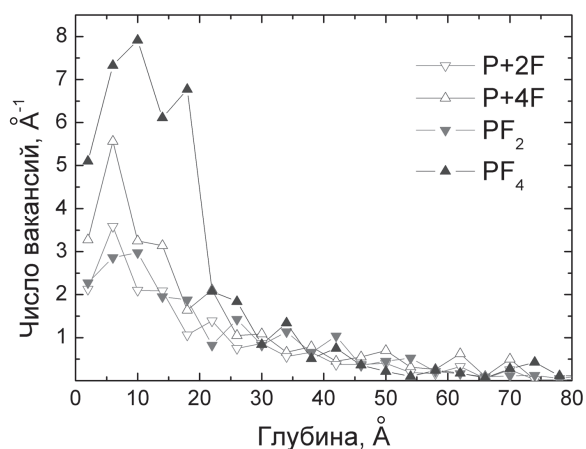


Рис. 3. Распределения вакансий, созданных молекулярными ионами PF_2 и PF_4 , по глубине в момент 0,18 пс и соответствующие линейные комбинации $\text{P} + 2\text{F}$ и $\text{P} + 4\text{F}$

глубине генерации для ионов PF_n и линейные комбинации генераций компонентами молекул. Подчеркнем, что все данные на рис. 3 получены именно в ходе МД-расчетов. Видно, что для молекулы PF_2 кривые практически совпадают, демонстрируя линейный характер взаимодействия, а для молекулы PF_4 наблюдается образование повышенного количества дефектов от поверхности мишени до $\sim 20 \text{ \AA}$. Единственной причиной наблюдаемых явлений могут быть коллективные процессы, которые возникают вследствие пространственной близости смещений, производимых атомами, входившими в молекулу. Анализ процесса «разбега» атомов-компонентов молекулярных ионов показывает, что расстояние между ними в среднем растет примерно до $15 \text{ \AA}$ за время проникновения центра масс молекулы на такое же расстояние. По нашим оценкам, это происходит за время около $0,02 \text{ пс}$, после чего в пределах проникновения, по-видимому, и начинается развитие перекрывающихся индивидуальных каскадов. В этой же области и наблюдается (по нашим расчетам) отклонение от линейности для молекулы PF_4 , то есть для нее проявляется молекулярный эффект.

Таким образом, при облучении тяжелыми ионами Ag и PF_4 в момент, когда концентрация точечных дефектов в нитриде галлия становится максимальной, проявляется эффект увеличения их количества. Для иона PF_2 подобной нелинейности не выявлено. Сильная внутрикаскадная рекомбинация приводит к исчезновению повышенных концентраций точечных дефектов за времена порядка 4 пс . В результате остаточное количество дефектов после попадания молекулярного иона равно сумме дефектов, созданных при независимом падении его компонентов. Однако следующий молекулярный ион попадет в более силь-

но нарушенную мишень. Поэтому с ростом флюенса молекулярных ионов (1 атом в наших расчетах соответствует флюенсу порядка 10^{12} см^{-2}) как генерация точечных дефектов, так и формирование устойчивых повреждений может происходить более эффективно по сравнению с облучением атомарными ионами. Этот вопрос будет рассмотрен в отдельной публикации.

Итак, в работе методом молекулярной динамики исследовано взаимодействие атомарных и молекулярных ионов с нитридом галлия. Показано, что для молекулярного иона PF_4 , равно как и для тяжелого атомарного иона Ag , в начале взаимодействия проявляется усиленная генерация простейших точечных дефектов по сравнению с уровнем, предсказанным приближением парных взаимодействий. Это связано с нелинейными процессами в каскадах смещений. Для иона PF_2 и легких атомарных ионов F и P подобной нелинейности не выявлено. Облучение молекулами PF_4 также приводит к образованию повышенного количества дефектов в приповерхностной области мишени до $\sim 20 \text{ \AA}$ по сравнению с линейной комбинацией генераций отдельными ионами фтора и фосфора. Сильная внутрикаскадная рекомбинация вызывает исчезновение избыточных концентраций за времена порядка 4 пс . Распределения остаточных концентраций точечных дефектов довольно существенно сдвинуты к поверхности мишени, что может приводить к хорошо известному из экспериментов эффекту роста в этой области аморфных слоев.

Работа выполнена в рамках совместного проекта ENIGAZ, поддержанного РФФИ и Академией Финляндии (грант 10-08-91751-АФ_а). Авторы также благодарят Центр научных вычислений в г. Эспоо (Финляндия) за предоставленное компьютерное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Hakkarainen, T.** Optical properties of ion irradiated and annealed InGaAs/GaAs quantum wells and semiconductor saturable absorber mirrors [Text]/ T. Hakkarainen, E.-M. Pavelescu, K. Arstila [et al.] // J. Phys. D. Appl. Phys. 2005. — Vol. 38. — P. 985–990.
2. **Yoshita, M.** Mode locking of a GaInN semiconductor laser with an internal saturable absorber [Text]/ M. Yoshita, M. Kuramoto, M. Ikeda, H. Yokoyama // Appl. Phys. Lett. — 2009. — Vol. 94. — P. 061104 (1–3).
3. **Kucheyev, S.O.** Ion implantation into GaN [Text]/ S.O. Kucheyev, J.S. Williams, S.J. Pearton // Mater. Sci. Eng. — 2001. — Vol. R. 33. — P. 51–107.
4. **Карасёв, П.А.** Плотность каскадов смещений в каскаде кластерного иона: методика расчета и влияние на образование структурных нарушений в ZnO и GaN [Текст]/ П.А. Карасёв, А.Ю. Азаров, А.И. Титов, С.О. Кучеев// ФТП. — 2009. — Т. 43. — С. 721–729.
5. **Kucheyev, S.O.** Energy spike effects in ion-bombarded GaN [Text]/ S.O. Kucheyev, A.Yu. Azarov, A.I. Titov,



P.A. Karasev [et al.] // J. Phys. D. Appl. Phys. — 2009. — Vol. 42. — P. 085309 (1–10).

6. **Nord, J.** Modelling of compound semiconductors: analytical bond-order potential for gallium, nitrogen and gallium nitride [Text] / J. Nord, K. Albe, P. Erhart, K. Nordlund // J. Phys. Condensed Matter. — 2003. — Vol. 15. — P. 5649–5662.

7. **Saito, S.** The microwave spectrum of the PF_2 radical in the X^2B^1 ground vibronic state [Text] / S. Saito, Y. Endo, E. Hirota // J. Chem. Phys. — 1986. — Vol. 85. — P. 1778–1784.

8. **Tschumper, G.S.** Structures, thermochemistry, and electron affinities of the PF_n and PF_n^- series, $n = 1-6$ [Text] / G.S. Tschumper, J.T. Fermann, H.F. Schaefer // J. Chem. Phys. — 1996. — Vol. 104. — P. 3676–3683.

9. **Tao, F.M.** On the use of bond functions in molecular calculations [Text] / F. M. Tao // J. Chem. Phys. — 1993. — Vol. 98. — P. 2481–2483.

10. **Ziegler, J.F.** The stopping and range of ions in matter [Text] / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark. — New York: Pergamon, 1985. — 268 с.

11. **Ghaly, M.** Molecular dynamics investigations of surface damage produced by kiloelectronvolt self-bombardment of solids [Text] / M. Ghaly, K. Nordlund, R.S. Averback // Phil. Mag. A. — 1999. — Vol. 79. — P. 795–820.

12. **Nordlund, K.** Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1–100 keV energy range [Text] / K. Nordlund // Comput. Mater. Sci. — 1995. — Vol. 3. — P. 448–456.

13. **Berendsen, H.J.C.** Molecular dynamics with coupling to an external bath [Text] / H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren [et al.] // J. Chem. Phys. 1984. — Vol. 81. — P. 3684–3690.

14. **Nordlund, K.** Defect production in collision cascades in elemental semiconductors and fcc metals [Text] / K. Nordlund, M. Ghaly, R.S. Averback [et al.] // Phys. Rev. B. — 1998. — Vol. 57. — P. 7556–7570.

15. **Nord, J.** Molecular dynamics study of damage accumulation in GaN during ion beam irradiation [Text] / J. Nord, K. Nordlund, J. Keinonen // Phys. Rev. B. — 2003. — Vol. 68. — P. 184104 (1–7).

16. **Bjorkas, C.** Comparative study of cascade damage in Fe simulated with recent potentials [Text] / C. Bjorkas, K. Nordlund // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. — 2007. — Vol. 259. — P. 853.

17. **Мейер, Дж.** Ионное легирование полупроводников (кремний и германий) [Текст]: Дж.Мейер, Л. Эрикссон, Дж. Дэвис. — М.: Мир, 1973. — 118 с.

18. **Андерсен, Х.** Измерения коэффициента распыления [Текст] / Х. Андерсен, Х. Бай // Сб. «Распыление твердых тел ионной бомбардировкой»; под ред. Р. Бериша. — М.: Мир, 1984. — 222 с.

УДК 539.534.9

*К.В. Карабешкин, П.А. Карасёв,
В.С. Беляков, А.В. Архипов, А.И. Титов*

ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ КАСКАДОВ СМЕЩЕНИЙ НА ТОПОГРАФИЮ И СДВИГ ПОВЕРХНОСТИ НИТРИДА ГАЛЛИЯ, ОБЛУЧАЕМОГО АТОМАРНЫМИ И МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ИОНАМИ

Ионная имплантация широко используется в современной технологии, в частности, при производстве электронных устройств на основе нитрида галлия [1, 2]. Однако для успешного применения ионной имплантации необходимо понимание процессов формирования и трансформации дефектов при внедрении ионов в полупроводниковую матрицу, поскольку образование устойчивых радиационных нарушений

всегда сопровождается внедрением ускоренных ионов в полупроводники. Помимо дефектов, образующихся внутри кристалла, ионное облучение может также вызывать изменение топографии поверхности, которое тесно связано с трансформацией свойств материала в приповерхностных слоях. Так, в случае бомбардировки ионами нитрида галлия GaN внедрение ускоренных ионов сопровождается декомпози-

цией материала и образованием в аморфизованных слоях наноразмерных пузырей, которые наполнены газообразным азотом при высоком давлении. Это драматически влияет как на среднюю плотность материала, так и на топографию его поверхности [2 – 5], вызывая увеличение шероховатости и набухание образца.

Бомбардировка ионами в условиях повышенных плотностей каскадов смещений (столкновений) увеличивает эффективность накопления структурных нарушений [6, 7]. Подобные каскадные эффекты могут быть исследованы, в частности, при облучении кластерными ионами. Действительно, каскады столкновений, создаваемые компонентами кластерного иона, перекрываясь в приповерхностном слое, образуют объединенный каскад с большей плотностью атомных смещений, чем в случае облучения атомными ионами. Так, облучение нитрида галлия молекулярными ионами Bi_2 [8] и ионами PF_4 [9] приводит к значительному увеличению уровня разупорядочения в приповерхностном слое, по сравнению с бомбардировкой атомарными ионами, что связано с увеличением плотности каскадов смещений в этом слое за счет формирования нелинейных энергетических пиков [9]. В этом случае говорят о молекулярном эффекте в накоплении радиационных нарушений.

Поскольку имплантация молекулярных ионов приводит к ускоренному образованию аморфных слоев у поверхности (где и формируются нанополости), нелинейные эффекты, сопровождающие перекрытие каскадов столкновений компонентов кластерного иона, должны в этом случае сильно проявляться на поверхностном рельефе. Кроме того, усиленное образование газовых пузырьков в аморфной фазе нитрида галлия должно вызывать набухание (свеллинг) материала, поэтому изменение толщины слоев, подвергнутых воздействию данных ионов, также являлось предметом рассматриваемых ниже экспериментов.

Описанные эффекты и являлись предметом настоящей работы. В ней мы исследовали развитие топографии поверхности нитрида галлия при облучении атомарными ионами F, P и не большими кластерными ионами PF_2 и PF_4 .

Экспериментальная часть

Эпитаксиальные пленки (0001) нитрида галлия со структурой вюрцита, выращенные

в ФТИ им. А.Ф. Иоффе (Санкт-Петербург) методом осаждения из газовой фазы с использованием металлоорганических соединений на подложке из сапфира, облучались при комнатной температуре ионами F, P, PF_2 и PF_4 с энергией 1,3 кэВ/а.е.м. в широком диапазоне доз. Имплантация проводилась под углом 7° по отношению к направлению [0001] для подавления эффекта каналирования. Как подробно описано в работе [10], эффекты радиационного повреждения, связанные с плотностью каскадов смещений при облучении кластерными ионами, должны исследоваться, когда следующие параметры бомбардировки остаются постоянными: энергия ионов, нормированная на атомную единицу массы, доза ионов, нормированная на число смещений на атом (DPA – Displacement Per Atom); поток ионов, нормированный на DPA/c (корректные условия облучения).

Значения DPA рассчитывались как полная концентрация вакансий решетки при данной дозе, созданных при бомбардировке ионами на глубине максимума упругих потерь энергии иона (g_v), отнесенная к атомной концентрации нитрида галлия ($8,85 \cdot 10^{22}$ ат/см³). Таким образом, DPA есть среднее число смещений каждого атома в области максимума упругих потерь энергии за все время облучения. Дозы DPA были получены с помощью программы TRIM (версия SRIM-2003.26) [11], с использованием пороговой энергии атомных смещений 25 эВ для подрешеток галлия и азота.

Для всех использованных в этой работе ионов корректные условия облучения были выполнены. Поток для всех ионов составлял $3,6 \cdot 10^{-3}$ DPA/c. При расчетах концентрации вакансий (g_v), создаваемых кластерными ионами PF_n , мы использовали линейную аппроксимацию:

$$g_v(\text{PF}_n) = g_v(\text{P}) + n g_v(\text{F}).$$

Топография поверхности исследовалась на атомно-силовом микроскопе (АСМ) фирмы Pacific Nanotechnology в тэппинг-море. Для определения изменения толщины облученного слоя мы измеряли высоту ступеньки между облученной и необлученной областями поверхности. Последние были созданы путем маскирования поверхности нитрида галлия кремниевой пластиной, которая находилась в тесном механическом контакте с поверхностью образца во время имплантации. Измерение топографии поверхности проводилось на областях поверх-



ности размером 1×1 мкм, находящихся вдали от границы облученная — необлученная части, чтобы избежать возможного влияния эффекта распыления маски [12].

Результаты

Шероховатость поверхности. На рис. 1 представлены АСМ-изображения поверхности нитрида галлия, облученного ионами F, P, PF_2 и PF_4 дозой 30 DPA. Реальные дозы (в единицах 10^{16} см^{-2}), соответствующие дозе 30 DPA, составляли 3,2; 1,5; 0,69 и 0,45 для ионов F, P, PF_2 и PF_4 соответственно. Заметим, что поверхность

исходных образцов была относительно гладкой, с уступами высотой менее 0,6 нм и среднеквадратичной шероховатостью примерно 0,2 нм. Плотность дислокаций составляла порядка 10^8 см^{-2} . Видно, что в результате ионной бомбардировки формируется нанорельеф, при этом изменения в топографии поверхности зависят от типа иона: чем он тяжелее, тем большие особенности рельефа формируются на поверхности.

Этот эффект представлен нагляднее на рис. 2, а, где показана зависимость среднеквадратичной шероховатости поверхности от дозы. Шероховатость поверхности нитрида галлия

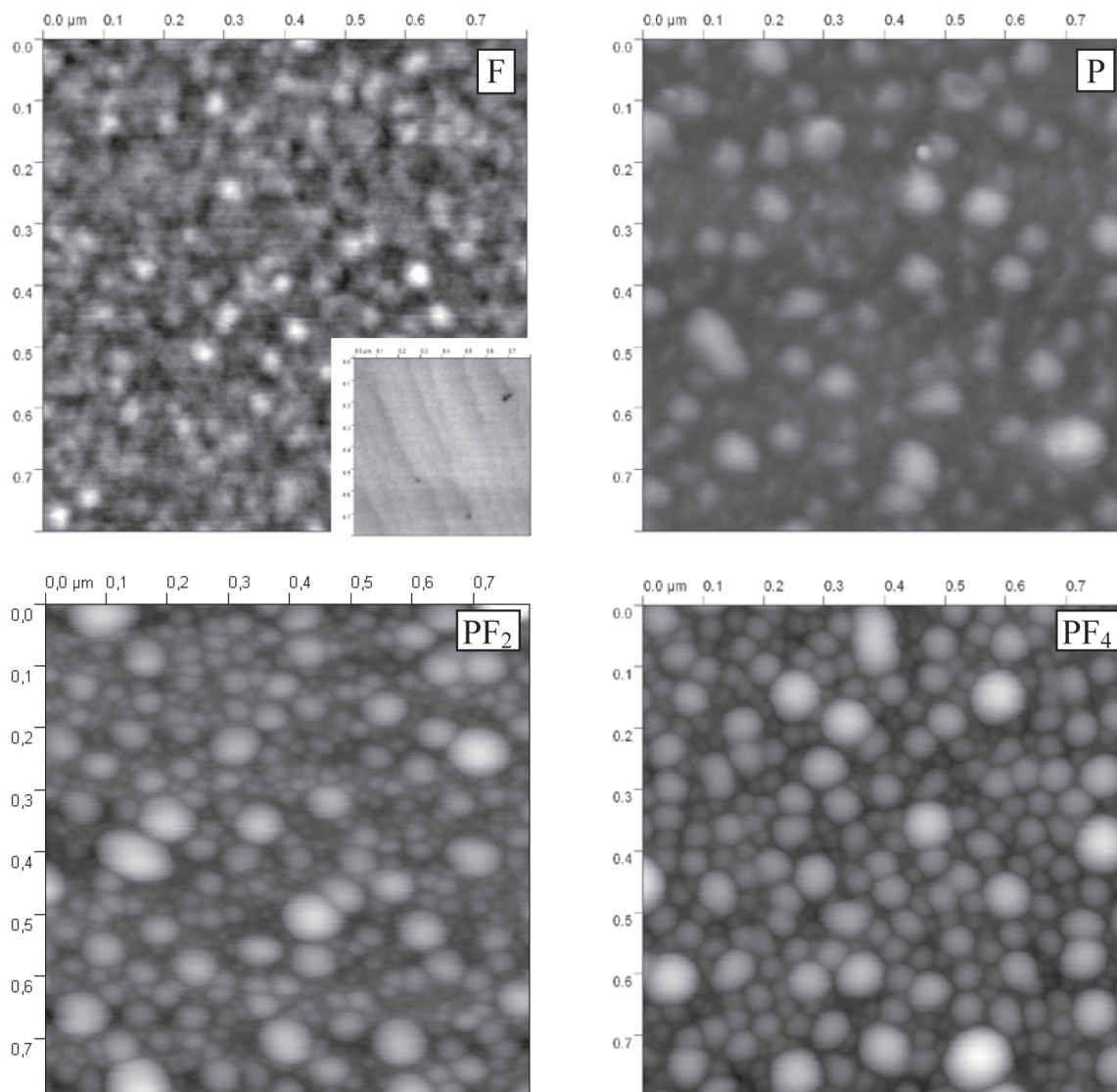


Рис. 1. АСМ-изображения поверхности GaN после облучения при комнатной температуре ионами F, P, PF_2 и PF_4 с энергией 1,3 кэВ/а.е.м. до дозы 30 DPA.

Размер изображений $0,8 \times 0,8$ мкм. Полная высота равна 4 нм для левого верхнего изображения и 40 нм для остальных. На вставке: скан поверхности исходного образца

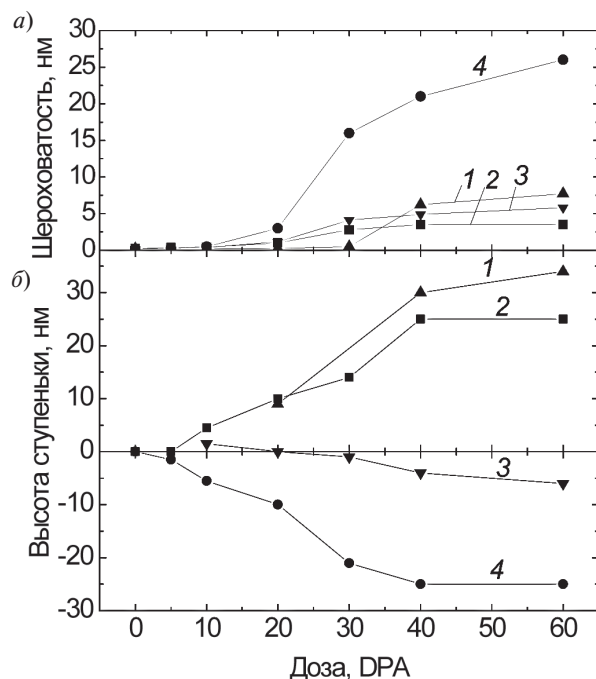


Рис. 2. Зависимости среднеквадратичной шероховатости поверхности нитрида галлия (а) и высоты ступеньки между облученной и необлученной областями (б) от дозы облучения различными ионами: F (1), P (2), PF₂ (3), PF₄ (4), с энергией 1,3 кэВ/а.е.м. при комнатной температуре

увеличивается как с увеличением дозы ионного облучения, так и с ростом массы ионов. При этом, например, шероховатость образцов, облученных ионами PF₄ с дозой 30 DPA, более чем на порядок превышает соответствующую величину для образцов, облученных той же дозой ионов F. Из рис. 2,а также следует, что развитие шероховатости начинается с пороговой дозы порядка 15 DPA, что не противоречит предыдущим сообщениям [2 – 4].

Изменение толщины облученных слоев.

На рис. 3 представлены трехмерные АСМ-изображения границ между исходными и облученными областями образцов нитрида галлия, имплантированных при комнатной температуре ионами P и PF₄. Видно, что наряду с увеличением шероховатости ионная бомбардировка вызывает также формирование ступеньки между облученными и необлученными участками. При этом имплантация ионов P ведет к свеллингу облучаемой области, что соответствует предыдущим работам [2 – 5]. Облучение ионами PF₄ вызывает, наоборот, уменьшение толщины модифицируемого ионами слоя. Подоб-

ное уменьшение толщины облученной области недавно было обнаружено при бомбардировке нитрида галлия высокими дозами ($3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) атомарных ионов золота с энергией 500 кэВ при комнатной температуре [4].

Изменение толщины модифицируемого ионами слоя начинается с пороговой дозы около 5 DPA, что значительно меньше пороговой дозы 15 DPA, необходимой для развития шероховатости поверхности (см. рис. 2,а). В случае бомбардировки ионами PF₄ высота ступеньки монотонно увеличивается по мере роста дозы. При облучении ионами PF₂ при небольших дозах наблюдается небольшое распухание образца, а дальнейшее увеличение дозы ионов, как и для ионов PF₄, вызывает уменьшение толщины облученного слоя, хотя абсолютные значения высоты ступеньки в этом случае существенно ниже. Обращает на себя внимание тот факт, что свеллинг нитрида галлия при внедрении ионов фтора несколько больше, чем при имплантации ионов фосфора с той же дозой при больших значениях последней.

Обсуждение результатов

Как было описано выше, условия ионного облучения были выбраны таким образом, что-

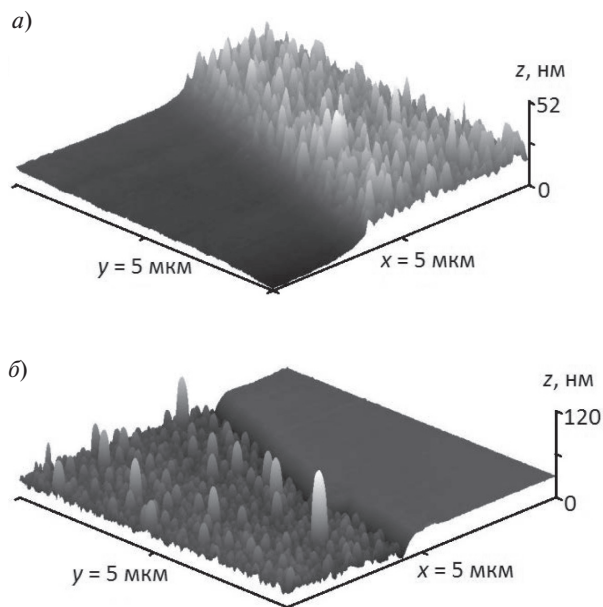


Рис. 3. АСМ-изображения границы облученной и необлученной областей поверхности GaN. Имплантация проводилась при комнатной температуре ионами P (а) и ионами PF₄ (б) с энергией 1,3 кэВ/а.е.м. до доз 40 DPA (а) и 30 DPA (б)



бы профили распределения первичных смещений по глубине, полное их число и скорость генерации этих смещений были одинаковыми для всех четырех типов ионов (F, P, PF₂ и PF₄). Условия облучения различались только плотностью каскадов столкновений. В предыдущей работе [9] нами было показано, что профили распределения стабильных дефектов по глубине значительно различаются для этих случаев. Также нам удалось соотнести расчетные значения плотности каскадов столкновений с накапливаемым повреждением. В качестве примера на рис. 4, а приведены профили распределения устойчивых дефектов (получены из спектров, резерфордского обратного рассеяния быстрых ионов гелия, представленных в работе [9]) для дозы 10 DPA. Поверхностный пик дефектов на этих профилях соответствует поверхностному аморфному слою, толщина которого возрастает с ростом дозы (размытие этого пика на экспериментальных кривых связано с ограниченным разрешением использованного метода измерения). Как показали результаты выполненной нами оценки, толщина поверхностного аморфного слоя, например, для ионов P и PF₄ составляла для случая, представленного на рис. 4, а, 6,7 и 12,1 нм соответственно. На рис. 4, б показаны распределения плотности смещений атомов в каскадах столкновений, выполненные в предположении бинарности столкновений по методике, подробно изложенной в работе [9]. Видно, что в приповерхностном слое толщиной около 10 нм плотность каскадов смещений велика, сильно зависит от типа иона и превышает (особенно для кластерных ионов) пороговое критическое значение концентрации (~0,8% для GaN), при превышении которого в каскадах смещений имеют место нелинейные процессы при генерации первичных дефектов [9].

Из сопоставления рис. 2, а и 4, б следует, что при увеличении плотности каскадов смещений увеличивается и шероховатость поверхности. Последнее связано с ростом скорости увеличения толщин аморфных слоев при повышении плотности смещений в каскаде (см. рис. 4, а). Действительно, при бомбардировке ионами внутри включений аморфной фазы возникают сферические полости, заполненные газообразным азотом при высоком давлении, который возникает в результате декомпозиции нитрида галлия [2]. Размер этих полостей может дости-

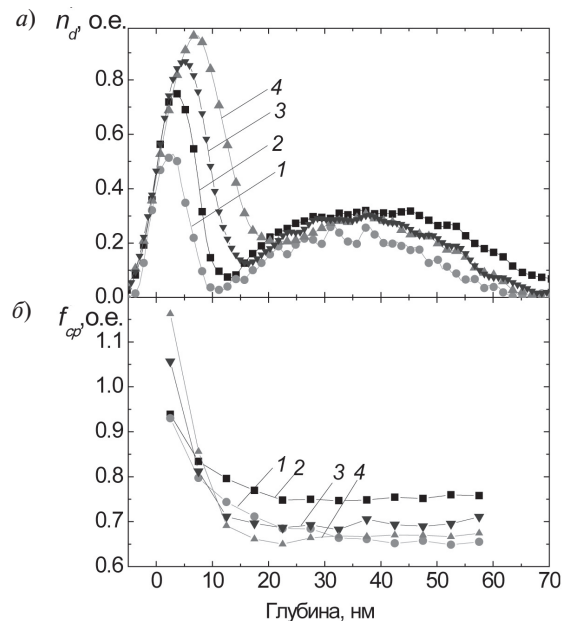


Рис. 4. а – Профили распределения относительной концентрации дефектов n_d в GaN по глубине после имплантации ионов F (1), P (2), PF₂ (3), PF₄ (4) до дозы 10 DPA; реальные дозы, 10^{15} см⁻²: 8,5; 5,0; 2,3; 1,5 для ионов F, P, PF₂, PF₄ соответственно; б – расчетное распределение плотности каскадов столкновений f_{cp} по глубине при бомбардировке GaN атомными и кластерными ионами с энергией 1,3 кэВ/а.е.м.

гать десятков нанометров. В поврежденных, но еще не аморфизованных областях GaN также могут возникать поры, но их размеры не превышают нескольких нанометров [5].

Как следует из данных рис. 4, а, аморфная фаза в нитриде галлия в случае облучения ускоренными ионами располагается непосредственно у поверхности. Естественно, что образующиеся в приповерхностных слоях газовые пузырьки должны приводить к формированию соответствующего нанорельефа на поверхности. Чем более плотными являются каскады (что имеет место при переходе от более легких к более тяжелым атомарным ионам и от атомарных к молекулярным), тем раньше и эффективнее образуется аморфная фаза и тем сильнее идет декомпозиция нитрида галлия, то есть генерация газообразного азота, «распирающего» полости. Очевидно это и вызывает явления, иллюстрируемые рис. 2, а.

Из этой последовательности «выпадает» результат для имплантации ионов фтора при больших дозах (более 30 DPA) – соответствующие

значения шероховатости лежат выше значений для Р и PF_2 . Однако этот результат легко объяснить, поскольку в этом случае внутрь мишени вводятся еще и атомы фтора, которые, диффундируя к границам нанополостей, добавляют давление газа в пузырьках, стимулируя увеличение их размеров. Например, при дозе ионов F 30 DPA усредненная по поперечному сечению концентрация имплантированных атомов фтора в максимуме их распределения имеет весьма высокое значение — около $5 \cdot 10^{21} \text{см}^{-3}$.

Обратимся теперь к результатам по изменению толщины модифицируемого слоя, показанных на рис 2,б. Здесь следует иметь в виду, что это изменение есть результат действия двух конкурирующих причин. Первая — это свеллинг слоя, связанный, как уже говорилось раньше, с формированием нанопузырьков внутри аморфных слоев, созданных ионным облучением, в результате чего модифицированный слой увеличивает свою толщину. Вторая — распыление поверхности бомбардирующими ионами, то есть уменьшение толщины слоя.

Из рис. 2, б видно, что процесс распыления в случае облучения ионами PF_4 преобладает над процессом распухания, а для ионов Р имеет место обратная ситуация. При бомбардировке ионами PF_2 оба этих процесса практически уравниваются друг друга.

Возникает резонный вопрос, почему по мере увеличения числа атомов в кластере происходит увеличение коэффициента распыления. Во-первых, уже давно известно [6, 7, 13, 14], что при переходе в режим формирования нелинейных каскадов смещений коэффициент распыления существенно возрастает. Во-вторых, коэффициент распыления увеличивается с ростом шероховатости поверхности [13]. Наконец, чем больше декомпозиция материала, тем, очевидно, легче его распылить. Все эти факторы усиливаются при переходе от ионов фосфора к ионам PF_2 и далее к PF_4 . Таким образом, влияние типа иона

на величину и знак ступеньки в целом физически понятен.

Используя данные рис. 2,б, мы оценили коэффициент распыления S для ионов PF_4 . Он составил значение около 40 без учета свеллинга и примерно 70 с его учетом. При оценке мы предполагали, что вклад свеллинга в итоговую высоту ступеньки одинаков для ионов Р и PF_4 . Столь высокий коэффициент распыления на самом деле не вызывает удивления, поскольку он сравним с величиной $S \approx 60$ при облучении нитрида галлия ионами золота с энергией 500 кэВ при комнатной температуре до дозы $3 \cdot 10^{16} \text{см}^{-2}$ [4].

Причина «выпадения» из этой последовательности значений величины ступеньки на границе облученной и необлученной областей для больших доз ионов F также физически понятна из вышеприведенных рассуждений о природе «аномальной» шероховатости для данного иона при больших дозах — это увеличение размеров нанопузырьков из-за распираания их газообразным фтором и, соответственно, усиление свеллинга.

Таким образом, результаты, представленные в данной работе, демонстрируют, что плотность каскадов столкновений драматически влияет как на толщину облученных слоев нитрида галлия, так и на топографию его поверхности. При облучении ионами в условиях невысоких плотностей каскадов смещений в приповерхностной области процесс распухания преобладает над процессом распыления. Для кластерных ионов с большой плотностью каскадов столкновений в приповерхностной области процесс распыления доминирует. В свою очередь, шероховатость поверхности увеличивается при увеличении массы иона/размера кластера. Установлен пороговый характер развития этих процессов и определены пороговые дозы начала развития особенностей топографии поверхности и изменения толщины модифицируемых слоев. Предложено физическое объяснение наблюдаемых закономерностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pearton, S.J.** GaN: Processing, defects, and devices [Text] / S.J. Pearton, J.C. Zolper, R.J. Shul, F. Ren // J. Appl. Phys. — 1999. — Vol. 86. — P. 1–78.
2. **Kucheev, S.O.** Ion implantation into GaN [Text] / S.O. Kucheev, J.S. Williams, S.J. Pearton // Mater. Sci. Eng. R. — 2001. — Vol. 33. — P. 51–108.
3. **Kucheev, S.O.** Ion-beam-induced porosity of GaN [Text] / S.O. Kucheev, J.S. Williams, C. Jagadish, [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2000. — Vol. 77. — P. 1455–1458.
4. **Gao, Y.** Swelling or erosion on the surface of patterned GaN damaged by heavy ion implantation [Text] / Y. Gao, C. Lan, J. Xue, [et al.] // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. — 2010. — Vol. 268. — P. 3207–3210.
5. **Ishimaru, M.** Ion-beam-induced chemical disorder in GaN [Text] / M. Ishimaru, Y. Zhang, W.J. Weber //



J. Appl. Phys. — 2009. — Vol. 106. — P. 053513 (4 p.).

6. **Thompson, D.A.** High density cascade effects [Text] / D.A. Thompson // Radiat. Eff. — 1981. — Vol. 56. — P. 105–150.

7. **Davies, J.A.** Ion implantation and beam processing [Text] / J.A. Davies // J.S Williams, J.M. Poarte (eds). — Sydney: Academic Press, 1984. — 419 p.

8. **Kucheev, S.O.** Effect of the density of collision cascades on implantation damage in GaN [Text] / S.O. Kucheev, J.S. Williams, A.I. Titov, [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2001. — Vol. 78. — P. 2694 (3 p.).

9. **Kucheev, S.O.** Energy spike effects in ion-bombarded GaN [Text] / S.O. Kucheev, A.Yu. Azarov, A.I. Titov, [et al.] // J. Appl. Phys. — 2009. — Vol. 42. — P. 085309 (10 p.).

10. **Titov, A.I.** Damage buildup and the molecular effect in Si bombarded with PF_n cluster ions [Text] / A.I. Titov, A.Yu. Azarov, L.M. Nikulina, [et al.] // Nucl.

Instrum. Methods. Phys. Res. B. — 2007. — Vol. 256 — P. 207–210.

11. **Ziegler, J.F.** The stopping and range of ions in solids [Text] / J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark // Oxford: Pergamon, 1985. — P. 109.

12. **Macko, S.** Is keV ion-induced pattern formation on Si(001) caused by metal impurities? [Text] / S. Macko, F. Frost, B. Ziberi, [et al.] // Nanotechnology. — 2010. — Vol. 21. — P. 085301.

13. **Andersen, H.H.** Sputtering by particle bombardment [Text] / H.H. Andersen, H.L. Bay; R. Behrish, ed. — Berlin — Heidelberg — New York: Springer, 1981. — 281 p.

14. **Bouneau, S.** Very large gold and silver sputtering yields induced by keV to MeV energy Au_n clusters ($n = 1–13$) [Text] / S. Bouneau, A. Brunelle, S. Della-Negra, [et al.] // Phys. Rev. B. — 2002. — Vol. 65. — P. 144106 (8 p.).

УДК 622.755

Н.А. Антипина, С.Н. Пещеренко

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТВЕРДЫХ ЧАСТИЦ В ПОГРУЖНЫХ СЕПАРАТОРАХ

Современные технологии интенсификации добычи нефти существенно повышают концентрацию твердых частиц в добываемой жидкости. В настоящее время доля отказов ввиду засорения центробежных насосов твердыми частицами достигает 40 – 50 %.

Для отделения частиц породы от жидкости применяют фильтры, но их срок службы ограничен по причине засорения; более надежны гравитационные сепараторы твердых частиц. Известны два типа сепараторов: без закрутки потока [1] и с закруткой, или иначе – гидроциклонного [2] типа (рис. 1).

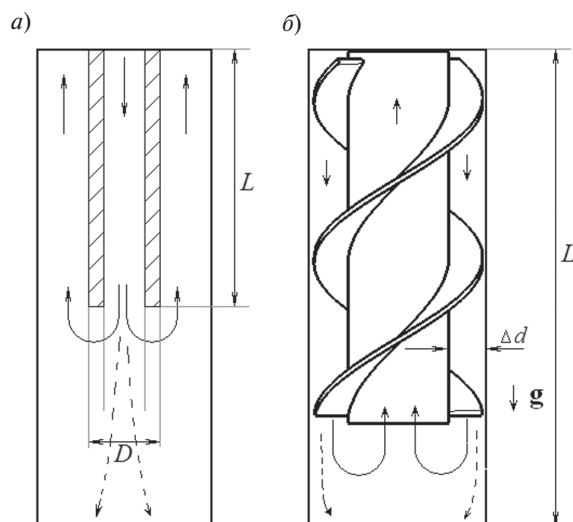


Рис. 1. Схемы гравитационных сепараторов:
а – без закрутки потока, б – гидроциклонного типа. Сплошными стрелками показано движение жидкости, пунктирными – твердых частиц; L , D – длина и диаметр сепаратора; Δd – ширина лопасти; g – ускорение свободного падения

Однако, проигрывая в надежности, фильтры выигрывают в тонкости очистки. Так, в промышленных условиях широко используются фильтры с тонкостью очистки 100 мкм. Тогда как тонкость очистки гравитационных сепараторов – 250 мкм, а гидроциклонного типа при расходах жидкости до 200 м³/сут – порядка 150 мкм [3].

Оптимизация конструкции погружных сепараторов твердых частиц до сих пор ведется либо эмпирическими методами с привлечением теории подобия [4–6], либо на основе приближенных моделей, лишь качественно описывающих динамику твердых частиц.

Например, известен подход на основе решения стохастического уравнения движения частиц в гидроциклоне [7]. В уравнение входит ряд коэффициентов, которые можно найти только опытным путем и которые зависят от конструктивных параметров гидроциклона, поэтому область применения такого подхода ограничена. Тем более, что конструкция поверхностных гидроциклонов, для которых накоплен опыт решения таких задач, существенно отличается от погружных конструкций (конический, а не цилиндрический корпус, два, а не одно отверстие для выхода рабочей жидкости).

В модели [8] сопротивление движению частиц определяется по закону Стокса, что справедливо только для течений с числом Рейнольдса меньше единицы.

Изложенные соображения показывают, что для успешного проектирования погружных сепараторов необходимо построение имитационной математической модели процесса отделения твердых частиц от жидкости. Модель



должна учитывать 3-мерный турбулентный характер движения жидкости и ее взаимодействие с твердыми частицами.

В качестве параметра оптимизации примем коэффициент сепарации при тонкости очистки 100 мкм, характерной для лучших конструкций погружных фильтров. Коэффициент сепарации k равен отношению массы песка, отделенной сепаратором, к общей массе песка.

Описание модели сепарации твердых частиц

Для описания турбулентного движения жидкости нами использовались уравнения Рейнольдса и модель турбулентности $k-\varepsilon$. Выбор последней является одним из допущений, поскольку эмпирические коэффициенты, входящие в модель, были определены для течений близкого, но другого типа – в погранслоях [9].

Для описания переноса механических примесей потоком жидкости был использован подход Лагранжа [10], согласно которому каждая частица движется в соответствии с уравнением Ньютона. Объемная доля частиц была порядка 0,3%, поэтому мы считали, что частицы не взаимодействуют друг с другом и не влияют на течение жидкости. На частицу, двигающуюся в потоке жидкости, действуют следующие силы:

сила сопротивления –

$$F_c = C_x S \rho_f \mathbf{w} |\mathbf{w}| / 2,$$

где C_x – коэффициент сопротивления; S – площадь сечения частицы; $\mathbf{w} = \mathbf{U}_p - \mathbf{U}_f$ – разность скоростей частицы и жидкости; ρ_f – плотность жидкости;

сила тяжести –

$$V \rho_p \mathbf{g} = m_p \mathbf{g},$$

где V , ρ_p , m_p – объем, плотность и масса частицы;

сила Архимеда –

$$V \rho_f \mathbf{g} = m_f \mathbf{g},$$

где m_f – масса жидкости, вытесненной частицей;

сила гидростатического давления жидкости, окружающей частицу [11] –

$$-\oint p d\mathbf{s} = -\oint \nabla p dV \approx -\nabla p V = -\nabla p \frac{m_p}{\rho_p},$$

где воспользовались малостью размера частицы, по сравнению с характерным масштабом неоднородности давления p ;

подъемная сила, действующая на частицу из-за неоднородности скорости жидкости [12] –

$$\mathbf{F}_s = C_s \pi r^2 \sqrt{\frac{\mu \rho_p}{\text{rot} \mathbf{U}_f}} \mathbf{w} \times \text{rot} \mathbf{U}_f,$$

где константа $C_s = 0,01$ [12];

сила Магнуса, возникающая из-за вращения частицы в жидкости [13] –

$$\mathbf{F}_M = \frac{4}{3} C_M \pi r^3 \rho (\mathbf{w} \times \boldsymbol{\omega}_p);$$

$$\boldsymbol{\omega}_p = \frac{1}{2} \text{rot} \mathbf{U}_f,$$

где коэффициент $C_M = 2$, если частица вращается жидкостью без проскальзывания; в этом случае сила Магнуса принимает максимальное значение.

Оценим порядки величин этих сил при следующих типичных значениях параметров: $C_x = 1$, $S \approx 10^{-6} \text{ м}^2$, $\rho_f \approx 10^3 \text{ кг/м}^3$, $r \approx 10^{-3} \text{ м}$, $g \approx 10 \text{ м/с}^2$, $V \approx 10^{-9} \text{ м}^3$, $\mu \approx 10^{-3} \text{ Па}\cdot\text{с}$, $\nabla p \approx 10^{-1} \text{ Па/м}$, $U_p \approx 1 \text{ м/с}$; $0 < w < U_p$, примем $w \approx 0,5 U_p$ (м/с). Тогда получаем следующие порядки для величин сил:

сила сопротивления $F_c \approx 10^{-4} \text{ Н}$, сила тяжести $\approx 10^{-5} \text{ Н}$, сила Архимеда $\approx 10^{-5} \text{ Н}$, сила гидростатического давления $\approx 10^{-10} \text{ Н}$, подъемная сила $F_s \approx 10^{-10} \text{ Н}$, сила Магнуса $\approx 10^{-8} \text{ Н}$.

Из приведенных оценок следует, что силами F_s , F_M и гидростатического давления можно пренебречь.

При написании уравнения движения частицы мы учитывали «присоединенную массу жидкости», т. е. жидкость, увлекаемую движущейся частицей:

$$\kappa m_f \frac{d\mathbf{w}}{dt},$$

где κ – коэффициент, зависящий от формы частицы; для шара $\kappa = 0,5$ [14].

Поскольку

$$\kappa m_f \frac{dw}{dt} < 0,5 \cdot 10^{-6} g \approx 10^{-6} \text{ Н},$$

то пренебрегать им не стали.

Окончательно получаем:

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = C_x S \rho_f \frac{w|w|}{2} + \frac{4}{3} \pi r^3 g (\rho_p - \rho_f) + \frac{1}{2} m_f \left(\frac{dU_f}{dt} - \frac{dU_p}{dt} \right), \quad (1)$$

где коэффициент сопротивления C_x зависит от формы частицы и $|w|$.

Для нахождения коэффициента сопротивления C_x был проведен эксперимент по оседанию частиц в восходящем потоке внутри круглой трубы на специально спроектированном стенде. Измеренное значение показано на рис. 2 пунктирной линией. Расчет по описанной выше модели при разных значениях C_x дал зависимость, изображенную на рис. 2 (линия 1). Видно, что совпадение эксперимента и расчета достигается при значении $C_x = 6$.

Задача о движении жидкости и частиц решалась в пакете ANSYS CFX. В качестве граничных условий на входе задавался массовый расход жидкости Q , на выходе – статическое давление. Распределение твердых частиц по диаметру задавали в соответствии с гистограммой (ее значения приведены в табл. 1).

Гистограмма была получена обработкой оптических изображений частиц в стереоскопическом микроскопе МБС-10 по программе анализа изображений «ВидеоТест-Мастер. Структура 4.0» [15]. Проанализировано несколько полей изображений. Увеличение микроскопа мы выбирали таким образом: поскольку ожидаемый средний размер частиц – 0,7 мм, то поле анализа должно быть не менее 7 мм, а для МБС-10 такому полю соответствует 28-кратное увеличение.

Число частиц в расчетах было взято равным 1000. Сетка имела 15–20 ячеек поперек канала. На стенках размер ячеек соответствовал $y^+ = 30 - 60$, что приемлемо при использовании модели турбулентности $k-\varepsilon$. Коэффициент роста ячеек от стенки в объем был взят равным

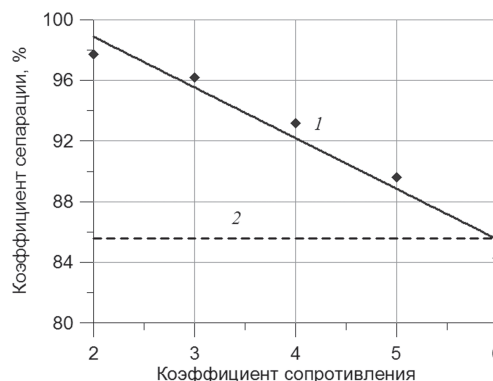


Рис. 2. Зависимость коэффициента сепарации от коэффициента сопротивления (1) и его экспериментальное значение (2)

1,2. В качестве граничного условия для модели $k-\varepsilon$ на входе задавалась степень турбулентности $I = u/U$, где U – средняя скорость, u – турбулентные пульсации скорости. Затем k и ε находились из соотношений [9]:

$$k = (3/2) I^2 U^2; \quad \varepsilon = C_\mu k^{3/2} / L,$$

где L – линейный масштаб турбулентности; $L = ID_h$ (D_h – гидравлический диаметр); C_μ – константа модели турбулентности $k-\varepsilon$.

Мы полагали, что плотность жидкости $\rho_f = 1000 \text{ кг/м}^3$; ее динамическая вязкость $\eta = 0,00089 \text{ Па·с}$; плотность частицы $\rho_p = 2500 \text{ кг/м}^3$.

Установившееся течение жидкости в гравитационном сепараторе находили методом установления, для чего решали нестационарное уравнение Рейнольдса с фиктивным шагом по времени (для ускорения сходимости нестационарной задачи к стационарному решению [16]).

Шаг по времени Δt выбирался из соотношения [10]:

$$\Delta t \leq \frac{h}{\max(U_{bc}, U_{node})}, \quad (2)$$

где U_{bc} – среднее арифметическое скоростей на открытых границах; U_{node} – среднее арифметическое скоростей по всей области, h – минимальный размер ячейки в расчетной сетке.

Таблица 1

Распределение частиц песка по размеру

Размер частиц, мм	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
Массовая доля частиц, %	1,5	3,9	2,0	2,5	7,8	15,6	20,3	17,4	11,1	6,3	4,7	2,6



Сходимость каждого расчета контролировалась по невязкам массового расхода и компонент скоростей согласно формуле

$$nev = \sqrt{\sum_n \frac{(u_i - u_{i-1})^2}{n}} \leq 10^{-5}, \quad (3)$$

где u_i — компоненты скорости на i -ой итерации по времени, n — количество элементов во всем объеме или на открытых границах (в случае невязок по массовому расходу).

Кроме того, дополнительно контролировалась согласованность моментов остановки разных расчетов по критерию гладкости поверхности целевой функции (т. е. коэффициента сепарации) при варьировании переменных, т. е. геометрических размеров сепаратора.

Решение задачи о разделении частиц в гравитационном сепараторе без закрутки потока

Расчетная область сепаратора представлена на рис. 1,а. Была проведена серия расчетов, в которых варьировались внешний диаметр трубы D в диапазоне 15 — 40 мм и длина трубы L в диапазоне 200 — 1000 мм. Использовались следующие значения величин: толщина стенки трубы $\delta = 3$ мм, внутренний радиус корпуса сепаратора $R = 50$ мм. Общая длина расчетной области равна $(L + 1000)$ мм. Подача жидкости равнялась $50 \text{ м}^3/\text{сут}$.

Шаг по времени, согласно соотношению (2), был порядка 0,001 с; число шагов, определенное по критерию (3), было порядка 500.

Результаты расчетов приведены в табл. 2.

Согласованность моментов остановки расчетов дополнительно контролировалась по критерию гладкости зависимости коэффициента сепарации k от L и D , для чего аппроксимировались результаты расчетов гладкой функцией (полиномом) (табл. 3). Из данных таблицы

Таблица 2

Зависимость коэффициента сепарации k от диаметра и длины внутренней трубы при скорости подачи $50 \text{ м}^3/\text{сут}$

D , мм	k , %			
	$L = 1,00 \text{ м}$	$L = 0,75 \text{ м}$	$L = 0,50 \text{ м}$	$L = 0,25 \text{ м}$
18	97	73	67	70
20	73	60	60	57
25	41	37	40	38
30	30	29	30	30
32	27	24	27	25
38	24	23	24	20

видно, что при увеличении степени полинома средняя ошибка аппроксимации достигает примерно 1 % и больше не меняется. Это означает, что ошибка, вносимая прерыванием расчетов по критерию (3), была не более 1%.

Таблица 3

Зависимость средней ошибки аппроксимации от степени полинома для $Q=50 \text{ м}^3/\text{сут}$

Степень полинома	Средняя ошибка
1	21,2
2	9,2
3	2,5
4	0,9
5	0,9

На основании данных табл. 2 получена зависимость коэффициента сепарации от варьируемых параметров D и L (рис. 3). Из рисунка видно, что при $L < 800$ мм коэффициент сепарации не зависит от L , а при $L > 800$ мм повышается при увеличении длины внутренней трубы L .

При уменьшении D коэффициент сепарации монотонно растет, следовательно, максимальный коэффициент сепарации достигается при максимальной длине трубы и минимальном диаметре.

Из технологических соображений (трудоемкости изготовления) была выбрана конструкция с параметрами $L = 1000$ мм и $D = 25$ мм, а также проведены расчеты и экспериментальные измерения коэффициента сепарации при подачах от 25 до $50 \text{ м}^3/\text{сут}$.

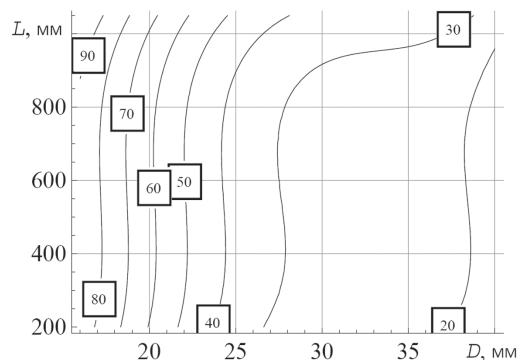


Рис. 3. Расчетные зависимости коэффициентов сепарации (изолинии, %) от длины и диаметра внутренней трубы

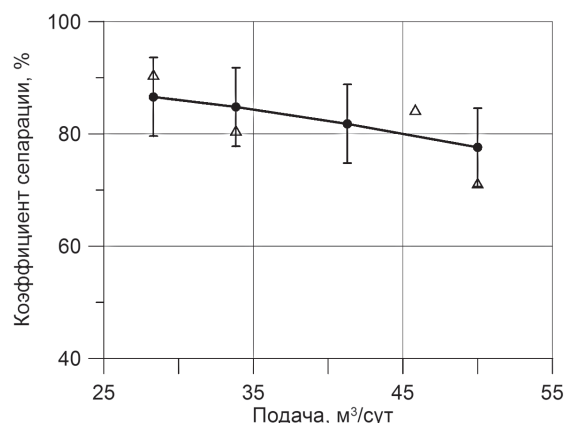


Рис. 4. Сравнение расчетных (треугольники) и экспериментальных (точки) результатов для сепаратора на малые скорости подачи

Сопоставление результатов расчетов и испытаний приведено на рис. 4, откуда видно, что получено их совпадение в пределах $\pm(5 - 7) \%$.

Погружные гравитационные сепараторы должны иметь коэффициент сепарации не менее 80%, чтобы в наиболее тяжелых по механическим примесям условиях (в настоящее время это 1000 мг/л) давать на выходе не более 200 мг/л. При такой концентрации твердых частиц можно применять оборудование базового исполнения по содержанию механических примесей [17 – 19].

Из рис. 4 видно, что при подачах более 45 – 50 м³/сут величина коэффициента сепарации становится меньше критического значения 80%. Поэтому при больших подачах применение данной конструкции нецелесообразно.

Решение задачи о разделении частиц в сепараторе гидроциклонного типа

Расчетная область гравитационного сепаратора гидроциклонного типа схематично приведена на рис. 1,б. Видно, что ее геометрия полностью описывается следующими параметрами: Δd – ширина лопасти, L – длина сепаратора, n – число лопастей.

Расчеты коэффициента сепарации проводились нами при подаче 50 м³/сут, 300 м³/сут и следующих значениях варьируемых параметров: $\Delta d = 12, 16, 20$ мм; $L = 500, 750, 1000$ мм; $n = 1, 2, 3$.

Общая длина расчетной области была равна $(L + 1000)$ мм, угол навивки лопасти – 45° .

Шаг по времени, согласно соотношению (2), был порядка 0,001 с; число шагов, определенное по критерию (3), было порядка 500.

Результаты расчетов зависимости коэффициента сепарации от варьируемых параметров приведены в табл. 4.

Согласованность моментов остановки расчетов также оценивалась по критерию гладкости зависимости коэффициента сепарации k от варьируемых параметров $\Delta d, L, n$. Было получено, что ошибка, вносимая прерыванием расчетов, была не более 2 %.

Из табл. 4 видно, что при увеличении L коэффициент сепарации k растет. Если анализировать результаты при $L = 1000$ мм, то можно отметить следующие особенности:

при $Q = 50$ м³/сут зависимость $k(\Delta d, n)$ монотонно растет при увеличении n и Δd (рис. 5);

Таблица 4

Зависимость коэффициента сепарации k от длины шнека, ширины лопасти и числа лопастей для двух скоростей подачи

$L, \text{ м}$	$k, \%$								
	$\Delta d = 12 \text{ мм}$			$\Delta d = 16 \text{ мм}$			$\Delta d = 20 \text{ мм}$		
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
Подача 50 м³/сут									
0,50	45	62	83	35	55	62	26	56	80
0,75	43	52	85	57	79	93	55	83	94
1,00	75	75	99	96	97	99	94	99	98
Подача 300 м³/сут									
0,50	90	93	91	61	95	98	54	80	80
0,75	98	98	97	57	97	97	25	80	65
1,00	95	80	83	94	94	82	87	89	76

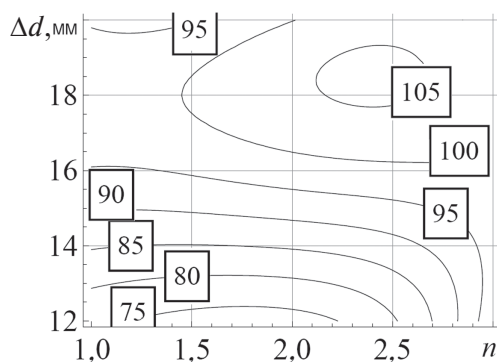


Рис. 5. Расчетные зависимости коэффициентов сепарации (изолинии, %) от ширины лопасти и их количества при $L = 1,00$ м для скорости подачи $50 \text{ м}^3/\text{сут}$

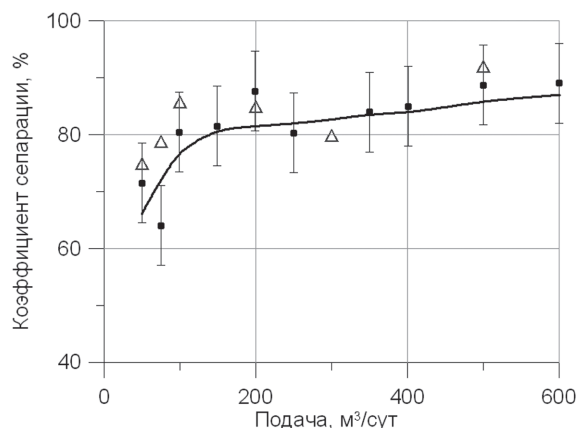


Рис. 6. Сравнение расчетных (треугольники) и экспериментальных (точки) результатов для сепаратора на большие скорости подачи

при $Q = 300 \text{ м}^3/\text{сут}$ максимум функции $k(\Delta d, n)$ достигается при $n = 2, 3$, $\Delta d = 18 \text{ мм}$.

Следовательно, оптимальной будет конструкция со следующими параметрами: $\Delta d = 18$, $L = 1000$, $n = 2$.

Однако для промышленных испытаний был изготовлен сепаратор с $\Delta d = 12 \text{ мм}$ ввиду технологических сложностей изготовления шнека с более широкой лопастью. Изготовленный сепаратор был испытан на стенде. Сравнение расчетных и экспериментальных данных приведено на рис. 6. Видно, что наблюдается совпадение этих данных в пределах (5–7) %; кроме того, практически во всей области достигается значение коэффициента сепарации 80 %.

Устройство на основе выбранной конструкции гравитационного сепаратора гидроциклонного типа было испытано в эксплуатационных условиях в ОАО «Газпромнефть – Ноябрьскнефтегаз» [20]. Лабораторные исследования проб, взятых со скважин, показали отсутствие частиц размером более 100 мкм. В ряде скважин наработка существенно превысила предыдущую. Так, в скважине № 5194, куст 516, наработка на 15 ноября 2011 года составила 365 суток, в то время как предыдущая – 17 суток. Опытно-промышленные испытания были признаны успешными. На указанную дату в ОАО «Газпромнефть – Ноябрьскнефтегаз» в эксплуатации находится 17 установок гравитационных сепараторов.

Таким образом, в работе предложена модель расчета траекторий частиц в гравитационных сепараторах без закрутки потока и гидроциклонного типа;

проведены расчеты движения частиц в гравитационных сепараторах двух типов, при этом расчетные данные совпали с экспериментальными в пределах погрешности (5–7) %.

По результатам опытно-промышленных испытаний в ОАО «Газпромнефть – Ноябрьскнефтегаз» разработанная конструкция гравитационного сепаратора признана успешной.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент РФ № 2 386 860. Российская Федерация МПК⁷ F04D13/10. Погружная насосная установка для добычи нефти [Текст] / Кучурин А.Е., Ленский А.В., Горбунов В.В. [и др.]; заявитель и патентообладатель ООО «РН-Уфанипнефть». – №2008141192/06; заявл. 16.10.2008; опубл. 20.04.2010, Бюл. №11 – 3 с.
2. Финкельштейн, З.Л. Применение и очистка рабочих жидкостей для горных машин [Текст] / З.Л. Финкельштейн – М.: Недра, 1986. – 232 с.
3. Афанасьев, А.В. Применение десендеров для защиты ЭЦН на пластах Покурской свиты [Текст] / А.В. Афанасьев, П.А. Шмонин, С.Б. Якимов // Жур-

нал о технологиях ТНК-ВР «Новатор». – 1999. – Вып. 27. – С. 27–31.

4. Мустафаев, А.М. Гидроциклоны в нефтедобывающей промышленности [Текст] / А.М. Мустафаев, Б.М. Гутман – М.: Недра, 1981. – 260 с.

5. Говберг, А.С. Гидроциклонные сепараторы механических примесей типа СМГБ для погружных электроцентробежных насосов [Текст] / А.С. Говберг, В.А. Терпунов, К.К. Суворов [и др.] // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2007. – Вып. 2. – С. 28–29.

6. Яблонский, В.О. Расчет показателей разделения суспензий с использованием уравнения регрессии

[Текст] / В.О. Яблонский // Химическое и нефтегазовое машиностроение.— 2008.— Вып. 8.— С. 3 — 7.

7. **Непомнящий, Е.А.** Расчет уноса частиц твердой фазы из конического гидроциклона [Текст] / Е.А. Непомнящий, А.М. Кутепов // ТОХТ. — 1982. — Т. 16. — Вып. 1. — С. 78–81.

8. **Баранов, Д.А.** Принципы расчета и конструирования гидроциклонов для разделения эмульсий [Текст]: автореферат дис. ... докт. техн. наук/ Д.А. Баранов. — Пермь, НИИНГ, 1996.— 16 с.

9. **Белов, И.А.** Моделирование турбулентных течений [Текст]: Учеб. пос. / И.А. Белов, С.А. Исаев. — СПб.: Балт. гос. техн. ун-т, 2001.— 108 с.

10. ANSYS CFX-Solver Theory Guide [Электронный ресурс]. — Canonsburg, 2006. — 312 p. — <http://ansys.com/>.

11. **Нигматулин, Р.И.** Основы механики гетерогенных сред [Текст] / Р.И. Нигматулин. — М.:Наука, 1978. — 336 с.

12. **Евтюшкин, Е.В.** Математическое моделирование движения дисперсной фазы и сепарации в гидроциклоне [Текст]: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 08.00.13: защищена 12.02.07: утв. 15.09.07/ Евтюшкин Евгений Вадимович. — Пермь, 2007.— 168 с. — Библиогр.: с.155 — 168.

13. **Островский, Г.М.** Прикладная механика неоднородных сред [Текст] / Г.М. Островский — СПб.: Наука, 2000. — 359 с.

14. **Ландау, Л.Д.** Механика сплошных сред [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Наука, 1986. — 736 с.

15. **Пантелеев, В.Г.** Компьютерная микроскопия [Текст] / В.Г. Пантелеев, О.В. Егорова, Е.И. Клыкова. — М.: Техносфера, 2005. — 304 с.

16. **Ашихмин, В.Н.** Введение в математическое моделирование [Текст]: Учеб. пос. под ред. П.В. Трусова / В.Н. Ашихмин, М.Б. Гитман, И.Э. Келлер [и др.]. — М.: Университетская книга, Логос, 2007.— 440 с.

17. Каталог продукции ГК «Новомет» [Электронный ресурс]. — <http://www.novomet.ru/>.

18. Каталог оборудования ООО «Производственная компания “Борец”» [Электронный ресурс]. — <http://www.boretscompany.ru/>.

19. Каталог «Погружное оборудования для добычи нефти», ОАО «Алнас» [Электронный ресурс]. — <http://www.alnas.ru/>.

20. **Антипина, Н.А.** Погружные сепараторы механических примесей [Текст] / Н.А. Антипина, А.Л. Каплан, С.Н. Пещеренко // Бурение и нефть.— 2011.— № 12.— С. 39–42.



АТОМНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА КЛАСТЕРОВ И НАНОСТРУКТУР

УДК 621.315.592

*А.В. Шиляев, Н.Л. Баженов,
К.Д. Мынбаев, Г.Г. Зегря*

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ И РТУТИ

Твердые растворы CdHgTe (КРТ) традиционно являются одними из основных материалов для инфракрасных фотоприемников; их электрические и фотоэлектрические свойства исследовались достаточно подробно. Возникший в последнее время интерес к КРТ как к материалу для изготовления инфракрасных излучателей обуславливает необходимость детального изучения их оптических свойств, и, в частности, идентификацию оптических переходов в наногетероструктурах КРТ с эффектами размерного квантования [1].

Настоящая работа посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию оптических переходов в наногетероструктурах на основе КРТ. Из сопоставления экспериментальных результатов по фотолюминесценции (ФЛ) таких структур и расчетов, учитывающих особенности зонной структуры материала, идентифицированы наблюдавшиеся переходы и объяснена их специфика.

Исследовались наногетероструктуры $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ с потенциальными ямами, выращенные в Институте физики полупроводников СО РАН методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках из арсенида галлия (310)GaAs с буферными слоями теллурида кадмия CdTe [2]. Составы твердого раствора в яме и в барьерных слоях, а также ширины ям приведены в табл. 1.

ФЛ изучалась в диапазоне температур $4,2 < T < 300$ К при импульсном возбуждении полупроводниковым лазером InGaAs/GaAs с рабочей длиной волны 0,98 мкм при темпера-

туре $T = 4,2$ К. Запись спектров осуществлялась на автоматизированной установке, включающей монохроматор МДР-23. Сигнал ФЛ регистрировался охлаждаемым InSb-фотодиодом; его возбуждение осуществлялось со стороны верхнего слоя КРТ, а регистрация сигнала — со стороны подложки GaAs.

На рис. 1 показаны на примере образцов № 1 и № 5 типичные спектры ФЛ образцов структур с узкими ямами ($a = 12 - 33$ нм) и с широкими ($a \geq 50$ нм). На рис. 2 приведены температурные зависимости положения пиков спектров ФЛ для образцов с узкой (а) и широкой (б) ямами.

Различие вида температурных зависимостей для положения пика спектра ФЛ, а также почти двукратное увеличение полуширины пика для образцов с широкой ямой, по сравнению с той же величиной для образцов с узкой ямой, очевидно, свидетельствует о различной специфике излучательной рекомбинации в таких структурах. В образцах КРТ с широкими ямами, как известно [4], ФЛ обусловлена рекомбинацией экситонов, локализованных на флуктуациях состава. Что же касается образцов с узкими ямами, то можно предположить, что в их спектрах наблюдается пик рекомбинации носителей заряда между уровнями их размерного квантования.

Для проверки этой гипотезы был проведен расчет положения локальных уровней размерного квантования носителей. Обычно его проводят в рамках параболической зависимости энергии от волнового вектора. Однако в нашем

Таблица 1

Характеристики исследованных наногетероструктур $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ с потенциальными ямами

Номер образца	Параметр состава твердого раствора, м. д.		Ширина ямы a , нм
	В яме (x_w)	В барьерном слое (x_b)	
1	0,24	0,80	12
2	0,35	0,82	33
3	0,34	0,69	50
4	0,32	0,68	100
5	0,37	0,84	200

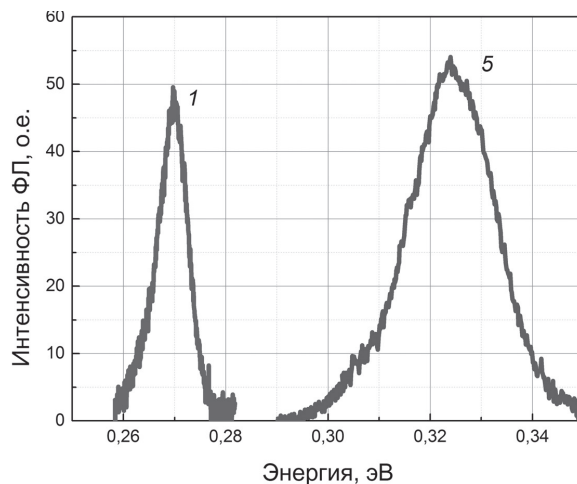


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции образцов № 1 и № 5, измеренные при $T = 4,2$ К; номера пиков соответствуют номерам образцов в табл. 1

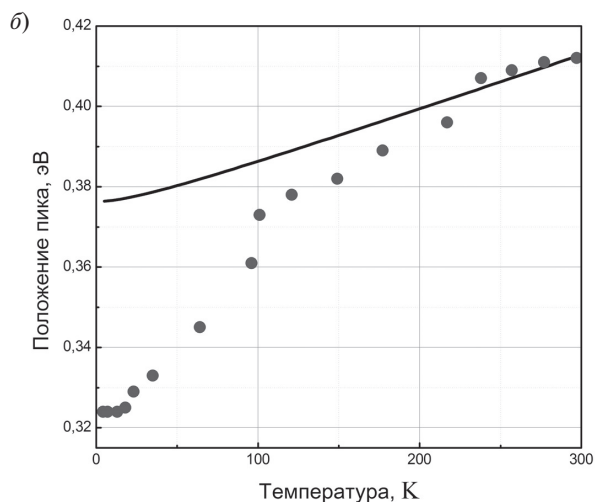
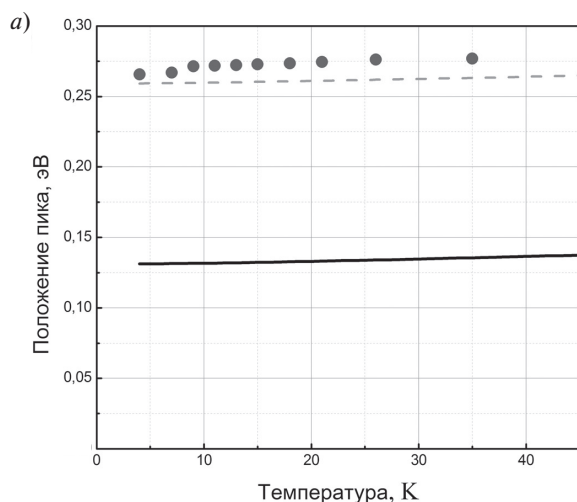


Рис. 2. Расчетные (линии) и экспериментальные (символы) температурные зависимости положения пиков ФЛ для образцов № 1 (а) и № 5 (б).

Приведены данные для ширины запрещенной зоны E_{gw} CdHgTe , вычисленные по формуле из работы [3] (сплошная линия) и для эффективной оптической ширины запрещенной зоны $\tilde{E}_g$ (пунктир); метод расчета см. в тексте

случае необходимо было учесть неравенство эффективных масс внутри ямы и барьерном слое структур КРТ, а также сильную непараболичность закона дисперсии, присущую всем узкощелевым полупроводникам.

Расчет указанного положения уровней с учетом непараболичности закона дисперсии полупроводника был проведен в рамках модели Кейна – Латтинжера. При этом использовались выражения, полученные в рамках четырехзонной модели Кейна для структуры энергетических зон, аналогичной структуре КРТ (см. работу [5]).

Далее приведены основные соотношения, позволяющие вычислить положения уровней размерного квантования в наногетероструктурах КРТ.

Для различных носителей заряда в структурах с квантовыми ямами получены дисперсионные уравнения (см. работу [5]), которые приведены далее.

Тяжелые и легкие дырки. Спектр тяжелых дырок совпадает с квантовомеханическим спектром частицы в прямоугольной квантовой яме для случая параболических зон; кроме



того, масса тяжелых дырок не зависит от состава твердого раствора в рамках используемой модели. Для состояний с четной и нечетной x -компонентами волновой функции тяжелых дырок дисперсионное уравнение принимает следующий вид:

$$\operatorname{tg}\left(\frac{k_h a}{2}\right) = \frac{\kappa_h}{k_h}; \quad \operatorname{ctg}\left(\frac{k_h a}{2}\right) = -\frac{\kappa_h}{k_h} \quad (7)$$

— для четных и нечетных состояний соответственно; здесь k_h, κ_h — поперечные волновые векторы для тяжелых дырок в области квантовой ямы, а также барьера.

Для легких дырок состояния с различной четностью уже не разделяются и дисперсионное уравнение становится более сложным:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{(E_g + \tilde{\delta} + U_c - E)(k_l^2 + q^2)}{(E_g + \delta - E)(\kappa_l^2 - q^2)} \kappa_l \operatorname{tg}\left(\frac{k_l a}{2}\right) - \right. \\ & \quad \left. - k_l \frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} \right] \times \\ & \times \left[\frac{(E_g + \delta + U_c - E)(k_l^2 + q^2)}{(E_g + \delta - E)(\kappa_l^2 - q^2)} \kappa_l \operatorname{ctg}\left(\frac{k_l a}{2}\right) - \right. \\ & \quad \left. - k_l \frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} \right] = \\ & = q^2 \left[\frac{2\lambda_l - 1}{2\tilde{\lambda}_l - 1} + \frac{(E_g + \tilde{\delta} + U_c - E)(k_l^2 + q^2)}{(E_g + \delta - E)(\kappa_l^2 - q^2)} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

где k_l — поперечный волновой вектор в области квантовой ямы, q — продольный волновой вектор; полный волновой вектор

$$k^2 = k_l^2 + q^2;$$

аналогично, κ_l — поперечный волновой вектор в области барьера,

$$\kappa^2 = \kappa_l^2 - q^2;$$

$$\lambda = \frac{\delta}{E + 2\delta - \frac{\hbar^2 k_l^2}{2m_h}}, \quad \tilde{\lambda} = \frac{\tilde{\delta}}{E + U_v + 2\tilde{\delta} - \frac{\hbar^2 k_l^2}{2m_h}};$$

U_c, U_v — величины барьера в зоне проводимости и в валентной зоне, соответственно. Энергия E отсчитывается так, что потолок валентной зоны $E_v = \delta$; m_h — эффективная масса тяжелых дырок. Переменные без тильды относятся к области ямы, а с тильдой — к области барьера.

Электроны. Дисперсионное выражение имеет вид:

$$\begin{aligned} & \left(k_c \operatorname{tg} \frac{k_c a}{2} - \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) \left(k_c \operatorname{ctg} \frac{k_c a}{2} - \frac{Z}{\tilde{Z}} \kappa_c \right) = \\ & = -q^2 \left(\lambda - \tilde{\lambda} \frac{Z}{\tilde{Z}} \right)^2, \end{aligned} \quad (9)$$

где k_c — волновой вектор в области ямы в поперечном направлении, который квантуется; полный волновой вектор

$$k^2 = k_c^2 + q^2;$$

аналогично κ_c — поперечный волновой вектор в области барьера,

$$\kappa^2 = \kappa_c^2 - q^2;$$

$$Z = \frac{E^2 + E(2E_g + 3\delta) + (E_g + 3\delta)E_g}{E_g + E + 2\delta};$$

$$\begin{aligned} \tilde{Z} = & \frac{E^2 + E(2E_g + 2U_v + 3\tilde{\delta})}{E_g + E + U_v + 2\tilde{\delta}} + \\ & + \frac{(E_g + U_v + 3\tilde{\delta})(E_g + U_v)}{E_g + E + U_v + 2\tilde{\delta}}; \end{aligned}$$

$$\lambda = \frac{\delta}{E + 2\delta + 2\delta}; \quad \tilde{\lambda} = \frac{\tilde{\delta}}{E + E_g + U_v + 2\tilde{\delta}}.$$

Заметим, что для электронов и легких дырок при $q = 0$ состояния разделяются на четные и нечетные, тогда как при $q \neq 0$ имеет место перемешивание состояний с различной четностью. Также можно показать, что в случае легких дырок ($q = 0$) дроби перед знаками тангенса или котангенса учитывают различие эффективных масс в областях ямы и барьерного слоя. Члены левой части уравнения, содержащие переменные λ_l и $\tilde{\lambda}_l$, появляются вследствие учета спин-орбитального взаимодействия в рамках используемой модели.

На рис. 3 показаны зависимости энергии электронов, легких и тяжелых дырок от произведения волнового вектора на ширину ямы (qa) для образца № 1 при $T = 4,2$ К, полученные в рамках предложенной модели непараболических зон и в рамках обычной параболической модели, но при учете различия масс носителей в областях ямы и барьера [6]. Энергии размерного квантования, рассчитанные в рамках указанных моделей, не совпадают (см. рис. 3). Для электронов это различие невелико, тогда как для легких дырок энергии отличаются почти в два раза. Это связано с сильным подмешиванием s -состояний зоны проводимости и p -состояний валентной зоны для легких дырок. Кроме этого, на энергетический спектр легких дырок оказывает существенное влияние спин-орбитальное взаимодействие.

Результаты, полученные для образцов с узкими ямами, представлены в табл. 2.

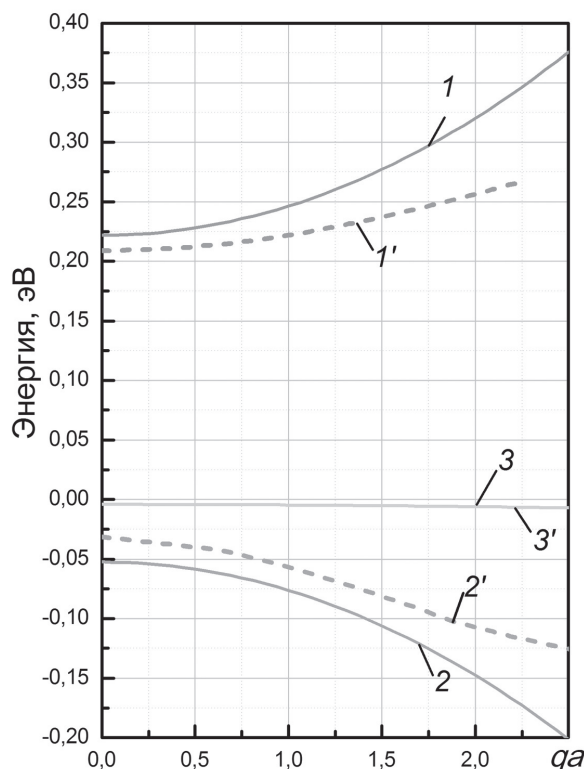


Рис. 3. Энергетический спектр в квантовой яме на основе КРТ для параболических зон (1, 2, 3) и при учете непараболическости (1', 2', 3')

Таблица 2

Результаты расчетов основных энергетических параметров по положению пика фотолуминесценции для образцов с узкими ямами

Номер образца	Ширина ямы a , нм	Энергия, эВ		
		E_{PL}	E_{gw}	$\tilde{E}_g$
1	12	0,270	0,131	0,269
2	33	0,351	0,335	0,349

Обозначения: E_{PL} — положение пика ФЛ; E_{gw} — ширина запрещенной зоны в яме; $\tilde{E}_g$ — эффективная оптическая ширина запрещенной зоны; $\tilde{E}_g = E_{gw} + E_{e1} + E_{lh1}$ (E_{e1}, E_{lh1} — энергии первых уровней размерного квантования для электронов и дырок).

Расчетные и экспериментальные температурные зависимости положения пика ФЛ для образца № 1 показаны на рис. 2,а.

Энергия излучения наблюдавшейся в эксперименте полосы ФЛ в максимуме составляла 270 мэВ, что близко к полученному нами расчетному значению энергии переходов между уровнями квантования электронов и легких дырок. Поскольку подмешивание s - и p -состояний приводит к усилению интенсивности оптических переходов между энергетическими уровнями электронов и легких дырок, можно сделать вывод о том, что экспериментально наблюдались именно такие оптические переходы. Явления, связанные с уровнями квантования тяжелых дырок, не могли проявляться в нашем эксперименте, так как соответствующая им длина волны излучения выходила за пределы полосы чувствительности фотоприемника InSb.

Таким образом, сопоставление результатов расчета положения уровней размерного квантования носителей заряда в наногетероструктурах на основе КРТ, выполненного с учетом особенностей зонной структуры этих твердых растворов, и данных по экспериментальному наблюдению фотолуминесценции позволяет говорить о возможности наблюдения переходов между состояниями электронов и легких дырок в подобных структурах.

Работа была частично поддержана РФФИ (проект 11-02-90434-Укр-ф-а).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mercury Cadmium Telluride: Growth, Properties and Applications [Text]/ Ed. by P. Capper and J. Garland, — Chichester, UK: Wiley and Sons, 2010. — 556 p.
2. **Mikhailov, N.N.** Growth of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ nanostructures by molecular beam epitaxy with ellipsometric control [Text]/ N.N. Mikhailov, R.N. Smirnov, S.A. Dvoretzky, [et al.] // Int. J. Nanotechnol. — 2006. — Vol. 3. — № 1. — P. 120–130.
3. **Laurenti, J.P.** Temperature dependence of the fundamental absorption edge of mercury cadmium telluride [Text]/ J.P. Laurenti, J. Camassel, A. Bouhemadou, [et al.] // J. Appl. Phys. — 1990. — Vol. 67. — № 11. — P. 6454–6461.
4. **Ivanov-Omskii, V.I.** Optical properties of molecular beam epitaxy-grown HgCdTe structures with potential wells [Text]/ V.I. Ivanov-Omskii, K.D. Mynbaev, N.L. Bazhenov, [et al.] // Phys. Stat. Sol. (c). — 2010. — Vol. 7. — № 6. — P. 1621–1623.
5. **Зегря, Г.Г.** Механизмы Оже-рекомбинации в квантовых ямах [Текст]/ Г.Г. Зегря, А.С. Полковников// ЖЭТФ. — 1998. — Т. 113. — Вып. 4. — С. 1491–1521.
6. **Воробьев, Л.Е.** Оптические свойства наноструктур [Текст]: Учеб. пос./ Л.Е. Воробьев, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин; под ред Е.Л. Ивченко и Л. Е. Воробьева. — СПб.: Наука, 2001. — 188 с.

УДК 535.14

А.С. Курапцев, И.М. Соколов

**СРАВНЕНИЕ МАКРО- И МИКРОСКОПИЧЕСКОГО МЕТОДОВ
РАСЧЕТА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПЛОТНЫХ
УЛЬТРАХОЛОДНЫХ АТОМНЫХ ОБЛАКОВ**

Холодные атомы в настоящее время являются объектом интенсивных исследований — как теоретических, так и экспериментальных. С научной точки зрения интерес к атомным ансамблям, охлажденным до сверхнизких температур, обусловлен целым рядом их уникальных физических свойств. С практической точки зрения интересны возможности применения этих объектов в ячейках квантовой памяти, в качестве систем для «остановки» света, а также в метрологии и стандартизации частоты [1 — 4]. При этом подавляющее большинство предложенных схем практического использования холодных атомных облаков основано на их взаимодействии с электромагнитным излучением (как правило, в световом диапазоне). В настоящее время к изучению этого взаимодействия приковано внимание большого числа научных групп из разных стран.

Взаимодействие холодных атомных облаков со светом имеет ряд особенностей, которые необходимо корректно учитывать при построении теоретической модели. При очень низкой температуре атомы имеют малые скорости, и как следствие, малые доплеровские уширения линий резонансного излучения и поглощения. Малые доплеровские уширения ($\Delta\omega_D \ll \gamma$, где γ — естественная ширина линии для изолированного атома) приводят к тому, что атомы имеют большие сечения резонансного рассеяния ($\delta \approx \lambda^2$, где λ — обратное волновое число излучения изолированного атома), поэтому необходимо учитывать многократное рассеяние даже для облаков сравнительно невысокой концентрации. Атомные облака, охлажденные в специальных ловушках, характеризуются неоднородным распределением атомов по сверхтонким подуровням, а также случайным пространственным поло-

жением атомов. Малые скорости движения атомов приводят также к тому, что при многократном рассеянии могут наблюдаться интерференционные эффекты, хотя упорядоченность в среде отсутствует [5].

В последнее время особый интерес вызывают плотные ультрахолодные атомные облака ввиду того, что в них возможен целый ряд уникальных физических эффектов. Наиболее значимым из них с точки зрения практического использования можно считать эффект сильной локализации света [6].

Для описания взаимодействия атомных облаков со светом можно применять метод локального поля и вытекающую из него формулу Лоренц — Лоренца, которая дает явную зависимость диэлектрической проницаемости от частоты падающего света и концентрации атомов. Однако в эту формулу входит средняя одноатомная поляризуемость, которая при большой концентрации изменяется вследствие межатомного резонансного диполь-дипольного взаимодействия и не совпадает с поляризуемостью изолированного атома. Ввиду межатомного взаимодействия облако рассеивает свет коллективным образом. Данный объект, по сути, представляет собой огромную квазимолекулу, а не отдельные атомы — независимые рассеиватели.

Для адекватного учета межатомного диполь-дипольного взаимодействия существует два подхода: макроскопический и микроскопический. Первый базируется, с одной стороны, на уравнениях макроскопической электродинамики, а с другой — на формуле Кубо, связывающей корреляционную функцию атомных дипольных моментов с восприимчивостью [7, 8]. В рамках этого самосогласованного макроскопического подхода в работе [7] было получено явное аналитическое выражение для диэлектрической проницаемости как функции концентрации атомов и частоты падающего света. Однако при выводе этого выражения был использован ряд приближений, которые ограничивают его применение для облаков большой концентрации.

Микроскопический подход базируется на представлении о дискретной структуре вещества и решении уравнения Шредингера для объединенной системы, состоящей из атомов и поля, взаимодействующего с ними [9, 10].

Такой подход позволяет рассматривать атомные облака в существенно большем диапазоне концентраций по сравнению с макроскопическим подходом, но его использование связано со значительными вычислительными трудностями.

Оба подхода позволяют вычислять диэлектрическую проницаемость для различных значений концентрации атомов и частоты падающего света.

Настоящая статья посвящена сравнению этих двух подходов и исследованию границ применимости макроскопического подхода. По вычисленным значениям диэлектрической проницаемости в обоих случаях нами рассчитано сечение рассеяния на облаке сферической формы с квазиоднородным (в среднем) распределением атомов по объему облака на основе теории Дебая — Ми. Помимо этого, сечение рассеяния рассчитано также микроскопически последовательным образом без использования теории Дебая — Ми (см. [9]).

Основы макро- и микроскопического подходов

Рассмотрим взаимодействие плотных ультрахолодных атомных ансамблей со слабым когерентным монохроматическим светом.

Как уже упоминалось, макроскопический подход базируется на решении уравнений Максвелла совместно с формулой Кубо для обобщенной восприимчивости. При этом используется приближение непрерывной среды, а также предположение о том, что дипольные моменты всех атомов считаются направленными одинаково (подробнее см. работу [7]). Данный подход позволяет получить следующее выражение для диэлектрической проницаемости ε :

$$\varepsilon(\omega) = (1 - 2MD\Omega) / (1 + MD\Omega), \quad (1)$$

где $M = 4\pi n_0 / 3\hbar$; $D = |d_{F_0 F}|^2 / [3(2F_0 + 1)]$;

$$\Omega = \left\{ \omega - \omega_0 + i\sqrt{\varepsilon(\omega)}\gamma/2 \right\}^{-1};$$

здесь n_0 — концентрация атомов; $d_{F_0 F}$ — приведенный матричный элемент дипольного момента для перехода между основным состоянием F_0 и возбужденным F ; ω — частота падающего света; ω_0 — резонансная частота перехода между основным и возбужденным со-



стояниями; γ — обратное время жизни возбужденного состояния.

Соотношение (1) является кубическим уравнением относительно $\sqrt{\varepsilon(\omega)}$, в результате решения которого получается зависимость диэлектрической проницаемости от частоты в явном виде.

Микроскопический подход основывается на представлении о среде как совокупности атомов. Ввиду того, что за время однофотонного рассеяния атомы из-за сверхнизкой температуры (≈ 30 мК) не успевают существенно изменить свою пространственную конфигурацию, в расчете их можно считать неподвижными. Но за весь период светового импульса, соответствующего реальным экспериментам, атомы успевают хаотическим образом переместиться, причем так, что все пространственные конфигурации становятся равновероятными. Поэтому в микроскопическом подходе производится многократное статистическое усреднение наблюдаемых по пространственным конфигурациям расположения атомов.

Как было сказано выше, падающее на облако излучение является слабым. Это позволяет ограничиться первыми двумя членами в разложении когерентного состояния по фоковским состояниям. Таким образом, когерентное состояние падающего света мы аппроксимируем суперпозицией однофотонного и вакуумного состояний.

Суть микроскопического расчета состоит в решении нестационарного уравнения Шредингера для объединенной системы, состоящей из атомов и взаимодействующего с ними поля. Полный гамильтониан указанной системы представляется в виде суммы гамильтонианов свободных (не взаимодействующих между собой) атомов, свободного поля, а также оператора их взаимодействия. Последний записывается в дипольном приближении; его использование уместно благодаря тому, что длина волны Де Бройля для атомов в облаке много меньше как среднего межатомного расстояния, так и длины волны излучения. Другое важное допущение — это ограничение числа квантовомеханических состояний. Для задачи однофотонного рассеяния на облаке, в котором в начальный момент времени все атомы находились в основном состоянии, рассматриваются следующие состояния:

есть один фотон и все атомы в основном состоянии;

есть один атом в возбужденном состоянии и нет фотонов;

есть два атома и один фотон (промежуточное нерезонансное состояние);

нет фотонов и все атомы в основном состоянии (вакуумное состояние).

Указанных состояний достаточно для того, чтобы провести расчет с точностью до второго порядка по постоянной сверхтонкой структуры. Ввиду того, что однофотонных состояний бесконечно много вследствие бесконечного числа мод полевой подсистемы, мы имеем базис, состоящий из бесконечного числа состояний. Тем не менее, можно методом исключения получить систему уравнений для амплитуд состояний с одним возбужденным атомом без фотонов.

В данной работе мы рассмотрим схему атомных уровней, в которой основное состояние характеризуется квантовым числом полного углового момента $J = 0$, а возбужденное — $J = 1$. Последнее имеет зеемановскую структуру, т. е. рассматривается три подуровня возбужденного состояния, каждый из которых характеризуется своим магнитным квантовым числом $m = -1; 0; +1$. В такой схеме имеется $3N$ состояний с одним возбужденным атомом без фотонов, где N — число атомов (потому что у каждого атома имеется три зеемановских подуровня возбужденного состояния). Через эти состояния находятся все остальные и в конечном итоге волновая функция, что обеспечивает максимально полное описание квантовомеханической системы. Любые интересующие нас наблюдаемые находятся путем квантовомеханического усреднения по волновой функции.

Диэлектрическую проницаемость мы находим с помощью комплексного волнового числа, связанного с ней простым соотношением. Это число, в свою очередь, находится на основе пространственного распределения атомной поляризации, пропорциональной полю в среде. Формально это делается следующим образом: облако мысленно разбивается на участки пространства мезоскопического объема, достаточно малые для того, чтобы атомная поляризация мало менялась в пределах этого объема, но в то же время достаточно большие для того, чтобы в них содержалось большое число атомов.

Затем для каждого мезоскопического объема вычисляется атомная поляризация — сумма дипольных моментов всех атомов, содержащихся в этом объеме, деленная на сам объем. После этого строится зависимость атомной поляризации от пространственного положения этих мезоскопических объемов. Значения атомной поляризации, как и любых других наблюдаемых величин, естественным образом зависят от координат атомов как от параметров, причем флуктуации от одной пространственной конфигурации атомов к другой сравнимы со средним значением. Учет остаточного теплового движения путем многократного статистического усреднения по пространственным конфигурациям устраняет эти флуктуации. Расчеты показали, что для нормального падения плоской волны на плоскую границу облака амплитуда атомной поляризации спадает в глубь среды по одноэкспоненциальному закону, а ее фаза — линейно нарастает. На основании этих данных находится комплексное волновое число, а значит и диэлектрическая проницаемость.

Результаты и их обсуждение

Диэлектрическая проницаемость. Проанализируем зависимость диэлектрической проницаемости от частоты падающего света ω для различных значений концентрации атомов n .

На рис. 1,а,б приведены результаты расчета дисперсии диэлектрической проницаемости ϵ для разреженного облака. Видно, что для рассмотренной безразмерной концентрации $n(\lambda/2\pi)^3 = 0,02$ два подхода достаточно хорошо согласуются, хотя небольшие отличия все же заметны. Чем меньше концентрация атомов, тем лучше согласуются два подхода, и для сильно разреженных облаков кривые становятся неразличимыми.

На рис. 1,в,г приведены результаты для значения концентрации 0,05, соответствующего некоторому промежуточному случаю между плотными и разреженными облаками. Качественное согласие имеется, но количественно результаты двух подходов отличаются уже существенно. Концентрация атомов, соответствующая рис. 1,в,г, представляет особый интерес ввиду того, что она по физическим условиям близка к предельной, достигнутой к настоя-

щему моменту в реальных экспериментах по рассеянию света с атомами рубидия [11].

Рис. 1,д,е соответствует плотному облаку. При большой концентрации коллективные эффекты уже существенно модифицируют атомную поляризуемость. Приближения макроскопического подхода при таких концентрациях (когда $n(\lambda/2\pi)^3 \approx 1$) становятся неприменимыми, и согласия между подходами уже нет (см. рис. 1,д,е). На кривых 1, соответствующих макроскопическому подходу, видны нефизичные изломы, что говорит о его неприменимости для описания облаков высокой концентрации.

Сечение рассеяния. Проанализируем теперь частотную зависимость сечения рассеяния на сфере с квазиоднородным (в среднем) распределением атомов. Выберем радиус сферы в виде $R = 15(\lambda/2\pi)$. Задача о нахождении сечения рассеяния на однородной сфере с заданной диэлектрической проницаемостью решена в классической электродинамике. Известна аналитическая формула Дебая — Ми, которая дает явную зависимость сечения рассеяния от радиуса сферы и ее диэлектрической проницаемости.

В макроскопическом подходе мы находим сечение рассеяния, используя теорию Дебая — Ми с диэлектрической проницаемостью, вычисленной с помощью формулы (1).

В микроскопическом подходе мы можем воспользоваться этим же приемом. Но, кроме того, этот подход позволяет вычислять сечение рассеяния непосредственно по найденной волновой функции, без привлечения формулы Дебая — Ми.

На рис. 2,а приведена частотная зависимость сечения рассеяния света, вычисленного по формуле Дебая — Ми с диэлектрической проницаемостью, вычисленной на основе макро- и микроскопического подходов. Видно, что для сравнительно небольшой концентрации кривые совпадают с хорошей точностью.

На рис. 2,б аналогичная зависимость приведена для некоторого промежуточного значения концентрации, разделяющего разреженные и плотные облака. Кривые имеют качественное сходство, но количественно уже существенно различаются.

На рис. 2,в приведены те же зависимости, что и на рис. 2,а,б, но уже для плотного облака. На рис. 2,в добавлена также частотная зависи-

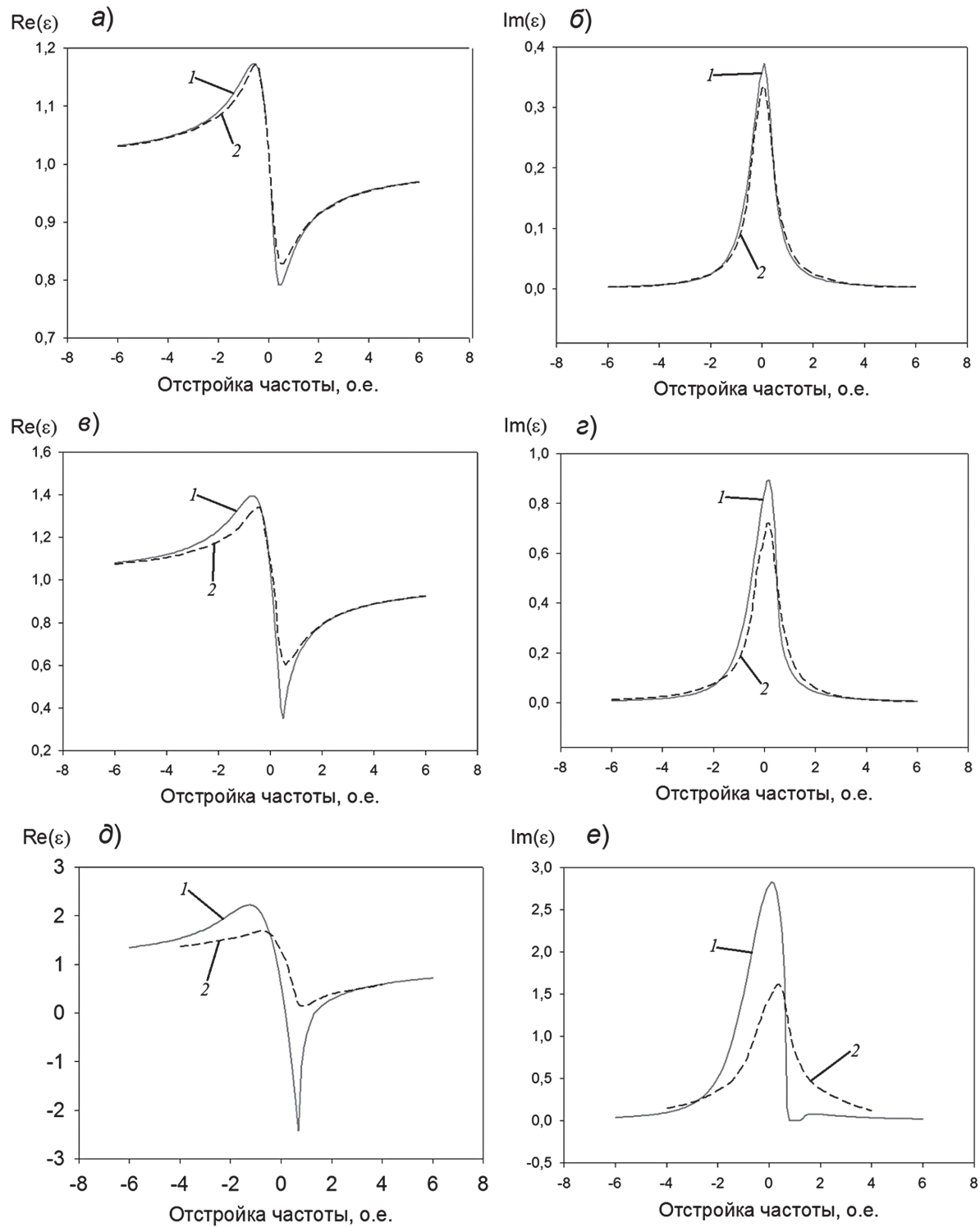


Рис. 1. Дисперсия вещественной и мнимой частей диэлектрической проницаемости: макроскопический (1) и микроскопический (2) подходы; значения безразмерной концентрации: 0,02 (а, б); 0,05 (в, г); 0,2 (д, е)

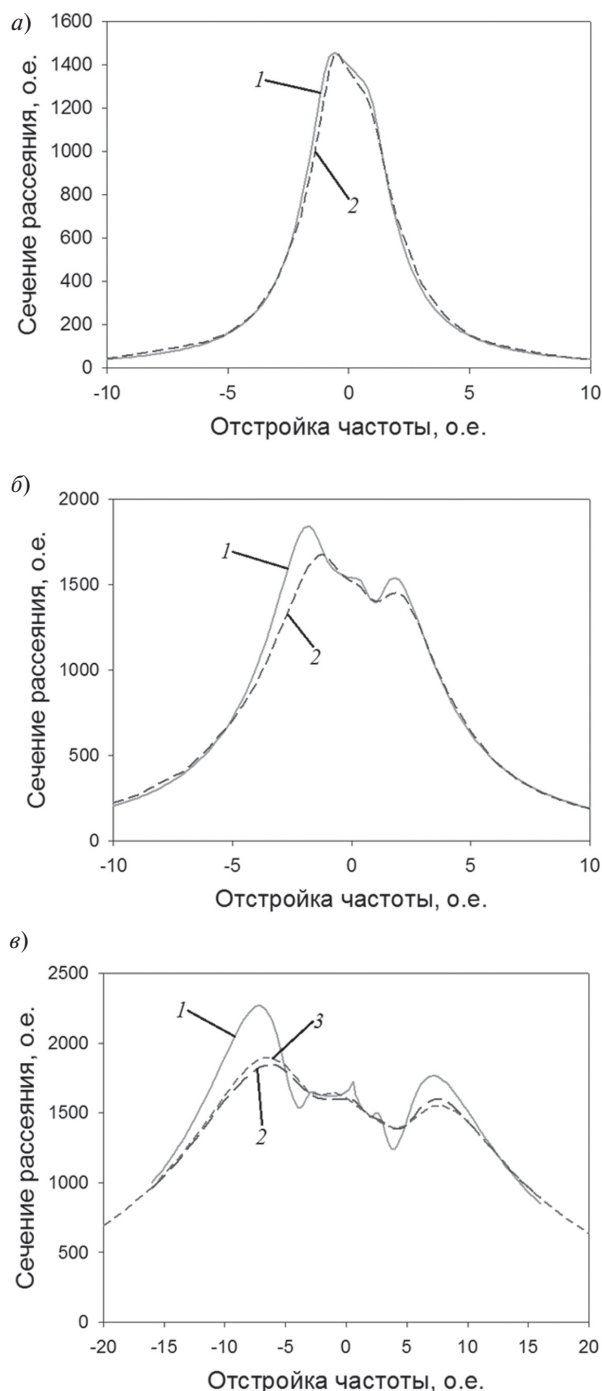


Рис. 2. Частотная зависимость сечения рассеяния электромагнитного излучения на квазиоднородном сферическом облаке: по формуле Дебая – Ми (ДМ) с величинами диэлектрической проницаемости, вычисленными на основе макроскопического (1) и микроскопического (2) подходов, а также без использования формулы ДМ основе микроскопического подхода (3); значения безразмерной концентрации: 0,02 (а); 0,05 (б); 0,2 (в)

мость сечения рассеяния, полученная на основе микроскопического подхода непосредственно, без привлечения формулы Дебая – Ми. Кривые, соответствующие последовательному микроскопическому расчету сечения рассеяния и формуле Дебая – Ми с диэлектрической проницаемостью, полученной из микроскопического расчета, очень близки между собой. Их незначительное различие связано с тем, что решение Дебая – Ми предполагает абсолютно однородную диэлектрическую сферу с резкой границей. Микроскопический расчет, в свою очередь, учитывает тот факт, что вблизи границы атомы находятся в физически других условиях, следовательно, диэлектрическая проницаемость не является постоянной по всему объему облака.

Кривая 1 на рис. 2, в, построенная по формуле Дебая – Ми с диэлектрической проницаемостью из макроскопического расчета, заметно отличается от двух других кривых на рис. 2, в, причем имеет нефизичные изломы. Это связано с тем, что (как уже отмечалось выше) приближения макроскопического подхода теряют справедливость при высокой концентрации атомов. Однако такое различие не столь значительно, как в случае диэлектрической проницаемости, из чего можно сделать вывод о меньшей чувствительности сечения рассеяния к выбору подхода по сравнению с диэлектрической проницаемостью.

Итак, в этой статье мы проанализировали частотные зависимости для диэлектрической проницаемости и сечения рассеяния электромагнитного излучения при различных концентрациях атомов в облаке. Анализ проведен с использованием двух разных подходов – макро- и микроскопического. Выявлены границы применимости макроскопического подхода по концентрации атомов: пороговое значение безразмерной концентрации $n(\lambda/2\pi)^3$ составляет порядок нескольких сотых долей (10^{-2}). Выше этой концентрации самосогласованным методом уже пользоваться нельзя и становится необходимым микроскопический расчет.

Авторы выражают благодарность Д.В. Куприянову за плодотворные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда некоммерческих программ «Династия» и РФФИ (грант 12-02-91056-НЦНИ-а).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bouwmeester, D.** The physics of quantum information: Quantum cryptography, quantum teleportation, quantum computation [Text] / D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger. — Berlin: Springer — Verlag, 2001. — 326 p.
2. **Fleishhauer, M.** Electromagnetically induced transparency: Optics in coherent media [Text] / M. Fleischhauer, A. Imamoglu, J.P. Marangos // Rev. Mod. Phys. — 2005. — Vol. 77. — P. 633 — 678.
3. **Milonni, P.W.** Fast light, slow light, and left-handed light [Text] / P.W. Milonni. — New York: Taylor and Francis, 2005. — 264 p.
4. **Ospelkaus, S.** Efficient state transfer in an ultracold dense gas of heteronuclear molecules [Text] / S. Ospelkaus, A. Peer, K.-K. Ni [et al.] // Nature Phys. — 2008. — Vol. 4. — P. 622 — 626.
5. **Stephen, M.J.** First-order dispersion forces [Text] / M.J. Stephen // J. Chem. Phys. — 1964. — Vol. 40. — № 3. — P. 669 — 673.
6. **Anderson, P.W.** Absence of diffusion in certain random lattices [Text] / P.W. Anderson // Phys. Rev. — 1958. — Vol. 109 — P. 1492 — 1505. *ibid* Vol. 110. — P. 827 — 835.
7. **Sokolov, I.M.** Light scattering from a dense and ultracold atomic gas [Text] / I.M. Sokolov, M.D. Kupriyanova, D.V. Kupriyanov, M.D. Havey // Phys. Rev. A. — 2009. — Vol. 79. — № 053405. — P. 1 — 10.
8. **Glauber, R.J.** Quantum optics of dielectric media [Text] / R.J. Glauber, M. Lewenstein // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 43. — P. 467 — 491.
9. **Соколов, И.М.** Микроскопическая теория рассеяния слабого электромагнитного излучения плотным ансамблем ультрахолодных атомов [Текст] / И.М. Соколов, Д.В. Куприянов, М.Д. Havey // ЖЭТФ. — 2011. — Т. 139 — Вып. 2. — С. 288 — 304.
10. **Fofanov, Ya.A.** Dispersion of the dielectric permittivity of dense and cold atomic gases [Text] / Ya.A. Fofanov, A.S. Kuraptsev, I.M. Sokolov, M.D. Havey // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 84. — № 053811. — P. 1 — 10.
11. **Balik, S.** Near-resonance light scattering from a high-density, ultracold atomic ^{87}Rb gas [Электронный ресурс] / S. Balik, A.L. Win, M.D. Havey [et al.] // arXiv:0909.1133.

УДК 535.333; 544.174.2

*М.А. Ходорковский, С.В. Мурашов,
А.А. Беляева, П.Ю. Сердобинцев, Л.П. Ракчеева*

ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ АРГОН-КСЕНОН В ОБЛАСТИ ДАЛЕКОГО ВАКУУМНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТА, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДОМ (3 + 1) REMPI

Димерные молекулы благородных газов участвуют во многих процессах, происходящих в атмосфере, в различных источниках излучения, а также в лазерных средах [1]. Для прогнозирования этих процессов необходимы знания о межатомных потенциалах в молекулах благородных газов. Имеющиеся в литературе сведения о характере потенциальных кривых возбужденных состояний гомо- и гетероядерных молекул инертных газов, необходимые для разработки таких источников света, недостаточны, а теоретические расчеты подобных мно-

гоэлектронных систем очень трудоемки. Только сочетание теоретических и экспериментальных спектроскопических данных обеспечивает достоверность информации об электронной структуре молекул.

Данная работа является продолжением цикла наших работ по исследованию возбужденных электронных состояний двухатомных молекул благородных газов ($\text{Rg Rg}'$) методом многофотонной резонансной лазерной ионизации; в частности, электронным состояниям молекул ArXe посвящены наши работы [2–5].

В литературе встречается мало данных об электронных состояниях молекул ArXe в области $66500 - 85000 \text{ см}^{-1}$ [6–11], а в области, близкой к энергии ионизации молекул $E_{\text{ион}} = 96515,6 \text{ см}^{-1}$ ($85000 - 89500 \text{ см}^{-1}$), данные вообще отсутствуют. Электронная структура молекул ArXe ранее исследовалась традиционными методами оптического поглощения и флуоресценции, а также методами резонансной лазерной фотоионизации $(2 + 1)$ и $(1 + 1')$ REMPI, где первое число обозначает количество фотонов, необходимых для возбуждения молекул, а второе — для последующей их ионизации.

Теоретические расчеты потенциальных кривых для молекул в основном и некоторых возбужденных состояниях молекул ArXe были выполнены в работах [12, 13]. Полученные потенциальные кривые характеризуются неглубокими ямами, могут иметь «горб» и располагаться частично или полностью выше диссоционного предела. Несмотря на значительное количество работ, посвященных этой проблеме, не все возбужденные состояния молекул исследованы, так как слабосвязанные молекулы благородных газов представляют собой непростые объекты для изучения. Прежде всего, их образование возможно только при определенных условиях. Наиболее эффективно эти молекулы образуются в условиях сверхзвукового молекулярного пучка при низкой температуре (примерно 10 К) в основном электронном состоянии и, как правило, на нулевом колебательном уровне. Кроме того, все возбужденные состояния расположены в вакуумном ультрафиолете, что затрудняет их экспериментальное изучение.

Настоящая работа посвящена исследованию возбужденных состояний ArXe вблизи возбужденных состояний ксенона $\text{Xe}^* 7p, 6d$ в области $87800 - 89500 \text{ см}^{-1}$ с помощью метода резонансной многофотонной ионизации $(3 + 1)\text{REMPI}$. Ранее нами были получены и интерпретированы фотоионные спектры молекул ArXe в области атомов $\text{Xe}^* 6s[3/2]_{1,2}^0$ ($66500 - 68800 \text{ см}^{-1}$) [3], $\text{Xe}^* 6s', 6p, 5d$ ($77000 - 80200 \text{ см}^{-1}$) [4] и $\text{Xe}^* 5d, 7s, 6d, 6p'$ ($80300 - 89500 \text{ см}^{-1}$) [4, 5] методами $(2+1)$ и $(3+1)$ REMPI. В статье [5] в области $88000 - 89500 \text{ см}^{-1}$ приведены наблюдаемые спектры, но не дана их интерпретация ввиду их сложности. В литературе также отсутствуют данные относительно структуры возбужденных состояний ArXe в этой области.

Экспериментальная часть

Фотоионизационные спектры молекул ArXe в области $87500 - 89500 \text{ см}^{-1}$ были получены на той же установке, что и в работах [4, 5]. Димерные молекулы формировались при расширении смеси инертных газов состава 5% ксенона и 95% аргона из области высокого давления (5 атм) в вакуум (10^{-6} Торр) через импульсное сопло диаметром 0,1 мм. При этом происходит охлаждение газа до температур примерно 10 К. Центральная часть пучка выделялась скиммером и облучалась сфокусированным излучением лазера на красителе (Lambda Physik FL3002, накачка — XeCl EMG-103). В случае трехфотонного резонанса молекулы возбуждались излучением второй гармоники перестраиваемого лазера на РТР и DMQ ($\lambda = 333 - 373 \text{ нм}$) с длительностью лазерного импульса 15 нсек. Спектральная ширина полосы излучения составляла $0,3 \text{ см}^{-1}$. После взаимодействия лазерного и молекулярного пучков на определенных длинах волн положительные ионы при помощи электростатических линз выталкиваются электрическим полем в дрейфовую область время-пролетного масс-спектрометра в направлении микрональной пластины для регистрации. Одновременно можно регистрировать молекулярные и атомарные ионы $\text{ArXe}^+, \text{Ar}^+, \text{Xe}^+$.

Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 1 представлены фотоионизационные спектры молекул ArXe при регистрации молекулярных (ArXe^+) и атомных (Ar^+) ионов в области $87500 - 90000 \text{ см}^{-1}$. Видно, что наблюдаются очень сложные системы полос. Так как наиболее интенсивные молекулярные полосы должны наблюдаться вблизи разрешенных атомных переходов, то при интерпретации спектров будем ориентироваться прежде всего на них. Кроме того, молекулярные полосы могут появляться и вблизи запрещенных атомных линий.

В случае трехфотонного возбуждения для атомов разрешены дипольные переходы с $\Delta J = \pm 1, \pm 3$ и по четности электронной конфигурации термов: чет $\leftrightarrow$ нечет. Как известно [14], в области $87500 - 89500 \text{ см}^{-1}$ расположены 12 атомных переходов ксенона, из них при трехфотонном поглощении полностью разрешены 2 перехода: $\text{Xe}^1S_0 \rightarrow \text{Xe}^* 6d[1/2]_1^0$ при $88549,8 \text{ см}^{-1}$ и $\text{Xe}^1S_0 \rightarrow \text{Xe}^* 6d[7/2]_3^0$ при $89024,89 \text{ см}^{-1}$. В табл. 1 включены все возбужденные состояния Xe^* в этой области.

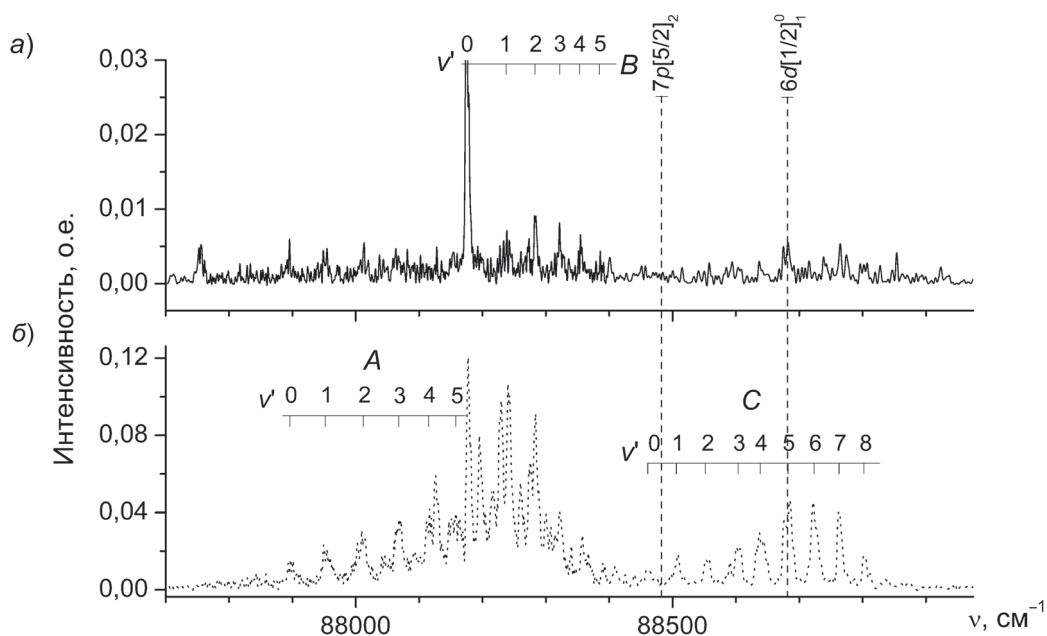


Рис. 1. Фотоионизационные спектры молекул ArXe при регистрации атомных ионов Ar^+ (а) и молекулярных ионов ArXe^+ (б).
Пунктирной линией обозначены положения возбужденных атомов в диссоциационных пределах $\text{ArXe}^* \rightarrow \text{Xe}^* + \text{Ar}$

Таблица 1

Молекулярные состояния, образованные из комбинации атомов $\text{Xe}^*(7p, 6d, 6p')$ и Ar^1S_0 [14]
в области $87500 - 90100 \text{ см}^{-1}$

Диссоционный предел $\text{Xe}^* + \text{Ar}^1S_0$	Энергия Xe^* , см^{-1}	Симметрия молекулярных состояний, Ω
$7p[1/2]_1 + ^1S_0$	87927,131	$0^-, 1$
$7p[5/2]_2 + ^1S_0$	88351,681	$0^+, 1, 2$
$6p'[3/2]_1 + ^1S_0$	88379,126	$0^-, 1$
$7p[5/2]_3 + ^1S_0$	88469,213	$0^-, 1, 2, 3$
$6d[1/2]_0 + ^1S_0$	88491,020	0^-
$6d[1/2]_1 + ^1S_0$	88549,775	$0^-, 1, 2$
$7p[3/2]_2 + ^1S_0$	88686,500	$0^+, 1$
$6d[3/2]_2 + ^1S_0$	88708,466	$0^-, 1, 2$
$7p[3/2]_1 + ^1S_0$	88842,256	$0^+, 1$
$7p[1/2]_0 + ^1S_0$	88842,300	0^+
$6d[7/2]_4 + ^1S_0$	88911,692	$0^-, 1, 2, 3, 4$
$6d[7/2]_3 + ^1S_0$	89024,890	$0^+, 1, 2, 3$
$6p'[3/2]_2 + ^1S_0$	89162,356	$0^+, 1, 2$
$6d[5/2]_2 + ^1S_0$	89243,258	$0^-, 1, 2$
$6p'[1/2]_1 + ^1S_0$	89278,706	$0^-, 1$
$6d[5/2]_3 + ^1S_0$	89534,568	$0^+, 1, 2$
$6p'[1/2]_0 + ^1S_0$	89860,015	$0^+, 1$
$6d[3/2]_1 + ^1S_0$	90032,155	$0^+, 1$

Электронные состояния молекул характеризуются проекцией полного углового момента электронов на ось молекулы (случай Гунда С) Ω . Основное состояние молекулы имеет симметрию $\Omega = 0^+$. В дипольном приближении для трехфотонных переходов молекул разрешены переходы с $|\Delta\Omega| \leq 3$, переход $0^+ \leftrightarrow 0^+$ разрешен, а переход $0^+ \leftrightarrow 0^-$ запрещен. При интерпретации спектров будем считать, что все молекулы ArXe в начальный момент времени находятся в основном электронном состоянии и, как правило, на нулевом колебательном уровне, так как они образуются в условиях сверхзвукового молекулярного пучка при низкой температуре (примерно 10 К). Возбужденные молекулы ArXe* можно рассматривать как результат взаимодействия атома аргона Ar в основном состоянии с атомом ксенона в возбужденном состоянии Xe* с пределом диссоциации



В этом приближении молекулярные полосы ArXe в области 87500 – 89500 см^{-1} должны наблюдаться вблизи атомных линий Xe* $7p$, $6p'6d$, а наиболее интенсивные полосы при трехфотонном возбуждении молекул – вблизи атомных линий Xe* $6d$.

Основное состояние молекул хорошо описывается дисперсионными взаимодействиями атомов в основном состоянии Ar^1S_0 и Xe^1S_0 и характеризуется молекулярными постоянными, а именно частотой гармонического колебания $\omega_e'' = 25,961 \text{ см}^{-1}$, постоянной ангармоничности $\omega_e x_e'' = 1,285 \text{ см}^{-1}$, энергией диссоциации $D_e'' = 131,1 \text{ см}^{-1}$, равновесным расстоянием $r_e'' = 4,09 \text{ \AA}$.

Возбужденные состояния молекул также будем рассматривать в рамках ангармонического осциллятора, и потенциальную энергию аппроксимировать функцией Морзе. Равновесное расстояние возбужденных состояний молекулы можно определить, используя принцип Франка – Кондона, по которому переходы вверх по вертикали на диаграмме потенциальной энергии соответствуют наиболее интенсивным полосам поглощения. В рамках этой модели на основании анализа полученных спектров были оценены параметры возбужденных состояний молекул. Для энергии переходов молекул с нулевого колебательного уровня основного состояния в возбужденное

электронно-колебательное состояние будем использовать выражение

$$v_{v'} = T_e' + G(v') = T_e' + \omega_e'(v' + 1/2) - \omega_e x_e'(v' + 1/2)^2, \quad (1)$$

где T_e' – энергия электронного состояния, соответствующая минимуму потенциальной кривой; ω_e' – частота гармонического колебания; $\omega_e x_e'$ – постоянная ангармоничности.

Энергия диссоциации в этом приближении вычисляется по формуле

$$D_e = \frac{\omega_e'^2}{4\omega_e x_e'}. \quad (2)$$

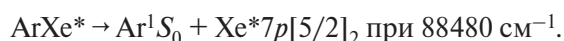
В спектре наблюдается две группы полос в областях 87500 – 88400 см^{-1} и 88500 – 90000 см^{-1} . Как видно из рисунка, в области 87500 – 88500 см^{-1} наблюдается особенно сложная картина: спектр состоит из нескольких колебательных прогрессий, но при регистрации молекулярных ионов (рис. 1,б) с определенностью была выделена только одна колебательная последовательность – А, состоящая из шести полос. Волновые числа полос этой прогрессии и их отнесение приведены в табл. 2. Самой длинноволновой полосе приписан квантовый колебательный номер $v' = 0$, затем построен график зависимости волнового числа от колебательного номера и аппроксимирован квадратичным полиномом, коэффициенты которого – молекулярные постоянные для данного возбужденного состояния:

$$\omega_e' = 62,5 \text{ см}^{-1}; \omega_e x_e' = 1,6 \text{ см}^{-1};$$

$$T_e' = 87864,3 \text{ см}^{-1}; D_e' = 610,4 \text{ см}^{-1}.$$

Энергия диссоционного предела $E_{\text{пред}} = T_e' + D_e' = 88475 \text{ см}^{-1}$.

Таким образом, колебательная последовательность А относится к переходу димера из основного состояния в возбужденное с диссоционным пределом



С использованием этих молекулярных постоянных в приближении Морзе построена потенциальная кривая для возбужденного состояния (рис. 2).

Самая интенсивная группа полос расположена в интервале 88100 – 88400 см^{-1} при регистрации молекулярных ионов. Очевидно,



Таблица 2

Идентификация и волновые числа наблюдаемых
полос в спектрах молекул ArXe^*

Прогрессия	ν', ν''	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\Delta G_{\nu'+1/2}, \text{см}^{-1}$
A	0, 0	87897,9	53,7
	1, 0	87951,2	55,8
	2, 0	88007,0	59,5
	3, 0	88066,5	50,8
	4, 0	88117,3	39,2
	5, 0	88156,5	—
B	0, 0	88175,0	55,0
	1, 0	88230,0	53,0
	2, 0	88283,0	39,0
	3, 0	88322,0	33,0
	4, 0	88355,0	29,0
	5, 0	88384,0	—
C	0, 0	88460,4	48,1
	1, 0	88508,5	46,5
	2, 0	88555,0	48,5
	3, 0	88603,5	48,5
	4, 0	88639,8	41,4
	5, 0	88681,2	40,7
	6, 0	88721,9	41,4
	7, 0	88763,3	39,9
	8, 0	88803,2	35,6
	9, 0	88838,8	—

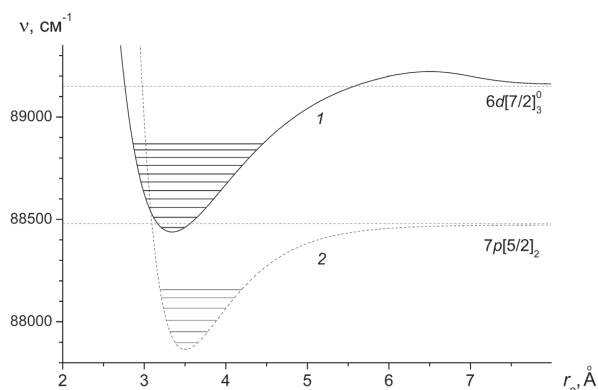


Рис. 2. Потенциальные кривые для возбужденных состояний, полученные из экспериментальных данных:

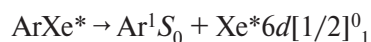
для $\text{ArXe}^* \rightarrow \text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^*6d[7/2]_3^0$ (1)
и $\text{ArXe}^* \rightarrow \text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^*7p[5/2]_2^0$ (2)

что она состоит из нескольких колебательных прогрессий, или что возбужденное состояние молекулы характеризуется потенциальной кривой сложной формы с несколькими минимумами. В спектре при регистрации атомных ионов Ar^+ спектр значительно упрощается. В области $88100 - 88400 \text{ см}^{-1}$ остается одна интенсивная полоса, а интенсивность остальных падает на два порядка. К сожалению, при регистрации ионов Xe^+ спектр существенно усложняется, так как в эту область попадают линии атомных ионов ксенона, рожденных при диссоциативной ионизации молекул Xe_2 , возбужденные состояния которых расположены в области, близкой к рассматриваемой. В результате анализа спектров Ar^+ и ArXe^+ (см. рис. 1) среди этих полос можно выделить еще одну колебательную прогрессию (обозначена буквой B). Волновые числа полос этой прогрессии приведены в табл. 2. Самой длинноволновой полосе приписан квантовый колебательный номер $\nu' = 0$, затем построен график зависимости волнового числа от колебательного номера и определены молекулярные постоянные для возбужденного состояния:

$$\omega_e' = 61,2 \text{ см}^{-1}; \omega_e x_e' = 3,1 \text{ см}^{-1};$$

$$T_e' = 88144,4 \text{ см}^{-1}.$$

Как видно из рис. 1, последовательность B — наиболее интенсивная в этой области и согласно эмпирическим правилам отбора должна относиться к диссоционному пределу



при $E_{\text{пред}} = 88671 \text{ см}^{-1}$.

В таком случае энергия диссоциации возбужденного состояния, соответствующего прогрессии B, должна равняться

$$D_e' = E_{\text{пред}} - T_e' = 526,6 \text{ см}^{-1}.$$

Энергия же диссоциации, вычисленная для потенциальной энергии Морзе, равна $D_e' = 302 \text{ см}^{-1}$. Такое расхождение свидетельствует о непригодности приближения Морзе для данного возбужденного состояния и, следовательно, о более сложном виде выражения для потенциальной энергии. При построении потенциальной кривой необходимо учитывать, по крайней мере, конфигурационные взаимодействия.

Группа полос в интервале $88450 - 88850 \text{ см}^{-1}$ также представляет собой колебательную последовательность (обозначена на рис. 1 буквой С). Волновые числа полос этой прогрессии приведены в табл. 2. Самой длинноволновой полосе в этой последовательности приписан квантовый колебательный номер $v' = 0$, затем построен график зависимости волнового числа от колебательного номера и определены молекулярные постоянные для соответствующего возбужденного состояния:

$$\omega_e' = 47,9 \text{ см}^{-1}; \omega_e x_e' = 0,61 \text{ см}^{-1};$$

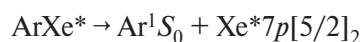
$$T_e' = 88438,2 \text{ см}^{-1}, D_e' = 940,3 \text{ см}^{-1},$$

а энергия диссоционного предела будет равна $E_{\text{пред}} = 89378,5 \text{ см}^{-1}$.

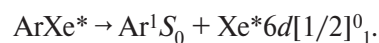
Колебательную прогрессию С относим к диссоционному пределу $\text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^* 6d[7/2]_3^0$ при 89284 см^{-1} .

Значение вычисленного $E_{\text{пред}}$ на 94 см^{-1} превышает диссоционный предел, к которому была отнесена колебательная прогрессия. Это означает, что потенциальная кривая имеет «горб» высотой $\geq 94 \text{ см}^{-1}$. В приближении Морзе с использованием полученных молекулярных постоянных построена потенциальная кривая для возбужденного состояния (см. рис. 2).

Таким образом, в данной работе методом (3+1)REMPI исследованы фотоионизационные спектры димерных молекул ArXe вблизи возбужденных состояний $\text{Xe}^* 7p, 6d$ в высокоэнергетической области от 87500 до 90000 см^{-1} , близкой к энергии ионизации молекул. Эта область содержит 12 состояний Xe^* , из них два разрешенных при трехфотонном возбуждении. Сложная картина спектра наблюдается при регистрации молекулярных ионов ArXe^+ . Были выделены две колебательные системы полос и определены диссоционные пределы, к которым они сходятся:



Для соответствующих возбужденных состояний определены молекулярные постоянные и построены потенциальные кривые. Самая интенсивная группа полос в области $88100 - 88400 \text{ см}^{-1}$ была предположительно отнесена к диссоционному пределу



Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ» при финансовой поддержке Минобрнауки России.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герасимов, Г.Н. Оптические спектры бинарных смесей инертных газов [Текст] / Г.Н. Герасимов // Успехи физических наук. — 2004. — Т. 174. — Вып. 2. — С. 155–175.
2. Ходорковский, М.А. Многофотонные масс-спектры молекул XeKr в области возбужденных атомов $\text{Xe}^* 6p[5/2]_{2,3}$ [Текст] / М.А. Ходорковский, А.А. Беляева, Л.П. Ракчеева, П.Ю. Сердобинцев [и др.] // Оптика и спектроскопия. — 2007. — Т. 102. — Вып. 6. — С. 908–915.
3. Khodorkovskii, M.A. Electronic spectra of ArXe molecules in region of $\text{Xe}^* (6s', 6p, 5d) 77000-80200 \text{ см}^{-1}$, using resonantly enhanced multiphoton ionization [Текст] / M.A. Khodorkovskii, S.V. Murashov, A.A. Beliaeva, L.P. Rakcheeva [et al.] // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2010. — Vol. 43. — P. 155101/1–155101/8.
4. Ходорковский, М.А. Электронные спектры двухатомных молекул аргон-ксенон в области возбужденных атомов ксенона [Текст] / М.А. Ходорковский, С.В. Мурашов, А.А. Беляева, П.Ю. Сердобинцев, J. Nordgren // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Серия Физико-математические науки. — 2010. — Вып. 4. — С. 21–27.
5. Khodorkovskii, M.A. Electronic spectra of ArXe molecules in the region of $\text{Xe}^* (5d, 7s, 7p, 6p')$, $80300-89500 \text{ см}^{-1}$, using resonantly enhanced multiphoton ionization [Текст] / M.A. Khodorkovskii, S.V. Murashov, A.A. Beliaeva, L.P. Rakcheeva [et al.] // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2010. — Vol. 43. — P. 235101/1–235101/10.
6. Castex, M.C. Absorption spectra of Xe-rare gas mixtures in the far uv region ($1150 - 1500 \text{ Å}$): High resolution analysis and first quantitative absorption measurements [Text] / M.C. Castex // J. Chem. Phys. — 1977. — Vol. 66. — № 9. — P. 3854–3865.
7. Pratt, S.T. Electronic spectra of NeXe, ArXe, and KrXe using resonantly enhanced multiphoton ionization [Текст] / S.T. Pratt, P.M. Dehmer, J.L. Dehmer // J. Chem. Phys. — 1985. — Vol. 83. — № 11. — P. 5380–5390.
8. Mao, D.M. Electronic symmetry assignments for the ArXe and KrXe band systems in the vicinity of the $\text{Xe}^* 6s'[1/2]_1^0 \leftarrow \text{Xe}(^1S_0)$ resonance line [Text] / D.M. Mao, X.K. Hu, S.S. Dimov, R.H. Lipson // J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys. — 1996. — Vol. 29. — P. 89–94.



9. **Mao, D.M.** Heteronuclear rare-gas dimer bonding: Understanding the nature of the Rydberg states that dissociate to the highest energy level of the $\text{Xe}^*(5d)$ manifold [Text] / D.M. Mao, X.K. Hu, Y.J. Shi, R.H. Lipson // J. Chem. Phys. – 1999. – Vol. 111. – № 7. – P. 2985–2990.
10. **Tsuchizawa T.** Interatomic potentials of the C1 and D0^+ states of XeNe , XeAr , and XeKr as studied by tunable vacuum ultraviolet laser spectroscopy [Text] / T. Tsuchizawa, K. Yamanouchi, S. Tsuchiya // J. Chem. Phys. – 1990. – Vol. 92. – Iss. 3. – P. 1560–1567.
11. **Piticco, L.** Structure and dynamics of the electronically excited C1 and D0^+ states of ArXe from high-resolution vacuum ultraviolet spectra [Text] / L. Piticco, M. Schäfer, F. Merkt // Journal of Chemical Physics. – 2012. – Vol. 136. Iss. 7. – P. 074304/1–074304/15.
12. **Hickman, A.P.** Interatomic potentials for excited states of XeHe and XeAr [Text] / A.P. Hickman, D.L. Huestis, R.P. Saxon // J. Chem. Phys. – 1992. – Vol. 96. – № 3. – P. 2099–2113.
13. **Lipson, R.H.** Toward a global and causal understanding of the unusual Rydberg state potential energy curves of the heteronuclear rare gas dimers [Text] / R.H. Lipson, R.W. Field // J. Chem. Phys. – 1999. – Vol. 110. – № 22. – P. 10653–10656.
14. **Ralchenko, Yu.** NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5) [Электронный ресурс] / Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. – 2008. – Режим до-

УДК 539.149

П.Н. Дьячков, И.А. Бочков

НАНОАНТЕННА ТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ АЗОТОМ ИЛИ БОРОМ

В настоящее время физика наноструктур является одной из наиболее интенсивно развивающихся отраслей науки и техники. Интерес к исследованию наноструктур вызван не только стремлением к дальнейшей миниатюризации устройств современной электроники, но также множеством принципиально новых физических и химических явлений, наблюдаемых в наноструктурах и не имеющих аналогов для макроскопических объектов. Особый интерес как с точки зрения фундаментальных исследований, так и с точки зрения практических приложений в опто- и наноэлектронике представляют нетривиальные оптические свойства наноструктур. Это привело к выделению особого направления научных исследований, находящегося на стыке оптики, физики твердого тела, химии и материаловедения.

Нетривиальный отклик наноструктур при их взаимодействии с электромагнитным полем обусловлен особенностями их электронной структуры. В частности, при достаточно малых размерах нанообъектов квантовый размерный эффект для элементарных возбуждений вдоль одного или нескольких измерений объекта может стать существенным, что приводит к квантованию энергии квазичастицы вдоль данного измерения. Поскольку вероятности переходов зависят от плотности конечных состояний, уменьшенная размерность сильно влияет на процессы рассеяния в наноструктурах, а, следовательно, и на процессы их взаимодействия с электромагнитным излучением.

Новый тип углеродных 1D-наноструктур, называемых углеродными нанотрубками (УНТ), был синтезирован Сумио Ииджимой в 1991 году. УНТ представляет собой полую

цилиндрическую углеродную макромолекулу, расположение атомов углерода на поверхности которой можно представить, свернув полосу графена (монослой графита) в цилиндр вдоль вектора, соединяющего эквивалентные узлы кристаллической решетки графена (носит название «вектор хиральности»). Целочисленную пару индексов (m, n) , которые представляют собой коэффициенты разложения вектора хиральности по базисным векторам кристаллической решетки графена, используют для характеристики геометрии УНТ. Последние обладают уникальной электронной структурой. В частности, в зависимости от направления и длины вектора хиральности, УНТ могут быть металлами ($m = n$), узкозонными полупроводниками с шириной щели порядка нескольких сотых электронвольт ($m - n = 3q$, где q — целое; $m \neq n$) или полупроводниками с шириной запрещенной зоны порядка 1 эВ (в остальных случаях). Эта особенность делает перспективным создание на основе УНТ элементов наноэлектронных цепей. Зонная структура УНТ меняется при приложении к ним статических электрических или магнитных полей, а также механических напряжений. При этом продемонстрирован фазовый переход металл — полупроводник. Возможность модуляции ширины запрещенной зоны УНТ путем помещения УНТ в статические электрические и магнитные поля или приложения к ним механических воздействий [1] позволяет трансформировать оптически непрозрачный материал в оптически прозрачный и наоборот, а также создавать оптоэлектронные устройства с перестраиваемой рабочей частотой.

Следует отметить, что при исследовании взаимодействия электромагнитного излучения с УНТ в работах [1, 2] для вычисления зонной структуры УНТ использовался метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) и приближение свернутых зон. Однако из расчетов зонной структуры кристаллов известно, что метод ЛКАО хорошо воспроизводит валентную зону, но не зону проводимости, так как стандартный ЛКАО-базис не включает делокализованных состояний. Поэтому представляет интерес объединить электродинамические методы расчета электромагнитного отклика УНТ [1, 2] с более точным методом расчета зонной структуры — методом линеаризованных присоединенных

цилиндрических волн (ЛПЦВ) [3]. Данный метод представляет собой распространение на системы с цилиндрической геометрией метода линейных присоединенных плоских волн — одного из наиболее точных в теории зонной структуры объемных твердых тел. В этом способе расчетов для построения электронного потенциала используется приближение локальной плотности для обменного взаимодействия. Каждый атом системы окружается сферой, где потенциал считается сферически симметричным, а в пространстве между сферами он считается постоянным и выбирается за начало отсчета энергии. В УНТ движение электронов ограничено цилиндрическим слоем толщиной порядка удвоенного атомного Ван-дер-Ваальсова радиуса элементов, что учитывается введением двух непроницаемых для электронов цилиндрических барьеров: внешнего и внутреннего. Электронный спектр системы определяется свободным движением электронов в межатомном пространстве между цилиндрическими барьерами и рассеянием электронов на атомных центрах [3, 4]. С помощью метода ЛПЦВ зонные структуры и плотности электронных состояний изолированных нехиральных одностенных и двухстенных УНТ, а также нехиральных одностенных УНТ, погруженных в полупроводниковую матрицу, были изучены в работах [5 — 8]. Для полупроводниковых УНТ $(n, 0)$ предсказаны осцилляции ширины запрещенной зоны как функции диаметра нанотрубок [6]. Установлено, что делокализация электронов металлической УНТ в область матрицы сохраняет ее металлические свойства, но приводит к сдвигу состояний в высокоэнергетическую область и росту плотности состояний на уровне Ферми. В полупроводниковых УНТ под влиянием матрицы происходит их металлизация [7]. Отмечено, что межслоевое взаимодействие приводит к более сильному возмущению зонной структуры внутренней стенки по сравнению с внешней [8]. Существенный шаг в развитии метода ЛПЦВ сделан в работе [9], где реализован метод расчета электронных спектров хиральных УНТ. При этом учтены их винтовая и вращательная симметрия, благодаря чему резко повысилась сходимость электронных состояний в зависимости от числа базисных функций.



В настоящее время существует большой интерес к созданию на основе УНТ наноантенн терагерцового и ИК диапазонов. Среди возможных применений наноантенн можно выделить создание эффективного электрического контакта между наноустройствами и макромиром и беспроводное соединение с нанодатчиками. Возможность использования УНТ в качестве наноантенн была продемонстрирована теоретически [9] и экспериментально [10]. При этом была предсказана низкая антенная эффективность данных устройств [9]:

$$\eta = P_r / P_{in} \approx 10^{-5} - 10^{-6},$$

где P_r , P_{in} — мощности, излученная и поглощенная антенной соответственно.

Таким образом, вопрос повышения антенной эффективности данных устройств является весьма существенным.

В данной статье мы предлагаем в качестве метода увеличения антенной эффективности легирование УНТ атомами азота и бора. В разделе «Зонная структура химически модифицированных УНТ» методом ЛПЦВ рассчитывается зонная структура металлических УНТ, в которых несколько атомов углерода замещается атомами азота или бора. В следующем за ним разделе «Линейная проводимость УНТ» в рамках полуклассической модели динамики электронов проводится расчет линейной проводимости химически модифицированных УНТ. Для изучения влияния химической модификации УНТ на антенные характеристики затем решается задача рассеяния плоской электромагнитной волны на УНТ с учетом краевых эффектов и вычисляется антенная эффективность УНТ. И наконец, с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы вычисляется мощность теплового излучения УНТ. Демонстрируется, что замещение 8 % атомов углерода в УНТ атомами азота или бора приводит к увеличению проводимости, антенной эффективности и мощности теплового излучения УНТ.

Зонная структура химически модифицированных УНТ

Рассмотрим изолированную УНТ, в которой один или два атома углерода в каждой элементарной ячейке заменены атомами азота или бора. В связи с тем, что с точки зрения

антенных применений существенны только металлические УНТ, ограничимся рассмотрением УНТ типа «кресло» с индексами хиральности вида (m, m) . Для расчета зонной структуры данных УНТ был использован метод ЛПЦВ [2]. При этом для сохранения трансляционной симметрии вдоль оси УНТ предполагалось, что в каждой элементарной ячейке замещаются эквивалентные атомы углерода. В связи с тем, что УНТ представляет собой полый цилиндр, предполагалось, что движение электронов между маффин-тин-сферами ограничено двумя бесконечно высокими потенциальными барьерами. Использование данного приближения делает расчет УНТ зависящим от двух параметров — радиусов внешнего и внутреннего потенциальных барьеров, значения которых подбирались таким образом, чтобы воспроизвести ширину валентной зоны УНТ (5,5), предположив, что она совпадает с шириной валентной зоны графита. В результате были получены следующие значения радиусов внутреннего и внешнего барьеров [28]: $R_{cn} - 1,38 \text{ \AA}$ и $R_{cn} + 1,27 \text{ \AA}$, где R_{cn} — радиус УНТ. Для остальных УНТ зонная структура рассчитывалась при данных значениях радиусов внутреннего и внешнего барьеров. Результаты расчетов зонной структуры для УНТ типа «кресло» (6,6), элементарная ячейка которой содержит 24 атома углерода, представлены на рис. 1,а.

На рис. 1,б–д представлены результаты расчета зонной структуры УНТ (6,6), в которой один или два атома углерода в каждой элементарной ячейке заменены одним (обозначены 1N, 1B) или двумя (2N, 2B) атомами азота или бора. Таким образом мы рассматриваем УНТ, в которых доля примесей составляет соответственно 4 и 8 %. Следует отметить, что в настоящее время экспериментально реализованы методики, позволяющие получать УНТ, в которых вплоть до 15 % (20 %) атомов углерода замещены атомами бора [11] (азота [12]). В связи с тем, что атом азота имеет пять валентных электронов, его внедрение в УНТ приводит к добавлению электронов и соответственно уровень Ферми смещается вверх в зону проводимости, по сравнению со случаем УНТ без примесей. Внедрение трехвалентного атома бора, напротив, приводит к добавлению дырок и смещению уровня Ферми вниз в валентную зону. При этом следует отметить, что внедрение атомов бора приводит к более сильному смещению уров-

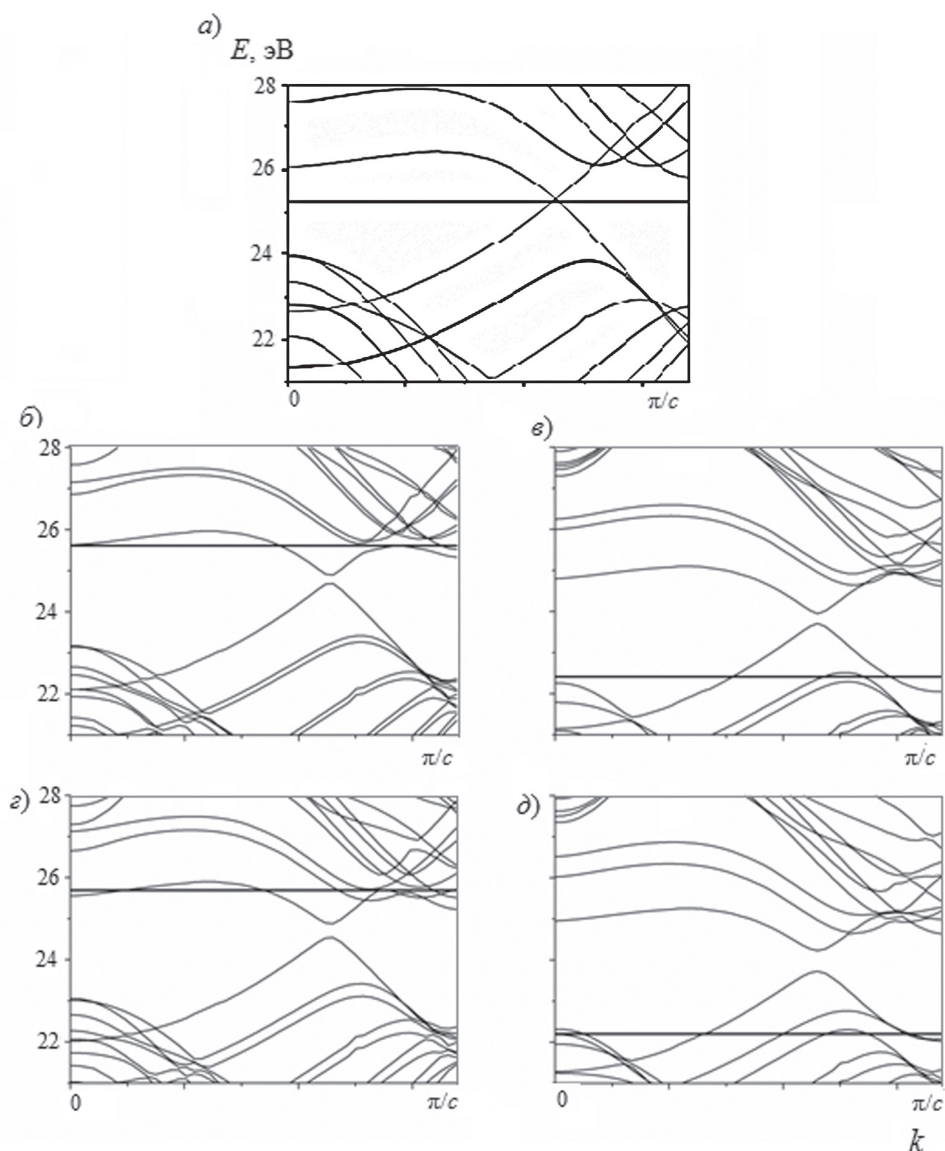


Рис. 1. Зонные структуры УНТ (6,6) без примесей (а) и содержащих примеси 1N (б), 2N (в), 1B (г), 2B (д). Уровень Ферми обозначен жирной прямой линией

ня Ферми (~ 3 эВ), чем внедрение атомов азота ($\sim 0,3$ эВ). Энергии уровня Ферми для различных типов УНТ приведены в табл. 1. Как видно из представленных данных, легирование приводит к изменению количества зон, которые пересекает уровень Ферми, что приводит к увеличению плотности электронных состояний на уровне Ферми. Таким образом, можно ожидать, что химическое модифицирование УНТ приведет к увеличению низкочастотной линейной проводимости, что, в свою очередь, положительно скажется на увеличении антенной эффективности легированных УНТ, по сравнению с чистыми.

Таблица 1

Зависимость положения уровня Ферми УНТ (6,6) от примеси

Примесь	E_F , эВ
—	25, 25
1N	25,61
2N	25,70
1B	22,42
2B	22,21

N, B — атомы азота и бора



Линейная проводимость УНТ

В данном разделе для расчета влияния химической модификации УНТ на линейную проводимость будет рассмотрено взаимодействие УНТ с монохроматической электромагнитной волной частоты ω , распространяющейся перпендикулярно оси УНТ, вектор электрической напряженности которой направлен вдоль оси УНТ:

$$E_z = E_0(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}).$$

При этом предполагалось, что частота ω меньше частоты переходов между сингулярностями Ван Хофа в плотности электронных состояний УНТ. Данное требование выполняется, в частности, для терагерцового диапазона. В этом случае отклик электронной подсистемы УНТ на приложенное внешнее электрическое поле может быть описан с помощью полуклассической модели динамики электронов [13, 14]. Также было использовано приближение времени релаксации для интеграла столкновений [14]. В рамках полуклассической модели предполагается, что движение электронов в твердом теле описывается классическим уравнением Больцмана для электронной функции распределения $f(t, k)$. При этом дисперсионный закон для электронов вычисляется с использованием методов квантовой теории твердого тела [2].

Уравнение Больцмана было решено методами теории возмущений. Так как нас интересовала только линейная проводимость, мы ограничились первым порядком по теории возмущений. Решение уравнения Больцмана применялось для вычисления плотности осевого тока, индуцированного в УНТ внешним электрическим полем. Используя определение линейной проводимости $\sigma = j_0/E_0$, где j_0 — амплитуда плотности тока, индуцированного в УНТ, мы получили следующее выражение для линейной проводимости УНТ [14]:

$$\sigma = \frac{(2e)^2}{(2\pi\hbar)^2 (I\omega - 1/\tau) R_{cn}} \sum_s \int \frac{\partial \epsilon_s(k)}{\partial k} \frac{\partial F_s(k)}{\partial k} dk, \quad (1)$$

где e — заряд электрона, $\hbar$ — постоянная Планка; суммирование по индексу s означает суммирование по всем зонам УНТ, а интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна.

Для расчета дисперсионного закона электронов в УНТ $\epsilon_s(k)$ использовался метод ЛПЦВ [2]. Следует, однако, отметить, что для зон, энергия которых превышает энергию Ферми на несколько десятых электронвольт и более, значения функции распределения Ферми $F_s(k)$ стремятся к нулю. Также для зон, энергия которых меньше энергии Ферми на несколько десятых электронвольт и более, значения функции распределения Ферми $F_s(k)$ стремятся к единице, а их производная по волновому вектору соответственно стремится к нулю. В связи с этим вклад в сумму, входящую в выражение (1), дадут только те зоны, которые пересекают уровень Ферми, а интегрирование проводится по квазиимпульсам, таким что

$$|\epsilon(k) - \mu| < 0,1 \text{ эВ}.$$

Следует отметить, что выражение (1) было получено в модели бесконечно длинной УНТ, то есть пренебрегалось влиянием краев УНТ на электромагнитный отклик. Данное приближение справедливо в случае, когда длина УНТ гораздо больше, чем длина волны облучающего поля. При этом проводимость, вычисляемая с использованием выражения (1), представляет собой проводимость на единицу длины УНТ.

Результаты вычислений проводимости УНТ типа (6,6) без примесей, а также 1N УНТ, 2N УНТ, 1B УНТ, 2B УНТ представлены на рис. 2. Видно, что внедрение атомов бора в УНТ приводит к увеличению проводимости как для случая 1B УНТ, так и для случая 2B УНТ, в то время как при внедрении атомов азота наблюдается снижение проводимости для случая 1N УНТ. Уменьшение проводимости для случая внедрения одного атома азота объясняется тем, что смещение уровня Ферми в этом случае вверх в зону проводимости приводит к уменьшению количества энергетических зон, которые уровень Ферми пересекает (см. рис. 1,б). Таким образом, можно сделать вывод, что для увеличения проводимости УНТ легирование бором более эффективно, чем легирование азотом.

Антенные характеристики химически модифицированных УНТ

Для исследования антенных свойств легированных УНТ мы учли влияние краевых эффектов на взаимодействие УНТ с электромагнитным полем. При этом учет краевых эффектов

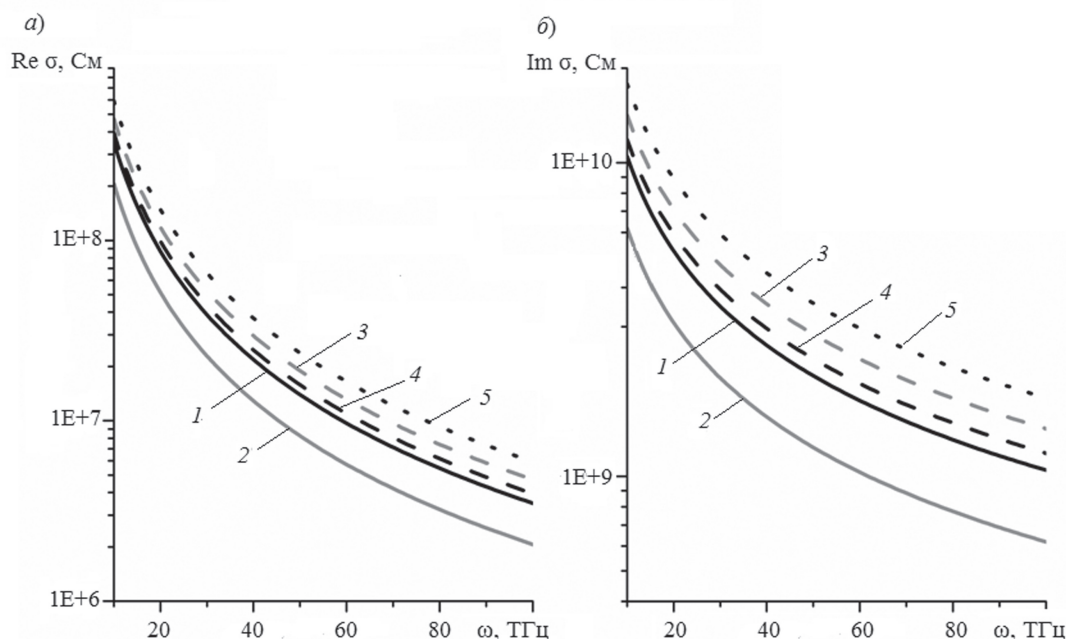


Рис. 2. Расчетные частотные зависимости реальной (а) и мнимой (б) частей комплексной проводимости УНТ (6,6) без примесей (1) и содержащих примеси 1N (2), 2N (3), 1B (4), 2B (5). Время релаксации $\tau = 3 \cdot 10^{-12}$ с

производился только электродинамически. Предполагалось, что УНТ имеет достаточную длину для того, чтобы влиянием ее краев на зонную структуру можно было пренебречь. Было рассмотрено рассеяние плоской электромагнитной волны на углеродной нанотрубке длины L . С этой целью была решена краевая задача для уравнений Максвелла с двухсторонними импедансными граничными условиями, учитывающими реалистичную электронную структуру УНТ. Учет электронной структуры осуществлялся посредством использования линейной проводимости, вычисленной в предыдущем разделе, при формулировке граничных условий. С помощью векторной теоремы Грина краевая задача была сведена к интегральному уравнению Фредгольма первого рода для плотности осевого тока $j(z)$, индуцированного на поверхности УНТ. Интегральное уравнение было решено численно методом квадратур. Ограничиваясь рассмотрением полей только в дальней зоне, для случая облучения УНТ электромагнитным полем, длина которого много больше длины УНТ, электромагнитный отклик УНТ можно описать с помощью поляризуемости, определяемой выражением:

$$\alpha = \frac{2\pi i R_{cn}}{\omega E_0} \int_{-L/2}^{L/2} j(z) dz. \quad (2)$$

На рис. 3 представлены результаты вычисления поляризуемости УНТ (6,6) без примесей, а также с двумя атомами азота или бора, заменившими в каждой ячейке два атома углерода. Видно, что спектры поляризуемости УНТ в терагерцовом диапазоне имеют ярко выраженные резонансные линии. Это резонансы поверхностных волн на краях УНТ, которые определяются из условия $L \cdot \text{Re} h \approx \pi n$, где n — целое число, h — волновое число поверхностной волны.

Очевидно, что положение резонанса будет определяться не только типом УНТ, но также и ее длиной. В связи с этим в дальнейшем мы будем называть эти резонансы геометрическими. Мы продемонстрировали антенный эффект в УНТ, который заключается в том, что отклик антенны на внешнее электромагнитное излучение максимален при подходящем согласовании длины антенны и длины волны облучающего поля.

Необходимо отметить, что внедрение примесей смещает положение резонансов, а также их усиливает. Следовательно, легирование УНТ

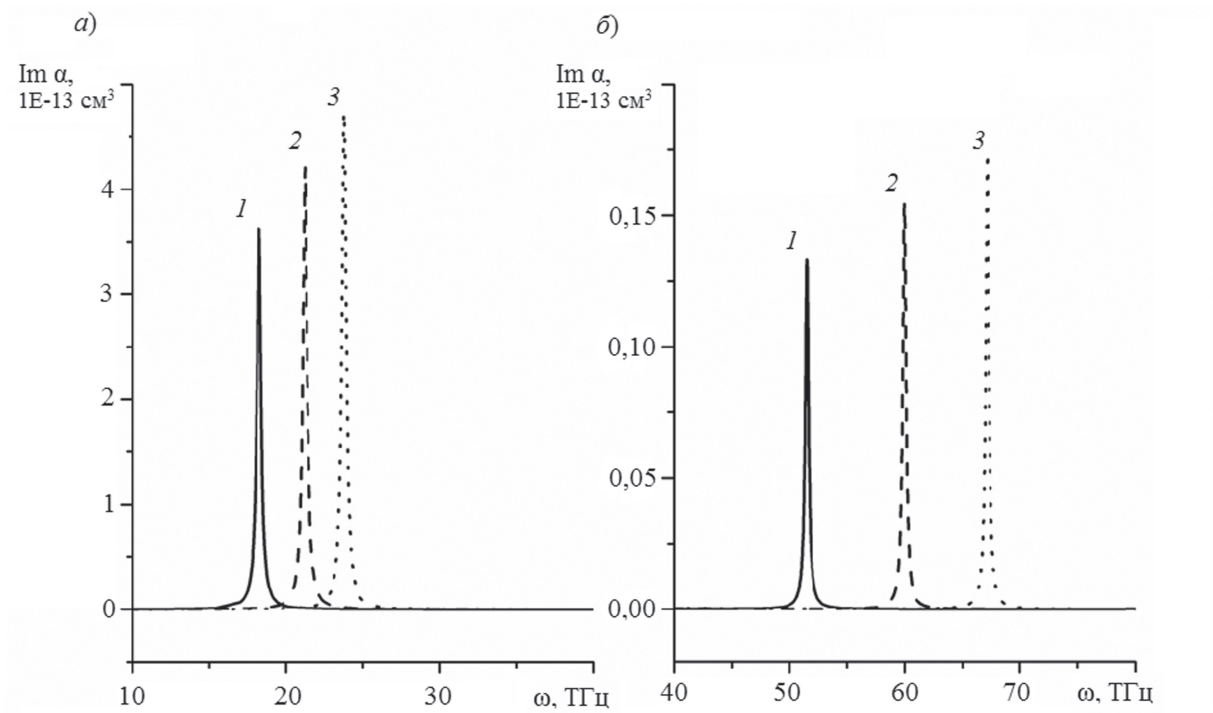


Рис. 3. Расчетные частотные зависимости поляризуемости УНТ (6,6) в диапазонах 10 – 40 ТГц (а) и 40 – 80 ТГц (б). Длина нанотрубки $L = 1$ мкм; УНТ без примесей (1) и с примесями 2N (2) и 2B (3)

Таблица 2

Влияние примесей на основные параметры резонанса и эффективность антенн на основе УНТ (6,6)

Примесь	Основные параметры резонанса				Антенная эффективность η , 10^{-5}	
	ω , ТГц		$\text{Im}\alpha$, 10^{-14} см^3			
	I	II	I	II	I	II
—	18,22	51,5	36,3	1,33	6,5	53
1N	14,00	39,59	27,8	1,02	2,3	18
2N	21,22	59,96	42,1	1,55	12	96
1B	19,38	54,80	38,6	1,42	8,4	67
2B	23,67	67,16	47,3	1,74	19	151

I, II – первый и второй резонансы

улучшает их антенные характеристики. Для более детального исследования влияния примесей на характеристики антенны на основе УНТ мы рассчитали антенную эффективность на частотах, соответствующих частотам геометрических резонансов. В длинноволновом режиме антенная эффективность УНТ будет эквивалентна эффективности дипольной антенны длины L с сопротивлением R_{dip} на единицу длины:

$$\eta = \frac{L / \lambda}{L / \lambda + 3cR_{dip}\lambda / (8\pi)^2}, \quad (3)$$

где λ – длина волны облучающей электромагнитной волны, c – скорость света в вакууме, $R_{dip} = \text{Re}[1/2\pi R_{cn}\sigma]$.

Результаты вычислений антенной эффективности представлены в табл. 2. Как видно

из этой таблицы, внедрение двух примесных атомов бора на элементарную ячейку УНТ приводит к существенному (в три раза) увеличению эффективности антенн на основе УНТ. Таким образом, можно сделать окончательный вывод о том, что введение атомов примесей служит эффективным способом улучшения характеристик антенн на основе УНТ.

Тепловое излучение УНТ

Проблема электромагнитной совместимости будущих наноэлектронных устройств на основе УНТ в настоящее время еще мало исследована, хотя ее решение существенно для их эффективного функционирования. Для решения данной проблемы необходимо знать источники возможных шумов в данных устройствах. Одним из возможных источников помех является тепловое излучение УНТ. В данном разделе была рассчитана мощность теплового излучения УНТ длины L и температуры T . Для расчета характеристик теплового излучения УНТ была использована флуктуационно-диссипационная теорема в форме Каллена – Велтона [14]. Было показано, что в длинноволновом пределе в данной зоне мощность теплового излучения УНТ будет иметь следующий вид:

$$I_{\omega} = \mathbf{u}_p \frac{4\hbar\omega^4 \operatorname{Im}[\alpha]}{3c^3 [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]}, \quad (4)$$

где $\mathbf{u}_p$ – единичный вектор сферического базиса с началом координат в геометрическом центре УНТ.

Результаты вычисления мощности теплового излучения УНТ с примесями и без них представлены на рис. 4. При вычислениях длина УНТ предполагалась равной 1 мкм, а температура – 300 К. Видно, что спектры мощности теплового излучения УНТ также имеют резонансный характер. При этом положения резонансов в спектрах мощности теплового излучения совпадают с их положениями в спектрах поляризуемости. Следовательно, хотя на резонансах интенсивность сигнала антенн на основе УНТ будет наибольшей, шум на резонансах тоже сильно возрастает. И в связи с тем, что значение мощности теплового излучения снижается с увеличением номера резонанса медленнее, чем значения поляризуемости, отношение сигнал/шум будет расти с увеличением этого номера. Соответственно, наибольшая эффективность антенн на основе УНТ будет достигнута на частоте первого геометрического резонанса.

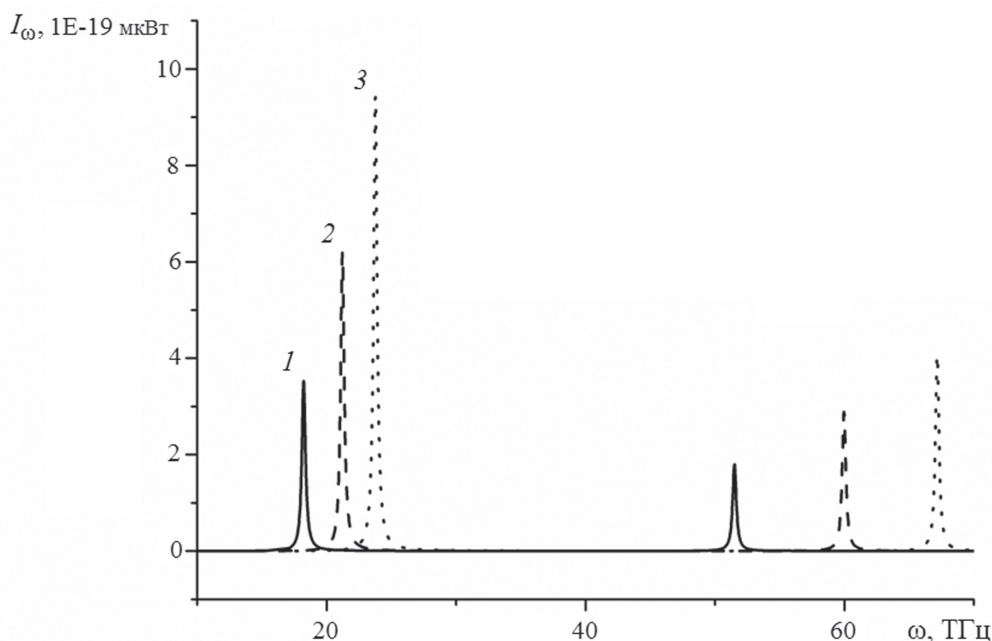


Рис. 4. Расчетные зависимости мощности теплового излучения УНТ (6,6); УНТ без примесей (1) и с примесями 2N (2) и 2B (3)



Наличие резонансов в спектрах теплового излучения УНТ позволяет рекомендовать их в качестве тепловых наноантенн. В этом случае возбуждение антенны будет осуществляться путем нагрева УНТ постоянным электрическим током, а модуляция сигнала — посредством нагрева УНТ переменным электрическим током. Из данных, представленных на рис. 4, видно, что при химическом модифицировании УНТ мощность теплового излучения на резонансе сильно возрастает. Таким образом, можно рекомендовать внедрение примесей для улучшения эффективности тепловых антенн на основе УНТ.

Итак, в работе объединены методы расчета функций электромагнитного отклика УНТ с методом ЛПЦВ-расчета ее зонной структуры.

Данные методы применены к исследованию влияния химической модификации УНТ атомами бора или азота на антенные характеристики УНТ. Продemonстрировано, что 8 %-е замещение атомов углерода атомами бора и азота приводит к существенному увеличению проводимости УНТ и ее антенной эффективности. Показано, что легирование УНТ положительно сказывается на эффективности тепловых наноантенн на основе УНТ.

Все результаты были получены в ходе выполнения государственного контракта № 16.513.11.3051 в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Slepyan, G.Ya.** High-order harmonic generation by conduction electrons in carbon nanotube ropes [Text] / G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko, V.P. Kalosha, [et al.] // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Vol. 63. — P. 053808.
2. **D'yachkov, P.N.** Augmented waves for nanomaterials [Text] / P.N. D'yachkov // in *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology.* — Vol. 1; ed. by H.S. Halwa. — Valencia, California: Americal Scientific Publishers, 2004. — P. 191–212.
3. **Дьячков, П.Н.** Электронное строение и применение нанотрубок [Текст] / П.Н. Дьячков. — М.: Бином—Лаборатория знаний, 2011. — 448 с.
4. **D'yachkov, P.N.** Electronic structure and interband transitions of metallic carbon nanotubes [Text] / P.N. D'yachkov, H. Hermann, D.V. Kirin // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 81. — P. 5228.
5. **D'yachkov, P.N.** Electronic structure and interband transitions of semiconducting carbon nanotubes [Text] / P.N. D'yachkov, H. Hermann // *J. Appl. Phys.* — 2004. — Vol. 95. — P. 399–401.
6. **D'yachkov, P.N.** Electronic structure of embedded carbon nanotubes [Text] / P.N. D'yachkov, D.V. Makaev // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 081101(R).
7. **D'yachkov, P.N.** Linear augmented cylindrical wave method for calculating the electronic structure of double-wall carbon nanotubes [Text] / P. N. D'yachkov, D.V. Makaev // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 155442.
8. **D'yachkov, P.N.** Account of helical and rotational symmetries in the linear augmented cylindrical wave method for calculating the electronic structure of nanotubes: Towards the ab initio determination of band structure of (100, 99) tubule [Text] / P.N. D'yachkov, D.V. Makaev // *Phys. Rev. B.*—2007. — Vol. 76. — P. 195411.
9. **Hanson, G.W.** Fundamental transmitting properties of carbon nanotube antennas [Text] / G.W. Hanson // *IEEE Trans. Anten. Propagat.* — 2005. — Vol. 53. — P. 3426.
10. **Li, W.** Large scale synthesis of aligned carbon nanotubes [Text] / W. Li, H. Zhang, C. Wang, [et al.]// *Science.* — 1996. — Vol. 274. — P. 1701.
11. **Bondarev, I.V.** Spontaneous decay of excited atomic states near a carbon nanotube [Text] / I.V. Bondarev, G.Ya. Slepyan, S.A. Maksimenko // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89. — P. 115504.
12. **Stanciu, C.** Experimental and theoretical study of third-order harmonic generation in carbon nanotubes [Text] / C. Stanciu, R. Ehlich, V. Petrov [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 81. — P. 4064 – 4066.
13. **Ашкрофт, Н.** Физика твердого тела [Текст] / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. — М.: Мир, 1979. — 395 с.
14. **Лифшиц, Е.М.** Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния [Текст] / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. — М.: Физматлит, 2001. — 420 с.
15. **Shuba, M.V.** Electromagnetic wave propagation in an almost circular bundle of closely packed metallic carbon nanotubes [Text] / M.V. Shuba, S.A. Maksimenko, A. Lakhtakia // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 76. — P. 155407.

УДК 57.086.2

*А.В. Сабанцев, Г.Е. Побегалов, С.В. Мурашов,
А.С. Мельников, М.А. Ходорковский*

МОДЕРНИЗАЦИЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО МИКРОСКОПА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР С СУБДИФРАКЦИОННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Флуоресцентная микроскопия находит широкое применение в биологии для исследования разнообразных биологических структур. Однако волновая природа света ограничивает разрешение этого метода величиной около $\lambda/(2NA)$, где λ — длина волны флуоресценции, а NA — числовая апертура используемого объектива. За последние 20 лет был предложен целый ряд методов, позволяющих обойти дифракционный предел разрешения флуоресцентной микроскопии [1–5]. Реализация многих из этих методов представляет сложную техническую задачу и требует значительных финансовых затрат. Наиболее легко на практике реализуются методы локализационной микроскопии (ЛМ), для использования которых требуется лишь незначительная модификация флуоресцентного микроскопа. К тому же ЛМ позволяет достичь наиболее высокого разрешения из всех существующих на данный момент методов субдифракционной флуоресцентной микроскопии.

Несмотря на это, реализация и тестирование методов ЛМ не является тривиальной задачей. Целью данной работы была выработка рекомендаций, которые должны существенно облегчить создание новых ЛМ-установок на базе серийных флуоресцентных микроскопов, на основании опыта, полученного при модернизации флуоресцентного микроскопа, являющегося частью установки FA-1 «Лазерный пинцет», для осуществления ЛМ.

В основе ЛМ лежит возможность определения положения точечного объекта (его размер много меньше длины волны регистрируемого света) по его изображению с субдифракционной точностью при условии, что оно не перекрывается с изображениями других объектов. Зная, что в формировании изображения принимала участие только одна молекула, можно определить ее положение с точностью, зависящей от отношения сигнал/шум в изображении молекулы и достигающей 1 нм, что легло в основу методики FIONA (Fluorescence Imaging with One Nanometer Accuracy) [6].

Таким образом, для получения субдифракционного изображения объекта необходимо проводить регистрацию флуоресценции различных молекул так, чтобы дифракционные изображения отдельных молекул не перекрывались. Флуоресценцию единичных молекул можно дискриминировать либо спектрально [7 – 9], либо во времени [1, 4, 5]. В настоящее время повсеместно используется второй способ.

Такой подход предполагает получение серии кадров, в каждом из которых регистрируется флуоресценция лишь небольшой доли флуоресцентных молекул, количество которых достаточно мало, чтобы их дифракционные изображения не перекрывались. Эта серия изображений далее обрабатывается при помощи компьютерного алгоритма, который обнару-



живает изображения отдельных молекул и локализует их (например, по методу центра масс или аппроксимации функцией Гаусса). В итоге формируется таблица, содержащая положения всех локализованных молекул. Получаемое субдифракционное изображение объекта является графической репрезентацией данной таблицы.

Материалы и методы

Для осуществления ЛМ неинвертированный микроскоп AxioImager.Z1 (Carl Zeiss), являющийся частью лазерного комплекса FA-1 «Лазерный пинцет», был дооснащен DPSS-лазерами производства ALTECHNA с рабочими длинами волн 532 и 473 нм (мощность — 100 мВт, TEM_{00} , поляризация линейная), а также лазером мощностью 50 мВт с длиной волны 405 нм. Ввод излучения с длинами волн 532 и 473 нм в микроскоп осуществлялся через резервный порт микроскопа с помощью поляризационного кубика. Излучение с длиной волны 405 нм вводилось через порт для световода лампы возбуждения флуоресценции. Для регистрации флуоресценции использовались два набора фильтров Filter Set: 10 и 20 (Carl Zeiss). Входной фильтр в Filter Set 20 был демонтирован, поскольку он не пропускает излучение с длиной волны 532 нм.

Оптическая система настраивалась таким образом, что при работе с объективом $100\times$ лазерами освещалась область в фокальной плоскости диаметром около 40 мкм. Это позволило получить среднюю освещенность до $4,0 \text{ кВт/см}^2$ в плоскости объекта для излучения с длинами волн 473 и 532 нм, а также $2,0 \text{ кВт/см}^2$ для излучения с длиной волны 405 нм.

Во всех экспериментах использовался масляный иммерсионный объектив с числовой апертурой 1.46 «Plan-Apochromat» $100\times/1.46$ Oil DIC от фирмы Carl Zeiss. Для регистрации флуоресценции использовалась охлаждаемая ПЗС-камера с матрицей 1024×1024 пикселя и физическим размером пикселя 13 мкм, освещаемая со стороны подложки (Back-illuminated EM-CCD) Cascade II 1024 от Photometrics. ПЗС-матрица охлаждается элементом Пельтье до -55°C . Схема установки приведена на рис. 1. Установка для ЛМ смонтирована на антивибрационном оптическом столе с пневмоподвеской Newport.

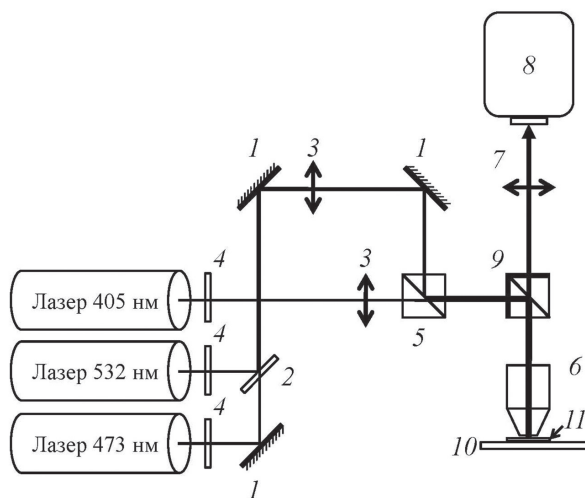


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для локализационной микроскопии:

1 — зеркала, 2 — дихроическое зеркало, 3 — линзы, 4 — нейтральные фильтры, 5 — поляризационный куб, 6 — объектив микроскопа, 7 — тубусная линза микроскопа, 8 — ПЗС-камера, 9 — набор фильтров для регистрации флуоресценции, 10, 11 — предметное и покрывное стекла

Подробное исследование влияния масштаба изображения на ПЗС-камере и отношения сигнал/шум на точность локализации молекулы было проведено в работах [10 — 12]. Было показано, что отношение сигнал/шум в изображении отдельной молекулы является основным фактором, определяющим достигаемое разрешение. В связи с этим использование высокочувствительной, низкошумящей ПЗС-камеры с высокой квантовой эффективностью крайне важно для ЛМ, и лучше всего подходят для этой цели охлаждаемые ПЗС-камеры, освещаемые со стороны подложки (back-illuminated EM-CCD).

При выборе объектива и ПЗС-камеры следует учитывать два обстоятельства. Во-первых, для успешной реализации ЛМ необходим объектив с высокой разрешающей способностью (иммерсионный, с числовой апертурой 1, 2 или более). Во-вторых, микроскоп должен обеспечивать масштаб изображения на ПЗС-матрице в пределах от 50 до 150 нм/пиксель [11, 12]. Следует также уделить особое внимание подавлению вибраций. Установка должна быть смонтирована на виброизолирующем столе с пневмоподвеской.

Для обеспечения метода ЛМ в фокальной плоскости необходимо создать плотность излу-

чения в несколько кВт/см². Размер освещаемого участка должен быть больше размера исследуемого объекта. В связи с тем, что последние обычно не превышают 5 – 10 мкм, размер освещаемой области 30–40 мкм является достаточным. Стоит отметить, что для осуществления ЛМ не предъявляется особых требований к стабильности источника света и однородности освещения, поскольку небольшие изменения освещенности (около 5–10 %) приводят к незначительному изменению времени, в течение которого молекулы флуорофора находятся во флуоресцентном состоянии и практически не влияют на точность локализации [13 – 15]. Поляризация возбуждающего излучения в большинстве практических случаев исследования биологических объектов не оказывает влияния на разрешение (подробный анализ можно найти в работе [16]). Таким образом, для реализации метода ЛМ можно использовать недорогие непрерывные диодные и DPSS-лазеры (стоимость менее 20000 руб.) и даже лазерные указки (стоимость от 3000 до 10000 руб.). Необходимая мощность составляет 50 – 200 мВт.

Важными шагами в создании установки для ЛМ являются определение аппаратной функции микроскопа во флуоресцентном режиме и величины разрешения, достигаемого в режиме ЛМ. Для получения аппаратной функции необходимы яркие точечные флуоресцентные объекты, жестко закрепленные на поверхности покровного стекла; для этих целей хорошо подходят квантовые точки и флуоресцентные микросферы малого диаметра (например 40 нм). В данной работе использовались покрытые стрептавидином квантовые точки QDot585 (Invitrogen), закрепленные на поверхности покровного стекла, покрытого полистиролом ПСМ-115Н (Нева-Реактив). Размер квантовых точек составляет 20 нм. Для тестирования микроскопа в режиме ЛМ и определения разрешения использовались молекулы ДНК бактериофага λ (NEB), окрашенные YOYO-1 (Invitrogen) и выпрямленные на поверхности покровного стекла. Линейность ДНК позволяет легко оценить достигнутое разрешение как ширину на полувысоте поперечного сечения через изображение ДНК.

Для закрепления молекул ДНК на покровном стекле был выбран метод, описанный в ра-

боте [17], с использованием покровного стекла, покрытого полистиролом по методу центрифугирования. λ -ДНК Fermentas (10 пМ) в буфере PBS инкубируется 15 минут с красителем YOYO-1 (Invitrogen) в концентрации 200 нМ. Покровное стекло при вращении промывается двумя миллилитрами воды MilliQ и высушивается в течение одной минуты по методу центрифугирования (скорость вращения 3000 об/мин). 60 мкл полистирола в дихлорметане (концентрация раствора 5 мг/мл) наносится по методу центрифугирования (в течение 30 секунд при скорости 3000 об/мин) на поверхность покровного стекла. На подготовленную таким образом поверхность наносится 100 мкл раствора ДНК, и препарат инкубируется в течение четырех минут. Затем стекло центрифугируется при той же скорости вращения, при этом на стекло наносится 2 мл воды MilliQ для удаления несвязавшихся молекул. Покровное стекло помещается обработанной поверхностью вниз на предметное стекло с каплей 10 мкл буфера GOC (500 мкг/мл глюкозооксидазы (Sigma), 50 мкг/мл каталазы (Sigma), 10 % глюкозы (Нева-Реактив) в PBS) с 50 мМ дитиотритолом, после чего камера герметизируется при помощи лака для ногтей.

Длина молекулы λ -ДНК составляет около 16 мкм (48502 пары оснований). Молекула, окрашенная YOYO-1, хорошо видна во флуоресцентном режиме микроскопа при освещении ксеноновой лампой и использовании соответствующего набора фильтров.

Для осуществления локализационной микроскопии ДНК использовался лазер с рабочей длиной волны 473 нм, создающий в фокальной плоскости освещенность 2 кВт/см² в области диаметром 40 мкм. После начала лазерного облучения образца записывалась последовательность из 1000 кадров, которая использовалась для реконструкции ЛМ-изображения. Последняя осуществлялась с помощью алгоритма QuickPALM [18], реализованного в виде плагина для программы обработки изображений ImageJ [19] (плагин QuickPALM, а также ImageJ являются полностью бесплатными программами с открытым кодом). В этой программе реализован метод локализации, основанный на вычислении центра масс изображения молекулы. Более высокой точности можно добиться



ся, если использовать метод аппроксимации изображения молекулы двумерной функцией Гаусса, однако это требует существенно более трудоемких вычислений. Перед обработкой алгоритмом QuickPALM из изображения вычиталась низкочастотная компонента для коррекции фона, а также осуществлялась высокочастотная фильтрация при помощи свертки с функцией Гаусса.

Результаты и их обсуждение

Ширина на полувысоте графика аппаратной функции микроскопа во флуоресцентном режиме, определенной при помощи квантовых точек, составила 320 нм (теоретический предел для используемого объектива составляет 220 нм на длине волны 610 нм). При облучении лазером (473 нм) молекул ДНК, окрашенных YOYO-1 и закрепленных на поверхности покровного стекла, с освещенностью объекта 2 кВт/см², наблюдается эффект обратимого перехода молекул красителя в долгоживущее нефлуоресцентное состояние.

В первый момент времени наблюдается высокая интенсивность флуоресценции, затем она быстро падает, и наблюдается «мерцание» молекул YOYO-1, связанное с переходами молекул красителя в долгоживущее нефлуоресцентное состояние и обратно (рис. 2). Несмотря на интенсивно проводимые исследования в данном

направлении, в настоящее время детальный механизм обратимого перехода многих красителей (в том числе YOYO-1) в нефлуоресцентное состояние в световых полях с интенсивностью порядка единиц кВт/см² остается неясным [20 – 22, 14, 23]. Однако для цианиновых красителей было показано, что указанное состояние есть продукт фотохимического присоединения тиола к красителю [24].

На основании 1000 кадров молекулы ДНК при освещенности 2 кВт/см², в которых наблюдалось «мерцание» отдельных молекул, удалось реконструировать при помощи алгоритма QuickPALM изображение молекул ДНК с разрешением, намного превосходящим таковое в обычном флуоресцентном режиме.

Молекула ДНК является удобным модельным объектом для ЛМ, так как представляет собой очень тонкий (толщина около 2 нм) линейный объект, в связи с чем получаемое разрешение можно легко определить как ширину на полувысоте (FWHM) поперечного профиля яркости изображения молекулы ДНК.

На рис. 3 представлены поперечные профили яркости изображений ДНК в обычном и ЛМ-режимах. Видно, что ЛМ позволяет достигнуть разрешения до 50 нм, что на порядок лучше обычного.

Итак, микроскоп Axio Imager.Z1, являющийся частью установки FA-1 «Лазерный пинцет», был модернизирован для осуществления локализационной микроскопии.

На основе двух DPSS-лазеров с длинами волн 473 и 532 нм, работающих в непрерывном режиме, была изготовлена дополнительная система освещения, обеспечивающая плотность излучения в фокальной плоскости до 4 кВт/см² для обеих длин волн, при этом диаметр освещаемого участка составляет 40 мкм. Данная система позволяет освещать образец лазерными пучками одной или двух длин волн одновременно и может быть использована независимо от стандартной системы освещения образца, входящей в комплект микроскопа, или одновременно с ней. На основе диодного лазера (405 нм) реализовано облучение образца с плотностью излучения до 2 кВт/см² (диаметр освещаемого участка составляет 40 мкм); при этом ввод излучения осуществляется через порт для световода лампы возбуждения флуоресценции.

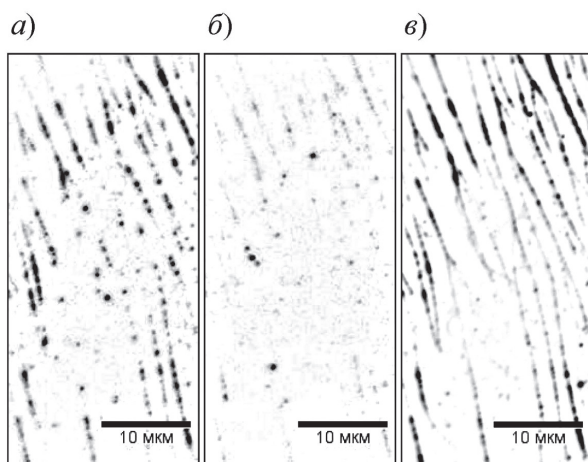


Рис. 2. Примеры изображений молекул ДНК в обычном флуоресцентном режиме, полученных при проведении эксперимента по лазерному (473 нм) освещению объекта (1000 кадров): *а* – сразу после начала, *б* – последний примерно из 500 кадров, *в* – усредненное изображение по первым 300 кадрам

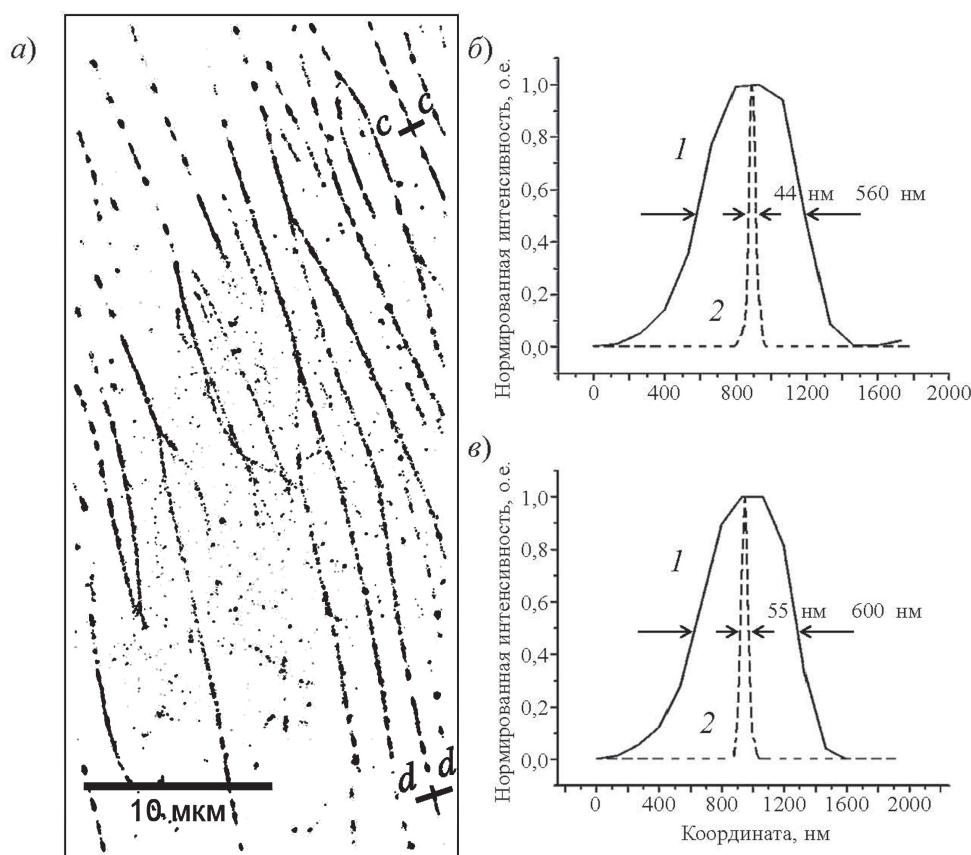


Рис. 3. Изображение молекул ДНК (а), профили его яркости вдоль линий $c-c$ и $d-d$ (б, в, соответственно), полученные методом локализационной микроскопии (кривые 2); кривые 1 (б, в) – те же профили, полученные в обычном режиме на том же объекте (см. рис. 2, в)

Использование молекул ДНК в качестве тестового образца позволило определить разрешение микроскопа в ЛМ-режиме, которое составило около 50 нм, что почти на порядок выше, чем разрешение в обычном флуоресцентном режиме.

Большинство современных исследовательских микроскопов оснащаются подходящими для ЛМ ПЗС-камерами и монтируются на виброизолирующих столах. В таком случае модернизация микроскопа для работы в режиме ЛМ состоит в изготовлении дополнительной системы освещения на основе лазеров, работающих в непрерывном режиме; данная система создает в фокальной плоскости плотность освещения более 2 кВт/см² в области размером около 40 мкм. Такая модернизация требует относительно небольшого, по сравнению со стоимостью микроскопа, вложения средств, однако позволяет существенно расширить

возможности измерительной системы. Модернизированный таким образом микроскоп позволяет использовать целый ряд методов локализационной микроскопии, в частности, основанных на фотоактивируемых или фотопереключаемых белках или на «мерцании» распространенных флуоресцентных красителей. Для обработки результатов может быть использована бесплатная программа обработки изображений с открытым кодом ImageJ с плагином QuickPALM.

Удобным объектом для тестирования ЛМ-микроскопа являются молекулы ДНК бактериофага λ , окрашенные при помощи красителя YOYO-1 и выпрямленные на поверхности покровного стекла, покрытого полистиролом. Эти образцы достаточно просты в приготовлении и позволяют легко определить разрешение микроскопа в режиме локализационной микроскопии.



Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Государственный контракт № 16.518.11.7045) и Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере «УМНИК» с использованием научного обо-

рудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ» в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Betzig, E.** Imaging intracellular fluorescent proteins at nanometer resolution [Text] / E. Betzig, G.H. Patterson, R. Sougrat [et al.] // *Science*.— 2006.— Vol. 313.— Iss. 5793.— P. 1642–1645.
2. **Gustafsson, M.G.** Surpassing the lateral resolution limit by a factor of two using structured illumination microscopy [Text] / M.G. Gustafsson // *J. Microsc.*— 2000.— Vol. 198.— Pt 2.— P. 82–87.
3. **Hell, S.W.** Breaking the diffraction resolution limit by stimulated emission: stimulated-emission-depletion fluorescence microscopy [Text] / S.W. Hell, J. Wichmann // *Opt. Lett.*— 1994.— Vol. 19.— Iss. 11.— P. 780–782.
4. **Hess, S.T.** Ultra-high resolution imaging by fluorescence photoactivation localization microscopy [Text] / S.T. Hess, T.P. Girirajan, M.D. Mason // *Biophys. J.*— 2006.— Vol. 91.— Iss. 11.— P. 4258–4272.
5. **Rust, M.J.** Sub-diffraction-limit imaging by stochastic optical reconstruction microscopy (STORM) [Text] / M.J. Rust, M. Bates, X. Zhuang // *Nat. Methods*.— 2006.— Vol. 3.— Iss. 10.— P. 793–795.
6. **Yildiz, A.** Fluorescence imaging with one nanometer accuracy: application to molecular motors [Text] / A. Yildiz, P.R. Selvin // *Acc. Chem. Res.*— 2005.— Vol. 38.— Iss. 7.— P. 574–582.
7. **Burns, D.H.** Strategies for attaining super-resolution using spectroscopic data as constraints [Text] / D.H. Burns, J.B. Callis, G.D. Christian, E.R. Davidson // *Appl. Opt.*— 1985.— Vol. 24.— Iss. 2.— P. 154–161.
8. **Naumov, A.V.** Far-field nanodiagnostics of solids with visible light by spectrally selective imaging [Text] / A.V. Naumov, A.A. Gorshelev, Y.G. Vainer, [et al.] // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*— 2009.— Vol. 48.— Iss. 51.— P. 9747–9750.
9. **van Oijen, A.M.** 3-Dimensional super-resolution by spectrally selective imaging [Text] / A.M. van Oijen, J. Köhler, J. Schmidt, [et al.] // *Chem. Phys. Lett.*— 1998.— Vol. 292.— Iss. 1–2.— P. 183–187.
10. **Cheezum, M.K.** Quantitative comparison of algorithms for tracking single fluorescent particles [Text] / M.K. Cheezum, W.F. Walker, W.H. Guilford // *Biophys. J.*— 2001.— Vol. 81.— Iss. 4.— P. 2378–2388.
11. **Ober, R.J.** Localization accuracy in single-molecule microscopy [Text] / R.J. Ober, S. Ram, E.S. Ward // *Biophys. J.*— 2004.— Vol. 86.— Iss. 2.— P. 1185–1200.
12. **Thompson, R.E.** Precise nanometer localization analysis for individual fluorescent probes [Text] / R.E. Thompson, D.R. Larson, W.W. Webb // *Biophys. J.*— 2002.— Vol. 82.— Iss. 5.— P. 2775–2783.
13. **Folling, J.** Fluorescence nanoscopy by ground-state depletion and single-molecule return [Text] / J. Folling, M. Bossi, H. Bock, [et al.] // *Nat. Meth.*— 2008.— Vol. 5.— Iss. 11.— P. 943–945.
14. **Heilemann, M.** Super-resolution imaging with small organic fluorophores [Text] / M. Heilemann, S. van de Linde, A. Mukherjee, [et al.] // *Angew. Chem. Int. Ed.*— 2009.— Vol. 48.— Iss. 37.— P. 6903–6908.
15. **Zondervan, R.** Photoblinking of rhodamine 6G in poly(vinyl alcohol): radical dark state formed through the triplet [Text] / R. Zondervan, F. Kulzer, S.B. Orlinskii, [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry A*.— 2003.— Vol. 107.— Iss. 35.— P. 6770–6776.
16. **Engelhardt, J.** Molecular orientation affects localization accuracy in superresolution far-field fluorescence microscopy [Text] / J. Engelhardt, J. Keller, P. Hoyer, [et al.] // *Nano Lett.*— 2011.— Vol. 11.— Iss. 1.— P. 209–213.
17. **Allemand, J.F.** pH-dependent specific binding and combing of DNA [Text] / D. Bensimon, L. Jullien, A. Bensimon, V. Croquette // *Biophys. J.*— 1997.— Vol. 73.— Iss. 4.— P. 2064–2070.
18. **Henriques, R.** QuickPALM: 3D real-time photoactivation nanoscopy image processing in ImageJ [Text] / R. Henriques, M. Lelek, E.F. Fornasiero [et al.] // *Nat. Meth.*— 2010.— Vol. 7.— Iss. 5.— P. 339–340.
19. **Abramoff, M.D.** Image processing with ImageJ [Text] / M.D. Abramoff, P.J. Magelhaes, S.J. Ram // *Biophotonics Int.*— 2004.— Vol. 11.— Iss. 7.— P. 36–42.
20. **Flors, C.** Photoswitching of monomeric and dimeric DNA-intercalating cyanine dyes for super-resolution microscopy applications [Text] / C. Flors // *Photochemical & Photobiological Sciences*.— 2010.— Vol. 9.— Iss. 5.— P. 643–648.
21. **Flors, C.** DNA and chromatin imaging with super-resolution fluorescence microscopy based on single-molecule localization [Text] / C. Flors // *Biopolymers*.— 2011.— Vol. 95.— Iss. 5.— P. 290–297.
22. **Flors, C.** Super-resolution imaging of DNA labelled with intercalating dyes [Text] / C. Flors, C.N.J. Ravarani, D.T.F. Dryden // *Chem. Phys. Chem.*— 2009.— Vol. 10.— Iss. 13.— P. 2201–2204.
23. **Lemmer, P.** Using conventional fluorescent markers for far-field fluorescence localization nanoscopy allows resolution in the 10-nm range [Text] / P. Lemmer, M. Gunkel, Y. Weiland, [et al.] // *J. Microsc.*— 2009.— Vol. 235.— Iss. 2.— P. 163–171.
24. **Dempsey, G.T.** Photoswitching mechanism of cyanine dyes [Text] / G.T. Dempsey, M. Bates, W.E. Kowtoniuk, [et al.] // *J. Am. Chem. Soc.*— 2009.— Vol. 131.— Iss. 51.— P. 18192–18193.

УДК 533.9.004.14

*В.Е. Кузнецов, А.А. Киселев,
Р.В. Обчинников, Ю.Д. Дудник*

ЭЛЕКТРОДЫ ОДНОФАЗНЫХ ПЛАЗМОТРОНОВ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА И МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИХ ИЗГОТОВЛЕНИЯ

Основное промышленное назначение генераторов — это получение плазменного потока для нагрева технологических объектов. Низкотемпературные генераторы плазмы в настоящий момент используются достаточно широко, создан целый ряд конструкций плазмотронов переменного тока [1], предназначенных для переработки или уничтожения отходов [2], развиваются технологии обработки материалов [3, 4], резки металлов [5] и т. п.

В связи с этим обеспечение надежной работы плазмотрона в течение длительного времени, снижение стоимости изготовления и эксплуатационных затрат — задачи актуальные и требующие внимания, так как их выполнение позволит в дальнейшем получить новые конкурентные преимущества и обеспечить широкое внедрение плазменной техники и технологий в промышленность.

В технологических приложениях традиционно применяется модель плазмотрона переменного тока со стержневыми электродами мощностью до 50 кВт как наиболее простая и востребованная [6, 7].

Особенностью данной конструкции является ее высокая надежность, простота изготовления и стабильность рабочих параметров;

для нее используется стержневая конструкция электродов [8].

Стержневой электрод размещается в водоохлаждаемом цилиндрическом канале 1, подача рабочего газа осуществляется тангенциально, а для формирования плазменной струи используется сужающееся коническое сопло 2 (рис. 1.).

Работа плазмотрона основана на следующем принципе: между стенкой канала и наконечником электрода прикладывается высокое переменное напряжение (с амплитудой порядка нескольких киловольт, достаточной для самостоятельного пробоя минимального расстояния между электродом и стенкой канала). В зоне минимального расстояния между ними при достижении достаточной разности потенциалов возникает электрический пробой. Инициированная дуга под действием газо- и электродинамических сил движется в сторону сопла плазмотрона. Сначала дуга удлиняется в радиальном направлении по мере изменения зазора между стенкой камеры и наконечником электрода. Затем, когда одна из ее привязок достигает торца электрода и остается на нем, другая движется по стенке канала дальше и выходит на его наружную торцевую кромку; там она замыкается в воздухе с дугой другого канала.

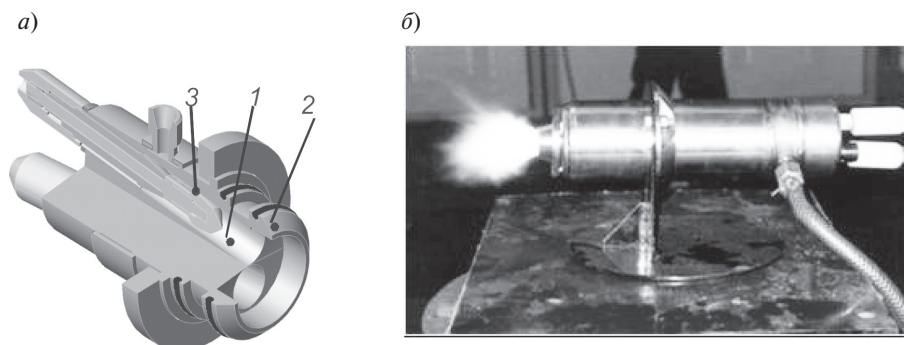


Рис. 1. Высоковольтный плазмотрон переменного тока: а — общий вид; б — пример эксплуатации;

1 — водоохлаждаемый цилиндрический канал, 2 — сужающееся коническое сопло, 3 — электрод



Это замыкание происходит, если длина канала плазмотрона меньше длины самоустанавливающейся дуги, и напряжение источника питания обеспечивает стабильную (без пауз тока) работу плазмотрона. При изменении полярности дуга вновь инициируется в насыщенном носителями зарядов канале дуги предыдущей части периода, а в случае погасания — опять в зоне минимального зазора между стенкой и наконечником электрода. Тангенциальный газовый поток стабилизирует дугу в осевой зоне канала, защищая стенки канала от ее термического воздействия.

Стержневой электрод выполнен в виде тела вращения и имеет общую ось с каналом, в котором устанавливается. Электрод состоит из двух основных элементов: изолятора и наконечника (рис. 2.).

Основная функция наконечника — обеспечение стабильного зажигания дуги и работы плазмотрона в течение всего времени его эксплуатации. Зазор между стенкой цилиндрического канала и областью наконечника выбирается в зависимости от условия самостоятельного пробоя, а также от напряжения, приложенного между электродами. Электрод выполнен так, что между уплотнительной втулкой и областью максимального диаметра наконечника (в осевом направлении) существует промежуток с меньшим диаметром. Таким образом, при установке в корпусе плазмотрона, между стенкой канала и электродом образуется кольцевая полость, ограниченная в осевом направлении уплотнительной (без зазоров) втулкой изолятора с одной стороны и зоной максимального диаметра наконечника (с малым зазором) с другой. Эта полость играет роль вихревой камеры, в нее подается рабочий газ из тангенциально расположенного отверстия в стенке канала. Закрученный поток формируется в зоне присоединения наконечника электрода к изолятору, обтекает зону минимального зазора между электродом и стенкой канала и движется в сто-

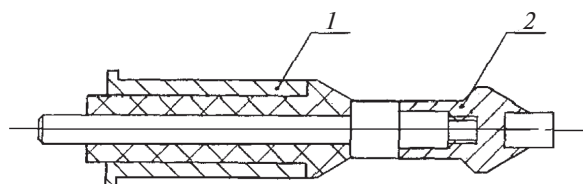


Рис. 2. Конструкция стержневого электрода:
1 — проходной изолятор; 2 — сменный наконечник

рону выхода из канала через коническое сопло.

Основными факторами [9], приводящими к износу поверхности электродов низкотемпературных плазмотронов, являются следующие воздействия:

термическое со стороны электрической дуги;

электроэрозионное;

коррозионно-окислительное (при использовании воздуха в качестве рабочего газа).

В зоне непосредственного воздействия привязки электрической дуги на поверхность электрода возможен его локальный разогрев до температуры в несколько тысяч градусов. При перемещении пятна привязки на поверхности электродов могут появляться кратеры и их комплексы, возникать трещины и отколы вследствие термических и усталостных напряжений (рис. 3).

Поэтому для изготовления электродов достаточно часто используется медь, которая обладает высокой теплопроводностью и электропроводностью; это позволяет снизить потери на электросопротивление и эффективно отводить тепло, выделяющееся в процессе горения дуги. Вместе с тем не стоит забывать, что для меди характерны сравнительно низкие температуры плавления ($1083\text{ }^{\circ}\text{C}$) и испарения ($2310\text{ }^{\circ}\text{C}$) и что ее показатели по длительности работы и удельной эрозии не являются очень высокими [13]:

Ток дуги, А.....	2,8
Удельная эрозия, г/Кл	$2,78 \cdot 10^{-4}$
Время наработки, ч.....	25

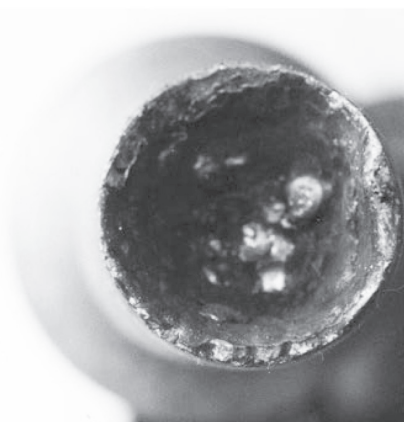


Рис. 3. Фотография поверхности электрода плазмотрона после нескольких часов работы

Очевидно, что приведенные результаты по долговечности электродов, изготовленных из меди, не могут быть признаны удовлетворительными для промышленного применения данной системы.

Чтобы увеличить время работы и уменьшить электроэрозионный износ материала электрода, целесообразно использовать композиции с добавками металлов, более тугоплавких, чем медь, например железа. Исследование композиционных материалов, содержащих микрочастицы железа, показывает, что микроизменение поверхности электрода под воздействием электрической дуги зависит от концентрации тугоплавкого компонента (железа) в данном микрообъеме материала. Наиболее медленно износ происходит на участках с наибольшей концентрацией железа, при этом внешние границы исследуемых образцов имеют вид дугообразных линий неправильной формы, проходящих по цепочке частиц железа [10]. Таким образом, добавки тугоплавких материалов в состав медной матрицы открывают перспективное направление усовершенствования материала электродов. В качестве же добавок может быть использовано не только железо, но и, например, хром. В табл. 1 по данным источников [11, 12] приведены сравнительные электро- и теплофизические характеристики меди, железа и хрома.

Из данных, приведенных в табл. 1, следует, что хром обладает более высокой температурой плавления и испарения, а также более высоки-

ми значениями величин скрытой теплоты плавления и испарения, чем медь и железо, вследствие чего можно ожидать большего эффекта от его введения при тех же концентрациях по сравнению с железом.

Для выяснения степени влияния добавок тугоплавкого материала на долговечность и для разработки технологии создания материала (применительно к электроду) была выполнена серия ресурсных испытаний стержневых электродов для плазмотронов переменного тока.

Первоначально были опробованы каркасные карбидные композиционные материалы, содержащие медь. Каркасная структура (два взаимопроникающих каркаса — карбидный и металлический) представляет собой двухфазную систему. Была выдвинута гипотеза, что тугоплавкий, стойкий к окислению карбидный каркас удерживает в своих порах медь и таким образом при температурах выше точки плавления последней сохраняет работоспособность материала.

Для проверки этой гипотезы был поставлен ряд экспериментов. Их результаты (время работы плазмотрона было приблизительно 10 часов) представлены на рис. 4.

Установлено, что при увеличении времени работы электрода эрозионный унос материала значительно возрастает. Наилучший результат, полученный для композиционного материала на основе карбида хрома с добавлением меди при длительности работы электрода около 40 часов, характеризуется следующими значениями величин:

Таблица 1

Электро- и теплофизические характеристики металлов для изготовления электродов

Физическая величина	Значение		
	Cu	Fe	Cr
Температура, °С плавления испарения	1083	1535	1900
	2310	2450	1900
Теплоемкость, кал(г·град)	0,093	0,113	0,110
Скрытая теплота, кал/град плавления испарения	42	49	67
	1146	1455	1603
Теплопроводность, кал(см·с·град)	0,920	0,161	0,160
Удельное электросопротивление, 10 ⁻⁸ Ом·м	1,72	9,8	14,4

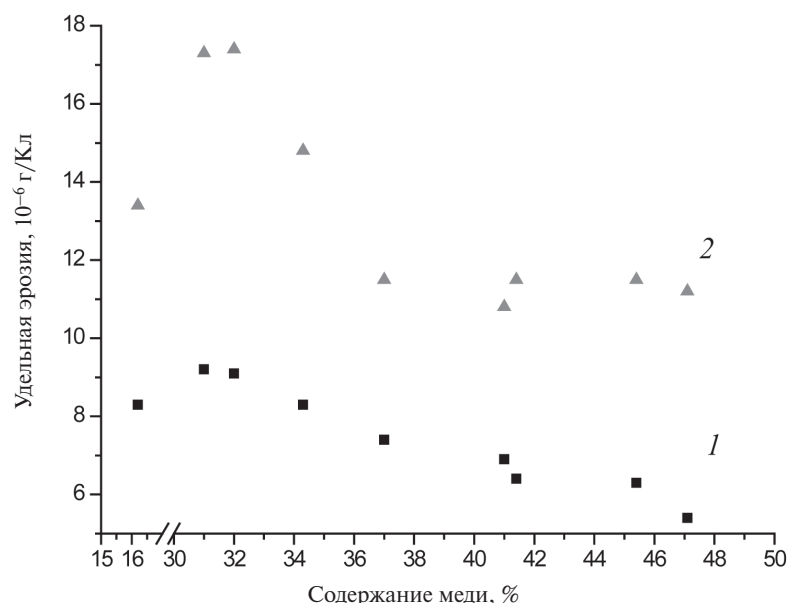


Рис. 4. Зависимость величины удельной эрозии от содержания меди в композиционном материале на основе карбида хрома при двух значениях тока дуги, А: 4,5 (1) и 7,8 (2)

Ток дуги, А.....6,7

Удельная эрозия, г/Кл..... $9,8 \cdot 10^{-6}$

Ввиду достаточно высокой стоимости и технологических ограничений на получение каркасных материалов, были проведены опыты с другими материалами, полученными методами порошковой металлургии. Результаты экспериментов приведены в табл. 2.

Таблица 2

Экспериментальные результаты по использованию электродов из разных материалов

Состав материала	Длительность работы, ч	Ток дуги, А	Удельная эрозия, 10^{-6} г/Кл
70 %Cu + 30 %Fe	~ 40	6,9	3,2
Cu + CrC	~ 20	7,1	14,5

Таким образом, в работе получены следующие результаты.

Определен фазовый состав композиционных материалов медь — тугоплавкая добавка, соответствующий минимальному эрозионному уносу, который можно считать оптимальным для данных режимов работы плазмотрона.

Экспериментально установлено, что композиционный материал состава железо — медь обладает наилучшими электроэрозионными показателями в данном диапазоне мощности плазмотрона переменного тока.

При изготовлении электродов из порошкового композиционного материала состава 70%Cu + 30%Fe получен ресурс работы плазмотрона переменного тока более 100 часов при незначительной величине эрозионного уноса материала электрода — $3,8 \cdot 10^{-6}$ г/Кл.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rutberg, Ph.G. Thermal methods of waste treatment [Текст]: Environmental Technologies Handbook. Chapter 4/ Ph.G. Rutberg; Edited by N. Cheremisnoff.— Lanham, Maryland, Toronto, Oxford: Government Institutes. The Scarecrow Press, Inc., 2005.— P. 161—192.

2. Rutberg, Ph.G. On efficiency of plasma gasification of wood residues [Текст] / Ph.G. Rutberg, A.N. Bratsev,

V.A. Kuznetsov [et al.] // Biomass and Bioenergy.— Elsevier Ltd, 2011.— 35/1.— P. 495—504.

3. Абдуллин, И.Ш. Влияние потока низкотемпературной плазмы на гигроскопические свойства текстильных материалов из натуральных волокон [Текст] / И.Ш. Абдуллин, В.В. Кудинов, В.В. Хамматова // Перспективные материалы.— 2007.— №2.— С. 65—69.

4. **Кутепов, А.М.** Плазменное модифицирование текстильных материалов: перспективы и проблемы [Текст] / А.М. Кутепов, А.Г. Захаров, А.И. Максимов [и др.] // Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева).— 2002.— Т. XLVI.— № 1.— С. 103–115.
5. **Hogan, J.A.** Plasma processes of cutting and welding [Текст] / J.A. Hogan, J.B. Lewis // 20 Years To Practical Plasma.— 1976.— Hypertherm.
6. **Рутберг, Ф.Г.** Плазмотроны переменного тока со стержневыми электродами мощностью от 5 до 50 кВт для плазмохимических приложений [Текст] / Ф.Г. Рутберг, А.А. Сафронов, Г.В. Наконечный [и др.] // Известия вузов. Физика.— 2007.— № 9.— С. 77–79.
7. **Рутберг, Ф.Г.** Перспективы применения низкотемпературной плазмы в котельных агрегатах ТЭС [Текст] / Ф.Г. Рутберг, В.Л. Горячев, А.А. Сафронов // Известия Академии наук. Энергетика.— 1993.— № 5.— С. 110–117.
8. **Rutberg, Ph.G.** Research of erosion of water cooling electrodes of powerful AC plasma generators [Текст] / Ph.G. Rutberg, A.A. Safronov, V.E. Kuznetsov [et al.] // The European Materials Conf. Book of Abstract E-MRS. ICEM—2000 Strasbourg (May 30— June 2, 2000) Symposium A.TPP—6 Thermal Plasma Processes A/P—98. P. A-36.
9. **Rutberg, Ph.** Physics and technology of high-current discharges in dense gas media and flows [Текст] / Ph. Rutberg.— N. Y.: Nova Science Publishers, Inc, 2009. — 214 p.
10. **Виноградов, С.Е.** Исследование механизмов износа электродов плазмотрона [Текст] / С.Е. Виноградов, В.В., Рыбин, Ф.Г. Рутберг [и др.] // Вопросы материаловедения.— 2002.— № 2.— С. 52–59.
11. **Абрикосов, Н.Х.** Двойные и многокомпонентные системы на основе меди [Текст]: справочник / М.Е. Дриц, Н. Р. Бочвар, Л. С. Гузей [и др.]; Отв. ред. Н.Х. Абрикосов.— М.: Наука, 1979.— 248 с.
12. **Уикс, К.Е.** Термодинамические свойства 65 элементов, их окислов галотенидов, карбидов и нитридов [Текст] / К.Е. Уикс, Ф.Е. Блок.— М.: Металлургия, 1965.— 240 с.
13. **Рутберг, Ф.Г.** Мощный плазмотрон переменного тока [Текст] / Ф.Г. Рутберг, А.А. Сафронов, В.Н. Шириев [и др.] // ФНТП-95. Матер. конф. Петрозаводск, 20–26 июня, 1995. — Т. 3. — С. 422–425.

УДК 543.427.4, 519.24

А.П. Мороз, А.С. Серебряков, Я.А. Бердников

ВЛИЯНИЕ КОНСТРУКТИВНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ КРЕМНИЙ-ЛИТИЕВОГО ДЕТЕКТОРА НА ФОРМУ АМПЛИТУДНОГО СПЕКТРА

Полупроводниковый детектор (ППД) из кремния — один из наиболее известных и широко используемых типов детекторов рентгеновского излучения благодаря высокому энергетическому разрешению, позволяющему разделять линии характеристического излучения соседних элементов периодической системы с атомными номерами Z и $Z + 1$. Развитие технологии производства таких детекторов происходит более полувека и продолжается до сих пор. Они используются во многих направлениях, в том числе и в рентгенофлуоресцентном анализе (РФА).

Настоящая статья посвящена использованию кремниевых ППД именно для целей РФА, хотя полученные результаты могут быть полезны и для других применений.

Наиболее эффективным кремниевым детектором является устройство с $p-i-n$ -переходом и компенсацией примесной проводимости литием (Si(Li)). Толщина такого детектора может быть порядка 4–5 мм, что в принципе позволяет регистрировать рентгеновское излучение с энергией примерно до 100 кэВ, перекрывая диапазон K -серий характеристических линий всех элементов периодической системы.

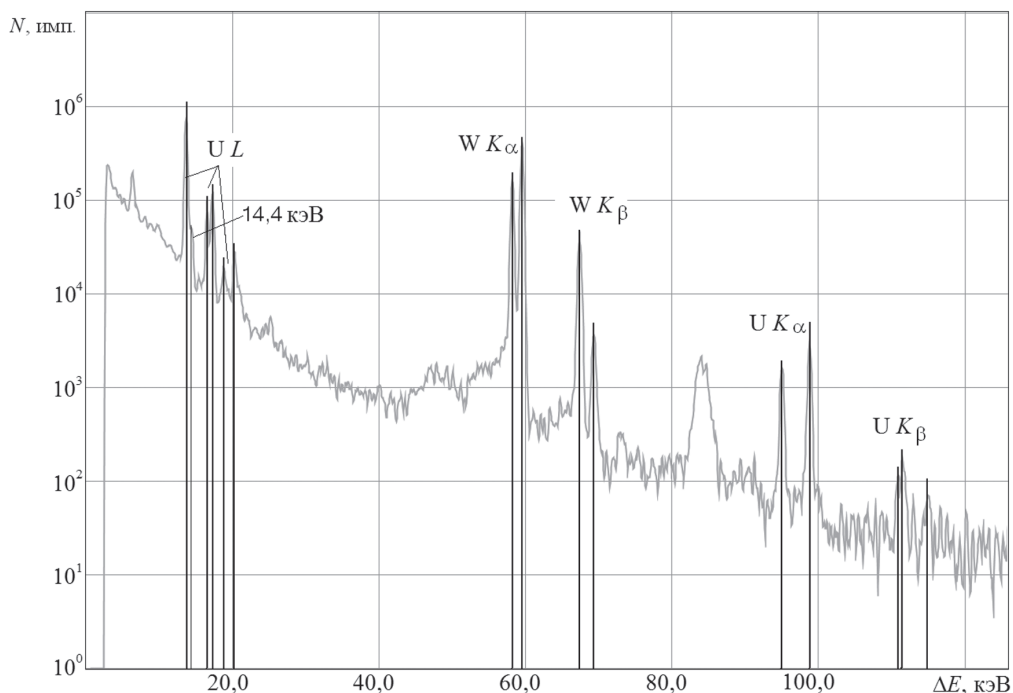


Рис. 1. Спектр образца U_3O_8 при облучении источником ^{57}Co в коллиматоре из вольфрама; показаны характеристические линии K - и L -серий урана и вольфрама; 14,4 кэВ – линия изотопа ^{57}Co

На рис. 1 показан спектр образца окиси урана, полученный при его облучении источником ^{57}Co с энергиями основных линий 122 и 136 кэВ и зарегистрированный $Si(Li)$ -детектором площадью 20 мм² и толщиной чувствительной области 3,5 мм. Аналогичный детектор используется в серийном анализаторе «Х-Арт М», выпускаемом в Санкт-Петербурге фирмой ЗАО «Комита». На спектре видны характеристические линии урана, включающие K - и L -серии. Эффективность регистрации линий K -серии урана с помощью $Si(Li)$ -детектора толщиной 3,5 мм – около 3 %.

Механизм формирования амплитудного спектра детектора известен и достаточно прост. Падающий фотон образует вторичный электрон в чувствительной зоне детектора, который тормозится в материале кристалла и образует носители заряда – электрон-дырочные пары. Под действием приложенного внешнего электрического поля происходит сбор носителей заряда на электродах, нанесенных на две поверхности кристалла, а возникающие при этом импульсы электрического тока или напряжения во внешней цепи усиливаются, обрабатываются электроникой и записываются многоканальным анализатором [1]. Величина

амплитуды электрического импульса и номера канала, в который она будет записана, прямо пропорциональны количеству образовавшихся в детекторе носителей заряда, а, следовательно, и величине энергии поглощенного фотона. Таким образом, амплитудный спектр после калибровки по энергии может быть преобразован в энергетический спектр фотонов, упавших на детектор.

Особенности конструкции кремний-литиевого ППД

В работе [2] описан способ моделирования рентгенофлуоресцентного анализатора «Х-Арт М», включающего источник на основе рентгеновской трубки (РТ), образец и блок детектирования на основе $Si(Li)$ -детектора. Там же показано, что спектры, полученные моделированием, при напряжениях на аноде РТ свыше 20 кВ плохо совпадают с экспериментальными в области низких энергий менее 5 кэВ.

Типичный экспериментальный спектр в области менее 5 кэВ значительно выше расчетного и имеет тенденцию к повышению в область меньших энергий (рис. 2). Здесь расчетный спектр представляет собой спектр потерь энергии фотонов ΔE от образца в чув-

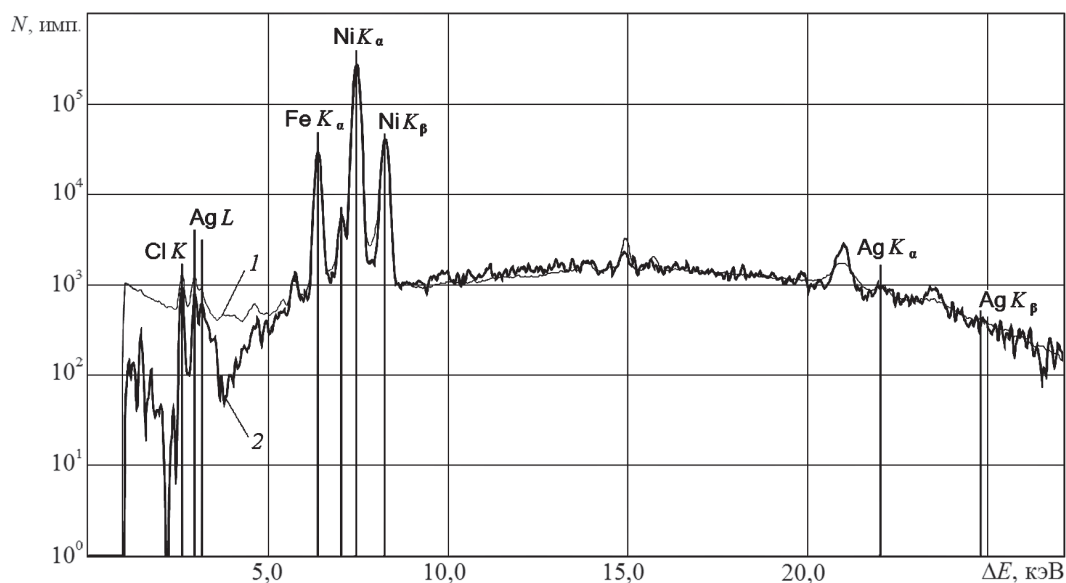


Рис. 2. Сравнение экспериментального (1) и расчетного (2) спектров образца из работы [2], содержащего железо, никель, хлор в углеродной матрице; рентгеновская трубка с серебряным анодом

ствительном объеме детектора, имеющем форму прямого кругового цилиндра. Расчетный фон в области малых энергий образован фотонами, оставившими долю своей энергии в детекторе после некогерентного рассеяния. Таким образом, ясно, что реальный эксперимент содержит некоторый значительный дополнительный источник фона.

Наличие нелинейного низкоэнергетического фона вообще характерно для любых ППД, в том числе и при регистрации гамма-излучения детекторами на основе германия [3], когда граница этого фона сдвигается к величине около 20 кэВ.

В рентгеновском диапазоне энергий этот вопрос важен как с точки зрения понимания процессов, происходящих в ППД, так и со стороны практической спектрометрии, в частности в РФА наличие фона ухудшает пределы обнаружения элементов, линии которых регистрируются в этой области энергий. Кроме того, решение прямой задачи, а именно — точного согласия экспериментальных и расчетных данных, полученных при моделировании рентгенофлуоресцентного анализатора во всем диапазоне энергий, позволит решить обратную задачу: определения количественного состава образца нестандартным расчетным методом фундаментальных параметров. Этот же метод позволит оптимизировать конструкцию любых ППД под решение задач РФА.

В работе [3] предполагается, что расхождение экспериментального и расчетного спектров в низкоэнергетической области для детекторов из германия может быть связано с утечками вторичных электронов из чувствительного объема, например, за счет эффекта каналирования электронов в его приповерхностном слое. Однако данный эффект в случае относительно низких энергий рентгеновского диапазона не может играть существенной роли.

Поэтому в настоящей работе внимание было сосредоточено только на возможном эффекте неполного сбора заряда из тех областей кристалла детектора, которые ввиду конструктивных особенностей представляют собой либо «мертвую» зону, либо «проблемную» зону с ослабленным и (или) искаженным электрическим полем.

Схема криостата Si(Li) ППД с коллиматором представлена на рис. 3.

Видно, что детектор имеет следующие особенности: выступающий из криостата бериллиевый коллиматор 2 для увеличения эффективности регистрации легких элементов на воздухе, а также конструктивные детали для фиксации и тепловой защиты кристалла детектора в виде алюминиевого корпуса 3 и колпачка из нитрида бора 4. Сам кристалл детектора имеет сложную форму и дополнительные окружающие конструкции, которые также могут повлиять на

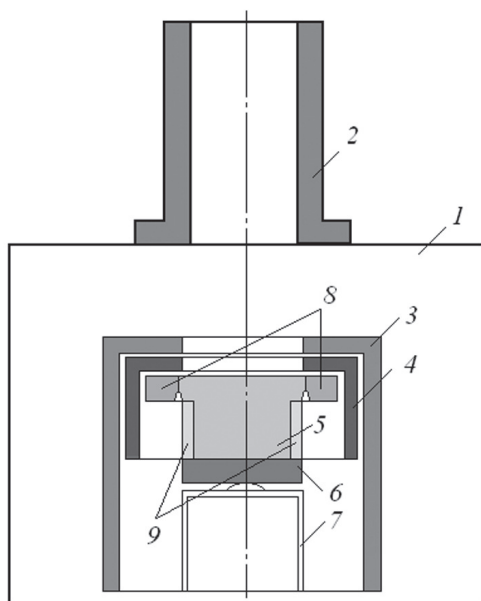


Рис. 3. Конструкция Si(Li) ППД с коллиматором: 1 — вакуумный объем криостата, 2 — бериллиевый коллиматор, 3 — легкий алюминиевый корпус, 4 — колпачок из нитрида бора, 5 — чувствительная зона кристалла (полного сбора заряда), 6 — «мертвая» зона детектора, 7 — фторопластовый колпачок, 8 — «плечики» кристалла детектора (конструкционная зона для передачи низкой температуры), 9 — приповерхностная боковая зона кристалла

форму спектра. Это «плечики» 8 кристалла, прижимной электрод с фторопластовым колпачком 7 с обратной стороны, а также боковая приповерхностная зона кристалла 9, выделенная на рисунке.

Влиянием эффекта обратного рассеяния от фторопластового колпачка 7 можно пренебречь, поскольку расчеты показывают малую вероятность такого процесса при заданных условиях экспериментов.

Чувствительная зона 5 кристалла детектора глубиной 3,5 мм — это область хорошего сбора зарядов. Зона 6 с абсолютной толщиной 0,5 мм расположена за зоной 5, где после диффузии осталось много лития, и является зоной плохого сбора, а зоны 8 и 9, где поле существенно иное, чем в основной зоне 5, соответствуют области неполного сбора, что позволяет считать их «проблемными».

Хороший сбор зарядов в чувствительной зоне 5 кристалла обусловлен однородностью электрического поля, приложенного в направлении оси детектора. При этом канавка под зоной 8 выравнивает поле на небольших глубинах, отсчитываемых от входной поверхности кристалла.

Относительно неполного сбора из зоны 6 можно сказать, что при энергиях до 30 кэВ в спектре РТ (рассмотрены в работе [2]) количество поглощенных фотонов в этой дальней зоне (3,5 — 4,0 мм от входной поверхности кристалла детектора) ничтожно мало. При таких энергиях более 95 % актов выделения энергии происходят в приповерхностной части кристалла детектора, на глубинах менее 1 мм. Это объясняется тем, что число фотонов с энергией от 20 до 30 кэВ, которые потенциально могут рассеяться на образце и достичь этой зоны, пренебрежимо мало в падающем на образец излучении РТ.

Таким образом, в этом случае даже при наличии эффекта неполного сбора заряда потерянная энергия в глубокой зоне 6 детектора не дает существенного вклада в форму конечного амплитудного спектра. Но этот эффект может иметь место при больших энергиях (свыше 50 кэВ), когда число актов потерь энергии в дальней зоне детектора относительно велико; такая задача будет рассмотрена в отдельной работе. На спектре рис. 1 отчетливо видно резкое возрастание общего фона (особенно в области малых энергий) при регистрации фотонов высоких энергий; оно связано с выносом части энергии из чувствительного объема детектора как за счет неупругого рассеяния фотонов, так и за счет неполного сбора заряда, в том числе из этой зоны 6.

Принципиальное описание сбора зарядов из цилиндрической приповерхностной зоны 9 дано в монографии [4]. Там указано, что силовые линии поля, которые в центре детектора идут параллельно его оси, могут выходить на боковую поверхность кристалла, обуславливая тем самым неполный сбор заряда для фотонов, которые проникли на большую глубину в детектор и оказались вблизи этой поверхности. Это приводит к появлению протяженного «хвоста» в диапазоне от минимально регистрируемого значения до максимального в спектре излучения, падающего на детектор.

При тех размерах, которые характерны для кремниевых ППД, критическое значение энергии фотонов составляет, согласно результатам работы [4], 15 кэВ. Это означает, что фотоны с большей энергией, проникая глубже, могут участвовать в процессе с неполным сбором заряда в зоне 9.

Неполный сбор заряда из «мертвого» слоя со стороны окна ППД рассматривался в работах [5, 6] (в изучаемом их авторами детекторе этот слой составлял не более 1 мкм). Однако до сих пор не исследовался вопрос об участии фотонов больших энергий в процессе неполного сбора заряда из зоны «плечиков» кристалла δ . Так, в работе [7] вообще предполагается, что из этой зоны сбора зарядов нет.

Данная зона технологических «плечиков» δ является кольцом с минимальным и максимальным радиусами 2,5 и 4,5 мм соответственно и высотой около 1 мм. Эта зона (см. рис. 3) прикрыта легкими конструкционными материалами (корпус из алюминия 3 и колпачок из нитрида бора 4); таким образом, фотоны с энергией менее 15 кэВ практически в нее не попадают. Но если энергия фотонов становится больше, они в ней активно поглощаются.

В отличие от поглощения в приповерхностной зоне 9, здесь неполный сбор зарядов может привести к более значительным потерям. И в этом случае существенный фон или «хвост» должен появиться ближе к минимальным энергиям, что и наблюдается экспериментально (см. рис. 2).

Как показывает моделирование, прямое попадание фотонов из образца в зону «плечиков» δ происходит в основном благодаря их прохождению сквозь материал коллиматора (бериллий) в его нижней части — ближней к кристаллу — под относительно большими углами к оси детектора.

На рис. 4 представлены расчетные распределения числа актов поглощения энергии в объеме детектора (включена зона δ). Распреде-

ние на рис. 4,а соответствует случаю падения фотонов только на поверхность зоны 5, при этом их часть все же попадает в зону δ после когерентного и некогерентного рассеяния в зоне 5. Распределение на рис. 4,б учитывает прямое попадание фотонов в зону δ через конструкции коллиматора и колпачков 3, 4.

Неполный сбор заряда

Как было указано выше, в зоне «плечиков» δ детектора и приповерхностной боковой зоне 9 кристалла из-за искажения силовых линий электрического поля могут происходить процессы неполного сбора заряда. При этом оставленная в этих зонах энергия будет регистрироваться в спектр с определенным коэффициентом, меньшим единицы. К сожалению, в данном случае трудно определить, как этот коэффициент должен зависеть от координаты акта выделения энергии. Для сравнения отметим, что в работе [8], где решается одномерная задача, предполагается его линейное изменение внутри некоторой плоской приповерхностной «проблемной» зоны. По аналогии можно предположить, что в зоне 9 этот коэффициент падает линейно в зависимости от радиуса точки выделения энергии. Но, как будет показано далее, при тех энергиях фотонов, которые рассмотрены в настоящей работе, зона 9 не вносит столь существенного вклада в наблюдаемый спектр.

С другой стороны, хорошо наблюдаемый эффект искажения экспериментальных спектров в области малых энергий до 5 кэВ позволяет высказать предположение, что в зоне «плечиков» δ указанный коэффициент имеет величину порядка 0,1. При этом вклад смещен-

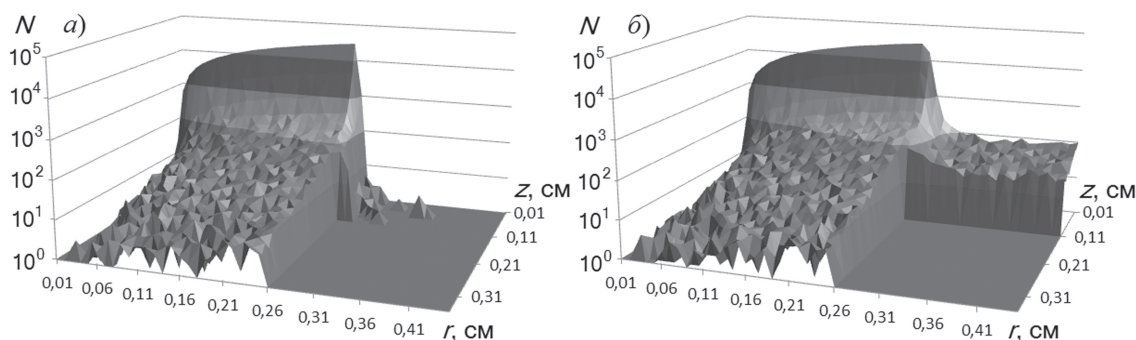


Рис. 4. Распределение числа актов выделения энергии по объему детектора без учета (а) и с учетом (б) его конструктивных особенностей; z и r — расстояния от поверхности (вглубь) и от оси детектора; распределения соответствуют спектрам 2 на рис. 2 и 6



ных в низкоэнергетическую область амплитуд по форме представляет собой функцию F от потерь энергии ΔE , близкую к экспоненте с отрицательным показателем:

$$F(\Delta E) = A \cdot \exp(-B \cdot \Delta E), \quad (1)$$

где A и B — числовые коэффициенты.

Спектр такой формы обычно возникает в случае, когда он обусловлен большим количеством независимых случайных процессов, например, он характерен для энергий электронов, выходящих из канала умножения микроканальной пластины. При таком спектре система не обладает энергетическим разрешением.

Таким образом, очевидно, что, во-первых, нужно сопоставить расчетную величину полных потерь энергии в зоне δ с наблюдаемой площадью в зоне «хвоста» (1), а во-вторых, интерпретировать характерную форму этого «хвоста».

Моделирование реальной геометрии

Под расчетной величиной полного выделения энергии ΔE_{tot} следует понимать сумму произведений энергий ΔE_i , оставленных фотонами в данной зоне, на вероятности P_i взаимодействия фотонов в этой зоне:

$$\Delta E_{tot} = \sum P_i \cdot \Delta E_i, \quad (2)$$

где суммирование идет по числу взаимодействовавших фотонов.

Кривая 1 на рис. 5 показывает, как для «проблемной» зоны δ меняется отношение R_1 этой величины ΔE_{tot} к максимальной выделенной в зоне энергии ΔE_{max} в зависимости от граничной энергии $E_{гр}$ спектра РТ:

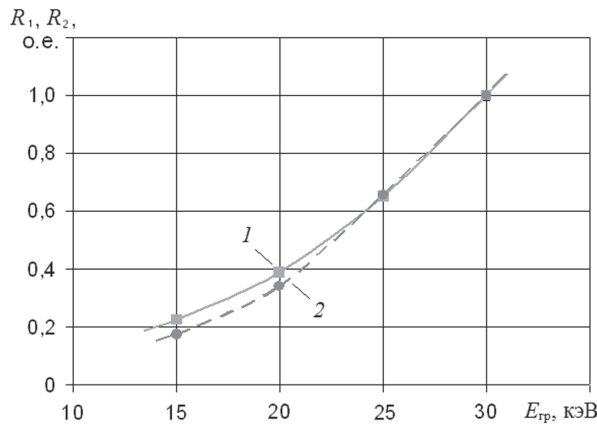


Рис. 5. Зависимость отношений R_1 (1) и R_2 (2) от граничной энергии рентгеновской трубки

$$R_1 = \frac{\Delta E_{tot}}{\Delta E_{max}}, \quad (3)$$

где ΔE_{max} соответствует максимальному значению $E_{гр}$.

Кривая 2 на этом же рисунке показывает одновременное поведение относительной площади фона в экспериментальном «хвосте» R_2 , найденное как отношение разности площадей экспериментального и расчетного спектров в диапазоне от 1 до 5 кэВ к ее максимальному значению:

$$R_2 = \frac{S_{\text{эксп}} - S_{\text{расч}}}{(S_{\text{эксп}} - S_{\text{расч}})_{\text{max}}}, \quad (4)$$

где величина $(S_{\text{эксп}} - S_{\text{расч}})_{\text{max}}$ соответствует максимальному значению $E_{гр}$.

Видно, что зависимости этих двух величин от $E_{гр}$ практически совпадают. График демонстрирует факт того, что площадь спектра в низкоэнергетической части от 1 до 5 кэВ имеет такую же тенденцию изменения от граничной энергии на РТ, как и величина выделения энергии в зоне «плечиков» δ . Это подтверждает высказанное предположение о значительной роли зоны δ в формировании низкоэнергетического «хвоста» в экспериментальных спектрах.

Сбор заряда из этой зоны столь необычен скорее всего по той причине, что силовые линии поля здесь хаотично замыкаются на внешней поверхности кристалла, обуславливая краткое движение носителей заряда вдоль них и приводя в основном к появлению импульсов с малыми амплитудами. Этому же может способствовать и наличие ловушек в материале «плечиков» детектора, предопределяющее захват носителей заряда в процессе сбора.

Как следствие, конечное распределение амплитуд из этой зоны имеет экспоненциальную форму (1). Параметр B распределения (1) может быть найден из эксперимента, и он слабо зависит от величины $E_{гр}$.

В итоге моделирование правильного фона сводится к вычислению потери энергии $\Delta E'_i$ в «проблемной» зоне, если фотон попал в нее, и к добавлению статистического веса этого фотона в канал искомого спектра, соответствующий потере энергии

$$\Delta E'_i = k \cdot \Delta E_i, \quad (5)$$

где $k < 1$ — коэффициент сбора заряда из данной зоны, зависящий от координат.

Однако для зоны «плечиков» δ , где этот коэффициент неизвестен, предпочтительно выбирать величину $\Delta E'_i$ из распределения (1):

$$\Delta E'_i = -\frac{1}{B} \cdot \ln \xi, \quad (6)$$

где ξ — случайное число, равномерно распределенное на промежутке $(0, 1)$.

Для проверки влияния конструктивных особенностей и эффекта частичного сбора заряда из «проблемных» зон детектора на форму получаемого спектра была проведена серия расчетов по моделирующей программе. Расчеты проводились для случая полного выделения энергии в цилиндрической чувствительной зоне детектора без учета конструктивных особенностей (аналогично работе [2]) и при наличии полного и частичного выделения энергии в детекторе с учетом указанных особенностей.

Для того чтобы оценить баланс неполного сбора заряда отдельно из зон 8 и 9, расчеты выделения энергии в этих областях были проведены для тех же условий, что и в предыдущей работе [2]. Согласно источнику [4], показатели качества детекторов с коллимационным кольцом и без такового сравниваются при площади коллимационного отверстия менее 50 % от площади чувствительной поверхности детектора. Таким образом, в случае моделирования актов выделения энергии в зоне 9 поверхность частичного сбора заряда была задана как кольцо, площадь которого составляет 50 % от заявленной чувствительной площади кристалла детектора.

Оказалось, что в условиях поставленного эксперимента зона 9 не вносит существенного вклада в изменение формы амплитудного спектра.

Расчетные спектры имеют статистику порядка 10^9 историй первоначальных фотонов (порядка 10^5 событий в детекторе); нормировка результатов производится по площади экспериментальных спектров.

Результаты расчетов представлены на рис. 4–6. Спектр 1 на рис. 6 получен экспериментально в следующем режиме: напряжение на аноде РТ — 30 кВ, ток анода — 20 мкА, время измерения — 600 с, диаметр коллимационной

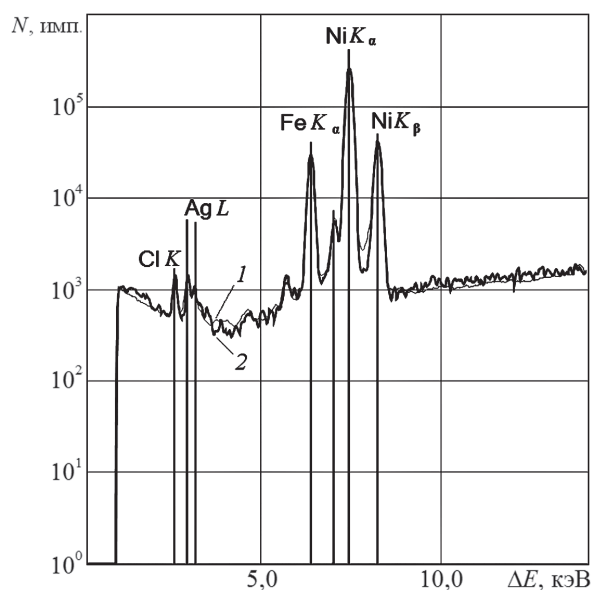


Рис. 6. Сравнение экспериментального (1) и расчетного (2) спектров образца (низкоэнергетичный диапазон), содержащего железо, никель, хлор в углеродной матрице;

спектр 2 рассчитан с учетом конструктивных особенностей блока детектирования и с выделением энергии по формуле (6) в зоне «плечиков» δ ; рентгеновская трубка с серебряным анодом

диафрагмы — 8 мм, загрузка детектора составляла около 4500 имп/с.

Как и ранее, спектр 2 на рис. 6 получен в результате работы моделирующей программы. При расчете этого спектра учитывались конструктивные особенности блока детектирования в виде бериллиевого коллиматора 2, алюминиевого корпуса 3, колпачка из нитрида бора 4, зоны «плечиков» δ кристалла. Сбор заряда из этой «проблемной» зоны δ рассчитывался по формуле (6). По изложенным выше причинам, сбор заряда из приповерхностной зоны цилиндра кристалла 9 считался полным и «мертвая» зона детектора 6 в расчете не учитывалась.

Таким образом, можно сделать вывод, что при моделировании работы Si(Li) ППД для получения правильной формы амплитудного спектра необходимо учитывать не только внутренние конструктивные особенности детектора конкретного типа, но и эффект неполного сбора заряда из «проблемных» зон кристалла детектора. Этот эффект неполного сбора проявляется в «мертвых» зонах и в областях с ослаб-



ленным и (или) искаженным электрическим полем кристалла.

После учета этого эффекта некоторые менее значительные расхождения расчетных и экспериментальных спектров можно объяснить ошибками в задании аналитического вида функции сбора из «проблемных» зон. Однако очевидно, что эффект частичного сбора есть и спектры, рассчитанные при его учете, значительно ближе к экспериментальным.

Наиболее реалистичной является модель Si(Li) ППД, которая корректно учитывает сбор заряда из всех зон объема кристалла и одновременно адекватно описывает особенности конструкции детектора.

Для устранения эффекта искажения спектров в области малых энергий предлагается расположить подряд над колпачком 4 (см. рис. 3) три защитные шайбы из набора материалов с последовательным понижением значения Z : из тантала, меди и титана толщиной соответственно 20, 30 и 40 мкм. Такая мера позволит предотвратить прямое проникновение фотонов высоких энергий в зону δ . Оптимизация значе-

ний толщины будет проведена в дальнейшем с помощью моделирующей программы.

Одновременно с зоной δ при любых граничных энергиях РТ существенный вклад в низкоэнергетическую часть регистрируемого спектра вносит приповерхностный мертвый слой со стороны окна детектора [8]. Этот эффект смоделирован нами аналогично моделированию, проделанному в работе [8], а также с учетом переноса вторичных электронов в пределах этого слоя толщиной порядка 1 мкм. В дальнейшем будет определен точный баланс между вкладами этих двух зон в указанную часть спектра.

Авторы благодарят кандидата физико-математических наук А.Д. Соколова, технического директора компании Baltic Scientific Instruments, за предоставление информации по разработке блока Si(Li) ППД и обсуждение полученных результатов, а также кандидата физико-математических наук В.К. Еремина, старшего научного сотрудника ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН за плодотворную дискуссию по теме настоящей работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Абрамов, А.И.** Основы экспериментальных методов ядерной физики [Текст]: Учеб. пос. для вузов / А.И. Абрамов, Ю.А. Казанский, Е.С. Матусевич. — М.: Энергоатомиздат, 1985. — 488 с.
2. **Мороз, А.П.** Численный подход к решению задач количественного рентген-флуоресцентного анализа образцов сложной геометрии [Текст] / А.П. Мороз, А.С. Серебряков, Я.А. Бердников // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 4 (134). — С. 71–78.
3. **Sood, A.** A new Monte-Carlo assisted approach to detector response functions [Text] / A. Sood, R.P. Gardner // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. — 2004. — Vol. B, № 213. — P. 100 – 104.
4. **Вольдсет, Р.** Прикладная спектрометрия рентгеновского излучения [Текст] / Р. Вольдсет. — М.: Атомиздат, 1977. — 192 с.
5. **Lowe, B.G.** An analytical description of low-energy X-ray spectra in Si(Li) and HPGe detectors [Text] / B.G. Lowe // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. — 2000. — Vol. A, № 439. — P. 247 – 261.
6. **Gross, B.** Monte-Carlo modeling of silicon X-ray detectors [Electronic resource] / B. Gross, G. Bale, B. Lowe, R. Sareen / Official web page of the International Centre for Diffraction Data (ICDD). — Access mode: http://www.icdd.com/resources/axa/vol49/V49_40.pdf
7. **Mesradi, M.** Experimental characterization and Monte Carlo simulation of Si(Li) detector efficiency by radioactive source and PIXE [Electronic resource] / M. Mesradi, A. Elanique A. Nourredine [et al.] / Official web page the NUCLEONICA (Institute for Transuranium Elements (ITU), European Atomic Energy Community). — Access mode: <http://www.nucleonica.net/wiki/images/7/7b/NuTRoNS1-Mesradi.pdf>
8. **Портной, А.Ю.** Об особенностях фона, обусловленных переносом и сбором электронов в Si-детекторе [Текст] / А.Ю. Портной, Г.В. Павлинский, М.С. Горбунов, Ю.И. Сидорова // Научное приборостроение. — 2011. — Т. 21, № 4. — С. 145 – 150.

УДК: 539.12:537.63:537.868

Г.Ф. Копытов, А.В. Погорелов

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПЛОСКОЙ МОНОХРОМАТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЕ И ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В работе [1] сделан последовательный вывод формулы для энергии частицы, усредненной по периоду ее колебаний в поле плоской монохроматической волны. Эта работа возникла в связи с проблемой ускорения заряженной частицы при взаимодействии ультракоротких лазерных импульсов с плазмой. Несомненный интерес представляет обобщение данного рассмотрения при наличии внешнего однородного постоянного магнитного поля $\mathbf{H}$.

В работе [2] рассматривается движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле и поле плоской электромагнитной волны. Была получена формула для средней энергии частицы, движущейся в такой системе. Однако в этой работе энергетические характеристики были изучены недостаточно полно.

Цель настоящей работы — последовательный вывод формулы для энергии частицы, усредненной по периоду колебаний в поле плоской монохроматической волны и постоянном магнитном поле.

Результаты работы могут быть полезны для интерпретации экспериментов с плазмой, помещенной во внешнее однородное магнитное поле.

Движение частицы в поле плоской монохроматической волны и постоянном магнитном поле

Уравнение движения частицы с массой m и зарядом q в поле плоской монохроматической

электромагнитной волны и постоянном магнитном поле имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \right), \quad (1)$$

где $\mathbf{p}$, $\mathbf{v}$ — импульс и скорость частицы.

Энергия частицы определяется из второго интеграла движения:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = q(\mathbf{vE}). \quad (2)$$

Для плоской монохроматической волны [1] и постоянного однородного магнитного поля имеем:

$$\mathbf{E} = [\mathbf{kH}_z]; \quad \mathbf{H}_z = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}; \quad \mathbf{H}_0 = \mathbf{kH}_0;$$

$$E_x = H_y = b_x \cos(\omega\tau + \psi);$$

$$E_y = -H_x = \pm b_y \sin(\omega\tau + \psi); \quad (3)$$

$$(\mathbf{kE}) = (\mathbf{kH}) = 0,$$

где $\mathbf{H}$, $\mathbf{E}$ — напряженности электрического и магнитного полей электромагнитной волны; b_x , b_y — оси эллипса ее поляризации; $\mathbf{H}_0$ — напряженность однородного магнитного поля; $\tau = t - z/c$; ω — круговая частота электромагнитного поля, ψ — некоторая постоянная фаза.

Координатные оси выбраны так, что ось z направлена вдоль направления распространения волны, а оси x и y совпадают с осями эллипса поляризации волны b_x и b_y , причем



$b_x \geq b_y \geq 0$. Верхний (нижний) знак в выражении для E_y соответствует правой (левой) поляризации.

Решая уравнения (1), (2) и используя условия (3), получим:

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{qb_x}{\omega} \sin(\omega\tau + \psi) + \frac{qH_0}{c} y + \\ &+ \left(P_{x0} - \frac{qb_x}{\omega} \sin(\omega_0\tau + \psi) - \frac{qH_0}{c} y_0 \right); \\ p_y &= \mp \frac{qb_y}{\omega} \cos(\omega\tau + \psi) - \frac{qH_0}{c} x + \\ &+ \left(P_{y0} \pm \frac{qb_y}{\omega} \cos(\omega_0\tau + \psi) + \frac{qH_0}{c} x_0 \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Используя (4) и переходя к дифференцированию по τ , получим:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{qb_x c}{\omega\gamma} \sin(\omega\tau + \psi) + \frac{qH_0}{\gamma} y + \\ &+ \frac{c}{\gamma} \left(\chi_x - \frac{qH_0}{c} y_0 \right); \\ \dot{y} &= \mp \frac{qb_y c}{\omega\gamma} \cos(\omega\tau + \psi) - \frac{qH_0}{\gamma} x + \\ &+ \frac{c}{\gamma} \left(\chi_y + \frac{qH_0}{c} x_0 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $\omega_0 = qH_0/\gamma$ — циклотронная частота; постоянные χ_x, χ_y и γ определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \chi_x &= P_{x0} - \frac{qb_x}{\omega} \sin(\omega\tau_0 + \psi); \\ \chi_y &= P_{y0} \pm \frac{qb_y}{\omega} \cos(\omega\tau_0 + \psi); \quad \gamma = \frac{mc(1 - v_{z0}c^{-1})}{\sqrt{1 - v_0^2c^{-2}}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Преобразовывая систему уравнений (5), получим:

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \omega_0^2 x &= \frac{qc}{\gamma} (b_x \mp \eta b_y) \cos(\omega\tau + \psi) + \\ &+ \frac{c\omega_0}{\gamma} (\chi_y + \omega_0 y_0); \\ \ddot{y} + \omega_0^2 y &= \frac{qc}{\gamma} (\pm b_y - \eta b_x) \sin(\omega\tau + \psi) + \\ &+ \frac{c\omega_0}{\gamma} (\chi_x - \omega_0 x_0), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\eta = \omega_0/\omega$.

Решение уравнений системы (7) ищем в виде суммы решений однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения.

Для координат x и y получим выражения:

$$\begin{aligned} x &= R \cos \Phi_{\omega_0} - \frac{q}{\gamma\omega k} \left(\frac{b_x \mp \eta b_y}{1 - \eta^2} \right) \cos \Phi + \\ &+ \frac{c}{\gamma\omega_0} \left(\chi_y + \frac{qH_0}{c} x_0 \right); \\ y &= R \sin \Phi_{\omega_0} + \frac{q}{\gamma\omega k} \left(\frac{\eta b_x \mp b_y}{1 - \eta^2} \right) \sin \Phi - \\ &- \frac{c}{\gamma\omega_0} \left(\chi_x - \frac{qH_0}{c} y_0 \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где $k = \omega/c$, R — «эффективный радиус», связанный с радиусом вращения электрона в области взаимодействия.

Кроме того, здесь используются обозначения:

$$\Phi = \omega\tau + \psi; \quad \Phi_{\omega_0} = \omega_0\tau + \varphi;$$

$$\Phi_0 = \omega\tau_0 + \psi; \quad \Phi_{0\omega_0} = \omega_0\tau_0 + \varphi,$$

где φ — постоянная фаза.

Используя формулы (8) и (4), получим выражения для поперечной составляющей импульса частицы:

$$\begin{aligned} P_x &= \frac{q}{\omega} \left(b_x + \frac{\eta(\eta b_x \mp b_y)}{1 - \eta^2} \right) \sin \Phi + \frac{R\omega_0}{c} \gamma \sin \Phi_{\omega_0}; \\ P_y &= \frac{q}{\omega} \left(\mp b_y + \frac{\eta(b_x \mp \eta b_y)}{1 - \eta^2} \right) \cos \Phi - \frac{R\omega_0}{c} \gamma \cos \Phi_{\omega_0}. \end{aligned}$$

При помощи интеграла движения (2) приходим к следующему выражению для продольной составляющей импульса P_z :

$$P_z = \frac{m^2 c^2}{2\gamma} - \frac{\gamma}{2} + \frac{P_x^2 + P_y^2}{2\gamma}. \quad (9)$$

Отсюда получаем, что

$$P_z = \gamma g,$$

где

$$g = h - \frac{R\omega_0}{c} \frac{q}{\gamma\omega} \left\{ (b_x \mp \eta b_y) \sin \Phi_{\omega_0} \sin \Phi - \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -(\eta b_x \mp b_y) \cos \Phi_{\omega_0} \cos \Phi \} (1 - \eta^2)^{-1} - \quad (10) \\
 & -\frac{1}{4} \left(\frac{q}{\gamma \omega} \right)^2 \frac{b_x^2 - b_y^2}{(1 - \eta^2)^2} \cos 2\Phi; \\
 & h = \frac{1}{2} \left\{ \frac{m^2 c^2}{\gamma^2} - 1 + \left(\frac{R \omega_0}{c} \right)^2 + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\gamma \omega} \right)^2 \frac{(b_x \mp \eta b_y)^2 + (\eta b_x \mp b_y)^2}{(1 - \eta^2)^2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Из начальных условий находим R и φ ; их удобно записать в виде

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{R \omega_0}{c} \right)^2 &= \frac{\chi_x^2 + \chi_y^2}{\gamma^2} + \left(\frac{q}{\gamma \omega} \right)^2 \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \times \\
 & \times \left[(b_x \mp \eta b_y)^2 \cos^2 \Phi_0 + \right. \\
 & \left. + (\eta b_x \mp b_y)^2 \sin^2 \Phi_0 \right] - \\
 & - 2 \frac{q}{\gamma^2 \omega} \frac{\eta}{(1 - \eta^2)} \left[\chi_x (\eta b_x \mp b_y) \sin^2 \Phi_0 + \right. \\
 & \left. + \chi_y (b_x \mp \eta b_y) \cos \Phi_0 \right]; \\
 & \begin{cases} \cos \varphi = \frac{-\chi_y}{\sqrt{\chi_x^2 + \chi_y^2}}; \\ \sin \varphi = \frac{\chi_x}{\sqrt{\chi_x^2 + \chi_y^2}}. \end{cases}
 \end{aligned}$$

Зная P_z , найдем выражение для энергии частицы:

$$\varepsilon = c\gamma(1 + g). \quad (11)$$

Используя (10), найдем точное решение для координаты z :

$$\begin{aligned}
 z &= Z_0 + ch\tau - \\
 & - \frac{R \omega_0}{c} \frac{q}{\gamma \omega k} (1 - \eta^2)^{-2} \left[(b_x \mp \eta b_y) \times \right. \\
 & \times (\cos \Phi \sin \Phi_{\omega_0} - \eta \sin \Phi \cos \Phi_{\omega_0}) + \quad (12) \\
 & \left. + (\eta b_x \mp b_y) (\sin \Phi \cos \Phi_{\omega_0} - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left. - \eta \cos \Phi \sin \Phi_{\omega_0} \right] - \\
 & - \frac{1}{8k} \left(\frac{q}{\gamma \omega} \right)^2 \frac{b_x^2 - b_y^2}{(1 - \eta^2)^2} \sin 2\Phi,
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 Z_0 &= z_0 - ch\tau_0 + \frac{R \omega_0}{c} \frac{q}{\gamma \omega k} (1 - \eta^2)^{-2} \times \\
 & \times \left[(b_x \mp \eta b_y) (\cos \Phi_0 \sin \Phi_{0\omega_0} - \eta \sin \Phi_0 \cos \Phi_{0\omega_0}) + \right. \\
 & \left. + (\eta b_x \mp b_y) (\sin \Phi_0 \cos \Phi_{0\omega_0} - \eta \cos \Phi_0 \sin \Phi_{0\omega_0}) - \right. \\
 & \left. - \frac{1}{8k} \left(\frac{q}{\gamma \omega} \right)^2 \frac{b_x^2 - b_y^2}{(1 - \eta^2)^2} \sin 2\Phi_0. \right.
 \end{aligned}$$

Используя выражения (8) и (9), получим параметрическое выражение для скорости частицы:

$$\begin{aligned}
 v_x &= -R \omega_0 \sin \Phi_{\omega_0} + \frac{q}{\gamma k} \frac{(b_x \mp \eta b_y)}{(1 - \eta^2)} \sin \Phi; \\
 v_y &= R \omega_0 \cos \Phi_{\omega_0} + \frac{q}{\gamma k} \frac{(\eta b_x \mp b_y)}{(1 - \eta^2)} \cos \Phi; \quad (13) \\
 v_z &= \frac{cg}{1 + g}.
 \end{aligned}$$

Из общего вида выражений (8), (11) – (13) видно, что движение частицы представляет собой наложение движения с некоторой постоянной продольной скоростью v_z и колебательного движения с частотой, отличной от частоты поля ω и циклотронной частоты ω_0 .

Учитывая (8), (12) и (13), получим, что осцилляции частицы описываются двумя периодами:

$$T_1 = \frac{2\pi}{\omega} \frac{1+h}{1-\eta}; \quad T_2 = \frac{2\pi}{\omega} \frac{1+h}{1+\eta}.$$

Движение частицы, усредненное по времени

В этом разделе приведем результаты усреднения координат $\mathbf{r}(t)$, скорости $\mathbf{v}(t)$, импульса $\mathbf{p}(t)$ и энергии ε частицы. Поскольку перемещение частицы представляет собой наложение двух видов периодического движения, то усреднять будем по формуле

$$\bar{f}(t) = \sup_{t \rightarrow \infty} \lim_{t} \frac{1}{t} \int_0^t f(t) dt.$$



При усреднении координат получим соотношения

$$\bar{x} = \frac{c}{\gamma\omega_0} \chi_y + x_0;$$

$$\bar{y} = \frac{c}{\gamma\omega_0} \chi_x + y_0;$$

$$\bar{z} = Z_0 + \frac{ch}{1+h} \tau.$$

При усреднении скорости получим:

$$\bar{v}_x = 0; \quad \bar{v}_y = 0; \quad \bar{v}_z = \frac{ch}{1+h}.$$

Анализируя полученные выражения, можно отметить, что поперечная составляющая скорости частицы не зависит от начальных условий, т. е. от точки влета в область взаимодействия.

При усреднении импульса частицы поперечные составляющие импульса будут равны нулю $\bar{P}_x = \bar{P}_y = 0$, а для продольной составляющей получим выражение

$$\begin{aligned} \bar{P}_z = & \frac{\gamma}{1+h} \left[h + h^2 + \right. \\ & + \frac{1}{4} \left(\frac{R\omega_0}{c} \right)^2 \left(\frac{q}{\gamma\omega} \right)^2 (1-\eta^2)^{-2} \times \\ & \times \left((b_x \mp \eta b_y)^2 + (\eta b_x \mp b_y)^2 \right) - \\ & \left. - \frac{1}{32} \left(\frac{q}{\gamma\omega} \right)^4 \left(\frac{b_x^2 - b_y^2}{(1-\eta^2)^2} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Усредняя энергию частицы, получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} = & \frac{c\gamma}{1+h} \left\{ (1+h)^2 + \right. \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{R\omega_0}{c} \right)^2 (1-\eta^2)^{-2} \left((b_x \mp \eta b_y)^2 + \right. \\ & \left. \left. + (\eta b_x \mp b_y)^2 \right) + \frac{1}{32} \left(\frac{q}{\gamma\omega} \right)^4 \left(\frac{b_x^2 - b_y^2}{(1-\eta^2)^2} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Случай круговой и линейной поляризации при отсутствии у частицы начальной скорости

В этом разделе рассмотрим случай, когда частица в начальный момент покоилась ($v_0 = 0$). Тогда выражения из (6) примут вид

$$\gamma = mc; \quad \chi_x = -\frac{qb_x}{\omega} \sin \Phi_0; \quad \chi_y = \pm \frac{qb_y}{\omega} \cos \Phi_0. \quad (15)$$

Для круговой поляризации имеем $b_x = b_y = b/\sqrt{2}$; тогда выражения для h и R примут вид

$$\begin{aligned} \left(\frac{R\omega_0}{c} \right)^2 = & \frac{1}{2} \left(\frac{qb}{mc} \right)^2 \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2 = \\ = & \frac{1}{2} \left(\frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I \lambda^2 \right) \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2 \equiv \\ \equiv & \frac{\mu}{2} \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} h = & \frac{\mu}{4} \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1-\eta^2)^2} + \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2 \right); \\ \mu = & \frac{2q^2}{\pi m^2 c^5} I \lambda^2, \end{aligned} \quad (17)$$

где $I = cb^2/8\pi$ — интенсивность электромагнитной волны; $\lambda = 2\pi c/\omega$ — длина волны.

Периоды осцилляции частицы в этом случае выражаются как

$$\begin{aligned} T_1 = & T(1+\eta)^{-1} \times \\ & \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1-\eta^2)^2} + \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2 \right) \right]; \\ T_2 = & T(1-\eta)^{-1} \times \\ & \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1-\eta^2)^2} + \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1-\eta^2)} \right)^2 \right) \right], \end{aligned} \quad (18)$$

где $T = 2\pi/\omega$.

Подставляя выражения (15) – (17) в (14), получаем формулу для средней энергии первоначально покоящейся частицы в волне круговой поляризации и постоянном магнитном поле:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} - mc^2 = \frac{1}{2} mc^2 \mu \times \\ \times \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1 - \eta^2)^2} + \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1 - \eta^2)} \right)^2 \right) + \right. \\ \left. + \frac{\mu}{4} \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1 - \eta^2)} \right)^2 \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \times \right. \\ \left. \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{(1 \mp \eta)^2}{(1 - \eta^2)^2} + \left(1 + \frac{\eta(\eta \mp 1)}{(1 - \eta^2)} \right)^2 \right) \right]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Как видно из (18) и (19), период осцилляций частицы и ее средняя энергия не зависят от начальной фазы волны с круговой поляризацией.

В случае линейной поляризации $b_x = b$, $b_y = 0$ (по-прежнему для неподвижной в начальный момент времени частицы) получим:

$$\gamma = mc; \chi_x = -\frac{qb}{\omega} \sin \Phi_0; \chi_y = 0. \quad (20)$$

$$\left(\frac{R\omega_0}{c} \right)^2 = \mu \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right); \quad (21)$$

$$h = \frac{\mu}{4} \left(\frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + 2 \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \right). \quad (22)$$

Периоды осцилляций частицы будут выражаться как

$$\begin{aligned} T_1 = T(1 + \eta)^{-1} \times \\ \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + 2 \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \right) \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_2 = T(1 - \eta)^{-1} \times \\ \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + 2 \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Подставляя выражения (20) – (22) в (14), получаем зависимость средней энергии первоначально покоящейся частицы в волне линейной поляризации:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} - mc^2 = \frac{mc^2 \mu}{4} \left\{ \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + \right. \\ \left. + 2 \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\mu}{(1 - \eta^2)^2} \left(\frac{1 - \eta^2}{8} + 2(1 + \eta^2) \times \right. \right. \\ \left. \times \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \right) \times \\ \left. \times \left[1 + \frac{\mu}{4} \left(\frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + \right. \right. \right. \\ \left. \left. + 2 \left(\frac{\sin^2 \Phi_0}{1 - \eta^2} + \frac{\eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right) \right) \right]^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Рассмотрим два случая. Если $\eta < 1$, то максимальная средняя энергия получается при фазе $\Phi_0 = \pi/2$ или $\Phi_0 = 3\pi/2$. Минимальная средняя энергия в этом же случае ($\eta < 1$) получается при фазе $\Phi_0 = 0$ или $\Phi_0 = \pi$.

При условии $\eta > 1$ максимальная средняя энергия получится при начальной фазе $\Phi_0 = 0$ или $\Phi_0 = \pi$, а минимальная средняя энергия будет принимать свое значение при условии, что начальная фаза будет $\Phi_0 = \pi/2$ или $\Phi_0 = 3\pi/2$.

Из выражений (23) и (24) видно, что период осцилляций и средняя энергия частицы зависят



от начальной фазы в линейно поляризованной электромагнитной волне.

При усреднении (24) по начальной фазе получим выражение для средней энергии частицы, движущейся в электромагнитном поле линейной поляризации и постоянном магнитном поле:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\varepsilon} \rangle - mc^2 = \frac{mc^2 \mu}{4} & \left\{ 6 \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} - \right. \\ & - \frac{1}{2} \left[8\mu \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} + 32(1 + \eta^2) - \right. \\ & \left. \left. - \mu(1 - \eta^2) - 40\mu \frac{1 + \eta^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] \times \right. \\ & \times \left[4(1 - \eta^2)^2 + \mu(1 + 3\eta^2) \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ & \left. \times \left[4(1 - \eta^2)^2 + \mu(3 + \eta^2) \right]^{\frac{1}{2}} \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

На рис. 1 приведены зависимости средних кинетических энергий электрона от интенсивности плоской монохроматической электромагнитной волны линейной поляризации (формула (25)) и круговой поляризации (формула (19)) при различных соотношениях циклотронной и круговой частот. На рис. 1,а приведен график, построенный при условии, что $\eta \ll 1$; полученные данные совпадают с приведенными в работе [1], т. е. частица ведет себя как при отсутствии магнитного поля. На рис. 1,б построены графики при условии, что $\eta \gg 1$. В этом случае видно, что средняя кинетическая энергия медленно изменяется при увеличении интенсивности электромагнитной волны.

Итак, проведен подробный анализ задачи о движении заряженной частицы во внешнем заданном поле плоской электромагнитной волны и постоянном магнитном поле. Исследованы различные случаи начальных условий движения заряженной частицы, поляризации волны, отношения частот циклотронной и круговой. Рас-

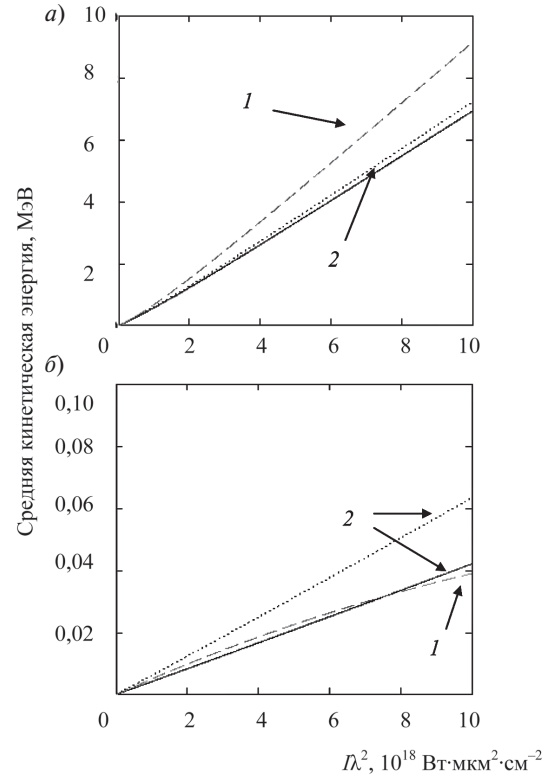


Рис. 1. Зависимости средней кинетической энергии частицы от интенсивности электромагнитного поля при условиях, что $\eta \ll 1$ (а) и $\eta \gg 1$ (б), для линейной (1) и круговой (2) поляризации (формулы (25) и (19) соответственно)

смотренное выше одночастотное приближение предполагает, что энергия ускоряющего поля значительно превосходит энергию, приобретаемую частицей. Это позволяет не учитывать обратного влияния ускоряемого тока на поле.

В рассматриваемом случае движение частицы представляет собой наложение движения с постоянной скоростью и колебательного движения с двумя собственными частотами, отличающимися от частоты электромагнитного поля и циклотронной частоты. Когда круговая частота электромагнитного поля значительно превышает циклотронную частоту вращения частицы в магнитном поле, то все формулы принимают вид формул, приведенных в работе [1], т. е. движение частицы практически теряет зависимость от напряженности магнитного поля. При значительном увеличении напряженности магнитного поля средняя кинетическая энергия заряженной частицы теряет зависимость от интенсивности электромагнитной волны. При приближении циклотронной частоты к

круговой наблюдается явление циклотронного авторезонанса, впервые полученное и описанное А.А. Коломенским и А.Н. Лебедевым [4] и независимо от них — В.Я. Давыдовским [5]. Данное явление требует особого рассмотрения,

выходящего за рамки данной статьи. Явление подробно описывается во многих работах, например в статьях [6] и [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-04-96523-Р-ЮГ-Ц).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Андреев, С.Н.** О движении заряженной частицы в плоской монохроматической электромагнитной волне [Текст] / С.Н. Андреев, В.П. Макаров, А.А. Рухадзе // Квантовая электроника.— 2009. — Вып. 39, № 1.— С. 68–72.
2. **Копытов, Г.Ф.** Об энергетических характеристиках электрона в поле Редмонда [Текст] / Г.Ф. Копытов, В.Б. Тлячев// Известия высших учебных заведений. Физика. — 1985. — № 9. —С. 120 — 121.
3. **Ландау, Л.Д.** Теория поля [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.— М.: Наука, 2004.— 509 с.
4. **Коломенский, А.А.** Авторезонансное движение частицы в плоской электромагнитной волне [Текст] /

А.А. Коломенский, А.Н. Лебедев // ДАН СССР. — 1962. — Т. 145. — С. 1259 — 1261.

5. **Давыдовский, В.Я.** О возможности резонансного ускорения заряженных частиц электромагнитными волнами в постоянном магнитном поле [Текст] / В.Я. Давыдовский // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 43, № 3. — С. 886 — 888.

6. **Милантьев, В.П.** Явление циклотронного авторезонанса и его применения [Текст] / В.П. Милантьев// Успехи физических наук.—1997.— Т. 167, № 1.— С. 3 — 16.

7. **Милантьев, В.П.** Ускорение электронов в режиме циклотронного авторезонанса [Текст] / В.П. Милантьев, С.П. Степина// Динамика сложных систем — XXI век. — 2009.— № 4.— С. 39 — 51.

УДК 532.372.082.5: 628.953.2

*Д.В. Кизеветтер, А.Ю. Савина,
В.М. Левин, Г.Г. Баскаков*

ИЗМЕРЕНИЕ ЗАТУХАНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ, АКТИВИРОВАННЫХ ФЛЮОРЕСЦИРУЮЩИМ КРАСИТЕЛЕМ

Коэффициент затухания излучения — это важная характеристика волоконных световодов, и существуют международные и российские стандарты по определению затухания излучения в кварцевых и полимерных световодах [1–3]. Однако физические свойства активных волоконных световодов существенно отличаются от свойств пассивных оптических волокон вследствие преобразования спектральных характеристик распространяющегося излучения. Известно, что параметры полимерных оптических волокон, активированных флуоресцирующими красителями (ФПОВ), которые измерены различными способами, могут отличаться. Помимо потерь, обусловленных собственными потерями материала оптического волокна и присущими данному волокну кабельными потерями, возникают дополнительные, связанные с поглощением излучения красителем. Метод укорачивания для измерения затухания в волоконных световодах, представленный, в частности, в ГОСТе [1], является разрушающим, поэтому неприменимым для действующих волоконно-оптических систем, например для волоконно-оптических усилителей или датчиков. Использование рефлектометрических способов, основанных на регистрации обратнорассеянного излучения, затруднено в диапазоне длин волн поглощения красителя вследствие большой величины затухания, а в диапазоне флуоресценции красителя возникает дополнительная проблема, связанная с необходимостью учета различной величины затухания на длинах волн накачки и флуоресценции.

Метод локального бокового освещения [4–7] флуоресцирующего волокна, известный в англоязычной литературе как SIF (Side-Illumination Fluorescence), который заключается в освещении ФПОВ узконаправленным излучением (с длиной волны, соответствующей диапазону поглощения красителя) перпендикулярно оси волокна, является неразрушающим и легко реализуется на практике в случае отсутствия защитной оболочки ФПОВ. Изменяя расстояние l_p от выходного торца до места облучения ФПОВ и измеряя зависимость мощности выходящего излучения от l_p , можно определить коэффициент затухания излучения в диапазоне длин волн флуоресценции. К недостатку такого способа следует отнести высокую чувствительность к локальным неоднородностям ФПОВ. Небольшие флуктуации диаметра сердцевин ФПОВ или концентрации красителя приводят к флуктуациям мощности флуоресценции, что снижает точность измерения затухания. При боковом локальном освещении на точность измерений влияют также дефекты формы сердцевин и дефекты отражающей оболочки, в частности царапины на наружной поверхности ФПОВ. Важно, что такой способ позволяет измерять затухание в ФПОВ только при равновесном (невозбужденном) состоянии молекул красителя в световоде за пределами области локального возбуждения. Измерить затухание при возбужденном состоянии молекул красителя, а также снизить указанные виды влияний на точность измерений можно за счет освещения протяженного участка световода путем использования методики, описанной далее.

В данной работе полимерный волоконный световод, активированный флуоресцирующим красителем, освещался источником излучения, создающим равномерную освещенность в пределах заданной длины ФПОВ. Часть волоконного световода была закрыта светонепроницаемым экраном. Изменяли длину освещаемого участка l_s ФПОВ и производили измерение спектрального распределения интенсивности выходного излучения $I(l_s, \lambda)$. Исследования проводились при различных отражающих свойствах поверхности, на которой был расположен волоконный световод. Изменение интенсивности излучения I по длине ФПОВ, по аналогии с описанием, приведенным в работе [8], можно выразить следующим уравнением:

$$\frac{dI}{dx} = -\alpha I + hp_l + gh p_l I, \quad (1)$$

где α — коэффициент затухания излучения; h — коэффициент, характеризующий интенсивность излучения флуоресценции, распространяющегося далее по световоду; p_l — мощность излучения накачки на единицу длины; g — коэффициент усиления среды; x — ось координат, сонаправленная с осью волоконного световода.

Все коэффициенты, входящие в формулу (1), зависят от длины волны и концентрации красителя; коэффициент h зависит также от диаметра волоконного световода. Величины, входящие в формулу (1), измеряются в следующих единицах: x — м, I — Вт/м², α — м⁻¹, p_l — Вт/м, h — м⁻², g — м²/Вт.

Равенство (1) является линейным дифференциальным уравнением первого порядка, решение которого хорошо известно. Введем α_{eq} как

$$\alpha_{eq} = \alpha - hgp_l.$$

Тогда принимая во внимание, что $I(l_s = 0) = 0$, получаем:

$$I(l_s) = \frac{hp_l}{\alpha_{eq}} (1 - \exp(-\alpha_{eq} l_s)).$$

Таким образом, экспериментально измерив зависимость $I(l_s)$, можно определить эквивалентную величину затухания α_{eq} . Если ввести нормировку $I(l_s \rightarrow \infty) = 1$, то при $\alpha_{eq} l_s < 1$, т. е. на начальном участке $I(l_s)$, имеет место линейная зависимость I от l_s : $I(l_s) \approx \alpha_{eq} l_s$.

Введенная величина α_{eq} характеризует затухание излучения с учетом возможного усиления за счет вынужденного излучения и нелинейности эффектов испускания и поглощения относительно интенсивности накачки. В частности, на измеряемую величину α_{eq} может оказать влияние изменение спектра флуоресценции и поглощение, наведенное светом накачки [9] (иногда называемое «поглощением с возбужденных состояний»). Таким образом, метод локального бокового освещения (SIF) принципиально отличается от предлагаемого способа. При локальном возбуждении излучение флуоресценции также возникает локально и при дальнейшем распространении по волоконному световоду затухает, а при освещении протяженного участка ФПОВ имеет место как затухание, в частности наведенное накачкой, так и оптическое усиление. Таким образом, измеряемая величина α_{eq} является характеристикой световода с активной средой при заданном уровне интенсивности накачки. Коэффициент эквивалентного затухания α_{eq} может быть как положительным — в этом случае в ФПОВ доминирует поглощение, так и отрицательным — тогда ФПОВ обладает свойством усиления оптических сигналов. При малой плотности мощности накачки p_l величина α_{eq} соответствует затуханию в ВС с учетом флуоресценции красителя без вынужденного усиления. Для того, чтобы различать методы с боковым освещением, целесообразно ввести уточнение в существующую аббревиатуру: для локального метода — LSIF, а для рассмотренного выше интегрального — ISIF. Полагаем, что измерения по методу ISIF также представляют интерес для множества различных практических применений, как и LSIF.

Наши экспериментальные исследования производились на ФПОВ, изготовленных из полиметилметакрилата с диаметром сердцевины 950 мкм, активированных родамином 6Ж (Р6Ж) с концентрациями 5 и 25 мг/кг. Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Световод 1 был уложен на подстилающую поверхность 2. Над световодом, вплотную к отражающей оболочке ФПОВ, был расположен непрозрачный экран 4, закрывающий от излучения накачки весь световод, кроме участка длиной l_s , подключаемого через соединитель 5

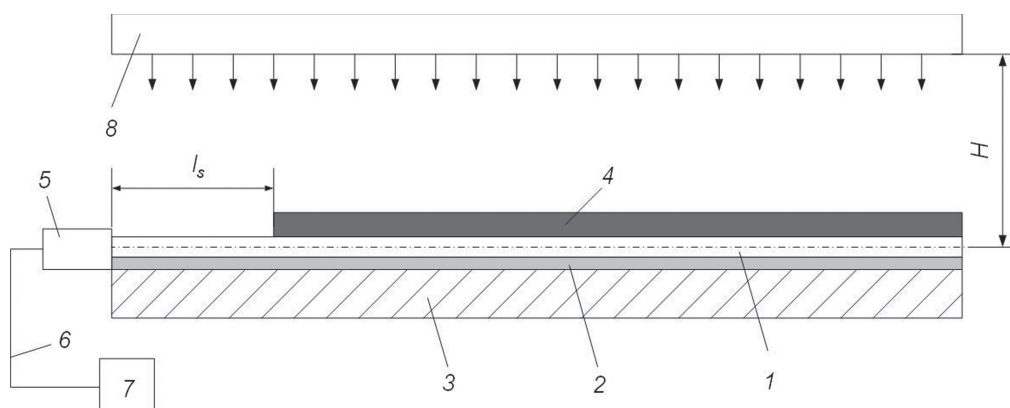


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 – исследуемый флуоресцирующий световод, 2 – подстилающая поверхность, 3 – оптический стол, 4 – непрозрачный экран, 5 – волоконно-оптический соединитель, 6 – приемный световод спектрометра, 7 – спектрометр AvaSpec-2048, 8 – протяженный источник излучения накачки

Параметры активированного полимерного волокна при его освещении электролюминесцентными лампами

λ , нм	Материал подстилающей поверхности	α_{eq} , 10^{-3} см^{-1}		I_m , о.е.	
		$C_1 = 5 \text{ мг/кг}$	$C_2 = 25 \text{ мг/кг}$	$C_1 = 5 \text{ мг/кг}$	$C_2 = 25 \text{ мг/кг}$
555	Ч	64 ± 2	370 ± 30	$17,7 \pm 0,2$	$3,32 \pm 0,06$
	Б	96 ± 2	340 ± 10	$39,7 \pm 0,4$	$7,01 \pm 0,07$
	Ф	93 ± 2	350 ± 10	$31,9 \pm 0,2$	$6,66 \pm 0,05$
600	Ч	$1,95 \pm 0,07$	$6,2 \pm 0,2$	286 ± 6	381 ± 5
	Б	$2,76 \pm 0,05$	$6,1 \pm 0,2$	495 ± 5	780 ± 10
	Ф	$2,17 \pm 0,03$	$5,7 \pm 0,1$	471 ± 3	878 ± 7
650	Ч	$0,5 \pm 0,1$	$1,9 \pm 0,1$	115 ± 30	133 ± 5
	Б	$1,3 \pm 0,1$	$2,1 \pm 0,1$	119 ± 5	260 ± 10
	Ф	$0,96 \pm 0,03$	$2,0 \pm 0,1$	124 ± 2	290 ± 5

Обозначения: λ – расчетная длина волны флуоресценции; α_{eq} – коэффициент эквивалентного затухания; I_m – максимальная интенсивность излучения; C_1 , C_2 – значения концентрации красителя-активатора (родамин 6Ж); Ч, Б, Ф – черная ткань, белая бумага, алюминиевая фольга.

к приемному световоду 6 спектрометра 7 типа AvaSpec-2048. В качестве протяженного источника излучения накачки 8 использовались люминесцентные лампы ЛБ-60 – 12 штук, расположенные попарно на расстоянии 0,2 м друг от друга в два ряда, с расстоянием между рядами 2,5 м, на высоте $H = 2,8$ м над исследуемым ФПОВ, а также две линейки планарных (SMD RT3528) светодиодов сине-зеленого свечения (120 шт/м), расположенных симметрично относительно исследуемых ФПОВ; световоды были расположены в два ряда на расстоянии 0,005 м друг от друга и находились на высоте 0,065 м над ФПОВ. Неравномерность освещен-

ности вдоль ФПОВ, измеренная сканирующим фотоприемником, в первом случае не превышала 5 %, во втором – 10 %. Спектральный диапазон излучения люминесцентных ламп составлял 400 – 700 нм с максимумом спектральной плотности люминесценции на длине волны $\lambda_{smax} = 580$ нм и локальными максимумами [10], а у использованных светодиодов – $\lambda_{smax} = 520$ нм с полушириной 30 нм. В качестве подстилающей поверхности для ФПОВ использовались три материала: лист белой бумаги с коэффициентом отражения k , приблизительно равным 90 % и с диффузной индикатрисой рассеяния; алюминиевая фольга с $k \approx 88$ % и

черная ткань с $k \approx 5\%$ (см. таблицу). Используемые типы подстилающей поверхности условно можно назвать поверхностями с преимущественным поглощением и преимущественным отражением излучения.

В связи с тем, что спектральный диапазон флуоресценции красителя Р6Ж составляет 525 – 675 нм, для расчетов параметров ФПОВ были выбраны три длины волны флуоресценции: 555, 600 и 650 нм. Две из них приблизительно соответствовали коротковолновой и длинноволновой границам диапазона длин волн флуоресценции красителя Р6Ж, а $\lambda = 600$ нм – середине диапазона, что позволило оценить тенденцию изменения измеряемых величин в зависимости от значений λ . Полученные зависимости интенсивности выходящего из световодов излучения от длины освещаемого участка для двух различных источников излучения накачки при $\lambda = 555$ нм приведены на рис. 2, 3. Для определения эквивалентного коэффициента затухания α_{eq} экспериментальные данные были аппроксимированы функцией

$$I(l_s) = I_m(1 - \exp(-\alpha_{eq}l_s)). \quad (3)$$

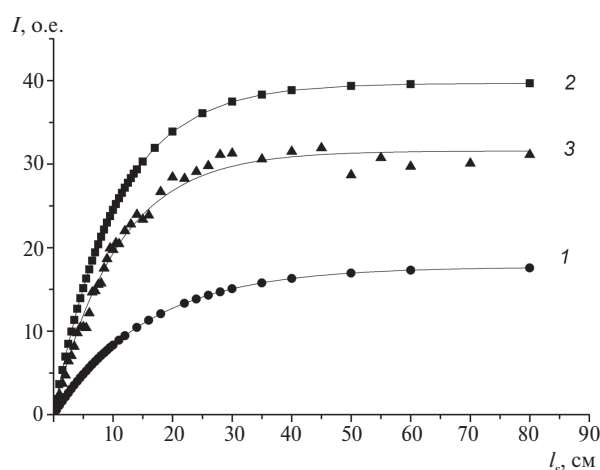


Рис. 2. Зависимость интенсивности выходного излучения от длины освещенного участка активированного оптоволоконного кабеля при накачке излучением люминесцирующих ламп для различных типов подстилающей поверхности:

1 – черная ткань, 2 – белая бумага, 3 – алюминиевая фольга; эксперимент (символы) и аппроксимация функцией (3) (линии); длина волны – 555 нм, концентрация активатора-красителя 5 мг/кг

Методом оптимизации [11] по двум параметрам с использованием компьютерной программы для построения графиков и статистического анализа Origin 8.1 были определены величины I_m и α_{eq} , при которых достигалось минимальное среднеквадратическое отклонение функции (3) от полученных экспериментальных данных. Результаты измерений для случая освещения ФПОВ излучением электролюминесцентных ламп приведены в таблице. Максимальное значение I_m дано в относительных единицах; погрешности измерений являются статистическими при аппроксимации экспериментальных данных функцией (3).

Изменение интенсивности излучения накачки I_p осуществлялось за счет изменения силы тока, протекающего через светодиодную линейку. В результате измерений интенсивности I_p с помощью спектрометра были определены величины κI_{pmax} , где $\kappa = 0,24 - 1,00$, I_{pmax} – максимальное значение I_p (см. подпись к рис. 3).

При использовании белой бумаги в качестве материала подстилающей поверхности была получена следующая зависимость величины α_{eq} от интенсивности накачки:

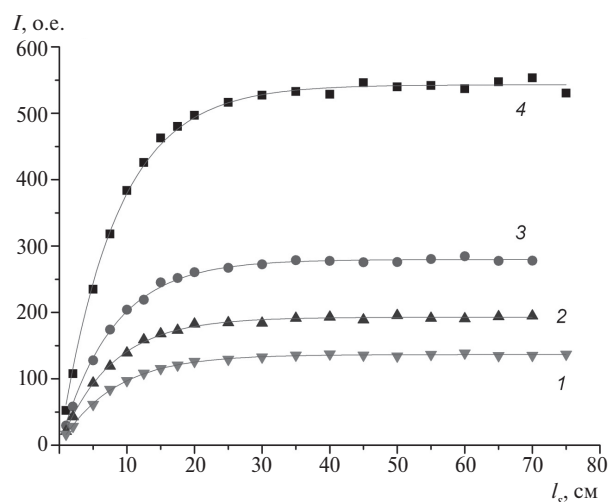


Рис. 3. Зависимость интенсивности выходного излучения от длины освещенного участка активированного оптоволоконного кабеля при светодиодной накачке с различной интенсивностью κI_{pmax} ;

значения κ : 0,24 (1), 0,35 (2), 0,53 (3), 1,00 (4); длина волны – 555 нм; концентрация активатора-красителя 5 мг/кг; эксперимент (символы) и аппроксимация функцией (3) (линии); подстилающий материал – белая бумага



I_p , о.е.	α_{eq} , см ⁻¹
$0,24 I_{pmax}$	$0,124 \pm 0,002$
$0,35 I_{pmax}$	$0,137 \pm 0,003$
$0,53 I_{pmax}$	$0,128 \pm 0,002$
$1,00 I_{pmax}$	$0,120 \pm 0,002$

Анализ полученных данных позволяет предположить, что зависимость α_{eq} от интенсивности накачки определяется двумя эффектами: во-первых, ростом поглощения в диапазоне длин волн флуоресценции, которое наведено излучением накачки [9], и во-вторых, возникновением вынужденного излучения, приводящего к снижению значения эквивалентного затухания.

Для пересчета величины затухания, измеренного в обратных сантиметрах, в децибелы на километр, можно использовать следующую формулу:

$$\alpha \text{ (дБ/км)} = 10^6 \alpha \text{ (см}^{-1}\text{)} / \ln(10) \approx 4,343 \cdot 10^5 \alpha \text{ (см}^{-1}\text{)}.$$

В частности, значение $\alpha_{eq} = 0,37 \text{ см}^{-1}$ соответствует приблизительно 161000 дБ/км, а $0,0005 \text{ см}^{-1} - 217 \text{ дБ/км}$.

Вследствие зависимости α_{eq} от интенсивности накачки и потерь в оптической оболочке ФПОВ, измеряемая величина эквивалентного затухания зависит от отражающей способности подстилающей поверхности. Выбор интенсивности накачки зависит от того, какие параметры ФПОВ необходимо определить. При малых интенсивностях I_p измеряемая величина α_{eq} соответствует режиму распространения излу-

чения в ФПОВ без вынужденного излучения. Использование высокой интенсивности накачки дает возможность оценить величину усиления сигналов в ФПОВ.

Величина α_{eq} зависит также от спектра излучения накачки вследствие различного поглощения излучения накачки красителем и зависимости наведенного поглощения в диапазоне флуоресценции от длины волны и интенсивности излучения накачки. Поэтому коэффициенты α_{eq} , измеренные при использовании различных источников излучения, могут отличаться.

Недостатком рассмотренного метода является невозможность его использования при малой длине отрезка ФПОВ, так как аппроксимация зависимости (2) на начальном участке не позволяет провести экстраполяцию в область насыщения зависимости $I(I_s)$.

Предложенный метод не является альтернативой методу LSIF. Совместное использование обоих методов дает возможность получить дополнительные сведения о затухании излучения в флуоресцирующих волокнах.

Дальнейшее развитие теории поглощения и излучения света в флуоресцирующих волокнах с учетом физических свойств красителей и использование интегрального метода бокового освещения при различных интенсивностях излучения накачки совместно с методом локального возбуждения позволит получить новые сведения о параметрах ФПОВ, необходимые при проектировании волоконно-оптических усилителей, лазеров и других устройств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **ГОСТ 26814-86.** Кабели оптические. Методы измерения параметров [Текст]. — Введ. 1987. — 01—01. — М.: Изд-во стандартов, 1986. — 32 с.
2. **Ziemann, O.** POF handbook. Optical short range transmission systems [Text] / O. Ziemann, J. Krauser, P.E. Zamzow [et al.] // Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. — 884 p.
3. **Кугушев, А.И.** Дифференциальные характеристики многомодовых градиентных волоконных световодов и методы их измерения [Текст] / А.И. Кугушев, А.А. Керимов, М.Я. Яколев // Зарубежная радиоэлектроника. — 1983. — № 7. — С. 54—74.
4. **Майер, Г.В.** Активные полимерные волокна с органическими красителями. Генерация и уси-

ние когерентного излучения [Текст] / Г.В. Майер, Т.Н. Копылова, В.А. Светличный [и др.] // Квантовая электроника. — 2007. — Т. 37. — № 1. — С. 53—59.

5. **Sumida, S.** A new method of optical fiber loss measurement by the side-illumination technique [Text] / S. Sumida, H. Murata, Y. Katsuyama // Journal of Lightwave Technology. — 1984. — Vol. 2. — No. 5. — P. 642—646.
6. **Kruhlak, R.J.** Side-illumination fluorescence (SIF) spectroscopy studies of aggregation ISQ dye-doped polymer optical fibers [Text] / R.J. Kruhlak, M.G. Kuzyk // SPIE Proc. — 1999. — Vol. 3799. — P. 312—319.
7. **Geetha, K.** Loss characterization in Rhodamine 6G doped polymer film waveguide by side illumination fluorescence [Text] / K. Geetha, M. Rajesh, V.P. Nampoori

[et al.] // Journal of Optics A: Pure and Applied Optics. — 2004. — Vol. 6. — No 4. — P. 379–383.

8. **Агравал, Г.** Нелинейная волоконная оптика [Текст] / Г. Агравал. — М.: Изд-во «Мир», 1996. — 323 с.

9. **Басс, М.** Лазеры на красителях [Текст] / М. Басс, Т. Дейч, М. Вебер // УФН. — 1971. — Т. 105. — № 3. — С. 521–573.

10. **Девярых, Э.В.** Люминесцентные лампы. Люминофоры и люминофорные покрытия [Текст] / Э.В. Девярых, В.Ф. Дадонов. — Саранск: Изд-во Мордов. ун-та, 2007. — 73 с.

11. **Васильев, Ф.П.** Методы оптимизации [Текст] / Ф.П. Васильев. — М.: Изд-во «Факториал Пресс», 2002. — 824 с.

УДК 539.125.17; 539.126.17

*Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов, В.Г. Рябов,
Ю.Г. Рябов, В.М. Самсонов*

ИЗМЕРЕНИЕ СВОЙСТВ ЛЕГКИХ АДРОНОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИЯХ 39,0 И 62,4 ГэВ

Согласно представлениям стандартной модели и квантовой хромодинамики (КХД), материя состоит из партонов: кварков и глюонов. Кварки представляют собой элементарные «блоки» материи, в то время как глюоны являются переносчиками сильного взаимодействия между ними. Кварки и глюоны формируют адроны и находятся в состоянии конфайнмента (не наблюдаются в свободном состоянии). Согласно современным представлениям об эволюции Вселенной, материя, образовавшаяся непосредственно после Большого взрыва, состояла из кварков, глюонов, фотонов и лептонов; при этом кварки и глюоны существовали в свободном несвязанном состоянии.

Столкновения ионов при высоких энергиях сопровождаются фазовым переходом, в результате которого кварки и глюоны могут на короткое время считаться свободными частицами, а это позволяет изучать свойства материи в первичном состоянии [1]. Если достаточно нагреть и сжать ядерную материю, то нейтроны и протоны в ядрах начнут перекрываться вследствие своих конечных размеров. При достижении таких условий кварки уже нельзя приписать к какому-либо конкретному нуклону, и их можно рассматривать как свободные частицы. При таких условиях систему можно анализировать как газ квазисвободных кварков и глюонов. Данное состояние вещества было названо кварк-глюонной плазмой (КГП) в связи с некоторыми аналогиями с обычной плазмой [1].

Бурное развитие ускорительной техники позволило начать изучение взаимодействий тяжелых ионов при высоких энергиях. Отдельного внимания в этом контексте заслуживает ускоритель RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider), Брукхейвен, США [2]. Уже первые эксперименты на коллайдере RHIC показали, что плотность энергии, достигаемая в столкновениях тяжелых ядер при его максимальной энергии ($\sqrt{s_{NN}} = 200$ ГэВ), превышает значение, необходимое для фазового перехода [1]. Физические результаты, полученные к 2005 году, позволили всем коллаборациям на RHIC сделать заявление об обнаружении кварк-глюонной плазмы. Одним из признаков образования КГП на RHIC стало обнаружение сильного подавления выхода адронов в центральных столкновениях тяжелых ядер. Данный эффект получил название эффекта гашения струй и впервые был обнаружен в центральных столкновениях ядер золота (Au + Au) при энергии $\sqrt{s_{NN}} = 130$ ГэВ [3].

Мотивацией для изучения КГП при энергиях порядка 20–100 ГэВ является более детальное изучение фазовой диаграммы состояния КХД материи и поиск критической точки перехода к деконфайнменту. Измерения при данных энергиях также необходимы для того, чтобы изучить энергетическую зависимость эффекта гашения струй.

Одно из первых систематических исследований по данной тематике было сделано

на ускорителе AGS (Alternating Gradient Synchrotron) в Брукхейвене, затем эстафету принял ускоритель SPS (Super Proton Synchrotron) в ЦЕРНе. В наши дни наиболее интересные данные поступают с ускорителя RHIC. К настоящему времени ускорителем RHIC накоплены объемы данных по столкновениям пучков ядер золота при энергиях 19,6; 27,0; 39,0 и 62,4 ГэВ.

В настоящей статье представлены инвариантные спектры рождения по поперечному импульсу и факторы ядерной модификации для π^0 - и ϕ -мезонов, полученные во взаимодействиях ядер золота при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 39,0$ и 62,4 ГэВ на основе данных эксперимента ФЕНИКС [4] на коллайдере RHIC.

Эксперимент ФЕНИКС на коллайдере RHIC

Установка ФЕНИКС [4] представляет собой сложный экспериментальный комплекс, предназначенный для детектирования и идентификации заряженных и нейтральных частиц, а также для измерения их импульсов и энергий.

Координаты точки взаимодействия ядер и центральность столкновений определяются путем анализа сигналов с пучковых счетчиков [5]. Каждый такой сигнал пропорционален множественности родившихся заряженных частиц.

Приводим объемы экспериментальных данных, полученные экспериментом ФЕНИКС во взаимодействиях ядер золота при энергиях 39,0 и 62,4 ГэВ:

Энергия $\sqrt{s_{NN}}$, ГэВ	Число событий, млн.
39,0	350
62,4	700

Для измерения характеристик заряженных частиц в указанном эксперименте реализована трековая система, основными элементами которой являются дрейфовые и падовые камеры. Времяпролетная система эксперимента используется для идентификации заряженных частиц и представляет собой комплекс из органических сцинтилляционных детекторов. Надежное разделение K - и π -мезонов обеспечивается благодаря высокому временному разрешению системы [6].

Измерение выходов нейтральных пионов производится в канале $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ при помощи электромагнитного калориметра [7] спектрометра ФЕНИКС. Электромагнитный калориметр состоит из восьми секторов (шесть «PbSc» и

два сектора «PbGl») и покрывает 0,35 единиц по псевдобыстроте и $22,5^\circ$ по азимутальному углу. Сегментация калориметра имеет размеры $\approx 5,5 \times 5,5$ см, что позволяет надежно разделять два фотона от распада π^0 -мезона вплоть до значений поперечных импульсов p_t 12 – 16 ГэВ/с.

Для восстановления ϕ -мезонов в адронном канале распада $\phi \rightarrow K^+ K^-$ все треки, восстановленные в пределах одного события, комбинируются в пары, и каждому присваивается масса заряженного K -мезона. Идентификация каонов позволяет улучшить отношение сигнала к фону, но при этом объем доступных данных уменьшается в пять раз, что связано с малым акцептансом времяпролетной системы. В связи с этим использование идентифицированных каонов рационально проводить только в условиях высокого уровня комбинаторного фона (при величине отношения сигнал/фон меньшей 1/200) [8, 9], который присутствует в области малых поперечных импульсов ($p_t < 2,0$ ГэВ/с).

Результаты измерений

На рис. 1 представлены инвариантные спектры рождения по поперечному импульсу, измеренные в столкновениях ядер золота для π^0 -мезонов при энергиях 39,0 и 62,4 ГэВ; ϕ -мезонов – при энергии 62,4 ГэВ.

Партоны, рожденные в жестком взаимодействии, перед фрагментацией проходят через слой плотной, горячей, сильно воздействующей среды и при этом теряют часть своей энергии на испускание глюонов. Именно этот эффект и приводит к общему уменьшению числа частиц, образующихся с большими поперечными импульсами.

Количественное описание этого эффекта удобно провести, исследуя фактор ядерной модификации R_{AA} , который определяется как отношение числа рожденных частиц в случае столкновения ионов, к числу частиц такого же сорта в случае протон-протонных столкновений. Выражение для R_{AA} также необходимо разделить на число парных неупругих бинарных столкновений при данной центральности столкновения:

$$R_{AA}(p_T) = dN_{AA} / (\langle N_{\text{столкн}} \rangle dN_{pp}),$$

где $dN_{AA}(dN_{pp})$ – выход частиц в столкновениях $A + A$ ($p + p$) в заданном интервале по

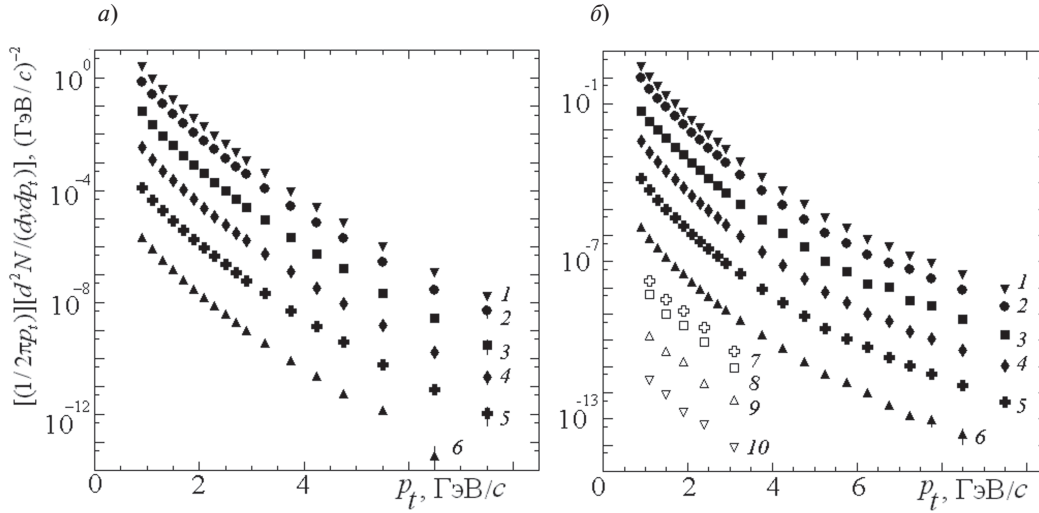


Рис. 1. Инвариантные спектры рождения π^0 -мезонов в столкновениях ядер золота при энергии 39,0 ГэВ (а) и π^0 -мезонов и ϕ -мезонов в столкновениях ядер золота при энергии 62,4 ГэВ (б).
Затухающие маркеры соответствуют π^0 -мезонам, пустые — ϕ -мезонам.
Классы событий по центральности и масштабирующие множители: (0 – 85%)·10⁰ (1), (0 – 10%)·10⁻¹ (2), (10 – 20%)·10⁻² (3), (20 – 40%)·10⁻³ (4), (40 – 60%)·10⁻⁴ (5), (60 – 85%)·10⁻⁵ (6), (0 – 83,7%)·10⁻⁷ (7), (0 – 20%)·10⁻⁸ (8), (20 – 40%)·10⁻⁹ (9), (40 – 83,7%)·10⁻¹⁰ (10)

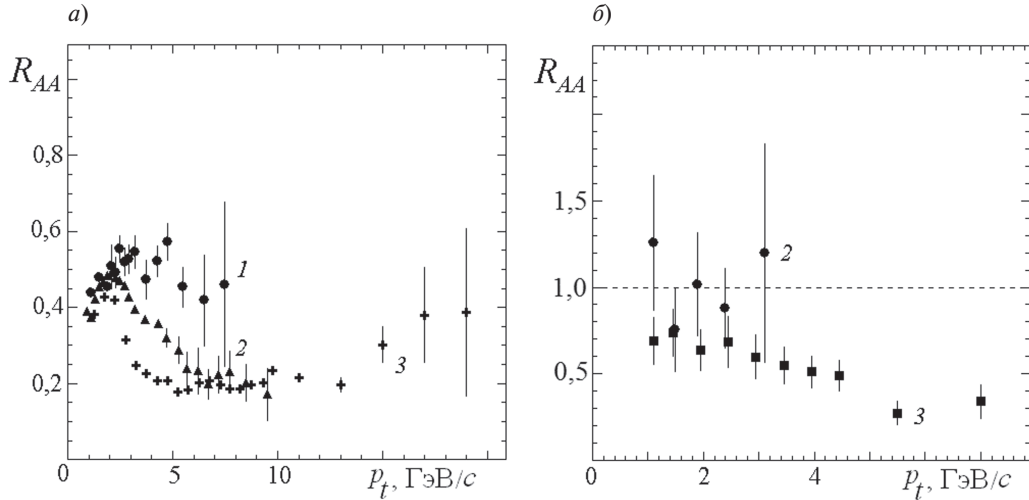


Рис. 2. Зависимости факторов ядерной модификации от поперечного импульса π^0 -(а) и ϕ -мезонов (б), измеренные в центральных столкновениях ядер золота при энергиях 39,0 (1), 62,4 (2) и 200 ГэВ (3)

поперечному импульсу; $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$ — число парных неупругих нуклон-нуклонных столкновений в $(A + A)$ -взаимодействии.

При этом число парных неупругих бинарных столкновений $\langle N_{\text{столкн}} \rangle$ определяется при помощи методов Монте-Карло с использованием модели Глаубера, учитывающей геометрию сталкивающихся ядер. Эта величина возрастает с увеличением центральности столкновений.

Нормировка на число парных неупругих бинарных столкновений применяется на основе предположения, что частицы рождаются в элементарных партон-партонных взаимодействиях, описываемых пертурбативной КХД.

В условиях отсутствия коллективных эффектов $(A + A)$ -взаимодействия в области больших поперечных импульсов ($p_t > 5,0$ ГэВ/с) являются суперпозицией $(p + p)$ -столкновений

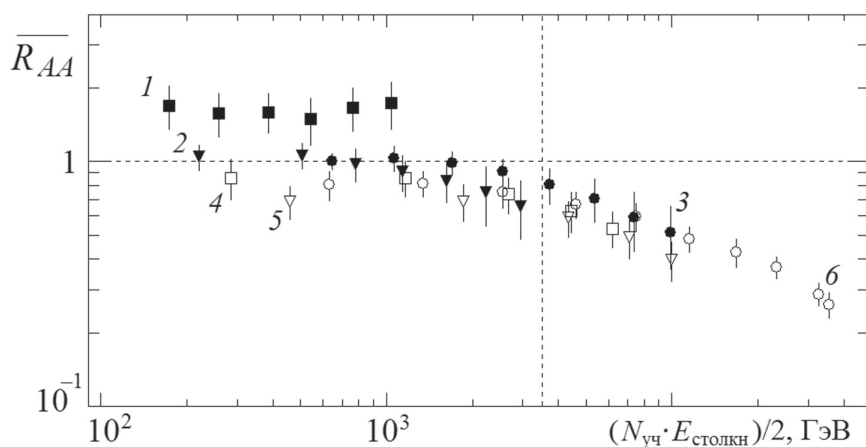


Рис. 3. Зависимости интегральных факторов ядерной модификации π^0 -мезонов от общей энергии взаимодействия системы. Представлены результаты экспериментов по столкновению ядер меди (1 – 3) и ядер золота (4 – 6) при значениях энергии, ГэВ: 22,4 (1); 39,0 (4); 62,4 (2, 5); 200 (3, 6).

Область интегрирования поперечных импульсов 2,5 – 3,5 ГэВ/с. Вертикальная пунктирная линия – максимальная энергия, достигаемая при столкновениях ядер свинца на синхротроне SPS в ЦЕРНе

($R_{AA} \approx 1$). В противном случае факторы ядерной модификации могут принимать значения, отличные от единицы, что указывает на подавление или избыток выхода частиц по отношению к $(p + p)$ -взаимодействиям.

На рис. 2 представлены факторы ядерной модификации, измеренные в центральных столкновениях ядер золота для π^0 -, ϕ -мезонов при энергиях 39,0; 62,4 и 200 ГэВ.

На рис. 3 представлена зависимость интегральных факторов ядерной модификации π^0 -мезонов от общей энергии взаимодействующей системы, которая определяется числом взаимодействующих нуклонов и энергией взаимодействия ядер. Следует отметить, что в пределах погрешности экспериментальные точки ложатся на одну универсальную зависимость. На рисунке вертикальной пунктирной чертой показана максимальная энергия, достижимая в столкновениях ядер свинца на синхротроне SPS в ЦЕРНе [10]. Данный рисунок может служить качественным объяснением, почему подавление выходов частиц не было обнаружено в ЦЕРНе и впервые было открыто на коллайдере RHIC. Необходимо, однако, отметить, что степень согласия между точками зависит от выбранного диапазона интегрирования факторов ядерной модификации по поперечному импульсу.

Итак, в настоящей статье представлены результаты измерений инвариантных инклюзивных спектров рождения по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для π^0 и ϕ -мезонов, полученные во взаимодействиях ядер золота при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 39,0$ и 62,4 ГэВ в эксперименте ФЕНИКС.

Инвариантные инклюзивные спектры рождения и факторы ядерной модификации π^0 - и ϕ -мезонов измерены с высокой точностью в широком диапазоне по поперечному импульсу p_t от 1,0 до 8,0 ГэВ/с. В центральных столкновениях ядер золота при энергиях 39,0; 62,4 и 200 ГэВ/с выход π^0 -мезонов в области больших поперечных импульсов подавлен одинаково, в то время как в области промежуточных поперечных импульсов степень подавления выхода π^0 -мезонов снижается по мере уменьшения энергии взаимодействия ядер. По-видимому, эффект гашения струй для π^0 -мезонов (подавление выходов частиц) начинает превалировать над эффектом Кронина (избыток выхода частиц) в области энергий взаимодействия ядер между 22,4 и 39,0 ГэВ. Выход ϕ -мезонов обнаруживает подавление только лишь в центральных столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ. При энергии столкновения ядер 62,4 ГэВ рождение ϕ -мезонов в столкновениях ядер золота описывается суперпозицией нуклон-нуклонных столкновений.



В статье также предпринята попытка систематизировать большой объем экспериментальных данных по факторам ядерной модификации, полученных экспериментом ФЕНИКС для π^0 -мезонов, которая позволила на качественном уровне объяснить отсутствие подавления

выходов частиц в ядро-ядерных взаимодействиях на синхротроне SPS в ЦЕРНе [10].

Работа поддержана в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Adcox, K.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Phys. A. — 2005. — Vol. 757. — P. 184–283.
2. **Baym, G.** RHIC: From dreams to beams in two decades [Text] / G. Baym // Nucl. Phys. A. — 2002. — Vol. 698. — P. 23–32.
3. **Adcox, K.** Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 130$ GeV [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 88. — P. 022301 – 022307.
4. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 469–479.
5. **Allen M.** PHENIX inner detectors [Text] / M. Allen, M. Bennett, M. Bobrek [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 549–559.
6. **Aizawa, M.** PHENIX central arm particle I.D. detectors [Text] / M. Aizawa, Y. Akiba, R. Begay [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 508–520.
7. **Aphecetche, L.** The PHENIX calorimeter [Text] / L. Aphecetche, T. Awes, V. Kochetkov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 521–536.
8. **L'Hote, D.** About resonance signal extraction from multiparticle data: combinatorics and event mixing methods [Text] / D. L'Hote // Nucl. Instr. Meth. — 1994. — Vol. 337. — P. 544–556.
9. **Kopylov, G.I.** Like particle correlations as a tool to study the multiple production mechanism [Text] / G.I. Kopylov // Phys. Lett. B. — 1974. — Vol. 50. — P. 472–474.
10. **Stock, R.** Quark matter 99 summary: hadronic signals [Text] / R. Stock // Nucl. Phys. A. — 1999. — Vol. 661. — P. 282–299.

УДК 517.9

Т.А. Шемякина

ТЕОРЕМА СУЩЕСТВОВАНИЯ ОГРАНИЧЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ФРАНКЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

Система Франкля используется для описания многочисленных задач в области геофизики, гидро- и газодинамики, механики газового sprays, в теориях переноса нейтронов, термоупругости и т. п. В настоящей работе исследуется система Франкля двух квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка смешанного типа. Известный физик Ф.И. Франкль [1] впервые привлек внимание к системе уравнений смешанного типа как значимого математического объекта, в отличие от чисто физических исследований таких систем, которые в частном случае описывают стационарный процесс трансзвуковой газовой динамики. Многие ученые — такие как С.А. Чаплыгин, С.В. Фалькович, А.В. Бигадзе, Ф. Трикоми, Б.Л. Рождественский, Н.Н. Яненко, исследовали задачи для таких систем уравнений (чаще всего в виде дифференциального уравнения второго порядка) для частных случаев, когда коэффициенты системы уравнений либо являются константами, либо независимыми переменными. Метод исследования заключался, как правило, в приведении нелинейных уравнений к линейным с помощью новых переменных. Но возврат к исходным переменным в общем случае представляет собой более трудоемкую задачу, чем исходная задача. В итоге разработанные методы наряду с преимуществами имеют существенные недостатки. Например, применение метода характеристик для таких систем уравнений в соответствующем интегральном уравнении вносит суперпозицию

неизвестных функций. В применении большинства методов условием разрешимости исходной задачи является условие существования обратной функции. Новая задача во многих случаях оказывается настолько сложной, что ее не решают, а принимают допустимость обратного преобразования переменных в качестве условия. Для преодоления таких трудностей исследуем задачу для достаточно общего вида системы Франкля гиперболического типа методом дополнительного аргумента.

В работах [4 – 7] автора данной статьи разработан принципиально новый способ применения метода дополнительного аргумента к системе Франкля для гиперболического случая. В работе [4] были сформулированы условия разрешимости системы Франкля, а также определен интервал разрешимости через начальные данные, в работах [5 – 7] построены новые расширенные характеристические системы для изучения системы Франкля. В указанных системах было уменьшено количество суперпозиций неизвестных функций, что упростило исследование. Численные эксперименты проводились для модельных примеров, а также для частного случая системы Франкля, когда она имела явное физическое содержание [7 – 9]. В настоящей работе продолжено исследование системы Франкля для гиперболического случая — представлено полное доказательство теоремы существования решения с новой расширенной характеристической системой.



Постановка задачи

Исследуется гиперболическая система Франкля двух квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка:

$$\begin{cases} \partial_y u(x, y) - P(x, y, u, v) \partial_x v(x, y) = 0; \\ \partial_x u(x, y) - Q(x, y, u, v) \partial_y v(x, y) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

при условии, что функции P, Q — дважды непрерывно дифференцируемые по всем аргументам и

$$P(x, y, u, v) \geq p_0 > 0; \quad Q(x, y, u, v) \geq q_0 > 0$$

(p_0, q_0 — константы).

Поставим для системы уравнений (1) задачу Коши:

$$u(x, 0) = \varphi(x); \quad v(x, 0) = \psi(x) \quad (2)$$

в области $\Omega = \{(x, y) : x \in (-\infty, \infty), y \in [0, Y]\}$.

Преобразование исходной задачи к характеристической форме

Для применения метода дополнительного аргумента к задаче (1), (2) необходимо привести систему уравнений (1) к характеристической форме, когда каждое уравнение содержит производные только от одной неизвестной функции. Это осуществляется с помощью алгоритма [2 — 5] и введения неизвестных функций, которые называют инвариантами Римана:

$$\begin{aligned} z_1(x, y, s) &= \partial_y u - b \partial_y v; \\ z_2(x, y, s) &= \partial_y u + b \partial_y v, \end{aligned} \quad (3)$$

где $e(x, y, u, v) = \sqrt{P/Q}$; $b(x, y, u, v) = \sqrt{PQ}$.

В результате алгебраических преобразований системы уравнений (1) и выражений (3) получаем систему уравнений относительно функций z_1, z_2 :

$$\begin{cases} \partial_y z_1 + e \partial_x z_1 = P_y \partial_x v - e b_x \partial_y v - e_y \partial_x u \equiv F_1; \\ \partial_y z_2 - e \partial_x z_2 = P_y \partial_x v - e b_x \partial_y v + e_y \partial_x u \equiv F_2, \end{cases} \quad (4)$$

где $P_y = \partial_y P + \partial_u P \partial_y u + \partial_v P \partial_y v$, $P_2 = \partial_y P$.

Частные производные выразим из (3), (1) через функции z_1, z_2 :

$$\partial_y u = 0,5(z_1 + z_2); \quad \partial_y v = 0,5(z_2 - z_1) / b;$$

$$\partial_x u = 0,5(z_2 - z_1) / e; \quad \partial_x v = 0,5(z_1 + z_2) / P,$$

тогда будут определены правые части системы уравнений (4). Для функций z_1, z_2 из соотношений (3), (1) находим начальные условия:

$$\begin{cases} z_1|_{y=0} = P(x, 0, \varphi, \psi) \psi' - e(x, 0, \varphi, \psi) \varphi' = \Phi_1(x); \\ z_2|_{y=0} = P(x, 0, \varphi, \psi) \psi' + e(x, 0, \varphi, \psi) \varphi' = \Phi_2(x). \end{cases} \quad (5)$$

Чтобы система уравнений была полной, добавим уравнения, полученные из выражений (3), (1) с помощью алгебраических преобразований:

$$\begin{cases} \partial_y u + e \partial_x u = z_2 = G_1(z_2); \\ \partial_y v - e \partial_x v = -z_1 / b = G_2(x, y, u, v, z_1). \end{cases} \quad (6)$$

Начальные условия для функций u, v определяются из задачи Коши (2).

Таким образом, мы получили характеристическую форму (4) — (6), (2) системы уравнений (1) относительно неизвестных функций u, v, z_1, z_2 .

В работе [5] нами доказана лемма об эквивалентности исходной задачи (1), (2) и характеристической формы (4) — (6), (2).

Применение метода дополнительного аргумента

Согласно методу дополнительного аргумента [3], в работе [5] для характеристической формы (4) — (6), (2) нами построена новая расширенная характеристическая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\eta_1(x, y, s)}{ds} = e_0(\eta_1(x, y, s), s, u_1(x, y, s), v_1); \\ \frac{d\eta_2(x, y, s)}{ds} = -e_0(\eta_2(x, y, s), s, u_2, v_2(x, y, s)); \\ \frac{dw_1(x, y, s)}{ds} = F_1^0(\eta_1, s, u_1, v_1, w_1(x, y, s), w_3); \\ \frac{dw_2(x, y, s)}{ds} = F_1^0(\eta_2, s, u_2, v_2, w_4, w_2(x, y, s)); \\ \frac{du_1(x, y, s)}{ds} = w_3(x, y, s); \\ \frac{dv_2(x, y, s)}{ds} = \frac{-w_4(x, y, s)}{b(\eta_2(x, y, s), s, u_2, v_2(x, y, s))}; \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \eta_i(x, y, s)|_{s=y} = x, i = 1, 2; \\ w_i(x, y, s)|_{s=0} = \Phi_i(\eta_i(x, y, 0)), i = 1, 2; \\ u_1|_{s=0} = \varphi(\eta_1(x, y, 0)); v_2|_{s=0} = \psi(\eta_2(x, y, 0)); \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} w_3(x, y, s) = w_2(\eta_1, s, s), \\ w_4(x, y, s) = w_1(\eta_2, s, s); \\ v_1(x, y, s) = v_2(\eta_1, s, s), \\ u_2(x, y, s) = u_1(\eta_2, s, s), \end{cases} \quad (9)$$

где

$$e(x, y, u, v) = e_0(\eta_i, s, u_i, v_i)|_{s=y}, i = 1, 2;$$

$$F_i(x, y, u, v, z_1, z_2) = F_i^0(\eta_i, s, u_i, v_i, w_1, w_2)|_{s=y}.$$

Функции $\eta_i, w_i, w_3, w_4, u_i, v_i, i = 1, 2$ зависят от переменных x, y и от дополнительного аргумента s в области

$$\Omega_Y = \{(x, y, s) : x \in \mathbb{R}^1, 0 \leq s \leq y \leq Y\}.$$

Новая расширенная характеристическая система уравнений, в отличие от предыдущей системы из работ [3, 4], имеет меньшее количество суперпозиций неизвестных функций. Интегрируя уравнения (7) по аргументу s и учитывая условия (8), (9), получим эквивалентную систему интегральных уравнений:

$$\begin{cases} \eta_1(x, y, s) = x - \int_s^y e_0(\eta_1(x, y, \tau), \tau, u_1, v_1) d\tau; \\ \eta_2(x, y, s) = x + \int_s^y e_0(\eta_2(x, y, \tau), \tau, u_2, v_2) d\tau; \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} u_1(x, y, s) = \varphi(\eta_1(x, y, 0)) + \int_0^s w_3(x, y, \tau) d\tau; \\ v_2(x, y, s) = \psi(\eta_2(x, y, 0)) - \int_0^s \frac{w_4(x, y, \tau) d\tau}{b_0(\eta_2, \tau, u_2, v_2)}; \end{cases} \quad (11)$$

$$\begin{cases} w_1 = \Phi_1(\eta_1|_{s=0}) + \int_0^s F_1^0(\eta_1, \tau, u_1, v_1, w_1, w_3) d\tau; \\ w_2 = \Phi_2(\eta_2|_{s=0}) + \int_0^s F_2^0(\eta_2, \tau, u_2, v_2, w_4, w_2) d\tau. \end{cases} \quad (12)$$

Считаем функции $\varphi, \psi, P, Q, F_i, \Phi_i (i = 1, 2)$ непрерывно дифференцируемыми и удовлетворяющими условию Липшица по своим аргументам. Для функции $w \in C(\Omega_Y)$ определим норму

$$\|w(x, y, s)\| = \sup_{\Omega_Y} |w(x, y, s)|.$$

Для получения оценок функций будем пользоваться следующими обозначениями.

$C^{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(\Omega_*)$ — пространство функций, определенных и непрерывных вместе со своими производными до порядка α_i по i -му аргументу ($i = 1, 2, \dots, n$) на некотором подмножестве $\Omega_* \subset \mathbb{R}^n, n = 1, 2, \dots$;

$$\Omega_e := \{(x, y, u, v) : x \in \mathbb{R}^1, y \in [0, Y], u, v \in [-K, K]\};$$

$$\Omega_F = \{(x, y, u, v, w_1, w_2) : x \in \mathbb{R}^1, y \in [0, Y], u, v \in [-K, K], w_i \in [-K_*, K_*], i = 1, 2\},$$

где K, K_* — положительные числа (докажем, что $K = 3C_{\varphi\psi}, K_* = 3C_{\Phi}$);

$$C_{\varphi\psi} = \max\left\{\sup_{(-\infty, \infty)} |\varphi^{(l)}|, \sup_{(-\infty, \infty)} |\psi^{(l)}|, l = \overline{0, 2}\right\};$$

$$C_{\Phi} = \max\left\{\sup_{(-\infty, \infty)} |\Phi_i^{(l)}|, l = \overline{0, 2}; i = 1, 2\right\};$$

$$NF_j = \max\left\{\sup_{\Omega_F} |\partial_{\xi_j} F_i|, i = 1, 2, j = \overline{1, 6}\right\};$$

$$NF = \max\left\{\sup_{\Omega_F} |F_i|, i = 1, 2\right\};$$

$$N_{ux} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_x u|, N_{uxx} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_{xx}^2 u|,$$

$$N_{uy} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_y u|;$$

$$N_{vx} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_x v|, N_{vxx} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_{xx}^2 v|,$$

$$N_{vy} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_y v|;$$

$$N_{wix} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_x w_i|, N_{wixx} = \sup_{\Omega_Y} |\partial_{xx}^2 w_i|, i = 1, 2.$$

Лемма 1. Если функции $u_1(x, y, s), v_2(x, y, s), w_i(x, y, s), i = 1, 2$, удовлетворяют системе интегральных уравнений (10) – (12) и являются непрерывно дифференцируемыми и ограниченными вместе со своими первыми производными, то тогда функции

$$u(x, y) = u_1(x, y, y); \quad v(x, y) = v_2(x, y, y);$$

$$z_i(x, y) = w_i(x, y, y), i = 1, 2,$$

будут решением задачи (4) – (6), (2) на $\Omega, 0 \leq y \leq Y_0 \leq Y$, где Y_0 – константа, определяемая через начальные условия.



Д о к а з а т е л ь с т в о. Введем дифференциальные операторы:

$$W_1(w) = \partial_y w + e(x, y, u, v) \partial_x w;$$

$$W_2(w) = \partial_y w - e(x, y, u, v) \partial_x w,$$

где функция $w(x, y, s)$ определена на области Ω_Y .

Применяя операторы к соотношениям (9)–(11) и суммируя оценки, для всех $(x, y, s) \in \Omega_Y$ получим неравенство:

$$\begin{aligned} & \|W_1(\eta_1)\| + \|W_1(u_1)\| + \|W_2(\eta_2)\| + \|W_2(v_2)\| \leq \\ & \leq y C_0 (\|W_1(\eta_1)\| + \|W_1(u_1)\| + \|W_2(\eta_2)\| + \|W_2(v_2)\|). \end{aligned}$$

Тогда для всех $0 \leq s \leq y \leq Y_0 < C_0^{-1}$ ($C_0 - \text{const}$) имеют место равенства:

$$\begin{aligned} & \|W_i(\eta_i)\| = 0, \quad i = 1, 2; \|W_1(u_1)\| = 0, \|W_2(v_2)\| = 0; \\ & W_1(v_1) = 0, W_1(w_3) = 0, W_2(u_2) = 0, W_2(w_4) = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Применяя операторы W_1, W_2 к уравнениям (12) и учитывая равенства (13), получим уравнения Вольтерра

$$W_i(w_i) = \int_0^s \partial_{w_i} F_i W_i(w_i) d\tau, \quad i = 1, 2,$$

решением которых будут выражения $W_i(w_i) = 0, i = 1, 2$, при условии

$$0 \leq s \leq y \leq Y_0 < C_0^{-1}.$$

Дифференцируя интегральные уравнения (10)–(12) по переменной s , получим соотношения:

$$\partial_s u_1|_{s=y} = z_2(x, y) = G_1(z_2);$$

$$\partial_s v_2|_{s=y} = -z_1 / b = G_2(x, y, u, v, z_1);$$

$$\partial_s w_i|_{s=y} = F_i(x, y, u, v, z_1, z_2); \quad i = 1, 2.$$

Учитывая последние результаты, убеждаемся, что функции

$$u(x, y) = u_1(x, y, y), \quad v(x, y) = v_2(x, y, y),$$

$$z_i(x, y) = w_i(x, y, y), \quad i = 1, 2,$$

удовлетворяют системе уравнений (4), (6):

$$\begin{cases} \partial_y z_1 + e \partial_x z_1 = \partial_s w_1|_{s=y} + \partial_y w_1 + e \partial_x w_1 = F_1; \\ \partial_y z_2 - e \partial_x z_2 = \partial_s w_2|_{s=y} + \partial_y w_2 - e \partial_x w_2 = F_2; \end{cases}$$

$$\begin{cases} \partial_y u + e \partial_x u = \partial_s u_1|_{s=y} + \partial_y u_1 + e \partial_x u_1 = G_1; \\ \partial_y v - e \partial_x v = \partial_s v_2|_{s=y} + \partial_y v_2 - e \partial_x v_2 = G_2, \end{cases}$$

а из уравнений (10)–(12) при $s = 0$ следуют начальные условия (2), (5).

Таким образом, функции

$$u(x, y) = u_1(x, y, y), \quad v(x, y) = v_2(x, y, y),$$

$$z_i(x, y) = w_i(x, y, y), \quad i = 1, 2,$$

будут решением задачи (4)–(6), (2) на Ω , $0 \leq y \leq Y_0 \leq Y$, где Y_0 – константа, определяемая через начальные условия.

Лемма 1 доказана.

Существование ограниченного непрерывного решения системы интегральных уравнений

Для доказательства существования решения задачи (1), (2) в классе ограниченных функций используем систему интегральных уравнений (10)–(12). Введем новые функции:

$$\mu_i(x, y, s) = x - \eta_i(x, y, s), \quad i = 1, 2;$$

тогда система интегральных уравнений примет вид

$$\begin{cases} \mu_1(x, y, s) = \int_s^y e_0(x - \mu_1(x, y, \tau), \tau, u_1, v_1) d\tau; \\ \mu_2(x, y, s) = - \int_s^y e_0(x - \mu_2(x, y, \tau), \tau, u_2, v_2) d\tau; \\ u_1(x, y, s) = \varphi(x - \mu_1(x, y, 0)) + \int_0^s w_3(x, y, \tau) d\tau; \\ v_2(x, y, s) = \psi(x - \mu_2|_{s=0}) - \int_0^s \frac{w_4(x, y, \tau) d\tau}{b(x - \mu_2, \tau, u_2, v_2)}; \\ w_1(x, y, s) = \Phi_1(x - \mu_1(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_1^0(x - \mu_1, \tau, u_1, v_1, w_1(x, y, \tau), w_3) d\tau; \\ w_2(x, y, s) = \Phi_2(x - \mu_2(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_2^0(x - \mu_2, \tau, u_2, v_2, w_4, w_2(x, y, \tau)) d\tau; \\ w_3 = w_2(x - \mu_1, s, s); \quad w_4 = w_1(x - \mu_2, s, s); \\ v_1 = v_2(x - \mu_1, s, s); \quad u_2 = u_1(x - \mu_2, s, s). \end{cases} \quad (14)$$

Лемма 2. Система интегральных уравнений (14) имеет единственное, ограниченное, непрерывное решение на Ω_{Y_1} , $0 < Y_1 \leq Y$, где Y_1 — константа, определяемая из исходных данных.

Доказательство. Нулевое приближение к решению системы интегральных уравнений (14) при $i = 1, 2$ задаем равенствами:

$$\mu_i^{(0)} = 0, w_i^{(0)} = \Phi_i(x),$$

$$u_1^{(0)} = \varphi(x), v_2^{(0)} = \psi(x).$$

Все последующие приближения системы интегральных уравнений (14) определим при помощи рекуррентной последовательности систем уравнений ($n = 1, 2, \dots$):

$$\begin{cases} \mu_1^{(n)}(x, y, s) = \int_s^y e_0(x - \mu_1^{(n-1)}, \tau, u_1^{(n-1)}, v_1^{(n-1)}) d\tau; \\ \mu_2^{(n)}(x, y, s) = - \int_s^y e_0(x - \mu_2^{(n-1)}, \tau, u_2^{(n-1)}, v_2^{(n-1)}) d\tau; \end{cases} \quad (15)$$

$$\begin{cases} u_1^{(n)} = \varphi(x - \mu_1^{(n)}(x, y, 0)) + \int_0^s w_3^{(n)}(x, y, \tau) d\tau; \\ v_2^{(n)} = \psi(x - \mu_2^{(n)}(x, y, 0)) - \\ - \int_0^s \frac{w_4^{(n)}(x, y, \tau) d\tau}{b(\eta_2^{(n)}, \tau, u_2^{(n)}, v_2^{(n)})}; \end{cases} \quad (16)$$

$$\begin{cases} w_1^{(n)}(x, y, s) = \Phi_1(x - \mu_1^{(n)}(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_1^0(x - \mu_1^{(n)}, \tau, u_1^{(n-1)}, v_1^{(n-1)}, w_1^{(n)}, w_3^{(n)}) d\tau; \\ w_2^{(n)}(x, y, s) = \Phi_2(x - \mu_2^{(n)}(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_2^0(x - \mu_2^{(n)}, \tau, u_2^{(n-1)}, v_2^{(n-1)}, w_4^{(n)}, w_2^{(n)}) d\tau; \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} v_1^{(n)} = v_2^{(n-1)}(\eta_1^{(n)}, s, s); \\ u_2^{(n)} = u_1^{(n-1)}(\eta_2^{(n)}, s, s); \\ w_3^{(n)} = w_2^{(n-1)}(\eta_1^{(n)}, s, s); \\ w_4^{(n)} = w_1^{(n-1)}(\eta_2^{(n)}, s, s). \end{cases} \quad (18)$$

Будем рассматривать системы уравнений (15) – (17) отдельно. Для всех пар независимых уравнений при каждом $n \geq 1$ с помощью своего процесса последовательных приближений до-

кажем существование решения. Затем покажем, что при $n \rightarrow \infty$ последовательности

$$\{u_1^{(n)}\}, \{v_2^{(n)}\}, \{\mu_i^{(n)}\}, \{w_i^{(n)}\}, i = 1, 2,$$

сходятся и тем самым дают решение системы интегральных уравнений (14). Предположим, что для $(n-1)$ -го приближения справедливы оценки:

$$\begin{cases} \|\mu_i^{(n-1)}\| \leq 1; \quad \|\partial_x \mu_i^{(n-1)}\| \leq 1; \quad \|\partial_x w_i^{(n-1)}\| \leq N_{wix}; \\ \|\mu_i^{(n-1)}\| \leq 2C_\Phi; \quad \|u_1^{(n-1)}\| \leq 2C_{\Phi\psi}; \quad \|v_2^{(n-1)}\| \leq 2C_{\Phi\psi}; \\ \|\partial_x u_1^{(n-1)}\| \leq 3C_{\Phi\psi}; \quad \|\partial_x v_2^{(n-1)}\| \leq 3C_{\Phi\psi}, i = 1, 2. \end{cases}$$

Рассмотрим уравнения (15), определяя начальные приближения $\mu_i^{(n,0)} = 0, i = 1, 2$, и k -приближения $\{\mu_i^{(n,k)}\}, i = 1, 2; k = 1, 2, \dots$:

$$\begin{cases} \mu_1^{(n,k)}(x, y, s) = \int_s^y e_0(x - \mu_1^{(n,k-1)}, \tau, u_1^{(n-1)}, v_1^{(n-1)}) d\tau; \\ \mu_2^{(n,k)}(x, y, s) = - \int_s^y e_0(x - \mu_2^{(n,k-1)}, \tau, u_2^{(n-1)}, v_2^{(n-1)}) d\tau. \end{cases} \quad (19)$$

Для всех $0 \leq y \leq Y_{k1} = C_e^{-1}$ получаем оценки $\|\mu_i^{(n,k)}\| \leq y C_e \leq 1, i = 1, 2$.

Последовательные приближения $\{\mu_i^{(n,k)}\}, i = 1, 2$ сходятся для всех $0 \leq y \leq Y_{k2}$, $Y_{k2} = 0,5 M_{\mu n}$, где $M_{\mu n} = \min\{M_{\mu k1}^{-1}, M_{\mu k2}^{-1}\}$, $M_{\mu ki} - \text{const}, i = 1, 2$, так как выполняются неравенства

$$\|\mu_i^{(n,k+1)} - \mu_i^{(n,k)}\| \leq y \|\mu_i^{(n,k)} - \mu_i^{(n,k-1)}\| M_{\mu ki}.$$

Производные по переменной x функций $\mu_i^{(n,k)}, i = 1, 2$ и их оценки имеют вид:

$$\begin{aligned} \partial_x \mu_1^{(n,k)}(x, y, s) &= \int_s^y [\partial_u e_0 \partial_x u_1^{(n-1)} + \\ &+ (\partial_x e_0 + \partial_v e_0 \partial_x v_2^{(n-1)})(1 - \partial_x \mu_1^{(n,k-1)})] d\tau; \\ \partial_x \mu_2^{(n,k)}(x, y, s) &= - \int_s^y [\partial_v e_0 \partial_x v_2^{(n-1)} + \\ &+ (\partial_x e_0 + \partial_u e_0 \partial_x u_1^{(n-1)})(1 - \partial_x \mu_2^{(n,k-1)})] d\tau, \end{aligned}$$

$$\|\partial_x \mu_i^{(n,k)}\| \leq 1, i = 1, 2 \text{ для всех}$$



$$0 \leq y \leq Y_{k3}, \quad Y_{k3} = \max\{M_{\mu k3}^{-1}; M_{\mu k4}^{-1}\},$$

где $M_{\mu k3}, M_{\mu k4} - \text{const.}$

Последовательные приближения (19) ограничены, сходятся и имеют ограниченные частные производные по переменной x :

$$\|u_i^{(n)}\| \leq 1, \quad \|\partial_x u_i^{(n)}\| \leq 1, \quad i = 1, 2. \quad (20)$$

Рассмотрим уравнения (16), определяя начальные приближения $u_1^{(n,0)} = \varphi(x - \mu_1^{(n)}(x, y, 0))$;

$v_2^{(n,0)} = \psi(x - \mu_2^{(n)}(x, y, 0))$
с оценками $\|u_1^{(n,0)}\| \leq C_{\varphi\psi}$; $\|v_2^{(n,0)}\| \leq C_{\varphi\psi}$, и k -приближения $\{u_1^{(n,k)}\}, \{v_2^{(n,k)}\}$, $k = 1, 2, \dots$:

$$\begin{cases} u_1^{(n,k)} = \varphi(x - \mu_1^{(n)}|_{s=0}) + \\ + \int_0^s w_2^{(n-1)}(x - \mu_1^{(n)}, \tau, \tau) d\tau; \quad v_2^{(n,k)}(x, y, s) = \\ = \psi(x - \mu_2^{(n)}(x, y, 0)) - \\ - \int_0^s \frac{w_1^{(n-1)}(x - \mu_2^{(n)}, \tau, \tau) d\tau}{b(x - \mu_2^{(n)}, \tau, u_1^{(n-1)}(x - \mu_2^{(n)}, \tau, \tau), v_2^{(n,k-1)})}. \end{cases} \quad (21)$$

Для всех $0 \leq y \leq Y_{k4}$,

$$Y_{k4} = 0,5 \max\{C_{\varphi\psi} / C_{\Phi}; C_{\varphi\psi} C_e q_0 / C_{\Phi}\}$$

получаем оценки

$$\|u_1^{(n,k)}\| \leq 2C_{\varphi\psi}; \quad \|v_2^{(n,k)}\| \leq 2C_{\varphi\psi}.$$

Последовательные приближения $\{u_1^{(n,k)}\}, \{v_2^{(n,k)}\}$ сходятся для всех $0 \leq y \leq Y_{k5}$,

$$Y_{k5} = p_0 / (4C_{\Phi} C_{ev}),$$

так как выполняются соотношения:

$$\|u_1^{(n,k+1)} - u_1^{(n,k)}\| = 0;$$

$$\|v_2^{(n,k+1)} - v_2^{(n,k)}\| \leq y 2C_{\Phi} C_{ev} p_0^{-1} \|v_2^{(n,k)} - v_2^{(n,k-1)}\|.$$

Предположим, что справедливо неравенство $\|\partial_x v_2^{(n,k-1)}\| \leq 3C_{\varphi\psi}$. Производные по переменной x функций $u_1^{(n,k)}, v_2^{(n,k)}$ и их оценки имеют вид

$$\partial_x u_1^{(n,k)} = (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) \varphi' + \int_0^s (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) \partial_x w_2^{(n-1)} d\tau;$$

$$\begin{aligned} \partial_x v_2^{(n,k)} &= (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) \psi' - \int_0^s (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) \times \\ &\times [\partial_x w_1^{(n-1)} b^{-1} - w_1^{(n-1)} (\partial_x b + \partial_u b \partial_x u_1^{(n-1)}) b^{-2}] - \\ &- w_1^{(n-1)} \partial_v b \partial_x v_2^{(n,k-1)} b^{-2} d\tau; \\ \|\partial_x u_1^{(n,k)}\| &\leq 3C_{\varphi\psi}, \quad \|\partial_x v_2^{(n,k)}\| \leq 3C_{\varphi\psi} \end{aligned}$$

для всех $0 \leq y \leq Y_{k6}$,

$$Y_{k6} = \max\{C_{\varphi\psi} / (2N_{w2x}); C_{\varphi\psi} / M_{vn}\},$$

$M_{vn} - \text{const.}$

Последовательные приближения (21) ограничены, сходятся и имеют ограниченные частные производные по переменной x :

$$\|u_1^{(n)}\| \leq 2C_{\varphi\psi}; \quad \|\partial_x u_1^{(n)}\| \leq 3C_{\varphi\psi};$$

$$\|v_2^{(n)}\| \leq 2C_{\varphi\psi}; \quad \|\partial_x v_2^{(n)}\| \leq 3C_{\varphi\psi}.$$

Рассмотрим уравнения (17), определяя начальные приближения

$$w_i^{(n,0)} = \Phi_i(x - \mu_i^{(n)}(x, y, 0))$$

с оценками $\|w_i^{(n,0)}\| \leq C_{\Phi}$, и k -приближения $\{w_i^{(n,k)}\}$, $i = 1, 2$; $k = 1, 2, \dots$:

$$\begin{cases} w_1^{(n,k)}(x, y, s) = \Phi_1(x - \mu_1^{(n)}(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_1^0(x - \mu_1^{(n)}, \tau, u_1^{(n-1)}, v_1^{(n)}, w_1^{(n,k-1)}, w_3^{(n)}) d\tau; \\ w_2^{(n,k)}(x, y, s) = \Phi_2(x - \mu_2^{(n)}(x, y, 0)) + \\ + \int_0^s F_2^0(x - \mu_2^{(n)}, \tau, u_2^{(n)}, v_2^{(n-1)}, w_4^{(n)}, w_2^{(n,k-1)}) d\tau. \end{cases} \quad (22)$$

Для всех $0 \leq y \leq Y_{k7} = NF^{-1}$ получим оценки $\|w_i^{(n,k)}\| \leq 2C_{\Phi}$, $i = 1, 2$. Последовательные приближения $\{w_i^{(n,k)}\}$ сходятся для всех $0 \leq y \leq Y_{k8}$,

$$Y_{k8} = 0,5 \min\{NF_5^{-1}, NF_6^{-1}\},$$

так как выполняются неравенства:

$$\|w_1^{(n,k+1)} - w_1^{(n,k)}\| \leq y NF_5 \|w_1^{(n,k)} - w_1^{(n,k-1)}\|;$$

$$\|w_2^{(n,k+1)} - w_2^{(n,k)}\| \leq y NF_6 \|w_2^{(n,k)} - w_2^{(n,k-1)}\|.$$

Производные по переменной x функций $w_i^{(n,k)}$, $i = 1, 2$, и их оценки имеют вид:

$$\begin{aligned} \partial_x w_1^{(n,k)} = & (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) \Phi'_1 + \int_0^s \{ (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) [\partial_x F_1^0 + \\ & + \partial_v F_1^0 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_1^0 \partial_x w_2^{(n-1)}] + \\ & + \partial_u F_1^0 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1} F_1^0 \partial_x w_1^{(n,k-1)} \} d\tau; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_x w_2^{(n,k)} = & (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) \Phi'_2 + \int_0^s \{ (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) [\partial_x F_2^0 + \\ & + \partial_u F_2^0 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1} F_2^0 \partial_x w_1^{(n-1)}] + \\ & + \partial_v F_2^0 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_2^0 \partial_x w_2^{(n,k-1)} \} d\tau, \end{aligned}$$

$$\|\partial_x w_i^{(n,k)}\| \leq N_{wix}, \quad i = 1, 2 \text{ для всех } 0 \leq y \leq Y_{k8}.$$

Последовательные приближения (22) ограничены, сходятся и имеют ограниченные частные производные по переменной x :

$$\|w_i^{(n)}\| \leq 2C_\Phi; \quad \|\partial_x w_i^{(n)}\| \leq N_{wix}, \quad i = 1, 2.$$

Таким образом, система уравнений (15)–(17) при каждом $n = 1, 2, \dots$ имеет гладкое, ограниченное решение с производными первого порядка по переменной x . При этом равномерно выполняются оценки:

$$\begin{cases} \|\mu_i^{(n)}\| \leq 1, \quad \|\partial_x \mu_i^{(n)}\| \leq 1, \quad \|\partial_x w_i^{(n)}\| \leq N_{wix}; \\ \|w_i^{(n)}\| \leq 2C_\Phi, \quad \|u_1^{(n)}\| \leq 2C_{\Phi\psi}, \quad \|v_2^{(n)}\| \leq 2C_{\Phi\psi}; \\ \|\partial_x u_1^{(n)}\| \leq 3C_{\Phi\psi}, \quad \|\partial_x v_2^{(n)}\| \leq 3C_{\Phi\psi}, \quad i = 1, 2, \end{cases} \quad (23)$$

где константы определяются через исходные данные и не зависят от номера итерации.

На основе этого докажем, что при $n \rightarrow \infty$ последовательные приближения из системы рекуррентных уравнений (15) – (17) сходятся, то есть система уравнений (14) для всех $0 \leq s \leq y \leq Y_1$, $x \in \mathcal{R}^1$ имеет ограниченное и дифференцируемое решение с производными первого порядка по x . В силу полученных оценок (23) следует, что для функций $u_1^{(n)}, v_2^{(n)}, \mu_i^{(n)}, w_i^{(n)}$, $i = 1, 2$, равномерно выполняется условие Липшица по переменной x . Введем обозначения:

$$R_{\mu i}^{n+1} = \|\mu_i^{(n+1)} - \mu_i^{(n)}\|, \quad R_i^{n+1} = \|w_i^{(n+1)} - w_i^{(n)}\|;$$

$$R_u^{n+1} = \|u_1^{(n+1)} - u_1^{(n)}\|, \quad R_v^{n+1} = \|v_2^{(n+1)} - v_2^{(n)}\|, \quad i = 1, 2.$$

Из системы рекуррентных уравнений (15) с учетом оценок (23) имеем:

$$R_{\mu i}^{n+1} \leq y R_{\mu i}^{n+1} M_{\mu ki} + y(C_{eu} R_u^n + C_{ev} R_v^n),$$

и поскольку $\{\mu_i^{(n,k)}\}$, $i = 1, 2$, сходятся при $0 \leq y \leq Y_{k2}$, получим:

$$R_{\mu i}^{n+1} \leq M_{\mu n}(C_{eu} R_u^n + C_{ev} R_v^n), \quad i = 1, 2. \quad (24)$$

Из системы рекуррентных уравнений (15) – (17) с учетом (23), (24) для последовательностей $\{u_1^{(n)}\}$, $\{v_2^{(n)}\}$, $\{w_i^{(n)}\}$, $i = 1, 2$, выводим неравенства:

$$\begin{aligned} R_u^{n+1} & \leq R_u^n C_{u1}(y) + R_v^n C_{v1}(y) + R_2^n y; \\ R_v^{n+1} & \leq R_u^n C_{u2}(y) + R_v^n C_{v2}(y) + R_1^n C_{w2}(y); \\ R_1^{n+1} & \leq R_u^n C_{u3}(y) + R_v^n C_{v3}(y) + R_2^n C_{w3}(y); \\ R_2^{n+1} & \leq R_u^n C_{u4}(y) + R_v^n C_{v4}(y) + R_1^n C_{w4}(y). \end{aligned}$$

Просуммируем последние неравенства и обозначим соответствующий максимальный коэффициент $C_{\max}(y)$, тогда имеем:

$$\begin{aligned} R_u^{n+1} + R_v^{n+1} + R_1^{n+1} + R_2^{n+1} & \leq \\ & \leq C_{\max}(y)[R_u^n + R_v^n + R_1^n + R_2^n]. \end{aligned}$$

Так как $C_{\max}(y)$ есть многочлен первой степени относительно y с коэффициентами, не зависящими от номера итерации и определяемые через исходные данные, то точно определяется такое значение $Y_{k9} = 0,5C_{\max}^{-1}$, что для всех $0 < y \leq Y_{k9}$ выполняется неравенство $C_{\max}(y) < 1$. Тогда следует сходимость ряда

$$\sum_{n=1}^{\infty} (R_1^n + R_2^n + R_u^n + R_v^n),$$

и по признаку сравнения ряды $\sum_{n=1}^{\infty} R_u^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} R_v^n$,

$\sum_{n=1}^{\infty} R_i^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} R_{\mu i}^n$, $i = 1, 2$, сходятся.

Таким образом, доказана сходимость последовательных приближений $\{u_1^{(n)}\}$, $\{v_2^{(n)}\}$, $\{\mu_i^{(n)}\}$, $\{w_i^{(n)}\}$, $i = 1, 2$. Переходя к пределу при $n \rightarrow \infty$ в рекуррентных уравнениях (15) – (17), получим, что предельные функции будут удовлетворять



системе уравнений (14). Этим самым мы установили, что при $0 \leq s \leq y \leq Y_1$, $x \in \mathbb{R}^1$,

$$Y_1 = \min\{Y_0, Y_{k1}, \dots, Y_{k9}, Y_{k9}\}$$

существует ограниченное и непрерывное решение системы уравнений (14). Единственность решения системы уравнений (14) следует из того, что для разности двух возможных решений этой системы будет выполняться неравенство вида

$$\|\omega_1 - \omega_2\| \leq C_{\max}(y) \|\omega_1 - \omega_2\|.$$

Лемма 2 доказана.

Дифференцируемость решения системы интегральных уравнений

Для получения оценок производных второго порядка по переменной x функций $u_1(x, y, s)$, $v_2(x, y, s)$, $\mu_i(x, y, s)$, $w_i(x, y, s)$, $i = 1, 2$, удовлетворяющих системе интегральных уравнений (14), будем учитывать оценки (23).

Лемма 3. *Функции $u_1(x, y, s)$, $v_2(x, y, s)$, $\mu_i(x, y, s)$, $w_i(x, y, s)$, $i = 1, 2$, удовлетворяющие системе интегральных уравнений (14), имеют ограниченные и непрерывные производные по переменной x на Ω_{Y_1} .*

Доказательство. Предполагаем, что для $(n-1)$ приближений функций $u_1(x, y, s)$, $v_2(x, y, s)$, $\mu_i(x, y, s)$, $w_i(x, y, s)$, $i = 1, 2$, справедливы оценки:

$$\begin{cases} \|\partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)}\| \leq N_{uxx}; \quad \|\partial_{xx}^2 v_2^{(n-1)}\| \leq N_{vxx}; \\ \|\partial_{xx}^2 \mu_i^{(n-1)}\| \leq N_{\mu xx}; \quad \|\partial_{xx}^2 w_i^{(n-1)}\| \leq N_{wixx}, \quad i = 1, 2. \end{cases}$$

Найдем производные второго порядка функций $\mu_i^{(n)}$, $i = 1, 2$:

$$\begin{aligned} \partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} &= \int_s^y \{-\partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} (\partial_x e + \partial_v e \partial_x v_2^{(n-1)}) + (1 - \\ &\quad - \partial_x \mu_1^{(n)})^2 [2\partial_{xy}^2 e \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{vv}^2 e (\partial_x v_2^{(n-1)})^2 + \partial_{xx}^2 e] + \\ &\quad + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) [2(\partial_{xy}^2 e + \partial_{uv}^2 e \partial_x v_2^{(n-1)}) \partial_x u_1^{(n-1)} + \\ &\quad + \partial_v e \partial_{xx}^2 v_2^{(n-1)}] + \partial_{uu}^2 e (\partial_x u_1^{(n-1)})^2 + \partial_u e \partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)}\} d\tau; \\ \partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} &= - \int_s^y \{-\partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} (\partial_x e + \partial_u e \partial_x u_1^{(n-1)}) + (1 - \\ &\quad - \partial_x \mu_2^{(n)})^2 [2\partial_{xu}^2 e \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{uu}^2 e (\partial_x u_1^{(n-1)})^2 + \partial_{xx}^2 e] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) [2(\partial_{xy}^2 e + \partial_{uv}^2 e \partial_x u_1^{(n-1)}) \partial_x v_2^{(n-1)} + \\ &+ \partial_u e \partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)}] + \partial_{vv}^2 e (\partial_x v_2^{(n-1)})^2 + \partial_v e \partial_{xx}^2 v_2^{(n-1)}\} d\tau. \end{aligned}$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k2}$ имеем $yM_{\mu ki} \leq 0,5$; $M_{\mu i} - \text{const}$,

$$\|\partial_{xx}^2 \mu_i^{(n)}\| \leq 2yM_{\mu i} \leq M_{\mu i} M_{\mu n} \leq N_{\mu xx}.$$

Найдем производные второго порядка функций $u_1^{(n)}$, $v_2^{(n)}$:

$$\begin{aligned} \partial_{xx}^2 u_1^{(n)} &= -\partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} \phi' + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)})^2 \phi'' + \\ &+ \int_0^s \{-\partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} \partial_x w_2^{(n-1)} + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)})^2 \partial_{xx}^2 w_2^{(n-1)}\} d\tau; \\ \partial_{xx}^2 v_2^{(n)} &= -\partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} \psi' + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)})^2 \psi'' - \\ &- \int_0^s \{\partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} [w_1^{(n-1)} b^{-2} (\partial_x b + \partial_u b \partial_x u_1^{(n-1)}) - \\ &- \partial_x w_1^{(n-1)} b^{-1}] + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)})^2 \partial_{xx}^2 w_1^{(n-1)} b^{-1} - \\ &- 2(1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) \partial_x w_1^{(n-1)} b^{-2} [\partial_v b \partial_x v_2^{(n)} + \\ &+ (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_x b + \partial_u b \partial_x u_1^{(n-1)})] - \\ &- 2w_1^{(n-1)} b^{-3} [(1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_x b + \partial_u b \partial_x u_1^{(n-1)}) + \\ &+ \partial_v b \partial_x v_2^{(n)}]^2 - w_1^{(n-1)} b^{-2} [\partial_{vv}^2 b (\partial_x v_2^{(n)})^2 + \\ &+ (1 - \partial_x \mu_2^{(n)})^2 (2\partial_{xu}^2 b \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{uu}^2 b (\partial_x u_1^{(n-1)})^2 + \\ &+ \partial_{xx}^2 b) + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (2\partial_x v_2^{(n)} (\partial_{xb}^2 + \partial_{uv}^2 b \partial_x u_1^{(n-1)}) + \\ &+ \partial_u b \partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)}) + \partial_v b \partial_{xx}^2 v_2^{(n)}]\} d\tau. \end{aligned}$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k5}$, имеем

$$y2C_{\Phi} C_{ev} p_0^{-1} < 0,5; \quad M_{v2} - \text{const},$$

тогда

$$\begin{aligned} \|\partial_{xx}^2 u_1^{(n)}\| &\leq C_{\Phi\psi} (3 + N_{\mu xx}) + \\ &+ p_0 (4C_{\Phi} C_{ev})^{-1} (N_{w2x} N_{\mu xx} + 3N_{w2xx}) \leq N_{uxx}; \\ \|\partial_{xx}^2 v_2^{(n)}\| &\leq 2C_{\Phi\psi} (3 + N_{\mu xx}) + \\ &+ p_0 (2C_{\Phi} C_{ev})^{-1} M_{v2} \leq N_{vxx}. \end{aligned}$$

Рассмотрим производные второго порядка функций $w_i^{(n)}$, $i = 1, 2$:

$$\begin{aligned}
 \partial_{xx}^2 w_1^{(n)} = & -\partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} \Phi_1' + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)})^2 \Phi_1'' + \\
 & + \int_0^s \{ -\partial_{xx}^2 \mu_1^{(n)} (\partial_x F_1 + \partial_v F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_1 \partial_x w_2^{(n-1)}) + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) [(1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) (\partial_{xx}^2 F_1 + \partial_{xv}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{xw2}^2 F_1 \partial_x w_2^{(n-1)}) + \partial_{xu}^2 F_1 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{xw1}^2 F_1 \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) (\partial_{vv}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{vw2}^2 F_1 \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{vx}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + (\partial_{vu}^2 F_1 \partial_x u_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{vw1}^2 F_1 \partial_x w_1^{(n-1)}) \partial_x v_2^{(n-1)} + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) (\partial_{w2x}^2 F_1 + \\
 & + \partial_{w2v}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2w2}^2 F_1 \partial_x w_2^{(n-1)}) \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + (\partial_{w2u}^2 F_1 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w2w1}^2 F_1 \partial_x w_1^{(n-1)}) \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) (\partial_v F_1 \partial_{xx}^2 v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_1 \partial_{xx}^2 w_2^{(n-1)})] + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) [\partial_{uv}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{uw2}^2 F_1 \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{ux}^2 F_1] \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{uw1}^2 F_1 \partial_x w_1^{(n-1)} \partial_x u_1^{(n-1)} + \\
 & + (\partial_{uu}^2 F_1 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{uw1}^2 F_1 \partial_x w_1^{(n-1)}) \partial_x u_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_u F_1 \partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)} + (1 - \partial_x \mu_1^{(n)}) [\partial_{w1x}^2 F_1 + \\
 & + \partial_{w1v}^2 F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w1w2}^2 F_1 \partial_x w_2^{(n-1)}] \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{w1w1}^2 F_1 (\partial_x w_1^{(n-1)})^2 + \partial_{w1} F_1 \partial_{xx}^2 w_1^{(n-1)} \} d\tau; \\
 \partial_{xx}^2 w_2^{(n)}(x, y, s) = & -\partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} \Phi_2' + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)})^2 \Phi_2'' + \\
 & + \int_0^s \{ -\partial_{xx}^2 \mu_2^{(n)} (\partial_x F_2 + \partial_u F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1} F_2 \partial_x w_1^{(n-1)}) + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) [(1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_{xx}^2 F_2 + \partial_{xu}^2 F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{xw1}^2 F_2 \partial_x w_1^{(n-1)}) + \partial_{xv}^2 F_2 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{xw2}^2 F_2 \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_{uu}^2 F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{uw1}^2 F_2 \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{ux}^2 F_2) \partial_x u_1^{(n-1)} + (\partial_{uv}^2 F_2 \partial_x v_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{uw2}^2 F_2 \partial_x w_2^{(n-1)}) \partial_x u_1^{(n-1)} + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_{w1x}^2 F_2 + \\
 & + \partial_{w1u}^2 F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1w1}^2 F_2 \partial_x w_1^{(n-1)}) \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + (\partial_{w1v}^2 F_2 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2w1}^2 F_2 \partial_x w_2^{(n-1)}) \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) (\partial_u F_2 \partial_{xx}^2 u_1^{(n-1)} + \partial_{w1} F_2 \partial_{xx}^2 w_1^{(n-1)})] + \\
 & + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) [\partial_{uv}^2 F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{vw1}^2 F_2 \partial_x w_1^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{vx}^2 F_2] \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2v}^2 F_2 \partial_x v_2^{(n-1)} \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{vv}^2 F_2 (\partial_x v_2^{(n-1)})^2 + \partial_{vw2}^2 F_2 \partial_x w_2^{(n-1)} \partial_x v_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_v F_2 \partial_{xx}^2 v_2^{(n-1)} + (1 - \partial_x \mu_2^{(n)}) [\partial_{w2x}^2 F_2 + \\
 & + \partial_{w2u}^2 F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1w2}^2 F_2 \partial_x w_1^{(n-1)}] \partial_x w_2^{(n-1)} + \\
 & + \partial_{w2w2}^2 F_2 (\partial_x w_2^{(n-1)})^2 + \partial_{w2} F_2 \partial_{xx}^2 w_2^{(n-1)} \} d\tau.
 \end{aligned}$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k8}$ имеем $yNF_5 \leq 0,5$; $yNF_6 \leq 0,5$,

$$\begin{aligned}
 \|\partial_{xx}^2 w_1^{(n)}\| & \leq 2C_\Phi(3 + N_{\mu xx}) + NF_5^{-1} M_{w1} \leq N_{w1xx}; \\
 \|\partial_{xx}^2 w_2^{(n)}\| & \leq 2C_\Phi(3 + N_{\mu xx}) + NF_6^{-1} M_{w2} \leq N_{w2xx}.
 \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили оценки для производных второго порядка функций $u_1^{(n)}, v_2^{(n)}, \mu_i^{(n)}, w_i^{(n)}$, $i = 1, 2$, по переменной x :

$$\begin{cases} \|\partial_{xx}^2 u_1^{(n)}\| \leq N_{uxx}; & \|\partial_{xx}^2 v_2^{(n)}\| \leq N_{vxx}; \\ \|\partial_{xx}^2 \mu_i^{(n)}\| \leq N_{\mu xx}; & \|\partial_{xx}^2 w_i^{(n)}\| \leq N_{wixx}, \quad i = 1, 2. \end{cases}$$

Тогда для функций $\partial_x u_1^{(n)}, \partial_x v_2^{(n)}, \partial_x \mu_i^{(n)}, \partial_x w_i^{(n)}$, $i = 1, 2$, равномерно выполняется условие Липшица по переменной x :

$$\begin{aligned}
 |\partial_x u_1^{(n)}(x_1, y, s) - \partial_x u_1^{(n)}(x_2, y, s)| & \leq N_{uxx} |x_1 - x_2|; \\
 |\partial_x v_2^{(n)}(x_1, y, s) - \partial_x v_2^{(n)}(x_2, y, s)| & \leq N_{vxx} |x_1 - x_2|; \\
 |\partial_x \mu_i^{(n)}(x_1, y, s) - \partial_x \mu_i^{(n)}(x_2, y, s)| & \leq N_{\mu xx} |x_1 - x_2|; \\
 |\partial_x w_i^{(n)}(x_1, y, s) - \partial_x w_i^{(n)}(x_2, y, s)| & \leq N_{wixx} |x_1 - x_2|.
 \end{aligned}$$

Учитывая, что ряды $\sum_{n=1}^{\infty} R_u^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} R_v^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} R_i^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} R_{\mu i}^n$, $i = 1, 2$, сходятся, из рекуррентных уравнений для определения

$$\{\partial_x u_1^{(n)}\}, \{\partial_x v_2^{(n)}\}, \{\partial_x \mu_i^{(n)}\}, \{\partial_x w_i^{(n)}\}, \quad i = 1, 2,$$

получим, что будут выполняться соотношения

$$\begin{aligned}
 \|\partial_x u_1^{(n+1)} - \partial_x u_1^{(n)}\| & \leq \gamma_u^n; & \|\partial_x v_2^{(n+1)} - \partial_x v_2^{(n)}\| & \leq \gamma_v^n; \\
 \|\partial_x w_i^{(n+1)} - \partial_x w_i^{(n)}\| & \leq \gamma_i^n; & \|\partial_x \mu_i^{(n+1)} - \partial_x \mu_i^{(n)}\| & \leq \gamma_{\mu i}^n,
 \end{aligned}$$

где ряды $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_u^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_v^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_{\mu i}^n$, $\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_i^n$, $i = 1, 2$, сходятся.

В результате мы получили, что последовательные приближения

$$\{\partial_x u_1^{(n)}\}, \{\partial_x v_2^{(n)}\}, \{\partial_x w_i^{(n)}\}, \{\partial_x \mu_i^{(n)}\}, \quad i = 1, 2,$$

сходятся, а значит решения системы интегральных уравнений (14) имеют ограниченные и непрерывные производные по переменной x на Ω_{Y_1} .



Лемма 3 доказана.

Лемма 4. Функции $u_1(x, y, s), v_2(x, y, s), \mu_i(x, y, s), w_i(x, y, s), i = 1, 2$, удовлетворяющие системе интегральных уравнений (14), имеют ограниченные и непрерывные производные по переменной y на Ω_{Y_*} .

Доказательство. Предполагаем, что для $(n-1)$ приближений функций

$u_1(x, y, s), v_2(x, y, s), \mu_i(x, y, s), w_i(x, y, s), i = 1, 2$, справедливы оценки:

$$\begin{cases} \|\partial_y u_1^{(n-1)}\| \leq N_{uy}; \quad \|\partial_y v_2^{(n-1)}\| \leq N_{vy}; \\ \|\partial_y \mu_i^{(n-1)}\| \leq N_{\mu y}; \quad \|\partial_y w_i^{(n-1)}\| \leq N_{wiy}, i = 1, 2. \end{cases}$$

Рассмотрим производные функций $\mu_i^{(n)}, i = 1, 2$, по переменной y :

$$\begin{aligned} \partial_y \mu_1^{(n)} &= e(x - \mu_1^{(n)}, y, u_1^{(n-1)}, v_1^{(n)}) + \\ &+ \int_s^y \{-\partial_y \mu_1^{(n)} (\partial_x e + \partial_v e \partial_y v_2^{(n-1)}) + \partial_u e \partial_y u_1^{(n-1)}\} d\tau; \\ \partial_y \mu_2^{(n)} &= -e(x - \mu_2^{(n)}, y, u_2^{(n)}, v_2^{(n-1)}) + \\ &+ \int_s^y \{\partial_y \mu_2^{(n)} (\partial_x e + \partial_u e \partial_y u_1^{(n-1)}) - \partial_v e \partial_y v_2^{(n-1)}\} d\tau; \\ \|\partial_y \mu_i^{(n)}\| &\leq N_{\mu y}, \quad i = 1, 2, \text{ для всех } 0 \leq y \leq Y_{k3}. \end{aligned} \quad (25)$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k2}$ имеем $y M_{\mu ki} \leq 0,5$, то справедливы оценки

$$\begin{aligned} \|\partial_y \mu_1^{(n)}\| &\leq 2C_e + 2y C_{eu} N_{uy} \leq N_{\mu y}; \\ \|\partial_y \mu_2^{(n)}\| &\leq 2C_e + 2y C_{ev} N_{vy} \leq N_{\mu y}. \end{aligned}$$

Рассмотрим производные функций $u_1^{(n)}, v_2^{(n)}$ по переменной y :

$$\begin{aligned} \partial_y u_1^{(n)} &= -\partial_y \mu_1^{(n)} \Phi' + \int_0^s (-\partial_y \mu_1^{(n)} \partial_x w_2^{(n-1)}) d\tau; \\ \partial_y v_2^{(n)} &= -\partial_y \mu_2^{(n)} \Psi' + \int_0^s d\tau \{b^{-1} \partial_y \mu_2^{(n)} \partial_x w_1^{(n-1)} - \\ &- \frac{w_1^{(n-1)}}{b^2} [\partial_y \mu_2^{(n)} (\partial_x b + \partial_u b \partial_x u_1^{(n-1)}) - \partial_v b \partial_y v_2^{(n)}]\}. \end{aligned} \quad (26)$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k5}$ имеем $y 2C_\Phi C_{ev} p_0^{-1} < 0,5$, то

$$\begin{aligned} \|\partial_y u_1^{(n)}\| &\leq C_{\Phi \Psi} N_{\mu y} + \frac{p_0}{4C_\Phi C_{ev}} N_{w2x} N_{\mu y} \leq N_{uy}; \\ \|\partial_y v_2^{(n)}\| &\leq p_0 (2C_\Phi C_{ev})^{-1} \{N_{\mu y} N_{w1x} (p_0 q_0)^{-1/2} + \\ &+ 2C_\Phi p_0^{-1} N_{\mu y} M_{\mu k2}\} + 2C_{\Phi \Psi} N_{\mu y} \leq N_{vy}. \end{aligned}$$

Рассмотрим производные функций $w_i^{(n)}, i = 1, 2$, по переменной y :

$$\begin{aligned} \partial_y w_1^{(n)} &= -\partial_y \mu_1^{(n)} \Phi'_1 - \int_0^s \{\partial_y \mu_1^{(n)} [\partial_x F_1 + \\ &+ \partial_v F_1 \partial_x v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_1 \partial_x w_2^{(n-1)}] - \\ &- \partial_u F_1 \partial_y u_1^{(n-1)} - \partial_{w1} F_1 \partial_y w_1^{(n-1)}\} d\tau; \\ \partial_y w_2^{(n)} &= -\partial_y \mu_2^{(n)} \Phi'_2 - \int_0^s \{\partial_y \mu_2^{(n)} [\partial_x F_2 + \\ &+ \partial_u F_2 \partial_x u_1^{(n-1)} + \partial_{w1} F_2 \partial_x w_1^{(n-1)}] + \\ &+ \partial_v F_2 \partial_y v_2^{(n-1)} + \partial_{w2} F_2 \partial_y w_2^{(n-1)}\} d\tau. \end{aligned} \quad (27)$$

Поскольку для всех $0 \leq y \leq Y_{k8}$ имеем $y NF_5 \leq 0,5; y NF_6 \leq 0,5$, то

$$\begin{aligned} \|\partial_y w_1^{(n)}\| &\leq 2C_\Phi N_{\mu y} + 2y \{N_{\mu y} (NF_1 + NF_4 3C_{\Phi \Psi} + \\ &+ NF_6 N_{w2x}) + NF_3 N_{uy}\} \leq N_{w1y}; \\ \|\partial_y w_2^{(n)}\| &\leq 2C_\Phi N_{\mu y} + 2y \{N_{\mu y} (NF_1 + NF_3 3C_{\Phi \Psi} + \\ &+ NF_5 N_{w1x}) + NF_4 N_{vy}\} \leq N_{w2y}. \end{aligned}$$

В лемме 3 было доказано, что для функций $\partial_x \mu_i^{(n)}, \partial_x w_i^{(n)}, i = 1, 2, \partial_x u_1^{(n)}, \partial_x v_2^{(n)}$ равномерно выполняется условие Липшица по переменной x . Из соотношений (25) – (27) выводится, что последовательные приближения

$$\{\partial_y u_1^{(n)}\}, \{\partial_y v_2^{(n)}\}, \{\partial_y \mu_i^{(n)}\}, \{\partial_y w_i^{(n)}\}, i = 1, 2,$$

при достаточно малом $Y_* \leq Y_1$ сходятся, обеспечивая тем самым существование y функций

$$u_1(x, y, s), v_2(x, y, s), \mu_i(x, y, s),$$

$$w_i(x, y, s), i = 1, 2,$$

ограниченных и непрерывных производных по y на Ω_{Y_*} .

Лемма 4 доказана.

На основании проведенных исследований нами доказана следующая теорема.

Теорема. Пусть функции $P(x, y, u, v)$, $Q(x, y, u, v)$ дважды непрерывно дифференцируемы по всем аргументам, $P \geq p_0 > 0$, $Q \geq q_0 > 0$, $\varphi(x), \psi(x) \in C^{(2)}(\mathbb{R}^1)$. Тогда задача Коши (1), (2) для системы Франкля в гиперболическом случае при $0 \leq y \leq Y_*$ имеет единственное ограниченное, дифференцируемое решение $u(x, y), v(x, y) \in C^{(2,1)}(\Omega)$, при этом функции $u(x, y), v(x, y)$ определяются из системы интегральных уравнений (14).

Итак, полученные в данной работе результаты свидетельствуют об эффективности применения метода дополнительного аргумента к исследованию условий разрешимости и построению численных решений для систем квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка.

Автор выражает благодарность ведущему научному сотруднику профессору А.П. Качалову из лаборатории математических проблем геофизики ПОМИ им. В.А. Стеклова РАН за полезные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Франкль, Ф.И. Избранные труды по газовой динамике [Текст] / Ф.И. Франкль. — М.: Наука, 1973. — 712 с.
2. Рождественский, Б.Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике [Текст] / Б.Л. Рождественский, Н.Н. Яненко. — М.: Наука, 1968. — 592 с.
3. Alekseenko, S.N. A basic scheme to investigate two first order quasi-linear partial differential equations [Текст] / S.N. Alekseenko // Analytical and Approximate Methods / H.-P. Blatt, R. Felix, L.G. Lelevkina, M. Sommer (Eds.) International Conference at the Kyrgyz-Russian-Slavic University. Bishkek — Aachen: Shaker Verlag. — 2003. — P. 1 — 14.
4. Алексеенко, С.Н. Локальное существование ограниченного решения системы Франкля в гиперболическом случае [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина, К.Г. Круц // Исследования по интегро-дифференциальным уравнениям. — Бишкек: Илим, 2006. — Вып. 35. — С. 142—147.
5. Шемякина, Т.А. Построение расширенной характеристической системы для системы Франкля в гиперболическом случае [Текст] / Т.А. Шемякина // Труды Средне-Волжского матем. об-ва: докл. III Междунар. науч. школы. — Ульяновск, 2007. — Т. 9. — № 1. — С. 264—273.
6. Шемякина, Т.А. Условия существования и дифференцируемости решения системы Франкля в гиперболическом случае [Текст] / Т.А. Шемякина // Журнал Средне-Волжского матем. об-ва. — 2011. — Т. 13. — № 2. — С. 127—131.
7. Шемякина, Т.А. Численное решение задачи Коши для системы Франкля на основе метода дополнительного аргумента [Текст] / Т.А. Шемякина // Матер. XVII Междунар. конф. по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'). — М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2011. — С. 669—672.
8. Алексеенко, С.Н. Построение расширенной характеристической системы уравнений для частного случая системы Франкля эллиптического типа [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 3 (83). — С. 73—82.
9. Шемякина, Т.А. Примеры решения задачи Коши для некоторых вариантов системы Франкля эллиптического типа [Текст] / Т.А. Шемякина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 4 (134). — С. 191—197.

УДК 519.1

А.М. Магомедов, Т.А. Магомедов

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОДГРАФА МАКСИМАЛЬНОЙ ПСЕВДОПЛОТНОСТИ

Среди основных направлений исследований в теории графов паросочетания занимают одно из основных мест. Тесные связи теории

паросочетаний с задачами о раскрасках и назначениях с оптимизационными проблемами и задачами расписаний привлекают к ней много-



численных исследователей. При этом широко используются конструкции и подходы из теории NP-полных задач. Как известно, методы теории графов успешно используются для исследования задач расписаний (см., например, [1, 2]).

В данной работе паросочетания выступают в качестве связующего звена между задачей вычисления псевдоплотности графа и задачей о непрерывном расписании минимальной длительности.

В статье используются обозначения и определения, принятые в монографии [3].

Задача вычисления псевдоплотности графа

Максимум отношения числа ребер к числу вершин подграфа графа G обозначим через $density(G)$. Наименьшее целое число, не меньшее, чем $density(G)$, будем называть псевдоплотностью графа G и обозначать $ps(G)$. В работе [4] построен алгоритм, который позволяет для графа $G = (V, E)$ ($|V| = n$, $|E| = l$) вычислять $density(G)$ за время

$$M(n, n + l) \log n, \quad (1)$$

где $M(x, y)$ — время нахождения пропускной способности минимального разреза в сети с x вершинами и y ребрами.

Особенностью принятого в уже упомянутой работе [4] подхода является внимание лишь к мощностным характеристикам графа (n и l), в то время как индивидуальные особенности графа никак не влияют на качество алгоритма, и даже весьма простая структура графа не способствует улучшению приведенной оценки.

В следующем разделе изложен подход к вычислению $ps(G)$, а точнее — к проверке неравенства $ps(G) \leq p$ для заданного натурального p . В заключительном разделе показано применение предложенного подхода к проверке условий существования непрерывного расписания.

Сведение задачи к вычислению паросочетаний в двудольных графах

Для заданного графа

$$G = (V, E), V = \{v_1, \dots, v_n\}, E = \{e_1, \dots, e_l\}, \quad (2)$$

построим двудольную интерпретацию графа $G_1 = (X_1, Y_1, E_1)$:

$$X_1 = \{x_1, \dots, x_l\}; Y_1 = \{y_1, \dots, y_n\};$$

$$d_{G_1} x_i = 2 \forall x_i \in X_1; (x_i, y_j) \in E_1.$$

Такое построение справедливо в том и только в том случае, если ребро e_i и вершина v_j инцидентны в графе G .

Пусть $\Gamma_1(S)$ обозначает множество вершин, смежных в графе G_1 с вершинами множества $S \subseteq X_1$. Тогда, очевидно,

$$ps(G) = \left\lceil \max_{S \subseteq X_1} \frac{|S|}{|\Gamma_1(S)|} \right\rceil.$$

Для целого положительного p определим граф

$$G^{(p)} = (X^{(p)}, Y^{(p)}, E^{(p)}) \quad (3)$$

следующим образом: положим $X^{(p)} = X_1$ и выполним замену каждой вершины $y \in Y_1$ и всех инцидентных ей в графе G_1 ребер $(x_1, y), \dots, (x_k, y)$ на конструкцию из p новых вершин $y_1, \dots, y_p \in Y^{(p)}$ и pk новых ребер:

$$(x_j, y_i) \in E^{(p)}; \quad j = 1, \dots, k; \quad i = 1, \dots, p.$$

Множество вершин, смежных в графе $G^{(p)}$ с вершинами множества $S \subseteq X^{(p)}$, обозначим $\Gamma^{(p)}(S)$. Поскольку

$$|\Gamma^{(p)}(S)| = p |\Gamma_1(S)|,$$

то условия

$$\frac{|S|}{|\Gamma_1(S)|} \leq p \quad \forall S \subseteq X_1 \quad (4)$$

равносильны условиям

$$\frac{|S|}{|\Gamma^{(p)}(S)|} \leq 1 \quad \forall S \subseteq X^{(p)},$$

которые, согласно теореме Холла [1], являются условиями существования в графе (3) полного паросочетания множества $X^{(p)}$ с множеством $Y^{(p)}$. Таким образом, вычисление $ps(G)$ сводится к определению в множестве $\{1, \dots, n\}$ наибольшего элемента p , для которого в графе (3) существует полное паросочетание множества $X^{(p)}$ с множеством $Y^{(p)}$. Применение дихотомии приведет к появлению в оценке сомножителя $\log n$, аналогичного сомножителю в оценке (1).

Напомним, что вычисление максимального паросочетания в двудольном графе из k вершин

может быть выполнено за время $O\left(k^{\frac{5}{2}}\right)$ [5].

Применение к задаче оптимизации расписания

Пусть исходные данные к расписанию обслуживания n требований в системе из l приборов заданы в виде графа (2). Если $e_i = (v_k, v_j)$, то обозначим $\omega_i = (j, k)$; семейство наборов $\omega_i, i = 1, \dots, l$, обозначим Ω . Каждый прибор i должен выполнить точно одну операцию с каждым из требований (необязательно различных) из набора ω_i . Предполагается, что длительность каждой операции равна единице, порядок выполнения операций произволен (условия предшествования отсутствуют); кроме того, запрещается одновременное обслуживание одним прибором более одного требования и одного требования — более чем одним прибором.

Задача о существовании непрерывного расписания, соответствующего исходным данным. Существует ли матрица T из l строк и Δ столбцов с элементами из множества $\{0, 1, 2, \dots, n\}$, такая, что ненулевые элементы в каждом столбце матрицы попарно различны, в каждой i -й строке ненулевые элементы образуют набор ω_i и располагаются в соседних ячейках строки?

(Через Δ обозначена максимальная степень вершины в графе G).

Интерпретация. Если $T_{i,j} = k$, то

при $k > 0$ прибор i в момент времени j выполняет операцию над требованием k ;

при $k = 0$ прибор i в момент времени j не обслуживает ни одного требования.

При $l \geq 2$ и отсутствии ограничений на количество требований, предписанных отдельным приборам, в работе [6] доказана NP-полнота задачи о существовании непрерывного расписания (см. также [7]).

Приведем равносильную формулировку задачи в терминах реберной раскраски графов: *требуется проверить возможность раскраски Δ цветами ребер двудольного представления $G_1 = (X_1, Y_1, E_1)$ графа G так, чтобы*

для каждой вершины $x_i \in X_1$ цвета инцидентных ребер отличались точно на единицу;

для каждой вершины $y_j \in Y_1$ все инцидентные ребра имели разные цвета.

Вопросы NP-полноты проблемы в общем виде рассмотрены в работе [8]. Для четных Δ непрерывное расписание всегда существует [9]. Мы рассматриваем случай, когда Δ нечетно, $\Delta = 2p + 1$. Развернутый обзор по данному вопросу можно найти в работе [10].

Для непрерывного расписания введем следующие обозначения: $N(\Omega')$ — количество различных чисел в наборах из подсемейства $\Omega' \subseteq \Omega$; Ω'_i — подсемейство, образованное в Ω' наборами, один из элементов каждого из которых расположен в столбце с номером $2i$; $i = 1, \dots, p$.

Легко видеть, что

$$|\Omega'| \leq p \max_{i=1, \dots, p} |\Omega'_i| \leq pN(\Omega').$$

Другими словами, для существования непрерывного расписания необходимо выполнение условий

$$\frac{|\Omega'|}{N(\Omega')} \leq p \quad \forall \Omega' \subseteq \Omega. \quad (5)$$

Эти условия равносильны условиям (4). Таким образом, мы показали, что проверка условий (5) сводится к вычислению $ps(G)$. Кроме того, условия (5) являются и достаточными для существования непрерывного расписания; случай $p = 2$ рассмотрен в работе [11], а случай произвольного натурального p — в работе [12].

Итак, в работе рассмотрено применение нового подхода к эффективному вычислению подграфа с максимальной псевдоплотностью для решения задачи о непрерывном расписании.

Работа выполнена при финансовой поддержке средствами Технического задания № 1.1923.2011 1949.2011.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Even, S. On the complexity of timetable and integral multi-commodity flow problems [Text] / S. Even, A. Itai, A. Shamir // SIAM J. on Comp. — 1976. — Vol. 5. — No. 4. — P. 691–703.
2. Магомедов, А.М. Расслоение множества ребер двудольного графа [Текст] / А.М. Магомедов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2010. — № 4 (109). — С. 150–155.

3. Свами, М. Графы, сети и алгоритмы [Текст] / М. Свами, К. Тхуласираман. — М.: Мир, 1984. — 454 с.
4. Goldberg, A.V. Finding a maximum density subgraph [Текст] / A.V. Goldberg // Technical Report Identifier: CSD-84-171. — 12 p.
5. Hopcroft, J.E. An $n^{5/2}$ algorithm for maximum matching in bipartite graphs [Текст] / J.E. Hopcroft, R.M. Karp // SIAM J. Comput. — 1973. — Vol. 2. — P. 225–231.



6. **Танаев, В.С.** Теория расписаний. Многостадийные системы [Текст] / В.С. Танаев, Ю.Н. Сотсков, В.А. Струсович. — М.: Наука, 1989. — 328 с.

7. **Магомедов, А.М.** Непрерывное расписание для специализированных процессоров без отношения предшествования [Текст] / А.М. Магомедов // Вестник Московского энергетического института. — 2009. — № 5. — С. 14–17.

8. **Визинг, В.Г.** Жесткая раскраска инциденторов неориентированного мультиграфа [Текст] / В.Г. Визинг // Дискретный анализ и исследование операций. — 2005. — Сер. 1. — Т. 12. — № 3 — С. 48–53.

9. **Магомедов, А.М.** Уплотнение расписания с директивным сроком, кратным количеству занятий каждого преподавателя [Текст] / А.М. Магоме-

дов // Математические заметки. — 2009. — № 1. — С. 65–72.

10. **Визинг, В.Г.** Задача раскраски инциденторов мультиграфа [Текст] / В.Г. Визинг, А.В. Пяткин // Матер. Рос. конф. «Дискретный анализ и исследование операций». Новосибирск, 28 июня — 2 июля 2004 г. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2004. — С. 6–11.

11. **Магомедов, А.М.** Условия существования непрерывных расписаний длительности пять [Текст] / А.М. Магомедов, А.А. Сапоженко // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычислительная математика и кибернетика. — 2010. — Т. 34. — № 1. — С. 39–44.

12. **Магомедов, А.М.** Условия существования непрерывных расписаний [Текст]: автореф. дис. ... д-ра ф.-м.н. / А.М. Магомедов // М.: ВЦ РАН. — 2011. — 30 с.

УДК 531 (07)

М.Р. Петриченко

РАСЩЕПЛЯЮЩИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В ПРЕДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ КВАЗИЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Решение предельных задач для обыкновенных уравнений с помощью рядов известно как метод разложения по параметру. В задачах с физико-механическим содержанием роль параметра играет какой-либо масштаб предельной задачи. Важную роль играют предположение о малости (о порядке малости) параметра разложения, определение радиуса сходимости по параметру функционального ряда, а также метод (аналитического) продолжения решения за пределы круга сходимости. Первое предположение использует, как правило, физическую интуицию исследователя. Определение радиуса сходимости ряда по параметру связано с изучением предельных значений коэффициентов-функций разложения. Наибольший интерес для приложений представляет продолжение решения. Изучение сходимости разложений по малому параметру и техника вычисления периодических решений гамильтоновых систем с параметром по Пуанкаре

приводится в известном курсе К.Л. Зигеля (см. [1], с. 169–185). О решениях, представляемых рядами, в исторической ретроспективе подробно написано в главе XVI известного учебника [2]. Принципиально новый подход к проблеме продолжения решений предложен С. Каплуном. Теорема продолжения Каплуна утверждает следующее [3]: пусть $f(x; \varepsilon)$ — функция, заданная на множестве E , $D(f) = E$, и такая, что

$$f(x, \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} 0, \forall x \in E.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \exists E_\varepsilon, \text{mes}(E_\varepsilon \Delta E) < \sigma(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow f(x, \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} 0, \forall x \in E_\varepsilon. \end{aligned}$$

Иначе говоря, в теореме Каплуна речь идет о продолжении функции на более широкое множество без увеличения нормы. Согласно

указаниям работы [3], доказательство теоремы С. Каплуна — это чистое доказательство существования; способа продолжения функции и расширения области определения не приводится. Теорема Каплуна обосновывает правомерность продолжения коэффициентов-функций разложений (или «склеивания», «сшивания») в рядах по параметру (ϵ) и существование пограничных слоев решений (пересечений и симметрических разностей областей сходимости внешних и внутренних разложений). Условие равномерной сходимости, указанное в [3], излишнее: достаточно потребовать квазиравномерной сходимости $f(x)$ к нулю (или сходимости с точностью до ϵ) на обоих множествах, E, E_ϵ .

В статье приводится некоторая схема, альтернативная методу разложения по параметру, позволяющая «стереть» параметр разложения и свести задачу о сходимости разложения к сходимости последовательности коэффициентов-функций разложения, безотносительно к величине параметра разложения.

Простейшие примеры расщепления

Применение расщепляющих разложений для решения нелинейного уравнения на бесконечном промежутке впервые продемонстрировано, по-видимому, в работе [4]. Вот пример тестирования. Пусть

$$\frac{dy}{dx} = 1 + y^2, x > 0, y(0) = 0.$$

Тогда $y = \operatorname{tg} x$; решение этой задачи Коши можно попытаться искать в виде функционального ряда по степеням параметра λ :

$$y = \sum_{k=1} \lambda^k f_k(x).$$

Подстановка в исходное уравнение и сравнение коэффициентов-функций при одинаковых степенях параметра λ приводят к линейной расщепленной системе:

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{dx} &= \frac{1}{\lambda}, \\ \frac{df_2}{dx} - f_1^2 &= 0, \\ &\dots\dots\dots, \\ \frac{df_k}{dx} - \sum_{i=1}^k f_i f_{k-i} &= 0, \end{aligned}$$

причем все начальные условия однородны: $f_k(0) = 0, k \geq 1$. Тогда

$$\begin{aligned} f_1(x) &= \frac{x}{\lambda}, \quad f_2(x) = \frac{x^3}{3\lambda^2}, \\ f_3(x) &= \frac{2x^5}{15\lambda^3}, \dots, f_n(x) = \frac{2^{2n}(2^{2n}-1)}{\lambda^n 2n!} B_n x^{2n-1}, \end{aligned}$$

где B_n — числа Бернулли.

Иначе говоря, расщепляющий ряд приводится к разложению тангенса. Радиус сходимости полученного ряда равен $\pi/2$. Очевидно, что в данном примере любая сумма расщепляющего ряда не зависит от величины параметра расщепления λ .

Выбор расщепляющего разложения произволен. В рассматриваемом примере можно взять, например, такое расщепляющее разложение:

$$y = 1 + \sum_{k=1} \lambda^k f_k(x); f_1(0) + \frac{1}{\lambda} = f_k(0) = 0.$$

Условно говоря, первый член разложения задает некоторое значение y , правый фланг ряда — добавки к этому значению. Подстановка в исходное уравнение и сравнение коэффициентов при одинаковых степенях параметра λ расщепляет уравнение:

$$f_1' - 2f_1 = \frac{2}{\lambda}; f_k' - 2f_k = \sum_{i=1}^k f_{k-i} f_i, k > 1.$$

Тогда

$$\begin{aligned} f_1' - 2f_1 &= \frac{2}{\lambda}, \quad f_1(x) = -\frac{1}{\lambda}; \\ f_2' - 2f_2 &= \frac{1}{\lambda^2}, \quad f_2 = \frac{e^{2x}-1}{2\lambda^2}; \\ f_3' - 2f_3 &= -\frac{e^{2x}-1}{\lambda^3}, \quad f_3(x) = -\frac{xe^{2x}}{\lambda^3} + \frac{e^{2x}-1}{2\lambda^3}; \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

и тогда

$$y = e^{2x} - 1 - xe^{2x} + \dots$$

Получается разложение тангенса по степеням экспоненты (ряд Бюрмана — Лагранжа). В окрестности $x = 0$ оба разложения совпадают. И в этом случае алгоритм решения «стирает» параметр λ из функционального ряда.



Пример тестирования решения линейного уравнения с нелинейными предельными условиями. Пусть рассматривается такая предельная задача:

$$y'' + 2xy' = 0, \quad 0 < x < \infty;$$

$$y^2(0) + \alpha y'(0) - 1 = y(\infty) = 0$$

с вещественным параметром α .

Расщепляющий ряд имеет вид

$$y = 1 + \sum_{k=1} \lambda^k y_k(x).$$

Он сводит нелинейную предельную задачу к цепочке линейных задач:

$$y_k'' + 2xy_k' = 0, \quad 2y_k(0) + \alpha y_k'(0) = 0,$$

$$k \geq 1, \quad f_1(\infty) + \frac{1}{\lambda} = f_k(\infty) = 0.$$

Тогда

$$y(x) = \frac{\operatorname{erfc}(x)}{1 - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} - \frac{\alpha^2 \int_0^x \exp(-z^2) dz}{(\alpha - \sqrt{\pi})^2} +$$

$$+ \frac{\alpha^2}{(\alpha - \sqrt{\pi})^3} + O(\alpha^4).$$

Пусть $\alpha \rightarrow 0$. Тогда $y \rightarrow \operatorname{erfc}(x)$. При $\alpha \rightarrow \infty$ $y \rightarrow 0$ равномерно на промежутке $0 < x < \infty$. Действительно, предельная задача

$$y'' + 2xy' = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad y'(0) = y(\infty) = 0,$$

имеет только тривиальное решение $y = 0$.

Примеры нелинейных предельных задач

Ниже приводится несколько примеров решения нелинейных предельных задач для известных уравнений. Доказываются следующие свойства расщепляющих разложений:

расщепляющий ряд продолжает решение на весь промежуток изменения независимой переменной;

расщепляющий ряд не связан с необходимостью сращивания (аналитического продолжения) на границах различных промежутков значений параметра разложения. Поэтому исчезают границы между внутренними, промежуточными и внешними разложениями по параметру (по физическому масштабу задачи);

каждый отрезок (конечный или бесконечный) расщепляющего ряда аппроксимирует пограничный слой решения на всем промежутке изменения независимой переменной.

Пример 1. Конечный промежуток: уравнение Л. Крокко (L. Crocco).

Пусть

$$\tau \frac{d^2 \tau}{du^2} + u = 0, \quad 0 < u < 1;$$

$$\left(\frac{d\tau}{du} \right)_{u=0} = \tau(1) = 0,$$

причем τ интерпретируется как касательное напряжение трения, u — скорость в пограничном слое. Матричная запись уравнения Крокко, а именно

$$\frac{d}{du} \begin{pmatrix} \tau \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ -\frac{u}{\tau} \end{pmatrix}, \quad v := \frac{d\tau}{du},$$

указывает на гамильтоновскую (лаксовскую) структуру этого уравнения.

Расщепляющий ряд берется в виде

$$\tau = \tau_0 + \sum_{k=1} \lambda^k f_k(u),$$

что позволяет расщепить исходную предельную задачу в последовательность линейных предельных задач:

$$\tau_0 \frac{d^2 f_1}{du^2} + \frac{u}{\lambda} = 0, \quad f_1'(0) = f_1(1) + \frac{\tau_0}{\lambda} = 0;$$

$$\tau_0 \frac{d^2 f_2}{du^2} + f_1 \frac{d^2 f_1}{du^2} = 0, \quad f_2'(0) = f_2(1) = 0;$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\tau_0 \frac{d^2 f_k}{du^2} + \sum_{i=1}^k f_i \frac{d^2 f_{k-i}}{du^2} = 0, \quad f_k'(0) = f_k(1) = 0.$$

Ограничиваясь первыми членами расщепляющего ряда, получаем:

$$\tau = \frac{1-u^3}{6\tau_0} + \frac{30\tau_0^2-4}{180\tau_0^3} + \frac{5(1-6\tau_0^2)u^2-u^6}{180\tau_0^3},$$

причем $\tau_0 = \tau(0)$.

Пусть в расщепляющем разложении $u = 0$. Тогда

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{1}{6} + \sqrt{\frac{1}{180}}} = 0,4911.$$

Точное значение $\tau(0) = 0,4696$, т. е. первые три слагаемых расщепляющего ряда позволяют определить напряжения трения на стенке с погрешностью меньше 4 %, не прибегая к аналитическому продолжению рядов.

Структура расщепляющего ряда такова: первое слагаемое, $\tau = \tau_0$, задает пристеночное трение. Последующие слагаемые, $f_k(u)$, аппроксимируют распределение трения во внешней, струйной, части решения. Важно, что расщепляющий ряд описывает распределение трения в слое одной ветвью аналитической функции, без асимптотических и промежуточных разложений. Не требуется применять аналитического продолжения рядов из одного круга сходимости в другой.

Примечания к примеру 1

1. Решение однородной предельной задачи этого примера необходимо должно удовлетворять тождеству

$$\int_0^1 \left(\frac{d\tau}{du} \right)^2 du = \frac{1}{2}.$$

2. Уравнение Крокко можно записать в виде системы:

$$\frac{d\tau}{du} = \zeta; \quad \frac{d\zeta}{du} = -\frac{u}{\tau}.$$

Очевидно, это каноническая система с гамильтонианом

$$E(\tau, \zeta, u) = \frac{\zeta^2}{2} + u \ln \tau.$$

Тогда получается, что в действительном движении функционал (действие или первообразная функция)

$$F(\tau) := \int_0^1 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d\tau}{du} \right)^2 + u \ln \frac{1}{\tau} \right) du \rightarrow \inf \geq 0.$$

Действительно, для $F(\tau)$ необходимое условие минимума совпадает с уравнением Крокко. В данном примере исходное (нелинейное) уравнение совпадает с уравнением Лагранжа для некоторого положительного функционала.

Итак, справедливо следующее утверждение.

Утверждение. *Необходимое условие экстремума (минимума) $F(\tau)$ равносильно уравнению Крокко. Обратно, уравнение Крокко порождает гамильтонову систему, реализуемую на экстре-*

малях $F(\tau)$. Учитывая пункт 1 примечания, можно утверждать, что $\tau(u)$ минимизирует $F(\tau)$ в

классе $\tau \in W_2^1(0, 1)$ с ограничением $\left\| \frac{d\tau}{du} \right\|^2 = 1$.

Пример 2. Свободно-конвективное движение (приближение Буссинеска) формализуется предельной задачей пятого порядка:

$$f''' + 3ff'' - 2f'^2 + \vartheta = 1, \quad \vartheta'' + 3\sigma f \vartheta' = 0;$$

$$f(0) = f'(0) = f'(\infty) = \vartheta(0) - 1 = \vartheta(\infty) = 0.$$

Векторная запись, т. е.

$$\frac{d}{d\zeta}(f, u, \tau, \vartheta, q) = (u, \tau, 1 + 2u^2 - 3f\tau, q, -3\sigma f q);$$

$$u = \frac{df}{d\zeta}, \quad \tau := \frac{du}{d\zeta}, \quad q := \frac{d\vartheta}{d\zeta},$$

указывает на отсутствие гамильтоновской симметрии у исходной системы.

Здесь $f = f(\zeta)$ – безразмерная функция тока; $\vartheta = \vartheta(\zeta)$ – безразмерный температурный напор; ζ – безразмерная координата,

$$\zeta = \frac{y}{\delta(x)}, \quad \delta(x) = \sqrt{4\nu^2 \frac{x}{g}}, \quad \zeta \in (0, \infty);$$

x, y – продольная и поперечная координаты, $x > 0, y > 0$; $\delta(x)$ – толщина пограничного слоя; σ – число Прандтля; штрихуется производная по переменной ζ .

Пусть $\sigma = 1$. Расщепляющие ряды ищутся в виде

$$f(\zeta) = a + \sum_{k=1} \lambda^k f_k(\zeta), \quad \vartheta(\zeta) = \sum_{k=1} \lambda^k \vartheta_k(\zeta),$$

причем предельные условия на коэффициенты-функции ставятся таким образом:

$$f_1(0) + \frac{a}{\lambda} = f_1'(0) = f_1'(\infty) = \vartheta_1(0) - \frac{1}{\lambda} = \vartheta_1(\infty) = 0;$$

$$f_k(0) = f_k'(0) = f_k'(\infty) = \vartheta_k(0) = \vartheta_k(\infty) = 0.$$

Система расщепленных линейных уравнений записывается в виде

$$f_1''' + 3af_1'' + \vartheta_1 = 0, \quad \vartheta_1'' + 3a\vartheta_1' = 0;$$

$$f_k''' + 3af_k'' - 2 \sum_{i=1}^k f_i' f_{k-i}' + 3 \sum_{i=1}^k f_i f_{k-i}'' +$$

$$+ \vartheta_k = 0, \quad \vartheta_k'' + 3a\vartheta_k' + 3 \sum_{i=1}^k f_i \vartheta_{k-i}' = 0.$$



В первом приближении распределение скорости и температурного напора по толщине пограничного слоя имеет вид

$$f(\zeta) = \frac{1 - \exp(-3a\zeta)}{27a^3} - \frac{\zeta \exp(-3a\zeta)}{9a^2};$$

$$f'(\zeta) = \frac{\zeta \exp(-3a\zeta)}{3a}; \quad \vartheta(\zeta) = \exp(-3a\zeta),$$

причем для определения параметра a используется следующее простое соображение: из расщепляющего ряда и предельных условий на коэффициенты-функции следует, что $a = f(\infty)$.

Но $f(\infty) = (3a)^{-3}$, т. е. $a = 3^{-3/4} = 0,4387$.

Во втором приближении распределение температурного напора имеет вид

$$\begin{aligned} \vartheta(\zeta) = & \exp(-3a\zeta) + a\zeta \exp(-3a\zeta) + \\ & + \frac{\exp(-3a\zeta)}{3} - \frac{\zeta \exp(-6a\zeta)}{54a^3} - \\ & - \frac{\exp(-6a\zeta)}{324a^4} + \frac{\zeta \exp(-3a\zeta)}{27a^3} + \\ & + \frac{\exp(-3a\zeta)}{81a^4} - \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{108a^4} \right) \exp(-3a\zeta), \end{aligned}$$

и поэтому во втором приближении тепловой поток на обогреваемой стенке $\zeta = 0$ будет равен

$$-\left(\frac{d\vartheta}{d\zeta} \right)_{\zeta=0} = 3a - a - \frac{1}{36a^3} = \frac{2}{\sqrt[4]{27}} - \frac{\sqrt[4]{27^3}}{36} = 0,5448.$$

Полученное решение аппроксимирует действительное («струйное») распределение скорости в пограничном слое с максимумом скорости внутри слоя и монотонным падением напора поперек слоя, от нагретой стенки ($y = 0$) к внешней границе слоя ($y \rightarrow \infty$). Решение Эккерта качественно совпадает с полученным здесь решением. Так, по Эккерту, тепловой поток на стенке

$$-\vartheta'(0) = \left(-\frac{d\vartheta}{d\zeta} \right)_{\zeta=0} = 0,5046,$$

если не учитывать граничных эффектов на кромке (в окрестности сечения $x = 0$, где числа Рэлея малы) обогреваемой пластины. Обычно теплопередача рассчитывается по продольной координате x . Тогда во втором приближении:

$$\frac{N_x}{\sqrt[4]{G_x}} = 0,5448; \quad N_x := \frac{\alpha x}{\kappa}; \quad G_x := \frac{gx^3}{v^2},$$

где α , κ — коэффициенты теплоотдачи (теплопередачи) и теплопроводности.

Завышенное значение теплопередачи компенсирует влияние передней кромки поверхности ($x = O(\delta)$).

Пример 3. Вихревой шнур у твердой поверхности и экмановский пограничный слой (Д.К. Батчелор).

Система пятого порядка (без теплопередачи), т. е.

$$f''' + \frac{3+m}{2} ff'' - mf'^2 = S^2 - g^2;$$

$$g'' + \frac{3+m}{2} fg' - (1+m)fg = 0,$$

плюс предельные условия —

$$f(0) = f'(0) = f'(\infty) = g(0) - 1 + S = g(\infty) - S = 0$$

стилизуют вихревую плазму при вращении вязкой жидкости над твердой плоскостью

$$\zeta = 0, \quad \zeta := \frac{y}{\delta}, \quad \delta = \sqrt{\frac{vr}{u_\infty}}.$$

Исходная система уравнений не гамильтоновская, вектор правой части не обладает необходимой симметрией:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\zeta}(f, u, \tau, g, v) = & \left(u, \tau, \tau^2 - g^2 + mu^2 - \right. \\ & \left. - \frac{3+m}{2} f\tau, v, (1+m)ug - \frac{3+m}{2} fv \right), \\ v := & \frac{dg}{d\zeta}. \end{aligned}$$

В этих уравнениях $f = f(\zeta)$ — функция тока радиального движения;

$$g = g(\zeta) := \frac{u_\varepsilon}{u_\infty + u_w};$$

S, m — параметры, определяемые как

$$m := \frac{d \ln u_\infty}{d \ln r}, \quad S = \frac{u_\infty}{u_\infty + u_w};$$

u_ε — азимутальная компонента скорости в пограничном слое, u_∞ — азимутальная скорость «внешнего» движения, u_w — азимутальная скорость твердой поверхности, r — радиальная

координата в абсолютной (неподвижной) координатной системе.

Вращение вязкой жидкости над плоскостью $\zeta = 0$, неподвижной ($S = 1$) или подвижной ($S \neq 1$), порождает вторичное течение с осевой скоростью:

$$h(\zeta) = \frac{1-m}{2} \zeta f'(\zeta) - \frac{3+m}{2} f(\zeta).$$

Если $h(\infty) > 0$, то вторичное течение направлено от твердой поверхности. Тогда $f(\infty) < 0$. Если же $f(\infty) > 0$, то осевой поток направлен внутрь пограничного слоя, $h(\infty) < 0$, пограничный слой «втягивает» в себя линии тока внешнего движения.

Известны следующие частные случаи:

$S = 0, m = 1$ – пограничный слой твердого вихря над вращающимся диском;

$S = 1, m = 1$ – твердый вихрь над неподвижной плоскостью;

$S = \text{varia}, m = 1$ – твердый вихрь над вращающейся плоскостью;

$S = 1, m = \text{varia}$ – произвольный вихрь над неподвижной плоскостью.

Решения написанной системы ищутся в виде расщепляющих рядов:

$$f(\zeta) = a + \sum_{k=1} \lambda^k f_k(\zeta), g(\zeta) = S + \sum_{k=1} \lambda^k g_k(\zeta),$$

причем коэффициенты-функции удовлетворяют предельным условиям:

$$\begin{aligned} f_1(0) + \frac{a}{\lambda} &= f_1'(0) = f_1'(\infty) = \\ &= g_1(0) - \frac{1-2S}{\lambda} = g_1(\infty) = 0; \\ f_k(0) &= f_k'(0) = f_k'(\infty) = g_k(0) = \\ &= g_k(\infty) = 0, \quad k \geq 2. \end{aligned}$$

Расщепленная система уравнений

$$\begin{aligned} f_k''' + \frac{3+m}{2} a f_k'' + \sum_{i=1}^k f_i f_{k-i}'' - (1+m) \sum_{i=1}^k f_i' f_{k-i}' + \\ + 2S g_k + \sum_{i=1}^k g_i g_{k-i} &= 0; \\ g_k'' + \frac{3+m}{2} a g_k' + \frac{3+m}{2} \sum_{i=1}^k f_i g_{k-i}' - \\ - (1+m) S f_k' - (1+m) \sum_{i=1}^k g_i f_{k-i}' &= 0, \end{aligned}$$

$k \geq 2$, имеет простые экспоненциальные решения.

Вот основные физические результаты, полученные в первом ($k = 1$) приближении:

пусть $S = 0, m = 1$. Тогда $h(\infty) = -4\sqrt{\frac{1}{2}} = -0,8408$.

Точное значение составляет $-0,886$ (погрешность вычисления не больше 5%);

пусть $S = 1, m = 1$. Тогда $h(\infty) = 24\sqrt{\frac{7}{32}} = 1,3678$.

Точное значение составляет $1,35$ (погрешность вычисления не больше 1%);

устойчивое движение твердого ($m = 1$) вихря возможно, если a – вещественное число. Но

$$a = 4\sqrt{\frac{(1-2S)(1+6S)}{32}},$$

значит параметр скольжения заполняет интервал $-1/6 < S < 1/2$. Предельное значение $S = 1/2$ означает, что $U_\infty = U_w$, т. е. жидкость и твердая плоскость вращаются с одинаковой угловой скоростью. Никакого пограничного слоя нет, профиль азимутальной скорости u_ϕ однороден. Предельное значение $S = -1/6$ означает, что угловая скорость твердой поверхности в 7 раз больше угловой скорости, причем диск $\zeta = 0$ и твердый вихрь вращаются в разные стороны;

Таким образом, доказано следующее:

расщепляющие разложения позволяют, во-первых, аппроксимировать решения нелинейных предельных задач, не привлекая внешних и внутренних масштабов и аналитического продолжения рядов; во-вторых, для каждого коэффициента-функции расщепляющего ряда удается получить линейную предельную задачу; наконец, в-третьих, для каждого коэффициента-функции расщепляющего ряда линейная предельная задача связана с минимумом некоторого положительного функционала, своего для каждого коэффициента-функции расщепляющего ряда; вариационная задача не связана с линеаризацией исходного уравнения и не требует изоспектральной деформации (преобразования) исходного нелинейного уравнения;

соответствующее линейное уравнение для каждого (локального) коэффициента-функции расщепляющего ряда необходимо для выполнения экстремального условия для неотрицательного квадратичного функционала («локальное необходимое условие слабого экстремума»).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Зигель, К.Л.** Лекции по небесной механике [Текст] / К.Л. Зигель. — М.: Изд-во ИЛ, 1959. С. 169—185.
2. **Уиттекер, Е.Т.** Аналитическая динамика [Текст] / Е.Т. Уиттекер. — Ижевск: Изд-во «Регулярная и хаотическая динамика», 1998. — С. 540—573.
3. **Коул, Дж.** Методы возмущений в прикладной математике [Текст] / Дж. Коул. — М.: Мир, 1971. — С. 87—88.
4. **Шварц, Л.** Математические методы для физических наук [Текст] / Л. Шварц, Д. Юэ. — М.: Мир, 1965. — С. 76—77, пример 1-7.
5. **Фаддеев, Л.Д.** К теории устойчивости стационарных плоскопараллельных течений идеальной жидкости [Текст] / Л.Д. Фаддеев // Краевые задачи математической физики. Т. 5 (Записки научных семинаров ЛОМИ. — Т. 21).—М.,Л.: Наука, 1971. — С. 164—172.

УДК 539.3

В.В. Тихомиров

АНТИПЛОСКАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ТРЕЩИНЫ, ПРОНИКАЮЩЕЙ В УПРУГОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ ПРИ НЕИДЕАЛЬНОМ КОНТАКТЕ ФАЗ

Исследованию взаимодействия трещин с включениями различных конфигураций, начиная со второй половины 60-х годов прошлого столетия, посвящено большое количество публикаций. Неослабевающее внимание к этой проблеме обуславливается потребностями механики неоднородных сред и механики композиционных материалов, поскольку изучение упругих полей на микромеханическом уровне дает как понимание происходящих в гетерогенных структурах процессов, так и позволяет прогнозировать сопротивление подобных сред появлению и развитию трещин.

Рассмотрение проблемы проводилось как в рамках плоских задач, так и при антиплоской деформации композиции. В качестве математического аппарата применялись различные аналитические методы (метод комплексных потенциалов Колосова – Мусхелишвили [1–3], метод дислокаций [4, 5]) и численные подходы (метод граничных интегральных уравнений [6] и метод конечных элементов [7, 8]). При этом в аналитических исследованиях дело, как правило, сводилось к решению сингулярных интегральных уравнений, которое строилось с помощью численных процедур. Замкнутые аналитические решения подобных задач практически отсутствуют. Исключение составляет работа [9], в которой получено приближенное решение для полубесконечной трещины моды III, а также статья [10], где найдено точное решение антиплоской задачи о радиальной трещине конечной длины, частично проникающей в круговое включение. К сожалению, решение,

построенное в [10], не позволяет рассмотреть случай, когда вершина трещины совпадает с центром включения.

Подавляющее большинство работ рассматриваемого направления основано на предположении об идеальном контактировании матрицы и включения. Фактически условия идеального контакта фаз игнорируют присутствие интерфейсной поврежденности между матрицей и включением, возникающей вследствие несовершенства адгезии, наличия микротрещин и пор. Заметим, что только в работах [11, 12] на основе метода комплексных потенциалов построены приближенные аналитические решения задач о взаимодействии трещины с включением, имеющим интерфейсный слой, с несовершенным контактом.

В настоящей работе на примере антиплоской задачи для полубесконечной трещины, проникающей до центра упругого кругового включения, применен новый подход, не использовавшийся ранее в этом классе задач. Композиция матрица – включение рассматривается как гетерогенная среда, содержащая особую линию – интерфейсную границу, на которой имеет место разрыв упругого модуля материала, а в случае несовершенного контакта – разрыв перемещений. С этой точки зрения граница раздела может рассматриваться как своеобразный дефект. Действенным методом решения двумерных задач математической физики, содержащих дефекты структуры, служит аппарат обобщенных интегральных преобразований (преобразований через дефект),



развитый в книге [13]. В отличие от указанных выше традиционных методов решения подобных задач, в которых используется процедура сшивания решений, построенных для отдельных подобластей, в рассматриваемом подходе строится единая разрывная функция, определяющая упругие поля во всей области.

В работе используется обобщенное интегральное преобразование Меллина, применяемое к дифференциальному уравнению антиплоской деформации гетерогенной среды с кусочно-постоянным модулем сдвига. В ходе реализации этой процедуры (при интегрировании по частям) удовлетворяются условия контакта на интерфейсной границе. Ранее указанный подход использовался в задаче о трещине продольного сдвига, проникающей в круговое включение с промежуточным слоем при идеальных контактах на межфазных границах [14]. В данном случае принимается, что контакт матрицы и включения является неидеальным. В отличие от модели идеального контакта, в которой предполагается, что на границе раздела фаз имеет место непрерывность перемещений и напряжений, в рассматриваемом случае неидеального контакта используется так называемая модель линейных пружин, согласно которой напряжения на интерфейсе непрерывны и пропорциональны скачку перемещений. Для коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины получена простая точная формула, структура которой наглядно отражает влияние на КИН неоднородности композиции и неидеальности контакта на интерфейсной границе. Рассмотрены две предельные ситуации, отвечающие случаям идеального и скользящего контакта на интерфейсе.

Постановка задачи и получение гиперсингулярного интегрального уравнения

Рассмотрим неограниченную упругую среду, находящуюся в состоянии антиплоской деформации и содержащую полубесконечную трещину, проникающую в упругое круговое включение до его центра. Модули сдвига матрицы и включения будем считать постоянными и равными μ_0 и μ_1 , соответственно. Будем считать, что к берегам трещины приложены самоуравновешенные сосредоточенные силы величины T_0 на расстоянии r_0 от ее вершины. Благодаря наличию симметрии задача сводится

к решению дифференциального уравнения для неоднородной среды:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial w}{\partial r} = 0 \quad (1)$$

$$(0 \leq r < \infty, 0 \leq \varphi \leq \pi)$$

при граничных условиях на берегах трещины

$$w(r, 0) = 0; \quad \tau_{\varphi z}(r, \pi) = T_0 \delta(r - r_0) \quad (2)$$

и условиях неидеального контакта матрицы и включения (непрерывность напряжений и их пропорциональность скачку перемещений):

$$\tau_{rz}(r_1 - 0, \varphi) = \tau_{rz}(r_1 + 0, \varphi) = \tau(\varphi);$$

$$\tau(\varphi) = \lambda[w(r_1 - 0, \varphi) - w(r_1 + 0, \varphi)]. \quad (3)$$

Здесь $w(r, \varphi)$ — перемещения в полярных координатах r, φ с началом в вершине трещины, $\mu = \mu(r)$ — модуль сдвига композиции, причем $\mu(r) = \mu_1$ для $0 \leq r < r_1$ и $\mu(r) = \mu_0$ для $r_1 < r < \infty$; $\delta(r)$ — дельта-функция.

Касательные напряжения, входящие в условия (2) и (3), определяются формулами

$$\tau_{\varphi z} = \frac{\mu}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi}, \quad \tau_{rz} = \mu \frac{\partial w}{\partial r}. \quad (4)$$

Входящая в условия (3) величина $\lambda = \text{const} \geq 0$ характеризует несовершенство интерфейса и может быть названа параметром интерфейсной жесткости. В общем случае этот параметр является функцией координаты точки межфазной границы [15] (неоднородный несовершенный контакт). В предельном случае при $\lambda = \infty$ из условий (3) вытекают условия идеального контакта, а при $\lambda = 0$ — условия скользящего контакта фаз.

Для решения задачи воспользуемся обобщенным интегральным преобразованием Меллина (преобразованием через дефект) [13]:

$$W(p, \varphi) = \int_0^\infty \mu(r) w(r, \varphi) r^{p-1} dr;$$

$$\mu(r) w(r, \varphi) = \frac{1}{2\pi i} \int_L W(p, r) r^{-p} dp,$$

где L — контур интегрирования.

В результате интегрирования по частям слагаемых в уравнении (1), а также использования условий (2) и первого условия из (3) приходим к следующей неоднородной краевой задаче:

$$W''(p, \varphi) + p^2 W(p, \varphi) = pr_1^p u(\varphi); \quad (5)$$

$$W(p, 0) = 0; \quad W'(p, \pi) = T_0 r_0^p,$$

где $u(\varphi) = \mu_1 w_-(\varphi) - \mu_0 w_+(\varphi)$ — неизвестная функция, обусловленная скачком модуля сдвига и перемещений на границе раздела фаз; при этом

$$w_{\pm}(\varphi) = w(r_1 \pm 0, \varphi). \quad (6)$$

Согласно работе [13], решение задачи (5) может быть представлено в форме

$$W(p, \varphi) = pr_1^p \int G(\varphi, \theta) u(\theta) d\theta + \frac{\sin p\varphi}{p \cos p\pi} T_0 r_0^p,$$

где функция Грина имеет вид

$$G(\varphi, \theta) = \frac{1}{p \cos p\pi} \begin{cases} \cos p(\pi - \theta) \sin p\varphi, & \varphi \leq \theta; \\ \cos p(\pi - \varphi) \sin p\theta, & \varphi \geq \theta. \end{cases}$$

Отсюда, используя обратное преобразование Меллина, получаем:

$$\mu(r)w(r, \varphi) = w_0(r, \varphi) + \int_0^\pi u(\theta) J(r, \varphi, \theta) d\theta, \quad (7)$$

где $w_0(r, \varphi)$ — решение задачи о полубесконечной трещине, находящейся в однородной среде, которое определяется формулой

$$w_0(r, \varphi) = \frac{T_0}{2\pi} \ln \frac{r + r_0 + 2\sqrt{rr_0} \sin \frac{\varphi}{2}}{r + r_0 - 2\sqrt{rr_0} \sin \frac{\varphi}{2}}, \quad (8)$$

а ядро интегрального слагаемого имеет вид

$$J(r, \varphi, \theta) = R(r) \chi(r, \varphi, \theta); \quad (9)$$

$$R(r) = (r_1 - r) \sqrt{r_1 r} / (2\pi);$$

$$\chi(r, \varphi, \theta) = \frac{\cos[(\theta + \varphi)/2]}{r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos(\theta + \varphi)} - \frac{\cos[(\theta - \varphi)/2]}{r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos(\theta - \varphi)}.$$

Таким образом, согласно соотношению (7), перемещения в рассматриваемой задаче представляются в виде суммы перемещений соответствующей задачи для однородной среды и добавки (интегральное слагаемое в (7)), обусловленной наличием включения и несо-

вершенством контакта. Подчеркнем, что левая и правая части в соотношении (7) являются разрывными функциями вследствие разрыва модуля упругости и перемещений на границе раздела материалов.

Переходя в соотношении (7) к пределам при $r \rightarrow r_1 \pm 0$, с учетом формул (9), а также второго условия из (3), приходим к системе двух уравнений относительно предельных значений перемещений (6) на границе матрица — включение

$$\mu_1 w_-(\varphi) + \mu_0 w_+(\varphi) = 2\omega_{01}(\varphi);$$

$$w_-(\varphi) - w_+(\varphi) = \tau(\varphi)/\lambda,$$

где $\omega_{01}(\varphi) = w_0(r_1, \varphi)$.

В результате подстановки решения этой системы в формулу (7) получим представление для перемещений во всей области через неизвестное контактное напряжение $\tau(\varphi)$:

$$\begin{aligned} \mu(r)w(r, \varphi) = & w_0(r, \varphi) + \\ & + 2mR(r) \int_0^\pi \omega_{01}(\theta) \chi(r, \theta, \varphi) d\theta + \\ & + 2lr_1 R(r) \int_0^\pi \tau(\theta) \chi(r, \theta, \varphi) d\theta, \end{aligned} \quad (10)$$

где $m = (\mu_1 - \mu_0)/(\mu_1 + \mu_0)$ — биупругая постоянная, характеризующая соотношение модулей сдвига материалов, которая при $0 < \mu_0/\mu_1 < \infty$ изменяется от -1 до 1 ; для включения более жесткого, по сравнению с матрицей, $0 < m < 1$, а для мягкого включения берется $-1 < m < 0$; случаю же $m = 0$ соответствует однородная среда. Предельные ситуации, когда $m \rightarrow \pm 1$, отвечают абсолютно твердому включению и отверстию, соответственно.

Второй параметр, входящий в представление (10), $l = \mu_0 \mu_1 / [(\mu_1 + \mu_0) \lambda r_1]$ — параметр несовершенства интерфейса ($0 \leq l < \infty$); значению $l \rightarrow \infty$ соответствует идеальный контакт, а $l = 0$ — скользящий контакт матрицы и включения.

Вычисляя на основе представлений (4) и (10) касательные напряжения $\tau_{rz}(r, \varphi)$ и переходя к пределу, например, при $r \rightarrow r_1 - 0$, приходим к интегральному уравнению вида

$$\tau(\varphi) + \frac{l}{4\pi} \int_0^\pi K(\theta, \varphi) \tau(\theta) d\theta = (1 \mp m) \tau_{01}(\varphi), \quad (11)$$

где



$$K(\theta, \varphi) = \frac{\cos[(\theta + \varphi)/2]}{\sin^2[(\theta + \varphi)/2]} - \frac{\cos[(\theta - \varphi)/2]}{\sin^2[(\theta - \varphi)/2]},$$

$$\tau_{01}(\varphi) = \frac{T_0}{\pi r_1} \frac{\rho(\rho^2 - 1) \sin(\varphi/2)}{1 + 2\rho^2 \cos \varphi + \rho^4}, \quad \rho = \sqrt{\frac{r_0}{r_1}}. \quad (12)$$

Знак минус в правой части уравнения (11) отвечает случаю $\rho \geq 1$, т. е. когда сосредоточенные силы приложены к берегам трещины вне включения, а знак плюс — когда эти силы приложены внутри включения ($\rho \leq 1$).

Отметим, что интегральное уравнение (11) является гиперсингулярным [16] (интеграл понимается в смысле конечной части по Адамару) с симметричным ядром.

Если контакт на интерфейсе является идеальным, т. е. $\lambda = \infty$ ($l = 0$), то уравнение (11) вырождается и контактные напряжения определяются формулой

$$\tau(\varphi) = (1 \mp m) \tau_{01}(\varphi);$$

это совпадает с их представлением в данном предельном случае, полученном в работе [14].

Точное решение гиперсингулярного интегрального уравнения

Ядро уравнения (11) допускает следующее представление:

$$K(\theta, \varphi) = -2 \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \frac{\cos^2 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\varphi}{2}}{\left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\varphi}{2} \right)^2}. \quad (13)$$

На основании формул (12) и (13) решение интегрального уравнения (11) будем искать в виде

$$\tau(\varphi) = \frac{T_0}{r_1} \sin \frac{\varphi}{2} t\left(\cos \frac{\varphi}{2}\right), \quad (14)$$

где $t[\cos(\varphi/2)]$ — безразмерная четная функция своего аргумента.

Тогда после замены переменных

$$x = \cos \frac{\varphi}{2}, \quad \xi = \cos \frac{\theta}{2}$$

и использования свойства четности функции $t(\xi)$ уравнение (11) можно представить в следующей форме:

$$t(\xi) - \frac{l}{2\pi} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-\xi^2} t(\xi)}{(\xi-x)^2} d\xi = f(x);$$

$$f(x) = \frac{1 \mp m}{\pi} \frac{\rho(\rho^2 - 1)}{(\rho^2 - 1)^2 + 4\rho^2 x^2}. \quad (15)$$

Поскольку

$$\int_{-1}^1 \frac{h(\xi) d\xi}{(\xi-x)^2} = \frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \frac{h(\xi) d\xi}{\xi-x},$$

где интеграл в правой части представляет собой сингулярный интеграл типа Коши, из уравнения (15) для безразмерного контактного напряжения окончательно получим уравнение вида

$$t(\xi) - \frac{l}{2\pi} \frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-\xi^2} t(\xi)}{\xi-x} d\xi = f(x). \quad (16)$$

Решение уравнения (16) будем искать в виде ряда по полиномам Чебышева второго рода $U_{2k}(x)$:

$$t(x) = \sum_{k=0}^{\infty} A_{2k} U_{2k}(x). \quad (17)$$

Подставляя представление (17) в уравнение (16) и учитывая, что [17]

$$\frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-\xi^2} U_{2k}(\xi)}{\xi-x} d\xi = -\pi(2k+1) U_{2k}(x),$$

получим для определения коэффициентов ряда (17) соотношение

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_{2k} [1 + l(k+1/2)] U_{2k}(x) = f(x).$$

С учетом вида функции $f(x)$ в уравнении (15) коэффициенты A_{2k} вычисляются отсюда проще всего с помощью представления производящей функции для полиномов Чебышева [17]:

$$\frac{1}{1-2tx+t^2} = \sum_{k=0}^{\infty} U_k(x) t^k.$$

В итоге получаем

$$A_{2k} = \frac{(-1)^{k+1} (m \pm 1) \rho^{\pm(2k+1)}}{\pi [1 + l(k+1/2)]},$$

где верхний знак отвечает случаю $\rho < 1$, а нижний — $\rho > 1$.

Таким образом, точное решение гиперсингулярного интегрального уравнения (16) примет вид

$$t(x) = \frac{m \pm 1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \rho^{\pm(2k+1)}}{1 + l(k+1/2)} U_{2k}(x).$$

Отсюда на основании формулы (14) приходим к следующему представлению для контактного напряжения:

$$\tau(\varphi) = \frac{T_0(m \pm 1)}{\pi r_1} \sin \frac{\varphi}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \rho^{\pm(2k+1)}}{1 + l(k + 1/2)} \times \\ \times U_{2k} \left(\cos \frac{\varphi}{2} \right). \quad (18)$$

Коэффициент интенсивности напряжений

С точки зрения механики разрушения интерес представляет коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины, который определяется формулой

$$K_{III} = \lim_{r \rightarrow 0} \sqrt{2\pi r} \tau_{\varphi z}(r, 0). \quad (19)$$

Вычисляя согласно формулам (4), (8) и (10) касательные напряжения на продолжении трещины при $r \rightarrow 0$, будем иметь выражение

$$\tau_{\varphi z}(r, 0) = K_{III}^0 [1 - mh(\rho) - l\rho \int_0^{\pi} \tau(\theta) \sin \frac{\theta}{2} d\theta] r^{-1/2},$$

где $h(\rho) = 1$ для $\rho \leq 1$, $h(\rho) = \rho^2$ для $\rho > 1$, а $K_{III}^0 = \sqrt{2/(\pi r_0)} T_0$ представляет собой КИН для полубесконечной трещины при том же виде нагружения в однородной среде [14].

Отсюда по определению (19) приходим к следующей формуле для нормализованного КИН:

$$N = \frac{K_{III}}{K_{III}^0} = 1 - mh(\rho) - l\rho \int_0^{\pi} \tau(\theta) \sin \frac{\theta}{2} d\theta. \quad (20)$$

Структура выражения (20) такова: первое слагаемое определяет нормализованный КИН в неограниченной однородной среде, второе учитывает неоднородность композиции (наличие включения), а третье отражает влияние несовершенства контакта фаз на интерфейсной границе.

Подставляя в (20) представление для контактных напряжений (18) и выполняя интегрирование, получаем простые выражения для КИН, зависящие от положения точки приложения нагрузки:

$$N(m, l, \rho) = 1 + [(m+1)l/(l+2) - m]\rho^2 \\ \text{при } \rho < 1, \quad (21)$$

$$N(m, l, \rho) = 2(1-m)/(l+2) \text{ при } \rho > 1. \quad (22)$$

Обсуждение результатов

Таким образом, нормализованный КИН зависит от трех механических параметров: биупругой постоянной m ($-1 < m < 1$), характеризующей степень неоднородности композиции, параметра несовершенства интерфейсного контакта l ($0 \leq l < \infty$) и относительного расстояния $\rho = \sqrt{r_0/r_1}$, определяющего место приложения сосредоточенной нагрузки (при $0 < \rho < 1$ силы приложены внутри включения, а при $1 < \rho < \infty$ силы приложены вне включения).

В случае идеального контакта ($l = 0$) на границе матрица – включение, из выражений (21) и (22) вытекает формула

$$N(m, 0, \rho) = 1 - mh(\rho),$$

согласующаяся с результатом, полученным в работе [14]. В случае жесткого включения, когда $\mu_1 > \mu_0$ и, следовательно, $0 < m < 1$, величина КИН снижается по сравнению с однородной средой, и распространение трещины тормозится. Мягкое включение, у которого $\mu_0 > \mu_1$, а $-1 < m < 0$, напротив, приводит к возрастанию КИН и способствует распространению трещины.

Во втором предельном случае (скользящего контакта), когда $l \rightarrow \infty$, из формул (21), (22) получаем, что

$$N(m, \infty, \rho) = 1 + \rho^2 \text{ при } 0 < \rho < 1,$$

$$N(m, \infty, \rho) = 0 \text{ при } 1 < \rho < \infty.$$

Как и следовало ожидать, при скользящем контакте фаз КИН не зависит от соотношения модулей сдвига материалов, а нагрузка, приложенная вне включения, не влияет на напряженное состояние в вершине трещины.

Так же как при идеальном контакте, несовершенство интерфейса приводит к отсутствию зависимости КИН от точки приложения сил, когда эта точка расположена в матрице ($\rho > 1$). В то же время, в отличие от классической модели контакта, КИН при $l \neq 0$ терпит разрыв в точке $\rho = 1$, т. е. когда силы приложены на межфазной границе.

Если силы приложены к берегам трещины вне включения ($\rho > 1$), то из формулы (22) вытекает, что $N(m, l, \rho) < N(m, 0, \rho)$. Это означает, что несовершенство контакта на межфазной



границе усиливает уменьшение КИН, по сравнению с идеальным вариантом в случае жесткого включения ($0 < m < 1$), т. е. способствует торможению трещины. Для мягкого включения ($-1 < m < 0$) несовершенство взаимодействия матрицы и включения ослабляет возрастание КИН и тем самым снижает способность трещины к распространению.

Если же сосредоточенная нагрузка приложена внутри включения, то согласно формуле (21), $N(m, l, \rho) > N(m, 0, \rho)$. Следовательно, в этом случае неклассическая модель контакта на границе раздела фаз вызывает противоположный эффект, т. е. уменьшает способность жесткого включения к торможению трещины и, наоборот, усиливает способность мягкого включения к ее развитию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Tamate, O.** The effect of a circular inclusion on the stresses around a line crack in a sheet under tension [Text] / O. Tamate // Int. J. Fracture Mech. — 1968. — Vol. 4. — № 3. — P. 257–266.
2. **Bhargava, R.R.** A misfitting elastic inclusion in an infinite plane containing a crack [Text] / R.R. Bhargava // J. of Elast. — 1977. — Vol. 7. — № 2. — P. 201–211.
3. **Cheeseman, B.A.** The interaction of a curved crack with a circular elastic inclusion [Text] / B.A. Cheeseman, M.H. Santare // Int. J. Fracture. — 2000. — Vol. 103. — № 2. — P. 259–277.
4. **Erdogan, F.** Interaction between a circular inclusion and arbitrary oriented crack [Text] / F. Erdogan, G.D. Gupta, M. Ratwani // Trans. ASME. Ser.E. J. Appl. Mech. — 1974. — Vol. 41. — № 4. — P. 1007–1013.
5. **Liu, Z.G.** Interaction of the mode-III antiplane shear crack with a circular inhomogeneity [Text] / Z.G. Liu, R. Wang, J.J. Ma // Acta Mechanica. — 2005. — Vol. 178. — № 1. — P. 101–109.
6. **Williams, R.C.** SGBEM analysis of crack-particle(s) interaction due to elastic constants mismatch [Text] / R.C. Williams, A.V. Phan, H.V. Tippur, [et al.] // Eng. Fract. Mech. — 2007. — Vol. 74. — № 2. — P. 314–331.
7. **Li, R.** Variation of the energy release rate as a crack approaches and passes through an elastic inclusion [Text] / R. Li, A. Chudnovsky // Int. J. Fracture. — 1993. — Vol. 59. — № 4. — P. R69–R74.
8. **Lipetzky, P.** Crack-particle interaction in two-phase composites. Part I: Particle shape effects [Text] / P. Lipetzky, S. Schmauder // Int. J. Fracture. — 1994. — Vol. 65. — № 3. — P. 345–358.
9. **Steif, P.S.** A semi-infinite crack partially penetrating a circular inclusion [Text] / P.S. Steif // Trans. ASME. Ser.E. J. Appl. Mech. — 1987. — Vol. 54. — № 1. — P. 87–92.
10. **Wang, X.** Closed-form solutions for a mode III radial matrix crack penetrating a circular inhomogeneity [Text] / X. Wang, E. Pan, W.J. Feng // Appl. Math. Modelling. — 2008. — Vol. 32. — P. 2925–2935.
11. **Kim, K.** Interaction between a radial matrix crack and three-phase circular inclusion with imperfect interface in plane elasticity [Text] / K. Kim, L.J. Sudak // Int. J. Fracture. — 2005. — Vol. 131. — № 2. — P. 155–172.
12. **Park, P.G.** Stress intensity factor for an interface Griffith crack interacting with two imperfect interfaces [Text] / P.G. Park, L.J. Sudak // Math. Mech. Solids. — 2010. — Vol. 15. — № 3. — P. 353–367.
13. **Попов, Г.Я.** Концентрация упругих напряжений возле штампов, разрезов, тонких включений и подкреплений [Текст] / Г.Я. Попов. — М.: Наука, 1982. — 344 с.
14. **Тихомиров, В.В.** Трещина продольного сдвига, частично проникающая в упругое круговое включение с покрытием [Текст] / В.В. Тихомиров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 2(122). — С. 142–149.
15. **Sudak, L.J.** A circular inclusion with inhomogeneously imperfect interface in plane elasticity [Text] / L.J. Sudak, C.Q. Ru, P. Schiavone, A. Mioduchowski // J. of Elast. — 1999. — Vol. 55. — № 1. — P. 19–41.
16. **Линьков, А.М.** Комплексный метод граничных интегральных уравнений теории упругости [Текст] / А.М. Линьков. — М.: Наука, 1999. — 382 с.
17. **Градштейн, И.С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений [Текст]: справочник / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. — М.: Наука, 1971. — 1108 с.

УДК 621.822.171-251

Нгуен Ван Тханг, Д.Г. Арсеньев, А.К. Беляев

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ВРАЩЕНИЯ ВТУЛКИ В УПОРНОМ ПОДШИПНИКЕ СКОЛЬЖЕНИЯ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИКИ СМАЗКИ И ЦЕНТРОБЕЖНЫХ СИЛ

В рамках классической теории короткого подшипника обычно рассматривается твердый вал (ротор), вращающийся внутри гнезда, фиксированного в пространстве. Зазор между твердыми телами заполнен несжимаемым маслом [1 – 3]. В данной работе предлагается исследовать более сложный случай упорного подшипника скольжения, который состоит из трех частей (рис. 1): фиксированный цилиндр (гнездо) 3, плавающий цилиндр (втулка) 2, вращающийся с угловой скоростью ω_2 , и плавающий вал (ротор) 1, вращающийся со скоростью ω_1 . Зазоры между твердыми телами заполнены несжимаемым маслом 4, причем 4-1 и 4-2 обозначают соответственно внутреннее и внешнее поля.

Динамике роторов в подшипниках скольжения посвящено много публикаций, но все авторы использовали обычное уравнение для течения масла в зазоре, т. е. уравнение Рей-

нольдса без учета центробежных сил. В этих работах рассматривалось движение ротора либо с учетом только гидродинамических сил [2], либо указанных сил и сил трения [4, 5].

Целью настоящей работы является определение скорости вращения втулки в упорном подшипнике скольжения с учетом гидродинамики смазки и центробежных сил, влиянием которых нельзя пренебрегать при быстром вращении ротора [6].

Аналитическая зависимость давления от положения ротора в зазоре получается из решения гидродинамического уравнения для течения масла в зазоре (уравнение Рейнольдса). Имея в распоряжении решение из теории короткого подшипника, можно получить выражения для сил и моментов: силы, действующие на ротор, определяются путем интегрирования функции распределения давления по поверхности ротора, а моменты, действующие на ротор и на втул-

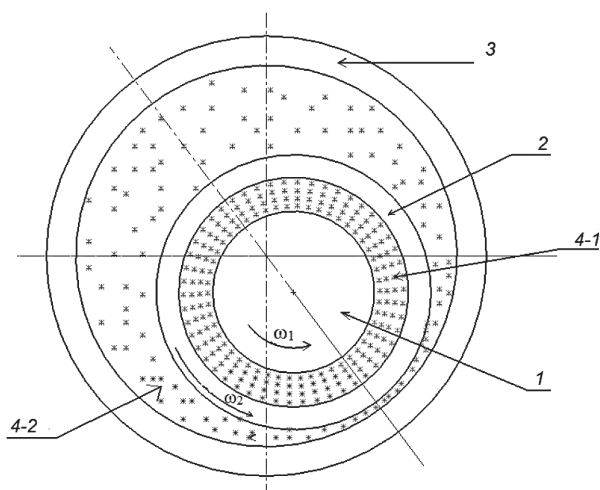


Рис. 1. Схематическое представление упорных подшипников скольжения с тремя цилиндрами:
1 – плавающий ротор; 2 – плавающая втулка (кольцо);
3 – фиксированный цилиндр (корпус подшипника); 4 – несжимаемое масло (4-1 – внутреннее поле, 4-2 – внешнее поле); ω_1 , ω_2 – угловые скорости вращения элементов 1 и 2

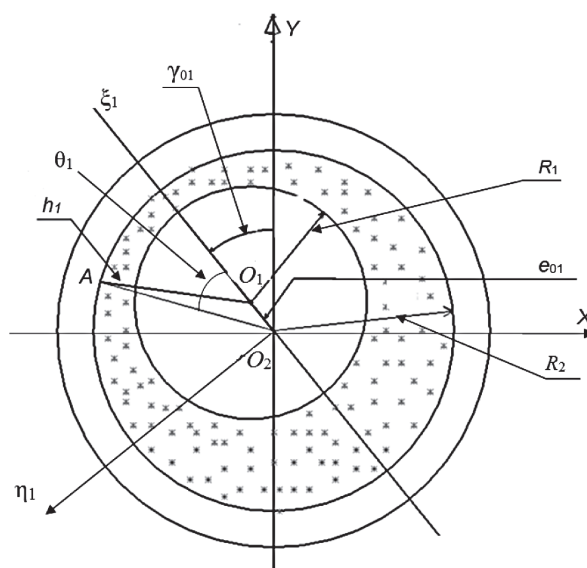


Рис. 2. Схема обозначений для системы «втулка-ротор»



ку, можно определить с помощью интегрирования касательного напряжения $\tau_{r\varphi}$ в цилиндрической системе координат. В этом случае (см. рис. 1) для того, чтобы найти момент, действующий на втулку, надо проинтегрировать $\tau_{r\varphi}$ по обеим ее сторонам. Скорость втулки ω_2 считается постоянной и определена из условия, что суммарный момент, действующий на втулку с обеих сторон, равен нулю.

Определение границы смазочного слоя

Сначала не будем учитывать влияния внешнего поля смазки 4-2, рассмотрим систему «втулка-ротор». Ее система отчета закреплена в центре втулки, несжимаемое масло 4-1 находится в зазоре между втулкой (O_2, R_2) (причем ее ось вращения фиксирована в пространстве) и вращающимся плавающим ротором (O_1, R_1) (рис. 2). Втулка вращается с угловой скоростью ω_2 , а ротор — с угловой скоростью ω_1 .

Здесь приняты обозначения: $h_{01} = R_2 - R_1$ — номинальный зазор; $e_1 = e_{p1}(t)$ — эксцентриситет центра плавающего ротора; $\gamma_1 = \gamma_{p1}(t)$ — угол, описывающий положение линии между центрами плавающего ротора и вращающейся втулки.

Движение ротора на смазочном слое является нестационарным, т. е. положение и скорость его центра зависят от времени, поскольку от времени зависят внешняя нагрузка и реакция смазочного слоя. Пусть в момент времени $t = t_0$ центр ротора O_1 занимает положение, соответствующее эксцентриситету $e_{01} = e_{p1}(t_0)$ и углу $\gamma_{01} = \gamma_{p1}(t_0)$, описывающему положение линии между центрами плавающего ротора и втулки; тогда

$$\theta_1 = \theta_1(t_0, \varphi) = \varphi - \gamma_{p1}(t_0) = \varphi - \gamma_{01}.$$

В работе [7] получено выражение для ширины зазора (толщина смазочного слоя):

$$h_1(\theta_1, t) = h_{01} - e_1(t) \cos \theta_1; \quad (1)$$

при $t = t_0$

$$h_1(\theta_1, t_0) = h_{01} - e_{01} \cos \theta_1, \quad (2)$$

а также для силы на единицу длины, действующей на ротор:

$$q_{01} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} (p_{01} - p_{01}^*) dz = \frac{\mu L^2 (\omega_1 + \omega_2)}{2h_{01}^2} \bar{q}_{01}, \quad (3)$$

где

$$\bar{q}_{01} = \left[\left(\frac{2\dot{\gamma}_1}{\omega_1 + \omega_2} - 1 \right) \varepsilon_1 \sin \theta_1 + \frac{2\dot{\varepsilon}_1}{\omega_1 + \omega_2} \cos \theta_1 \right] \times \times (1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^{-3}; \quad (4)$$

$\varepsilon_1 = e_1/h_{01}$ и $p_{01} = p_{01}(r, \varphi, z, t)$ — функция глобального давления в зазоре 4-1; $p_{01}^* = p_{01}^*(r, \varphi, t)$ — функция давления на концах подшипника; μ, L — соответственно динамическая вязкость смазки и длина подшипника.

В локальной системе координат ($O_2\xi_1, O_2\eta_1$), где направление $O_2\xi_1$ соответствует $\theta_1 = 0$ ($\varphi = \gamma_{p1}$), проекции силы $\mathbf{F}_1^P$, действующей на ротор от смазочного слоя, имеют следующий вид:

$$F_{1\xi}^P = L \int_{\bar{\theta}_1}^{\bar{\theta}_2} (R_2 - h_1) q_{01} \cos \theta_1 d\theta_1; \quad (5)$$

$$F_{1\eta}^P = L \int_{\bar{\theta}_1}^{\bar{\theta}_2} (R_2 - h_1) q_{01} \sin \theta_1 d\theta_1. \quad (6)$$

Вопрос о границах смазочного слоя в настоящее время не решен, несмотря на значительное количество работ по этой проблеме. В теории динамических нагруженных подшипников обычно пользуются одной из следующих двух гипотез:

за величины углов, которыми определяются начало и конец смазочного слоя, принимаются значения, где избыточное давление равно нулю, т. е. в местах, где размеры зазора — наименьший и наибольший, чаще всего это $\bar{\theta}_1 = 0$ и $\bar{\theta}_2 = \pi$ (только половина зазора) [4, 8];

величины углов составляют $\bar{\theta}_1 = 0, \bar{\theta}_2 = 2\pi$, т. е. смазочный слой окружает весь ротор. Согласно этой гипотезе существует отрицательное давление, соизмеримое или даже равное по величине положительному.

В настоящей работе используется вторая гипотеза, т. е. смазочный слой окружает весь ротор.

Распределение положений равновесия ротора в смазочном слое

Подставив выражения (3), (4) в (5), получим выражение для проекции силы $\mathbf{F}_1^P$ на направление $O_2\xi_1$:

$$F_{1\xi}^P = \frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2)}{2h_{01}^2} \left[\int_0^{2\pi} \frac{R_1 A \sin \theta_1 \cos \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \\ \left. + \int_0^{2\pi} \frac{R_1 B \cos^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \int_0^{2\pi} \frac{e_1 A \sin \theta_1 \cos^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \\ \left. + \int_0^{2\pi} \frac{e_1 B \cos^3 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right], \quad (7)$$

где

$$A = \left(\frac{2\dot{\gamma}_1}{\omega_1 + \omega_2} - 1 \right) \varepsilon_1; \quad B = \frac{2\dot{\varepsilon}_1}{\omega_1 + \omega_2}. \quad (8)$$

Легко увидеть, что первый и третий интегралы в формуле (7) равны нулю. Это значит, что выражение для проекции силы $\mathbf{F}_1^P$ на направление $\mathbf{O}_2\xi_1$ есть $F_{1\xi}^P$ и не содержит угловой скорости $\dot{\gamma}_1$. Если по первой гипотезе эта угловая скорость входит в выражение для $F_{1\xi}^P$, то получаем выражение

$$F_{1\xi}^P = \frac{2\mu L^3 \dot{\varepsilon}_1}{h_{01}^2} \left[\int_0^{\pi} \frac{R_1 \cos^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \\ \left. + \int_0^{\pi} \frac{e_1 \cos^3 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right]. \quad (9)$$

Аналогично, подставив выражения (3), (4) в (6), получим выражение для проекции силы $\mathbf{F}_1^P$ на направление $\mathbf{O}_2\eta_1$:

$$F_{1\eta}^P = \frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) \varepsilon_1}{h_{01}^2} \left(\frac{2\dot{\gamma}_1}{\omega_1 + \omega_2} - 1 \right) \times \\ \times \left[\int_0^{\pi} \frac{R_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \\ \left. + \int_0^{\pi} \frac{e_1 \cos \theta_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right]. \quad (10)$$

Пусть ротор (O_1, R_1) нагружен постоянной силой. Обозначим координаты равновесного положения в подшипнике как $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$ и $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$, тогда $\dot{\varepsilon}_1^* = 0$, $\dot{\gamma}_1^* = 0$. Из уравнений (9), (10) следует, что

$$F_{1\xi}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) = 0;$$

$$F_{1\eta}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) = -\frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) \varepsilon_1^*}{h_{01}^2} \times \\ \times \left[\int_0^{\pi} \frac{R_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \int_0^{\pi} \frac{e_1^* \cos \theta_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right].$$

Координаты $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$ находятся из условий равновесия:

$$|\mathbf{Q}^P| = |\mathbf{F}_1^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)| = \\ = \sqrt{(F_{1\xi}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*))^2 + (F_{1\eta}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*))^2} = \\ = \frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) \varepsilon_1^*}{h_{01}^2} \times \\ \times \left[\int_0^{\pi} \frac{R_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \int_0^{\pi} \frac{e_1^* \cos \theta_1 \sin^2 \theta_1}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right]; \quad (11)$$

$$\operatorname{tg} \theta_1^* = \frac{F_{1\eta}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)}{F_{1\xi}^P(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)} = -\infty, \quad (12)$$

где $\theta_1^* = (\mathbf{F}_1^P, \mathbf{O}_2\xi_1)$. Легко увидеть из выражения (11), что если скорость ротора ω_1 постоянна, то при увеличении внешней силы $\mathbf{Q}^P$ до бесконечности относительный эксцентриситет ε_1^* стремится к единице. Если принять, что внешняя сила $\mathbf{Q}^P$ направлена вертикально вниз, то из условия (11) следует, что величина $|\mathbf{Q}^P|$ пропорциональна угловой скорости ротора ω_1 . Внешней нагрузкой $\mathbf{Q}^P$ может являться, например, сила тяжести ротора, который находится в положении равновесия $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$. Следовательно, кроме выполнения соотношения (11), должно быть справедливо и другое:

$$\theta_1^* = (\mathbf{F}_1^P, \mathbf{O}_2\xi_1) = -\gamma_1^*, \quad (13)$$

т. е. сила $\mathbf{F}_1^P$ должна быть направлена вертикально вверх. Из соотношений (12), (13) следует, что $\gamma_1^* = \pi/2$.

Множество равновесных положений центра ротора в смазочном слое есть горизонтальный отрезок O_2M (на рис. 3 этот отрезок выделен жирной линией), соответственно $\varepsilon_1^* \in [0, 1]$ зависит от внешней нагрузки $\mathbf{Q}^P$ на ротор. Если

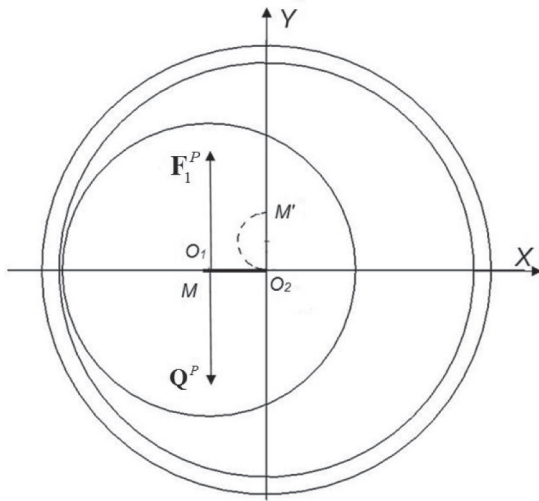


Рис. 3. Система втулка-ротор, на которой показаны множество равновесных положений центра ротора (отрезок O_2M) и кривая равновесных положений (пунктир O_2M') по первой гипотезе

использовать первую гипотезу, то кривая равновесных положений центра ротора O_1 есть полуокружность. На рис. 3 эта кривая показана пунктиром. Заметим, что $O_2M = O_2M' = h_{01} = R_2 - R_1$.

Распределение положений равновесия втулки в смазочном слое в зазоре между корпусом подшипника и ротором

До сих пор мы рассматривали только систему «втулка-ротор» и не учитывали влияния внешнего поля смазки 4-2. Теперь рассмотрим весь подшипник, который состоит из трех твердых тел (см. рис. 1). Для того, чтобы найти силу F_2^B , действующую на втулку (O_2, R_2) со стороны внешнего смазочного слоя, рассмотрим систему «корпус подшипника-втулка». Аналогично получают проекции этой силы в локальной системе координат ($O\xi_2, O\eta_2$), где направление $O\xi_2$ соответствует $\theta_2 = 0$ ($\varphi = \gamma_{B2}(t_0)$) (рис. 4):

$$F_{2\xi}^B = L \int_0^{2\pi} (R - h_2) q_{02} \cos \theta_2 d\theta_2; \quad (14)$$

$$F_{2\eta}^B = L \int_0^{2\pi} (R - h_2) q_{02} \sin \theta_2 d\theta_2. \quad (15)$$

Следует отметить, что корпус подшипника (O, R) неподвижен, что позволяет по аналогии получить выражения для этих проекций:

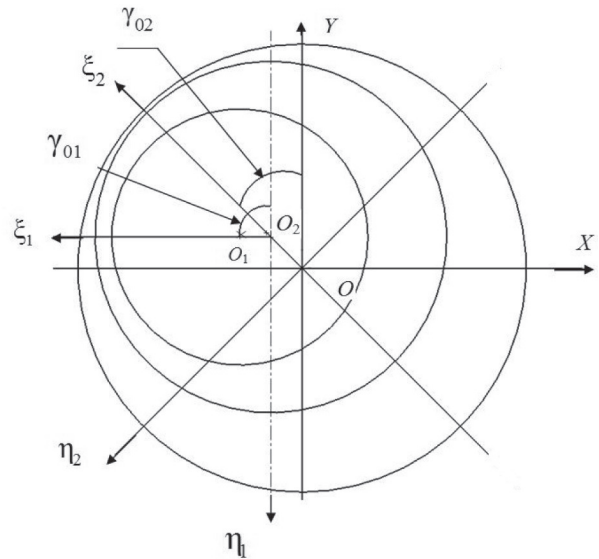


Рис. 4. Схема обозначений для упорного подшипника скольжения

$$F_{2\xi}^B = \frac{2\mu L^3 \dot{\varepsilon}_2}{h_{02}^2} \left[\int_0^\pi \frac{R_2 \cos^2 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2 \cos \theta_2)^3} d\theta_2 + \int_0^\pi \frac{e_2 \cos^3 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2 \cos \theta_2)^3} d\theta_2 \right]; \quad (16)$$

$$F_{2\eta}^B = \frac{\mu L^3 \omega_2 \varepsilon_2}{h_{02}^2} \left(\frac{2\dot{\gamma}_2}{\omega_2} - 1 \right) \times \left[\int_0^\pi \frac{R_2 \sin^2 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2 \cos \theta_2)^3} d\theta_2 + \int_0^\pi \frac{e_2 \cos \theta_2 \sin^2 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2 \cos \theta_2)^3} d\theta_2 \right]; \quad (17)$$

где $h_{02} = R - R_2$ — номинальный зазор внешнего смазочного слоя; $e_2 = e_{B2}(t)$ — эксцентриситет центра плавающей втулки; $\gamma_2 = \gamma_{B2}(t)$ — угол, описывающий положение линии между двумя центрами плавающей втулки и неподвижного корпуса подшипника.

Движение втулки в смазочном слое является нестационарным, т. е. положение и скорость его центра зависят от времени, поскольку от времени зависят внешняя нагрузка и реакция от внешнего смазочного слоя.

Пусть в момент времени $t = t_0$ центр втулки O_2 занимает положение, соответствующее эксцентриситету $e_{02} = e_{B2}(t_0)$ и углу, описывающему положение линии между двумя центрами плавающей втулки и неподвижного корпуса

подшипника. Тогда $\gamma_{02} = \gamma_{B2}(t_0)$; отсюда справедливо равенство:

$$\theta_2 = \theta_2(t_0, \varphi) = \varphi - \gamma_{B2}(t_0) = \varphi - \gamma_{02}.$$

Проекции силы $\mathbf{F}_1^B$, действующей на втулку от внутреннего смазочного слоя в локальной системе координат $(O\xi_2, O\eta_2)$, выражаются как

$$F_{1\xi}^B = LR_2 \int_0^{2\pi} q_{01} \cos(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02}) d\theta_1; \quad (18)$$

$$F_{1\eta}^B = LR_2 \int_0^{2\pi} q_{01} \sin(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02}) d\theta_1. \quad (19)$$

Подставив выражения (3), (4) в (18), (19), получим выражения для проекций этой силы $\mathbf{F}_1^B$:

$$F_{1\xi}^B = \frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) R_2}{2h_{01}^2} \times \left[A \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta_1 \cos(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02})}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \quad (20)$$

$$\left. + B \int_0^{2\pi} \frac{\cos \theta_1 \cos(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02})}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right];$$

$$F_{1\eta}^B = \frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) R_2}{2h_{01}^2} \times \left[A \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta_1 \sin(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02})}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 + \right. \quad (21)$$

$$\left. + B \int_0^{2\pi} \frac{\cos \theta_1 \sin(\theta_1 + \gamma_{01} - \gamma_{02})}{(1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1)^3} d\theta_1 \right].$$

Пусть втулка (O_2, R_2) нагружена постоянной силой $\mathbf{Q}^B$. Обозначим координаты равновесного положения в подшипнике как $(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)$; тогда $\dot{\varepsilon}_2^* = 0, \dot{\gamma}_2^* = 0$. Из уравнений (16), (17) следует, что

$$F_{2\xi}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*) = 0;$$

$$F_{2\eta}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*) = -\frac{\mu L^3 \omega_2 \varepsilon_2^*}{h_{02}^2} \times \left[\int_0^\pi \frac{R_2 \sin^2 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2^* \cos \theta_2)^3} d\theta_2 + \int_0^\pi \frac{e_2^* \cos \theta_2 \sin^2 \theta_2}{(1 - \varepsilon_2^* \cos \theta_2)^3} d\theta_2 \right].$$

Пусть $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$ обозначает координаты равновесного положения центра ротора в подшипнике, тогда $\dot{\varepsilon}_1^* = 0, \dot{\gamma}_1^* = 0$. Из уравнений (20), (21) следует, что

$$F_{1\xi}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) = -\frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) R_2}{2h_{01}^2} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta_1 \cos(\theta_1 + \gamma_1^* - \gamma_2^*)}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1;$$

$$F_{1\eta}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) = -\frac{\mu L^3 (\omega_1 + \omega_2) R_2}{2h_{01}^2} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta_1 \sin(\theta_1 + \gamma_1^* - \gamma_2^*)}{(1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1)^3} d\theta_1.$$

Через $\mathbf{F}_{1,2}^B$ обозначается суммарная сила, действующая на втулку от внутреннего и внешнего полей смазки, т. е. $\mathbf{F}_{1,2}^B = \mathbf{F}_1^B + \mathbf{F}_2^B$. Величины $(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)$ находятся из условий равновесия:

$$|\mathbf{Q}^B| = |\mathbf{F}_{1,2}^B| = \left\{ \left[F_{1\xi}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\xi}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*) \right]^2 + \right. \quad (22)$$

$$\left. + \left[F_{1\eta}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\eta}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*) \right]^2 \right\}^{1/2};$$

$$\operatorname{tg} \theta_2^* = \frac{F_{1\eta}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\eta}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}{F_{1\xi}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\xi}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}, \quad (23)$$

где $\theta_2^* = (\mathbf{F}_{1,2}^B, \mathbf{O\xi}_2)$.

Если принять, что внешняя сила $\mathbf{Q}^B$ тоже направлена вертикально вниз, то из формул (22) следует, что $\mathbf{Q}^B$ пропорциональна угловой скорости ротора ω_1 и угловой скорости втулки ω_2 . Внешней нагрузкой $\mathbf{Q}^B$ может являться, например, сила тяжести втулки. Втулка находится в положении равновесия $(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)$, т. е. кроме соотношения (22), сила $\mathbf{F}_{1,2}^B$ должна быть направлена вертикально вверх, откуда

$$\theta_2^* = (\mathbf{F}_{1,2}^B, \mathbf{O\xi}_2) = -\gamma_2^*. \quad (24)$$

Из соотношений (23), (24) следует равенство

$$\operatorname{tg} \gamma_2^* = -\operatorname{tg} \theta_2^* = -\frac{F_{1\eta}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\eta}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}{F_{1\xi}^B(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*) + F_{2\xi}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}.$$

Когда центры ротора и втулки находятся в положении равновесия, то $\gamma_1^* = \pi/2, \varepsilon_1^* \in [0, 1]$.



Каждое положение равновесия ротора $(\varepsilon_1^*, \gamma_1^*)$ в зазоре соответствует одной кривой равновесных положений центра втулки, которая определяется уравнением

$$\operatorname{tg} \gamma_2^* = -\frac{F_{1\eta}^B(\varepsilon_1^*, \pi/2) + F_{2\eta}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}{F_{1\xi}^B(\varepsilon_1^*, \pi/2) + F_{2\xi}^B(\varepsilon_2^*, \gamma_2^*)}. \quad (25)$$

Определение постоянной скорости вращения втулки в подшипнике скольжения

Пусть ротор (O_1, R_1) вращается с заданной постоянной угловой скоростью ω_1 , а втулка (O_2, R_2) вращается с неизвестной пока постоянной угловой скоростью ω_2 . Эта величина ω_2 входит в выражения для всех сил, действующих на ротор и втулку. Для того, чтобы определить движение частей подшипника, надо получить функцию скорости ω_2 от скорости ω_1 . До сих пор скорость вращения втулки определялась только экспериментальным методом [9, 10]. В данной работе мы получим аналитическую зависимость ω_2 от ω_1 . Следует заметить, что момент трения есть только в области положительного избыточного давления смазки. Поскольку в положении равновесия $\dot{\varepsilon}_1^* = \dot{\gamma}_1^* = \dot{\varepsilon}_2^* = \dot{\gamma}_2^* = 0$, то из уравнений (3), (4) получаем, что избыточное давление положительно в области $\theta_1 \in [\pi, 2\pi]$ и аналогично в области $\theta_2 \in [\pi, 2\pi]$.

В работе [7] получены выражения для моментов, действующих на втулку со стороны внутреннего поля смазки, для коротких подшипников скольжения:

$$M_1^B = R_2 \int_{\pi-L/2}^{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \tau_{r\varphi} \Big|_{r=R_2} dz d\theta_1, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} \tau_{r\varphi} \Big|_{r=R_2} &= 2\mu \overline{D}_1 \left(1 - \frac{2\ln\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)}{\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)^2 - 1} \right) - \\ &- \frac{2\mu(\omega_1 - \omega_2)}{\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)^2 - 1} = 2\mu \overline{D}_1 T_1 - S_1; \end{aligned} \quad (27)$$

$$T_1 = 1 - \frac{2\ln\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)}{\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)^2 - 1}; \quad S_1 = \frac{2\mu(\omega_1 - \omega_2)}{\left(\frac{R_2}{R_2-h_1}\right)^2 - 1};$$

$$\overline{D}_1 = \frac{3}{4} \frac{z^2}{h_{01}^2} \frac{\partial}{\partial \theta_1} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{[1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1]^3} \left[(\omega_1 + \omega_2 - 2\dot{\gamma}_1) \varepsilon_1 \sin \theta_1 - \right. \right. \quad (28)$$

$$\left. \left. - 2\dot{\varepsilon}_1 \cos \theta_1 \right] \right\} = \frac{3}{4} \frac{z^2}{h_{01}^2} \frac{\partial Q_1}{\partial \theta_1};$$

$$Q_1 = \frac{1}{[1 - \varepsilon_1 \cos \theta_1]^3} \times$$

$$\times [(\omega_1 + \omega_2 - 2\dot{\gamma}_1) \varepsilon_1 \sin \theta_1 - 2\dot{\varepsilon}_1 \cos \theta_1].$$

Когда центры ротора и втулки находятся в положении равновесия, то выполняются равенства

$$\dot{\varepsilon}_1^* = \dot{\gamma}_1^* = \dot{\varepsilon}_2^* = \dot{\gamma}_2^* = 0.$$

Из формулы (28) следуют выражения

$$\overline{D}_1^* = \frac{3}{4} \frac{z^2 (\omega_1 + \omega_2) \varepsilon_1^*}{h_{01}^2} \frac{\partial Q_1^*}{\partial \theta_1}; \quad (29)$$

$$Q_1^* = \frac{\sin \theta_1}{[1 - \varepsilon_1^* \cos \theta_1]^3},$$

а из формул (26), (27) и (29) –

$$\begin{aligned} M_1^B &= \frac{\mu(\omega_1 + \omega_2) \varepsilon_1^* L^3 R_2}{8h_{01}^2} \int_{\pi}^{2\pi} T_1 \frac{\partial Q_1^*}{\partial \theta_1} d\theta_1 - \\ &- R_2 L \int_{\pi}^{2\pi} S_1 d\theta_1. \end{aligned} \quad (30)$$

Аналогично получим выражение для моментов, действующих на втулку с внешнего поля смазки, для коротких подшипников скольжения:

$$\begin{aligned} M_2^B &= \frac{\mu\omega_2 \varepsilon_2^* L^3}{8h_{02}^2} \int_{\pi}^{2\pi} (R - h_2) T_2 \frac{\partial Q_2^*}{\partial \theta_2} d\theta_2 - \\ &- L \int_{\pi}^{2\pi} S_2 (R - h_2) d\theta_2, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$T_2 = 1 - \frac{2 \ln \left(\frac{R}{R-h_2} \right)}{1 - \left(\frac{R-h_2}{R} \right)^2}; \quad S_2 = \frac{2\mu\omega_2}{1 - \left(\frac{R-h_2}{R} \right)^2};$$

$$Q_2^* = \frac{\sin \theta_2}{[1 - \varepsilon_2^* \cos \theta_2]^3}. \quad (32)$$

Легко увидеть, что все моменты, действующие на втулку, не зависят от углов γ_1^*, γ_2^* , а зависят только от эксцентриситетов ротора и втулки в положении равновесия $(\varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)$. Вращение втулки вокруг своей оси подчиняется уравнению

$$M_1^B - M_2^B = J_B \dot{\omega}_2. \quad (33)$$

При установившемся движении $\dot{\omega}_2 = 0$, т. е. втулка вращается с постоянной угловой скоростью ω_2 , и тогда

$$M_1^B - M_2^B = 0. \quad (34)$$

Уравнения (30), (31) и (34) позволяют получить выражение для определения угловой скорости втулки ω_2 в неявном виде.

Численный анализ определения скорости вращения втулки в подшипнике скольжения и обсуждение результатов

Для численного расчета примем следующие значения параметров подшипника и его частей:

подшипник $(O, R) - R = 0,05$ м, длина $L = 0,05$ м;

втулка $(O_2, R_2) - R_2 = 0,048$ м,

отсюда следует номинальный зазор внешнего смазочного слоя $- h_{02} = R - R_2 = 0,002$ м;

ротор $(O_1, R_1) - R_1 = 0,046$ м. Он вращается с заданной угловой скоростью ω_1 .

Возьмем 11 значений ω_1 от $5 \cdot 10^4$ до $10 \cdot 10^4$ рад/с с равным шагом. Номинальный зазор внутреннего смазочного слоя составляет $h_{01} = R_2 - R_1 = 0,002$ м, динамическая вязкость $- \mu = 1,754 \cdot 10^{-5}$ Па·с. Легко видеть, что формула (34) не содержит динамической вязкости, т. е. угловая скорость втулки ω_2 не зависит от динамической вязкости смазки, а зависит только

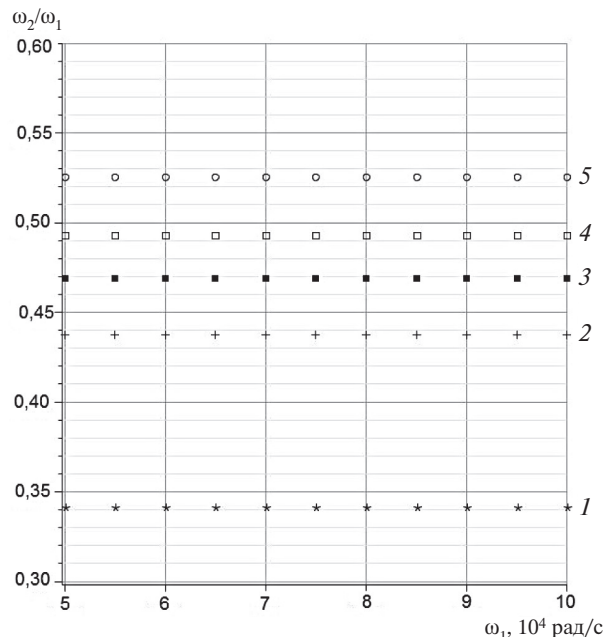


Рис. 5. Графики зависимости отношения угловых скоростей втулки и ротора от угловой скорости ротора при разных значениях положения равновесия ротора и втулки в подшипнике скольжения $(\varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)$: 0; 0,9(1); 0; 0,5(2); 0; 0(3); 0,5; 0,5(4); 0,5; 0(5)

от геометрических параметров подшипника и положения равновесия ротора и втулки, т. е. от эксцентриситетов ротора и втулки в положении равновесия $\varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*$.

Результаты численных расчетов представлены на рис. 5. Из анализа данного рисунка можно сделать следующие выводы:

1. Вопреки общепринятым представлениям (см., например, работы [9, 10]), угловая скорость втулки равна или чуть меньше половины угловой скорости ротора только в частных случаях, а не во всех. Эти частные случаи соответствуют кривым 2 – 4, для которых $\omega_2/\omega_1 \approx 0,5$ или немного меньше.

2. Угловая скорость втулки значительно меньше половины угловой скорости ротора при $\varepsilon_1^* \rightarrow 0, \varepsilon_2^* \rightarrow 1$ (кривая 1, для которой $\omega_2 \approx \omega_1/3$).

3. Угловая скорость втулки пропорциональна эксцентриситету ротора ε_1^* (или ε_1^*) и обратно пропорциональна своему эксцентриситету ε_2^* (или ε_2^*). При $0,5 \leq \varepsilon_1^* < 1, \varepsilon_2^* \rightarrow 0$ угловая скорость втулки даже превышает половину угловой скорости ротора (кривая 5 на рис. 5).



Настоящая работа посвящена определению скорости вращения втулки в подшипнике, заполненном маслом, с учетом центробежных сил. Интегрированием компонент тензора напряжений по поверхности зазора были получены явные выражения для сил и моментов, действующих как на ротор, так и на втулку подшипника. Определено распределение положений равновесия ротора в смазочном слое в подвижных осях. По аналогии проведен динамический анализ для зазора между втулкой и корпусом подшипника. Рассмотрена пробле-

ма определения угловой скорости вращения втулки в подшипнике скольжения; она важна для определения сил, действующих на ротор, зависящих от указанной скорости. Угловая скорость вращения втулки в подшипнике скольжения получена в рамках теории короткого подшипника из условия равенства моментов, действующих на втулку со стороны масла извне и изнутри. Численным расчетом показано, что угловая скорость вращения втулки в подшипнике скольжения может меняться в достаточно широких пределах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лойцянский, Л.Г. Механика жидкости и газа [Текст] / Л.Г. Лойцянский. — М.: Наука, 1987. — 840 с.
2. Dubois, G.B. Analytical derivation and experimental evaluation of short-bearing approximation for full journal bearing [Text] / G.B. Dubois, F.W. Ocvirk // Cornell Univ. Report. — 1953. — No. 1157. — P. 119–127.
3. Hatakenaka, K. A theoretical analysis of floating bush journal bearing with axial oil film ruptures being considered [Text] / K. Hatakenaka, M. Tanaka, K. Suzuki // Journal of Tribology. — 2002. — Vol. 124(3). — P. 494–505.
4. Максимов, С.П. Автоколебания роторов, вызванные масляным слоем подшипников скольжения [Текст] / С.П. Максимов // Труды ЦКТИ. Котлотурбостроение. — 1964. — № 44. — С. 87–96.
5. Коровчинский, М.В. Теоретические основы работы подшипников скольжения [Текст] / М.В. Коровчинский. — М.: Машгиз, 1959. — 405 с.
6. Belyaev, A.K. Forces and moments acting on the rapidly rotating floating bearing [Text] / A.K. Belyaev, Nguyen Van Thang // 36th International Summer School-Conference APM' 2008. Repino, Saint Petersburg, Russia. — P. 104–111.
7. Нгуен Ван Тханг. Силы и моменты, действующие на ротор в упорном подшипнике скольжения, с учетом гидродинамики смазки и центробежных сил [Текст] / Нгуен Ван Тханг // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 1(116). — С. 116–122.
8. Пешти, Ю.В. Проектирование подшипников скольжения с газовой смазкой [Текст] / Ю.В. Пешти. — М.: МВТУ им. Баумана, 1973. — 171 с.
9. Boyaci, A. Analytical bifurcation analysis of a rotor supported by floating ring bearings [Text] / A. Boyaci, H. Hetzler, W. Seemann // Nonlinear Dynamics. Berlin: Springer, 2009. — Vol. 57. — P. 497–507.
10. Lang, O.R. Gleitlager [Text] / O.R. Lang, W. Steinhilper. — Berlin: Springer, 1978. — P. 253.

УДК 532.501.32

А.В. Перминов

РАВНОВЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ОБОБЩЕННОЙ НЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ

Если градиент температуры, приложенный к ньютоновской жидкости, направлен вдоль поля тяжести, то в жидкости возможно состояние равновесия. Существует большое количе-

ство работ, в которых исследуется устойчивость равновесного состояния [1]. Вибрации — один из эффективных способов управления устойчивостью равновесного состояния жидкости

при ее подогреве. В работах [2, 3] было сформулировано условие квазиравновесия ньютоновской жидкости, находящейся в поле высокочастотных вибраций. Под квазиравновесием понимается такое состояние, при котором на фоне быстрого периодического пульсационного движения в жидкости отсутствует осредненный тепло- и массоперенос.

При описании термовибрационной конвекции в несжимаемой ньютоновской жидкости используются уравнения Зеньковской—Симоненко. Систематическое описание основных положений термовибрационной конвекции можно найти в монографии [4].

В работе [5] было предложено обобщение уравнений термовибрационной конвекции на случай обобщенной ньютоновской жидкости. Это класс неньютоновских жидкостей, для которых тензор напряжений сдвига τ_{ij} в каждой точке представляет некоторую функцию только от тензора скорости сдвига e_{ij} в той же точке [6]:

$$\tau_{ij} = f(I_2)e_{ij}; \quad e_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right); \quad (1)$$

$$I_2 = \frac{1}{2}e_{ij}e_{ji},$$

где u_i — компонента скорости жидкости вдоль координаты x_i .

Жидкости с реологическим соотношением вида (1) удобно подразделять на три группы [7]: вязкопластичные (бингамовские пластики); псевдопластичные (псевдопластики); дилатантные.

Вязкопластичные жидкости принято описывать реологическим уравнением Бингама:

$$\begin{cases} \tau_{ij} = \left(\frac{\tau_0}{\sqrt{I_2}} + \mu_p \right) e_{ij}, & |\tau_2| > \tau_0; \\ I_2 = 0, & |\tau_2| \leq \tau_0, \end{cases} \quad (2)$$

где $\tau_2 = \tau_{ij}\tau_{ji}/2$; τ_0 — предельное напряжение сдвига; μ_p — сдвиговая вязкость.

Из уравнения (2) видно, что сдвиговое течение в вязкопластичных жидкостях возникает, если приложенные к жидкости напряжения больше некоторого порогового значения.

При реометрических исследованиях вязкопластичных тел обнаружилась нелинейность

кривой течения (зависимость напряжений сдвига от его скорости) в области малых скоростей сдвига. В работах [8–10] при моделировании конвективных течений вязкопластичных жидкостей для учета нелинейных эффектов было предложено использовать неразрывную модель Уильямсона:

$$\tau_{ij} = \left(\frac{A}{B + \sqrt{I_2}} + \mu_\infty \right) e_{ij}, \quad (3)$$

где A, B — реологические параметры жидкости Уильямсона; μ_∞ — вязкость при больших скоростях сдвига.

При малых значениях параметра B жидкость Уильямсона близка по своим свойствам к бингамовскому пластику, тогда A приобретает смысл динамического предела текучести [11].

Псевдопластики и дилатантные жидкости описывают степенным уравнением Освальда де Вилля:

$$\tau_{ij} = k \left(\sqrt{I_2} \right)^{n-1} e_{ij}, \quad (4)$$

где k — консистентность жидкости, n — показатель ее неньютоновости.

Для описания реологических свойств псевдопластичных жидкостей можно применять уравнение (3).

В работе получен общий вид осредненного тензора вязких напряжений для обобщенной ньютоновской жидкости, находящейся в поле высокочастотных вибраций. Приведены выражения для осредненных тензоров вязких напряжений реологических моделей Бингама, Уильямсона и Освальда де Вилля. Сформулированы условия равновесного и квазиравновесного состояний для обобщенной ньютоновской жидкости, находящейся в замкнутой полости произвольной формы. Для вязкопластичной жидкости Бингама сформулировано условие существования жесткого состояния. Показано, что в поле высокочастотных вибраций реализация такого состояния возможна, когда вибрации происходят вдоль направления градиента температуры.

Уравнения термовибрационной конвекции

Пусть имеется однородная жидкость, целиком заполняющая замкнутую полость, совершающую линейно-поляризованные (возврат-



но-поступательные) вибрации с амплитудой смещения a и частотой ω в направлении единичного вектора $\mathbf{n}$; тогда $a\omega$ — амплитуда скорости пульсаций. Пусть вибрации высокочастотные, малоамплитудные, но не акустические, т. е. $a \ll L$, $\omega \gg v_e/L^2$, где L — характерный размер гидродинамических структур, v_e — эффективная кинематическая вязкость. Жидкость считается несжимаемой и находится в неоднородном температурном поле.

В работе [5] на основании метода осреднения [12] получена система уравнений, которая описывает медленное осредненное конвективное движение жидкости. При этом вводилась иерархия времен $t_- = \omega t$, $t_0 = t$, $t_1 = \omega^{-1}t$, $t_2 = \omega^{-2}t, \dots$. Все физические поля расщеплялись на пульсационную часть, зависящую от t_- , и медленную осредненную часть, зависящую от «медленных» (конвективных) времен $t_0, t_1, t_2, \dots$. «Быстрое» время t_- имеет один порядок с малым параметром ω^{-1} . Амплитуда скорости пульсаций $a\omega$ считается конечной.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = & -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \text{Div} \tau + g\beta T \gamma + \\ & + \frac{1}{2} (a\omega\beta)^2 \mathbf{w} \nabla (T \mathbf{n} - \mathbf{w}); \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T = & \chi \Delta T; \quad \text{div } \mathbf{u} = 0; \\ \text{div } \mathbf{w} = 0; \quad \text{rot } \mathbf{w} = & \nabla T \times \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\mathbf{u}$, T , p — функции медленного времени t , описывающие осредненное конвективное течение; $\mathbf{v} = \beta \mathbf{w}$ — безразмерная амплитуда пульсационного поля скорости.

Система (5) совпадает с системой уравнений термовибрационной конвекции для ньютоновской жидкости, за исключением вязкого слагаемого $\text{Div} \tau$, вид которого определяется реологической моделью.

Следуя работе [5], выпишем разложение для тензора скорости сдвига и второго инварианта этого тензора по степеням малого параметра ω^{-1} :

$$\begin{aligned} e_{ij} = e_{0ij} + \omega^{-1} e_{1ij} + \dots, \\ I_2 = \frac{e_{ij} e_{ji}}{2} = \frac{1}{2} (e_{0ij} e_{0ji} + \omega^{-1} e_{0ij} e_{1ji} + \omega^{-1} e_{1ij} e_{0ji} + \dots). \end{aligned}$$

Можно показать, что для жидкостей с реологическим соотношением вида (1) разложение тензора вязких напряжений примет вид

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = f_0(I_{00}) e_{0ij} + \omega^{-1} (f_1(I_{00}, I_{01}) e_{0ij} + \\ + f_0(I_{00}) e_{1ij}) + \dots; \\ I_{00} = \frac{1}{2} e_{0ij} e_{0ji}; \quad I_{01} = e_{0ij} e_{1ji}. \end{aligned} \quad (6)$$

В этом разложении учтена симметричность тензора скоростей сдвига e_{ij} . Вид функций f_0, f_1 определяется выбором конкретного реологического уравнения.

В разложении (6) необходимо ограничиться только первым слагаемым, так как остальные слагаемые имеют более высокий порядок малости. После его осреднения по быстрому времени t_- получаем выражение

$$\begin{aligned} \tau_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [f(I_{00}) e_{0ij}] dt_-; \\ e_{0ij} = a\omega\beta e_{wij} \sin t_- + e_{uij}. \end{aligned} \quad (7)$$

Тензор скоростей сдвига разделяется на две части, одна из которых —

$$e_{wij} = (\partial w_i / \partial x_j + \partial w_j / \partial x_i)$$

определяется амплитудой скорости пульсаций, вторая —

$$e_{uij} = (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$$

— скоростью осредненного конвективного движения. Функция $f(I_{00})$ для жидкостей Бингама, Уильямсона и Освальда де Вилля, соответственно, принимает значения

$$\begin{aligned} f = \frac{\tau_0}{\sqrt{I_{00}}} + \mu_p; \quad f = \frac{A}{B + \sqrt{I_{00}}} + \mu_\infty; \\ f = k (\sqrt{I_{00}})^{n-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

На твердых границах для медленно меняющейся скорости u выполняется условие прилипания, а для амплитуды пульсационной скорости — условие непротекания.

Введем масштабные множители: для разности температур и поля $\mathbf{w}$ — θ , для координат — h , для времени — h^2/v_e , для скорости — $\mu_p/\rho h$ и для давления — $\rho v_e^2/h^2$. Уравнения (5), (7) и (8) в безразмерных переменных примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla p + \text{Div} \tau + \text{Gr} T \gamma + \\ &+ \frac{1}{2} \text{Gv} \cdot \mathbf{w} \nabla (T \mathbf{n} - \mathbf{w}); \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla T &= \frac{1}{\text{Pr}} \Delta T; \quad \text{div} \mathbf{u} = 0; \\ \text{div} \mathbf{w} &= 0; \quad \text{rot} \mathbf{w} = \nabla T \times \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \tau_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{Bh}{\sqrt{I_{00}}} + 1 \right) e_{0ij} \right] dt_-, & |\tau_2| > Bh; \\ I_{00} = 0, & |\tau_2| \leq Bh; \\ \tau_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{D}{b + \sqrt{I_{00}}} + 1 \right) e_{0ij} \right] dt_-; \\ \tau_{ij} = \frac{K}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\sqrt{I_{00}} \right)^{n-1} e_{0ij} \right] dt_-; \\ e_{0ij} = \sqrt{\text{Gv}} e_{wij} \sin t_- + e_{uij}, \end{cases} \quad (10)$$

где $\text{Gv} = (\alpha \omega \beta \rho h / \mu_p)^2$ – вибрационное число Грасгофа; $\text{Gr} = g \beta \theta \rho^2 h^3 / \mu_p^2$ – гравитационное число Грасгофа; $\text{Pr} = \mu_p / (\chi \rho)$ – число Прандтля; $Bh = \rho h^2 \tau_0 / \mu_p^2$ – число Бингама; $D = \rho h^2 A / \mu_\infty^2$ – динамический предел текучести; $b = \rho h^2 B / \mu_\infty$; $K = k (\mu_p / \rho h^2)^n$ – реологические параметры моделей.

Равновесные состояния жидкости

Под квазиравновесием жидкости, находящейся в замкнутой полости в поле высокочастотных вибраций, будем понимать такое ее состояние, при котором на фоне быстрого пульсационного движения отсутствует медленное осредненное течение жидкости, т. е. $\mathbf{u} = 0$, $\partial/\partial t = 0$. В этом случае система уравнений (9) после применения к ней операции ротора и исключения давления, примет вид

$$\begin{aligned} \text{rot Div} \tau + \frac{1}{2} \text{Gv} \nabla (\mathbf{w} \mathbf{n}) \times \nabla T + \text{Gr} \nabla T \times \gamma &= 0; \\ \Delta T &= 0; \quad \text{div} \mathbf{w} = 0; \quad \text{rot} \mathbf{w} = \nabla T \times \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (11)$$

Уравнения (11), описывающие состояние квазиравновесия, являются обобщением условий, полученных в работе [2], на рассматриваемый класс неньютоновских сред.

Частным случаем квазиравновесного состояния жидкости является квазитвердое состояние. В этом случае в жидкости отсутствуют какие-либо течения, т. е. жидкость вместе с сосудом как единое целое совершает гармонические колебания. Приравнявая амплитуду пульсационной скорости к нулю, получим условия для квазитвердого состояния жидкости:

$$\begin{aligned} \text{rot Div} \tau + \text{Gr} \nabla T \times \gamma &= 0; \\ \Delta T &= 0; \quad \nabla T \times \mathbf{n} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Видно, что вибрационное число Грасгофа не влияет на квазитвердое состояние. Для обобщенной ньютоновской жидкости (1), кроме вязкопластичной жидкости Бингама, либо $\text{rot Div} \tau = 0$, т. е. квазитвердое состояние возможно в невесомости, либо когда все три вектора ∇T , $\mathbf{n}$, γ направлены вдоль одной прямой:

$$\nabla T \times \gamma = \nabla T \times \mathbf{n} = 0.$$

При отсутствии вибраций для неизотермической обобщенной ньютоновской жидкости (1) выполняется условие равновесия $\text{Gr} \nabla T \times \gamma = 0$, которое для обычной ньютоновской жидкости приведено в работе [1]. Там же обсуждается ряд задач по исследованию устойчивости равновесия.

Особняком стоят вязкопластичные жидкости Бингама, для которых характерно наличие предельных напряжений сдвига. Если напряжения, возникающие в жидкости, меньше предельных, то она находится в твердом или жестком состоянии. Напряжения сдвига подлежат определению из уравнения (12).

Жесткое состояние наклонного слоя жидкости Бингама

На рис. 1 показан наклонный слой жидкости Бингама, находящийся в поле тяжести Земли. Единичный вектор γ имеет компоненты $(-\sin \alpha, 0, \cos \alpha)$. Равновесный градиент температуры задается единичным вектором $\nabla T_0 = \mathbf{m}$. Единичный вектор $\mathbf{n}$ определяет направление вибраций. Для реализации жесткого состояния необходимо, чтобы $\mathbf{m} \times \mathbf{n} = 0$.

При указанных на рис. 1 условиях вязкие напряжения, возникающие в слое, зависят только от поперечной координаты. Уравнение (12) принимает вид

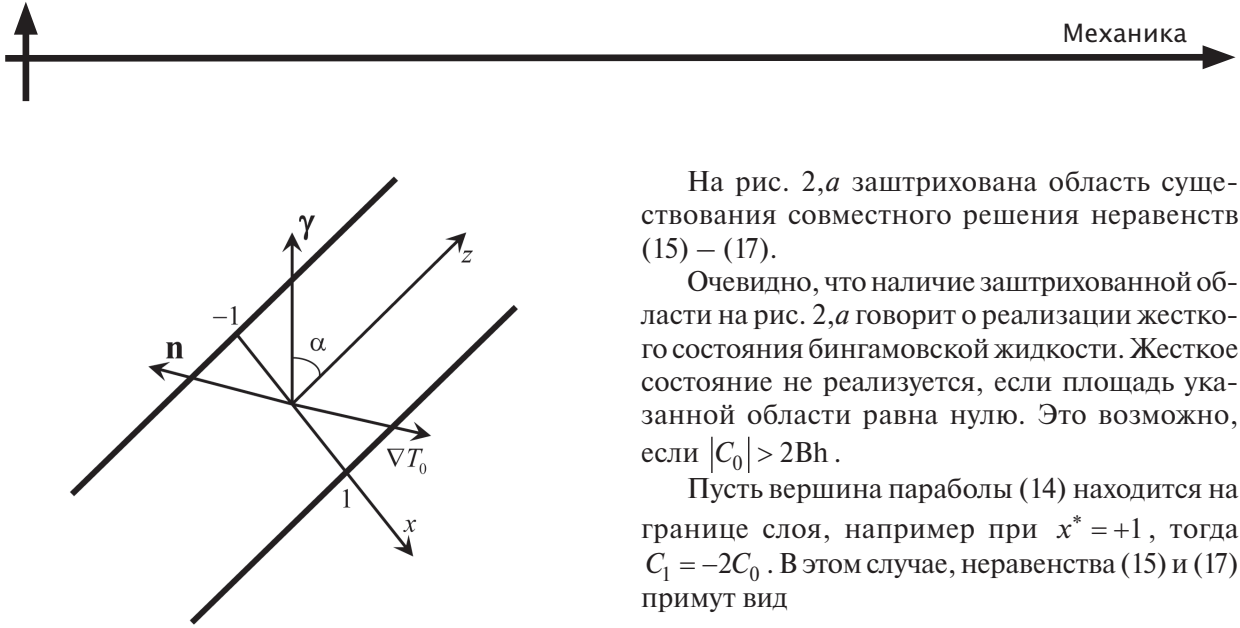


Рис. 1. Наклонный слой жидкости Бингама, находящийся в поле тяжести Земли:

γ , $\mathbf{n}$, ∇T_0 – единичные векторы

$$\frac{\partial^2 \tau}{\partial x^2} + \text{Gr}(m_z \sin \alpha + m_x \cos \alpha) = 0, \quad (13)$$

где $\tau \equiv \tau_{xz}(x)$.

Решение (13) имеет вид

$$\tau = C_0 x^2 + C_1 x + C_2, \quad (14)$$

где $C_0 = -\text{Gr}(m_z \sin \alpha + m_x \cos \alpha)/2$.

Жидкость находится в жестком состоянии, если в любой точке слоя выполняется условие $|\tau| \leq Bh$.

Вершина параболы (14) находится в точке с координатой $x^* = -C_1/2C_0$. Полагаем, что вершина параболы расположена в пределах слоя $-1 < x^* < 1$. В этом случае экстремальные напряжения сдвига возникают на границах слоя и в точке x^* . Для выполнения условия существования жесткого состояния необходимо потребовать выполнения следующих неравенств:

$$\begin{aligned} C_0 - C_1 + C_2 &\geq -Bh; \\ C_0 - C_1 + C_2 &\leq Bh \quad (x = -1); \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} C_0 + C_1 + C_2 &\geq -Bh; \\ C_0 + C_1 + C_2 &\leq Bh \quad (x = 1); \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_1^2}{4C_0} + C_2 &\geq -Bh; \\ \frac{C_1^2}{4C_0} + C_2 &\leq Bh \quad (x = x^*). \end{aligned} \quad (17)$$

На рис. 2,а заштрихована область существования совместного решения неравенств (15) – (17).

Очевидно, что наличие заштрихованной области на рис. 2,а говорит о реализации жесткого состояния бингамовской жидкости. Жесткое состояние не реализуется, если площадь указанной области равна нулю. Это возможно, если $|C_0| > 2Bh$.

Пусть вершина параболы (14) находится на границе слоя, например при $x^* = +1$, тогда $C_1 = -2C_0$. В этом случае, неравенства (15) и (17) примут вид

$$C_2 \geq -(Bh + 3C_0), \quad C_2 \leq Bh - 3C_0 \quad (x = -1); \quad (18)$$

$$C_2 \geq C_0 - Bh, \quad C_2 \leq Bh + C_0 \quad (x = 1). \quad (19)$$

Система (15), (17) не имеет решений, т. е. в слое бингамовской жидкости не реализуется жесткое состояние, если $|C_0| > Bh/2$. Данное неравенство оказывается справедливым и для $x^* = -1$.

Рассмотрим случай, когда вершина параболы находится за пределами слоя. Для реализации жесткого состояния необходимо потребовать выполнения неравенств (15), (16) и еще двух:

$$C_1 < -2C_0, \quad C_1 > 2C_0. \quad (20)$$

Графический анализ системы неравенств (15), (16) и (20) представлен на рис. 2,б. Прямая 4 соответствует $x^* > 1$. В области I левее линии 4 обсуждаемая система неравенств имеет решение при положительных C_0 . В области II правее 4 эта система справедлива, если $C_0 < 0$. Очевидно, что жесткое состояние жидкости не реализуется, если выполняется неравенство $|C_0| > Bh/2$. Путем аналогичных рассуждений убеждаемся в справедливости этого условия для $x^* < -1$.

Подставляя в неравенства $|C_0| > 2Bh$ и $|C_0| > Bh/2$ выражение для C_0 , окончательно выпишем условия перехода жидкости Бингама из жесткого состояния в жидкое:

$$\text{Gr} > \frac{4Bh}{|m_z \sin \alpha + m_x \cos \alpha|}; \quad \mathbf{m} \times \mathbf{n} = 0. \quad (21)$$

Неравенство (21) определяет границу области существования жесткого состояния в слу-

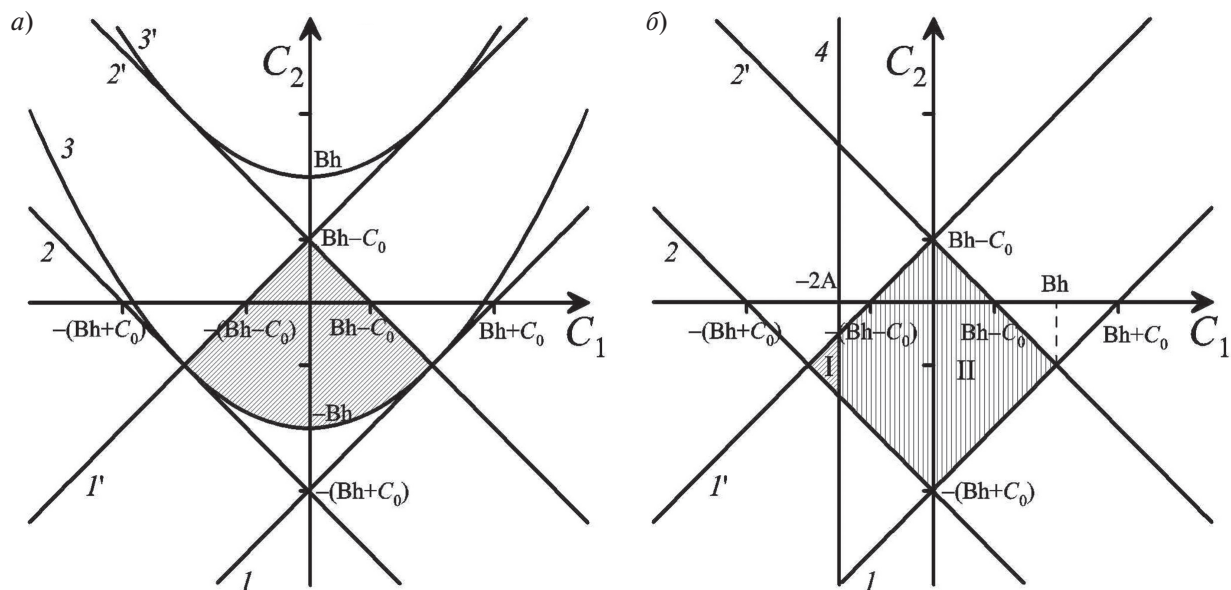


Рис. 2. Графический анализ систем неравенств (15) – (17) (а) и (15), (16), (20) при $x^* > 1$ (б). Области существования совместных решений заштрихованы. Представлены границы выполнения неравенств (15) (I, I'); (16) ($2, 2'$); (17) ($3, 3'$); (20) (4). I, II – случаи $C_0 > 0$ и $C_0 < 0$ соответственно

чае, когда экстремум функции (14) находится в пределах слоя.

Если вершина параболы (14) попадает на границы слоя или оказывается за его пределами, то область параметров, при которых реализуется жесткое состояние, уменьшается, а ее размеры определяются условием

$$Gr > \frac{Bh}{|m_z \sin \alpha + m_x \cos \alpha|}, \quad \mathbf{m} \times \mathbf{n} = 0. \quad (22)$$

Положение экстремума функции (14), т. е. форма профиля вязких напряжений определяется условиями подогрева слоя и состоянием его границ. Отметим, что условия (21), (22) справедливы в отсутствие вибраций. При наличии вибраций в неравенствах вектор $\mathbf{m}$ можно заменить на $\mathbf{n}$.

Известно, что в бесконечном слое после потери устойчивости равновесного состояния, как правило, возникает плоскопараллельное течение, состоящее из двух встречных потоков [1, 5, 13]. Экстремальные значения вязких напряжений реализуются на границе встречных потоков и границах слоя. Координата экстремума функции (14) располагается в пределах слоя. Следовательно, область параметров, при которых существует жесткое состояние вязкопластичной жидкости, будет определяться условием (21).

Итак, в настоящей работе приведены уравнения термовибрационной конвекции и осредненные выражения для тензоров вязких напряжений жидкостей, у которых напряжения сдвига в каждой точке представляет некоторую функцию только от скорости сдвига в той же точке. На основании этих уравнений можно исследовать устойчивость равновесных состояний таких жидкостей, а также конвективные режимы, которые возникают после потери равновесным состоянием устойчивости.

При исследовании устойчивости равновесного состояния обобщенной ньютоновской жидкости следует учитывать вид реологического уравнения жидкости и, следовательно, тип равновесного состояния, которое реализуется в ней при данных условиях подогрева и вибрационных воздействиях.

Так, в псевдопластичной, дилатантной и ньютоновской жидкостях при отсутствии вибраций реализуется состояние равновесия. Оно возможно, если жидкость находится в невесомости, либо градиент температуры направлен вдоль поля тяжести. Включение вибраций расширяет спектр равновесных состояний. В вибрационном поле в таких жидкостях возможно квазиравновесное состояние, при котором на фоне пульсационного движения в жидкости не возникает осредненного конвективного тепло-



и массопереноса. Частным случаем квазиравновесного состояния является квазитвердое, которое реализуется, когда все три вектора $\mathbf{n}$, $\mathbf{\gamma}$, $\mathbf{m}$ направлены вдоль одной прямой. В квазитвердом состоянии в жидкости отсутствуют пульсационное и осредненное движения, т. е. жидкость совершает колебания вместе с сосудом как твердое тело.

Вязкопластичная жидкость Бингама — это особый тип обобщенной ньютоновской жидкости, в которой сдвиговое течение возникает, если приложенные к жидкости напряжения больше некоторого порогового значения. В такой жидкости, кроме указанных выше равно-

весных состояний, наблюдается твердое или жесткое состояние.

Так, в отсутствие вибраций существует пороговое значение числа Грасгофа, ниже которого жидкость находится в жесткой фазе. Это равновесное состояние возможно при произвольном направлении градиента температуры.

При включении вибраций жесткая фаза бингамовской жидкости реализуется, только когда вибрации происходят вдоль градиента температуры. В остальных случаях в жидкости возможно состояние квазиравновесия, аналогичное тому, что имеет место в остальных типах обобщенной ньютоновской жидкости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гершуни, Г.З.** Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости [Текст] / Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий. — М.: Наука, 1972. — 392 с.
2. **Demin, V.A.** Mechanical quasi-equilibrium and thermovibrational convective instability in an inclined fluid layer [Текст] / V.A. Demin, G.Z. Gershuni, I.V. Verkholantsev // Int. J. Heat Mass Transfer. — 1996. — Vol. 39. — № 9. — P. 1979–1991.
3. **Демин, В.А.** Вибрационная конвекция в наклонном слое жидкости при подогреве снизу [Текст] / В.А. Демин // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. — 2005. — № 6. — С. 38–48.
4. **Gershuni, G.Z.** Thermal vibrational convection [Текст] / G.Z. Gershuni, D.V. Lyubimov. — New York: Wiley, 1998. — 358 p.
5. **Перминов, А.В.** Воздействие высокочастотных вибраций на конвективное движение неньютоновской жидкости [Текст] / А.В. Перминов, Е. В. Шулепова // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Серия «Физико-математические науки». — 2011. — № 3(129). — С. 169–175.
6. **Литвинов, В.Г.** Движение нелинейно-вязкой жидкости [Текст] / В.Г. Литвинов. — М.: Наука, 1982. — 376 с.
7. **Уилкинсон, У.Л.** Неньютоновские жидкости: Гидромеханика, перемешивание и теплообмен [Текст] / У.Л. Уилкинсон. — М.: Мир, 1964. — 216 с.
8. **Любимова, Т.П.** Конвективная устойчивость жидкости Уильямсона в вертикальном слое [Текст] / Т.П. Любимова, Н.И. Лобов, Д.В. Любимов // Уч. зап. Пермск. ун-та. Гидродинамика. — 1976. — Вып. 8. — С. 31–43.
9. **Любимова, Т.П.** Численное исследование конвекции вязкопластичной жидкости в замкнутой области [Текст] Т.П. Любимова // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1977. — № 1. — С. 3–8.
10. **Любимова, Т.П.** О конвективных движениях вязкопластичной жидкости в прямоугольной области [Текст] / Т.П. Любимова // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1979. — № 5. — С. 141–144.
11. **Тетельмин, В.В.** Реология нефти [Текст]: Учебное издание / В.В. Тетельмин, В.А. Язев. — М.: Графика, 2009. — 256 с.
12. **Любимов, Д.В.** Динамика поверхностей раздела в вибрационных полях [Текст] / Д.В. Любимов, Т.П. Любимова, А.А. Черепанов. — М.: Физматлит, 2003. — 216 с.
13. **Любимов, Д.В.** Стационарная конвекция вязкопластичной жидкости в вертикальном слое [Текст] / Д.В. Любимов, Т.П. Любимова // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1980. — № 2. — С. 118–123.

УДК 537.87

А.В. Денисов

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЭФФЕКТА ЭКРАНИРОВАНИЯ ВОЛНЫ ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ СИММЕТРИЧНЫМ ПЛАЗМЕННЫМ СЛОЕМ

Данная работа является продолжением работы [1], в которой был дан обзор и получено решение (методом сращивания асимптотических разложений) задачи о распространении волны вертикальной поляризации (другие используемые в литературе названия этой волны: волна *TM*-поляризации, волна *p*-поляризации) сквозь симметричные плазменные слои, характеризующиеся наличием максимума электронной концентрации и малыми диссипативными процессами. Как известно [1], на частоте поля, равной максимальной плазменной частоте слоя, наклонно падающая плоская вертикально поляризованная волна не пройдет за точку с максимальной концентрацией электронов, если потери в слое устремить к нулю. Этот эффект имеет место для слоев произвольной толщины, у которых в окрестности такой точки вещественная часть функции диэлектрической проницаемости имеет нуль четной кратности. Из-за отсутствия точного аналитического решения этой задачи все известные ее решения для подходящих моделей среды используют метод сращивания асимптотических решений уравнений Максвелла для магнитной или электрической составляющей поля, полученных в различных перекрывающихся интервалах на оси *OZ*, вдоль которой изменяется электронная концентрация в слое. Поэтому все известные приближенные решения [1] этой задачи не только очень громоздки, но и трудны, что, вероятно, и есть главная причина того, что ее,

как правило, не рассматривают в курсе лекций по теории распространения волн в неоднородных средах.

Цель данной работы — получить очень простое доказательство данного явления без построения решения задачи на всей оси *OZ*. В отличие от ранее рассмотренных методов доказательства, оно опирается на построение решения уравнения для магнитного поля в двух непересекающихся, но сближающихся при уменьшении потерь связанных промежутков на оси *OZ*, а также на использовании хорошо известного в электродинамике [2] условия непрерывности тангенциальных компонент поля. По мнению автора, приведенное здесь доказательство, ввиду его простоты, вполне можно использовать при чтении лекций по теории распространения электромагнитных волн.

Физическая и математическая постановка задачи

Рассмотрим неоднородный, изотропный, бесконечно протяженный плоскостной плазменный слой, выходящий с обеих сторон в вакуум. Выберем декартову прямоугольную систему координат (*X, Y, Z*) таким образом, чтобы ось *OZ* была перпендикулярна слою. Будем полагать, что тяжелые частицы (ионы и молекулы) в нем неподвижны, а пространственная дисперсия пренебрежимо мала. Диссипативные процессы учтем посредством введения эффективной частоты столкновений



электрона $v(z)$, которую будем считать постоянной в окрестности точки $z = 0$. Считаем, что при $v \rightarrow 0$ в точке $z = 0$ достигается максимум электронной концентрации. Рассмотрим падающую на этот слой со стороны $z = -\infty$ под углом $\theta_0 \neq 0$ к оси OZ плоскую монохроматическую электромагнитную волну вертикальной поляризации, XOZ – плоскость падения волны. Круговую частоту волны ω полагаем равной максимальной плазменной частоте слоя, отношение v/ω считаем малым параметром задачи: $v/\omega \ll 1$.

Представляя поле H_y в виде

$$H_y = H \exp(ikx \sin \theta_0 - i\omega t),$$

для комплексной амплитуды H имеем уравнение [1]:

$$H''_{ss} - \frac{\epsilon'_s}{\epsilon} H'_s + \eta_0^2 (\epsilon(s) - \sin^2 \theta_0) H = 0, \quad (1)$$

здесь $\eta_0 = (\omega/c)l = kl$; $s = z/l$ – независимая безразмерная переменная.

Не умаляя общности, в качестве характерного масштаба l выберем толщину слоя на уровне $\text{Re } \epsilon = 1/2$. Функцию комплексной диэлектрической проницаемости среды $\epsilon(s)$ зададим следующими пятью условиями:

1. В интервале E_1 на вещественной оси s , который определим условием $|s| \leq s_1$, где

$$s_1 = \left(\frac{v}{\omega} \right)^h; \quad h = \frac{1}{2} + \alpha, \quad \alpha > 0, \quad (2)$$

будем считать, что диэлектрическая проницаемость $\epsilon(s)$ дается выражением

$$\epsilon(s) = i \frac{v}{\omega} + o \left(\frac{v}{\omega} \right) \quad (3)$$

(o – символ порядка).

2. В интервале E_2 , который зададим условием $s \geq s_2$, где

$$s_2 = \left(\frac{v}{\omega} \right)^p; \quad p = \frac{1}{2} - \beta, \quad 0 < \beta < \frac{1}{2}, \quad (4)$$

положим $\epsilon(s) = \text{th}^2 s$. (5)

3. При всех вещественных значениях s функцию $\epsilon(s)$ считаем непрерывно дифференцируемой.

4. В интервале (s_1, s_2) функция $\epsilon(s)$ может быть продолжена как угодно, лишь бы она в этом промежутке удовлетворяла условию 3.

5. Будем считать, что $\lim_{s \rightarrow -\infty} \epsilon(s) = 1$, т. е. волна падает на слой $\epsilon(s)$ из вакуума.

Условия непрерывной дифференцируемости достаточны для существования решения уравнения (1) в классе непрерывных функций. Из второго условия следует, что плазменный слой при значениях $|s| \geq 1$ по экспоненциальному закону переходит в вакуум, так что асимптотика Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ) для решения уравнения (1) при $s \rightarrow \pm\infty$ имеет вид плоских волн и существует его решение, удовлетворяющее принципу излучения [3] при $s \rightarrow +\infty$.

Для определенности положим амплитуду падающей волны равной единице. Тогда граничные условия (на бесконечности) для искомого решения уравнения (1) запишутся в виде

$$H = T(v, \theta_0, \eta_0) \exp(i\eta_0 s \cos \theta_0) + O(\exp(-s)) \quad (6)$$

при $s \rightarrow +\infty$;

$$H = \exp(i\eta_0 s \cos \theta_0) + R(v, \theta_0, \eta_0) \exp(-i\eta_0 s \cos \theta_0) + O(\exp(s)) \quad (7)$$

при $s \rightarrow -\infty$,

где $T(v, \theta_0, \eta_0)$ и $R(v, \theta_0, \eta_0)$ – коэффициенты прохождения и отражения волны, зависящие от потерь v в слое, от угла θ_0 падения волны, а также от η_0 .

Будем считать параметры θ_0 и η_0 фиксированными, и в дальнейшем зависимость от них в коэффициентах прохождения и отражения будем опускать.

Рассмотрим решение уравнения (1), имеющее асимптотическое поведение (6) при $s \rightarrow +\infty$ с $T = 1$. Нетрудно видеть, что при $s \rightarrow -\infty$ оно имеет асимптотику, содержащую $\exp(\pm i\eta_0 s \cos \theta_0)$. В случае, если коэффициент при этой экспоненте с плюсовым аргументом не равен нулю, то получим решение (6), (7) разделив на этот коэффициент. Для определенного выше слоя $\epsilon(s)$ докажем следующую теорему.

Теорема. Для заданной выше пятью условиями зависимости $\epsilon(s)$ при произвольных фиксированных положительных значениях η_0 и θ_0 выполняется равенство:

$$\lim_{v \rightarrow 0} T(v) = 0. \quad (8)$$

Напомним, что для зависимости $\varepsilon(s)$, заданной голоморфной функцией, вопрос о единственности решения был рассмотрен в работе [1]. Здесь мы докажем эту теорему (как было вначале сказано), опираясь на непрерывность касательных составляющих электромагнитного поля. Существование предела (8), который мы ниже получим, будет означать и единственность решения данной задачи.

Доказательство теоремы

Построение решения в окрестности E_1 . Получим решение уравнения (1) в интервале $E_1 = (-s_1, s_1)$. Для этого перейдем в уравнении (1) от переменной s к новой независимой переменной x по формуле

$$x = \int_0^s \varepsilon(\tilde{s}) d\tilde{s} + C_0. \quad (9)$$

Выберем константу C_0 отличной от нуля, например, положим

$$C_0 = 1. \quad (10)$$

Посредством преобразования (9) уравнение (1) переходит в следующее уравнение:

$$H''_{xx} + \eta_0^2 \frac{\varepsilon(s) - \sin^2 \theta_0}{\varepsilon^2(s)} H = 0. \quad (11)$$

Для значений s , принадлежащих интервалу E_1 , коэффициент уравнения (11) целесообразно представить в виде

$$\eta_0^2 \frac{\varepsilon(s) - \sin^2 \theta_0}{\varepsilon^2(s)} = \eta_0^2 \left(\frac{\omega}{v} \right)^2 \sin^2 \theta_0 g(x(s)),$$

где с учетом выражения (3) при $v/\omega \rightarrow 0$ для всех значений $s \in E_1$ функция $g(x(s))$ эквивалентна единице: $g(x(s)) = 1 + o(1)$.

Поскольку отношение v/ω является малым параметром задачи, то при $s \in E_1$ можно записать ВКБ-решение уравнения (11) относительно большого параметра $\eta = \eta_0 (\omega/v) \sin \theta_0$:

$$H(s) = \frac{C_1}{\sqrt{g(x(s))}} \cos \left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0 \left(1 + \int_1^x g(\tilde{x}) d\tilde{x} \right) \right) \times \\ \times \left(1 + O \left(\frac{1}{\eta} \right) \right) +$$

$$+ \frac{C_2}{\sqrt{g(x(s))}} \sin \left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0 \left(1 + \int_1^x g(\tilde{x}) d\tilde{x} \right) \right) \times \\ \times \left(1 + O \left(\frac{1}{\eta} \right) \right).$$

Точке $s = 0$ соответствует (как видно из формул (9) и (10)) значение $x = 1$; в этой точке при стремлении параметра v/ω к нулю значение функции $g(x)$, как было отмечено ранее, стремится к единице. Тем самым в точке $s = 0$ магнитное поле представимо в виде

$$H(0) = C_1 \cos \left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0 \right) (1 + g_1(v)) + \\ + C_2 \sin \left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0 \right) (1 + g_2(v)), \quad (12)$$

причем при $v/\omega \rightarrow 0$ функции $g_1(v) \rightarrow 0$ и $g_2(v) \rightarrow 0$.

Перейдем теперь к построению решения в интервале E_2 .

Построение решения в интервале E_2 . Для значений $s \in E_2$, где функция $\varepsilon(s)$ задана формулой (5), перейдем в уравнении (1) от переменной s к новой независимой переменной $\mu = \varepsilon(s) = \text{th}^2 s$. При этом уравнение принимает вид

$$H''_{\mu\mu} - \left(\frac{1}{2\mu} + \frac{1}{1-\mu} \right) H'_\mu + \\ + \frac{\eta_0^2}{4} \frac{\mu^2 - \mu \sin^2 \theta_0}{\mu^2 (1-\mu)^2} H = 0. \quad (13)$$

Данное уравнение с помощью преобразования

$$H = (1-\mu)^\xi f,$$

где $\xi = -i(\eta_0/2) \cos \theta_0$, сводится к гипергеометрическому уравнению

$$\mu(1-\mu)f''_{\mu\mu} + [c - (a+b+1)]f'_\mu - abf = 0$$

со следующими параметрами:

$$a = -\frac{1}{4} - i \frac{\eta_0}{2} \cos \theta_0 + \sqrt{\frac{1}{4} - \eta_0^2};$$

$$b = -\frac{1}{4} - i \frac{\eta_0}{2} \cos \theta_0 - \sqrt{\frac{1}{4} - \eta_0^2}; \quad c = -\frac{1}{2}.$$



Два линейно независимых решения f_1 и f_2 данного уравнения выражаются через гипергеометрические функции

$$f_1 = {}_2F_1(a, b; a + b + 1 - c; 1 - \mu);$$

$$f_2 = (1 - \mu)^{c-a-b} {}_2F_1(c - a, c - b; c + 1 - a - b; 1 - \mu).$$

Решением уравнения (1), удовлетворяющим граничному условию (6), является

$$H = T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) (1 - \mu)^{\xi} f_1.$$

Воспользовавшись функциональным соотношением [4]:

$$f_1 = K_1 {}_2F_1(a, b; c; \mu) + K_2 \mu^{1-c} {}_2F_1(1 + a - c, 1 + b - c; 2 - c; \mu),$$

где

$$K_1 = \frac{\Gamma(a + b + 1 - c)\Gamma(c - 1)}{\Gamma(a)\Gamma(b)};$$

$$K_2 = \frac{\Gamma(a + b + 1 - c)\Gamma(c - 1)}{\Gamma(a)\Gamma(b)},$$

можно получить, что при $v/\omega \rightarrow 0$

$$H(s_2) = T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 (1 + g_3(v)), \quad (14)$$

где $g_3(v) \xrightarrow{v \rightarrow 0} 0$.

Определение неизвестных коэффициентов.

Для определения неизвестных коэффициентов C_1, C_2 и T воспользуемся непрерывностью $H_y(s)$, тангенциальной компоненты рассматриваемого электромагнитного поля [2]. Из формул (2) и (4) видно, что при $v/\omega \rightarrow 0$ как сама разность $(s_2 - s_1)$, так и значение s_1 стремятся к нулю, так что при этом предельном переходе должно выполняться выражение

$$H_y(s_2) - H_y(s_1) \xrightarrow{s_1 \rightarrow 0} 0.$$

Таким образом, с учетом выражений (12) и (14) при $v \rightarrow 0$ имеем:

$$\begin{aligned} & T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 (1 + g_3(v)) - \\ & - C_1 \cos\left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0\right) (1 + g_1(v)) - \\ & - C_2 \sin\left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0\right) (1 + g_2(v)) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Рассмотрим четыре числовые последовательности $\{v_n\}_{n=1}^{\infty}$ для задания бесконечно малых потерь v , имеющие своей предельной точкой нуль. Возьмем одну из таких последовательностей

$$v_n^{(1)} = \frac{\omega \eta_0 \sin \theta_0}{2\pi n},$$

при каждом значении которой

$$\cos\left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0\right) = 1; \quad \sin\left(\eta_0 \frac{\omega}{v} \sin \theta_0\right) = 0.$$

Для такой последовательности из формулы (15) при $n \rightarrow \infty$ получаем:

$$\begin{aligned} & T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 - \\ & - C_1 \cos\left(\eta_0 \frac{\omega}{v_n^{(1)}} \sin \theta_0\right) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Для другой последовательности

$$v_n^{(2)} = \frac{\omega \eta_0 \sin \theta_0}{\frac{3}{2}\pi + 2\pi n},$$

когда в выражении (15) косинус равен минус единице, а синус — нулю, при $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} & T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 + \\ & + C_1 \cos\left(\eta_0 \frac{\omega}{v_n^{(2)}} \sin \theta_0\right) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Выбирая по аналогии с первой две другие последовательности, когда косинус равен нулю, а синус — единице в одном случае и минус единице — в другом, запишем еще два соотношения:

$$\begin{aligned} & T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 - \\ & - C_2 \sin\left(\eta_0 \frac{\omega}{v_n^{(3)}} \sin \theta_0\right) \rightarrow 0; \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & T \exp(i\eta_0 \cos \theta_0 \ln 2) K_1 + \\ & + C_2 \sin\left(\eta_0 \frac{\omega}{v_n^{(4)}} \sin \theta_0\right) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Очевидно, формулы (16) — (19) могут быть верны, только если при $v \rightarrow 0$ одновременно выполняются предельные переходы $T \rightarrow C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow 0$.

Таким образом, при устремлении потерь в слое к нулю поле равно нулю правее точки $s = 0$.

На этом теорему для рассмотренной модели слоя считаем доказанной.

Заметим, что формулы (3) и (5) являются главными членами разложения функции

$$\varepsilon(s) = 1 - \frac{1 - \operatorname{th}^2 s}{1 + i \frac{v}{\omega}} \left(\frac{v}{\omega} = \operatorname{const} \right);$$

эта функция задает симметричный слой Эпштейна в интервалах E_1 и E_2 (см. формулы (2) и (4) соответственно).

Рассмотренная нами модель слоя показывает, что на эффект экранирования волны ока-

зывает влияние только бесконечно малая часть слоя в окрестности точки, где $\varepsilon(s)$ обращается в нуль при исчезновении потерь в среде.

Кроме того, в интервале (s_1, s_2) функция $\varepsilon(s)$ задавалась произвольно.

Таким образом, при доказательстве теоремы не требовалась четность вещественной части комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(s)$ ни в промежутке $(-s_2, s_2)$, ни в более широком промежутке. Снятие этого требования является новым результатом, расширяющим модели плазменных сред [1]. Последние при уменьшении в них потерь экранируют вертикально поляризованную волну.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Денисов, А.В.** Одномерная задача рассеяния плоской волны симметричным плазменным слоем [Текст] / А.В. Денисов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2011. – Вып. 3 (129). – С. 60 – 70.

2. **Пименов, Ю.В.** Линейная макроскопическая электродинамика. Вводный курс для радиофизиков и

инженеров [Текст] / Ю.В. Пименов. – Долгопрудный: ИД «Интеллект», 2008. – С. 156–160.

3. **Свешников, А.Г.** Принцип излучения [Текст] / А.Г. Свешников // ДАН СССР. – 1950. – Т. 73. – № 5. – С. 917–920.

4. **Люк, Ю.** Специальные функции и их приложения [Текст] / Ю. Люк. – М.: Мир, 1980. – 608 с.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

АНТИПИНА Наталья Анатольевна — аспирантка кафедры прикладной математики и информатики Пермского государственного национального исследовательского университета, ведущий математик ЗАО «Новомет-Пермь».

614990, г. Пермь, ул. Букирева, 15
(342) 299-75-99
crym@yandex.ru

АРСЕНЬЕВ Дмитрий Германович — доктор технических наук, профессор кафедры физики и математического моделирования в механике Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., 28
(812) 324-03-39
imop@imop.spbstu.ru

АРХИПОВ Александр Викторович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-61-27
arkhipov@rphf.spbstu.ru

БАЖЕНОВ Николай Леонидович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-71-82
bazhnil.ivom@mail.ioffe.ru

БАРЫШНИКОВ Сергей Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики и методики обучения физике Благовещенского государственного педагогического университета.

675000, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
(4162) 53-63-85
svbar2003@list.ru

БАСКАКОВ Григорий Геннадьевич — директор ООО «Технологический центр полимерного оптического волокна».

170100, г. Тверь, Индустриальная ул., 13
(4822) 47-62-97
info@pofcentre.ru

БЕЛОГОРОХОВ Иван Александрович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Государственного научно-исследовательского и проектного института редкометаллической промышленности.

119017, г. Москва, Б. Толмачёвский пер., 5
(495) 981-30-10
marykot58@gmail.com

БЕЛЯЕВ Александр Константинович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 321-47-78
13augen@mail.ru

БЕЛЯЕВА Антонина Александровна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
beliaeva@gmail.com

БЕЛЯКОВ Владимир Сергеевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-16
Platon.Karaseov@rphf.spbstu.ru

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

БОЧКОВ Илья Александрович — аспирант кафедры электронной техники и технологий Рязанского государственного радиотехнического университета.

390035, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1
(4912) 46-04-17
illikb@yandex.ru

БРОНВАЛЬД Юрий Алексеевич — студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

194352, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-73-33
yuramel@gmail.com

БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич — кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-73-33
roman.burkovsky@gmail.com

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-73-33
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

ВЕЙС Александр Николаевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
alnveis@mail.ru

ДЕНИСОВ Александр Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195521, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-67-50
A.V.Denisov@inbox.ru

ДЖУРАБЕКОВА Флюра — PhD, доцент кафедры физики Университета Хельсинки, Финляндия.

P.O. Box 43 (Pietari Kalminkatu 2, 00014 University of Helsinki
+358-9-191-50084
flyura.djurabekova@helsinki.fi

ДРОНОВ Михаил Александрович — аспирант лаборатории теории полупроводниковых наноструктур Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН.

119991, г. Москва, ул. Вавилова, 38
(495) 939-11-51
mikhail.dronov@gmail.com

ДУДНИК Юлия Дмитриевна — инженер Института электрофизики и электроэнергетики РАН.

191186, г. Санкт-Петербург, Дворцовая наб., 18
(812) 315-17-57
kuznetsov@iperas.nw.ru

ДЬЯЧКОВ Павел Николаевич — доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник центра инновационных коллабораций Рязанского государственного радиотехнического университета.

390035, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1
(4912) 46-04-17
p_dyachkov@rambler.ru

ЗАХАРОВА Ирина Борисовна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
zakharova@rhpfs.spbstu.ru

ЗЕГРЯ Георгий Георгиевич — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-71-82
zegrya@theory.ioffe.ru

ЗИМИНОВ Виктор Михайлович — студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
vziminov@gmail.com

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru



ИЛЬИН Владимир Иванович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
vilyin@rphf.spbstu.ru

КАРАБЕШКИН Константин Валерьевич — аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-16
yanikolaus@yandex.ru

КАРАСЁВ Платон Александрович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-16
Platon.Karaseov@rphf.spbstu.ru

КИЗЕВЕТТЕР Дмитрий Владимирович — доктор физико-математических наук, доцент кафедры электрической изоляции, кабелей и конденсаторов Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-87-26
dmitrykiesewetter@gmail.com

КИСЕЛЕВ Александр Александрович — кандидат технических наук, заместитель директора Института электрофизики и электроэнергетики РАН.

191186, г. Санкт-Петербург, Дворцовая наб., 18
(812) 315-17-57
kuznetsov@iperas.nw.ru

КОПЫТОВ Геннадий Филиппович — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
(861) 219-95-08
g137@mail.ru

КОРОЛЕВА Екатерина Юрьевна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-73-33
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru

КОТОВ Дмитрий Олегович — кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
dm_kotov@phmf.spbstu.ru

КОТОВА Мария Сергеевна — студентка физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

11991, г. Москва, Ленинские горы, 1
(495) 939-11-59
marykot58@gmail.com

КУЗНЕЦОВ Владимир Евгеньевич — кандидат технических наук, заведующий лабораторией Института электрофизики и электроэнергетики РАН.

191186, г. Санкт-Петербург, Дворцовая наб., 18
(812) 315-17-57
kuznetsov@iperas.nw.ru

КУРАПЦЕВ Алексей Сергеевич — студент радиологического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-95-16
aleksey-kurapcev@yandex.ru

КУРОНЕН Антти — PhD, доцент кафедры физики Университета Хельсинки, Финляндия.

P.O. Box 43 (Pietari Kalminkatu 2, 00014 University of Helsinki tel.
+358-9-191-50083
aakurone@acclab.helsinki.fi

ЛЕВИН Владимир Михайлович — кандидат химических наук, директор по науке ООО «Технологический центр полимерного оптического волокна».

170100, г. Тверь, Индустриальная ул., 13
(4822) 33-08-16
info@pofcentre.ru

ЛУНДИН Всеволод Владимирович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-22-45
lundin@vpegroup.ioffe.ru

МАГОМЕДОВ Абдулкарим Магомедович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой дискретной математики и информатики Дагестанского государственного университета.

367000, г. Махачкала, ул. Гаджиева, 43-а
(8722) 64-97-96
magomedtagir1@yandex.ru

МАГОМЕДОВ Тагир Абдулкаримович — сотрудник кафедры дискретной математики и информатики Дагестанского государственного университета.

367000, г. Махачкала, ул. Гаджиева, 43-а
(8722) 64-97-96
magomedtagirl@yandex.ru

МЕЛЬНИКОВ Алексей Сергеевич — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
amelnikov-NOC@yandex.ru

МОРОЗ Андрей Петрович — аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
andrey.p.moroz@gmail.com

МУРАШОВ Сергей Вадимович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
smurashov@cef.spbstu.ru

МЫНБАЕВ Карим Джафарович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, исполняющий обязанности заведующего лабораторией Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-71-82
mynkad@mail.ioffe.ru

НГУЕН Ван Тханг — аспирант кафедры физики и математического моделирования в механике Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195220, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., 28
(812) 324-03-39
thangspbstu@mail.ru

НОРДЛУНД Кай — PhD, профессор кафедры физики Университета Хельсинки, Финляндия
P.O. Box 43 (Pietari Kalminkatu 2, 00014 University of Helsinki.

+358-9-191-50007
knordlun@acclab.helsinki.fi

ОВЧИННИКОВ Роман Валерьевич — научный сотрудник Института электрофизики и электроэнергетики РАН.

191186, г. Санкт-Петербург, Дворцовая наб., 18
(812) 315-17-57
kuznetsov@iperas.nw.ru

ПЕРМИНОВ Анатолий Викторович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Пермского национального исследовательского политехнического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
(342) 219-82-50
perminov1973@mail.ru

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович — доктор технических наук, профессор кафедры гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 297-84-15
fonpetrich@mail.ru

ПЕЩЕРЕНКО Сергей Николаевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики Пермского национального исследовательского политехнического университета, начальник инженерно-технического центра Департамента инновационных разработок ЗАО «Новомет-Пермь».

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
(342) 296-37-21
peshcherenko@dom.raid.ru

ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич — аспирант Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
lwdrums@gmail.com

ПОГОРЕЛОВ Александр Владимирович — аспирант кафедры радиофизики и нанотехнологий Кубанского государственного университета.

350040, г. Краснодар, Ставропольская ул., 149
(861) 219-95-08
sapogi21@yandex.ru

РАКЧЕЕВА Лидия Павловна — младший научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
lida@nanobio.spbstu.ru

РЯБОВ Виктор Германович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru



РЯБОВ Юрий Германович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

САБАНЦЕВ Антон Владимирович — аспирант НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09
anton-sniper@list.ru

САВИНА Алла Юрьевна — аспирантка кафедры электрической изоляции, кабелей и конденсаторов Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251 г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
(812) 552-87-26
savall_07@mail.ru

САМСОНОВ Владимир Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

САХАРОВ Алексей Валентинович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 297-22-45
val@beam.ioffe.rssi.ru

СЕРДОБИНЦЕВ Павел Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Санкт-Петербургского государственного университета.

199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9.
(812) 428-44-05
serdobintsev@rambler.ru

СЕРЕБРЯКОВ Александр Сергеевич — кандидат физико-математических наук, заместитель генерального директора по науке ЗАО «КОМИТА».

197101, г. Санкт-Петербург, ул. Рентгена, 1
(812) 346-11-11
alexs@comita.ru

СОКОЛОВ Игорь Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-79-59
IMS@IS12093.spb.edu

СТУКОВА Елена Владимировна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
(4162) 39-46-82
lenast@bk.ru

ТИТОВ Андрей Иванович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-16
andrei.titov@rphf.spbstu.ru

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-65-08
victikh@mail.ru

ТРЕГУЛОВ Вадим Викторович — кандидат технических наук, доцент кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина.

390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46
trwww@yandex.ru

ТРОПИНА Наталья Эдуардовна — аспирантка кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-96-71
21@giricond.ru

ТРУБИЦЫН Андрей Афанасьевич — доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник центра инновационных коллабораций Рязанского государственного радиотехнического университета.

390035, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1
(4912) 46-04-17
assur@bk.ru

ТРЮХАН Татьяна Анатольевна — аспирантка кафедры теоретической и экспериментальной физики Амурского государственного университета.

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
8-(4162) 39-46-82
tat-tryukhan@yandex.ru

УЛЛА Мохаммад Вали — аспирант кафедры физики Университета Хельсинки, Финляндия.

P.O. Box 43 (Pietari Kalminkatu 2, 00014 University of Helsinki

+358-9-191-50007

mohammad.ullah@helsinki.fi

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

(812) 552-73-33

filalex@inbox.ru

ФОТИАДИ Александр Эпаминондович — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

(812) 552-73-33

fotiadi@rphf.spbstu.ru

ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

(812) 552-98-09

khodorkovskii@mail.ru

ЦАЦУЛЬНИКОВ Андрей Федорович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

(812) 297-22-45

andrew@beam.ioffe.ru

ЧЕРКАШИН Николай Анатольевич — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН и Центра разработки новых материалов и изучения структуры (CEMES) Национального центра научных исследований (CNRS) г. Тулузы, Франция.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

(812) 297-22-45

nikolag@cemes.fr

ЧЕРНЫШЕВА Екатерина Андреевна — студентка кафедры физики и технологии наногетероструктур Санкт-Петербургского академического университета.

195220, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8/3

(812) 297-22-45

EkChernisheva@gmail.com

ШАГАНОВ Антон Павлович — аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

(812) 552-73-33

shaganovanton@gmail.com

ШЕМЯКИНА Татьяна Алексеевна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

(812) 552-67-50

sh_tat@mail.ru

ШИЛЯЕВ Артем Владимирович — аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

(812) 292-71-82

vozzdooh@gmail.com



АННОТАЦИИ

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Антипина Н.А., Пещеренко С.Н. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТВЕРДЫХ ЧАСТИЦ В ПОГРУЖНЫХ СЕПАРАТОРАХ.

В статье предложена математическая модель движения твердых частиц в погружных сепараторах гравитационного и гидроциклонного типов. Выбраны рациональные конструкции устройств. Приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных.

ГРАВИТАЦИОННЫЙ СЕПАРАТОР. ГИДРОЦИКЛОН. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ОПТИМИЗАЦИЯ.

Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. ИЗМЕРЕНИЕ СВОЙСТВ ЛЕГКИХ АДРОНОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИЯХ 39,0 И 62,4 ГэВ.

Представлены результаты измерения спектров рождения и факторов ядерной модификации π^0 - и ϕ -мезонов в (Au+Au)-столкновениях при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 39,0$ и 62,4 ГэВ. Произведено сравнение интегральных факторов ядерной модификации R_{AA} , измеренных для π^0 -мезонов в (Cu+Cu)- и (Au+Au)-столкновениях при энергиях $\sqrt{s_{NN}} = 22,4$; 39,0; 62,4 и 200 ГэВ. Показано, что максимальная энергия, достижимая на синхротроне SPS в ЦЕРНе, недостаточна для обнаружения подавления выходов частиц.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. МЕЗОНЫ. РОЖДЕНИЕ. КРИТИЧЕСКАЯ ТОЧКА. АНАЛИЗ.

Вейс А.Н., Ильин В.И., Тропина Н.Э. ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА И СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК $Pb_{1-x}Cd_xSe$, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОДЛОЖКАХ ИЗ ФТОРИСТОГО КАЛЬЦИЯ И СТЕКЛА.

Высокотемпературная обработка пленок на стекле в кислородсодержащей среде создает композитную пленку из основного материала и диэлектрической фазы. При этом уменьшается концентрация свободных дырок у поверхности кристаллитов и растет фотолюминесценция пленок. Отжиг в парах йода сопровождается появлением фотопроводимости и резким усилением люминесценции. Эти эффекты объяснены инверсией проводимости в приповерхностных областях кристаллитов PbSe вследствие образования локализованных состояний донорного типа.

СЕЛЕНИД СВИНЦА. КОМПОЗИТНАЯ ПЛЕНКА. ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ. ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ. ШИРИНА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ. ПАРАМЕТР РЕШЕТКИ.

Денисов А.В. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЭФФЕКТА ЭКРАНИРОВАНИЯ ВОЛНЫ ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ СИММЕТРИЧНЫМ ПЛАЗМЕННЫМ СЛОЕМ.

Получено элементарное доказательство эффекта экранирования плоской гармонической волны вертикальной поляризации бесконечно протяженным плоскостойким изотропным плазменным слоем с максимумом электронной концентрации при стремлении потерь в слое к нулю, если частота волны равна максимальной плазменной частоте слоя.

ВОЛНА ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ. КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНЫ. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ.

Дьячков П.Н., Бочков И.А. НАНОАНТЕННА ТЕРАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК, ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ АЗОТОМ ИЛИ БОРОМ.

Исследовано влияние химической модификации углеродных нанотрубок (УНТ) атомами азота или бора на функции электромагнитной УНТ. Проведен расчет зонной структуры химически модифицированных УНТ методом линеаризованных присоединенных цилиндрических волн. Полуклассическая модель динамики электронов

использована для вычисления линейной проводимости УНТ. Для исследования антенных характеристик УНТ рассмотрено рассеяние на УНТ плоской электромагнитной волны и решена краевая задача для уравнений Максвелла. Продemonстрировано, что замещение атомов углерода атомами азота или бора является эффективным способом улучшения антенных свойств УНТ.

АНТЕННА. УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ЗОННАЯ СТРУКТУРА. МЕТОД ПРИСОЕДИНЕННЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ВОЛН.

Зиминов В.М., Захарова И.Б. ВЫПРЯМЛЯЮЩИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} .

Исследованы структура, состав и электрофизические свойства пленок, полученных методом вакуумного напыления из смеси фуллерена C_{60} с органическим либо неорганическим донорным полупроводником. Установлен диодный характер вольтамперных характеристик с коэффициентом выпрямления, зависящим от состава и структуры пленки. Проведен сравнительный анализ указанных композитных структур, сделаны выводы о перспективности использования смеси неорганического полупроводника с фуллереном для создания диода на основе объемного гетероперехода с высоким коэффициентом выпрямления.

ФУЛЛЕРЕН. ТОНКИЕ ПЛЕНКИ. ОБЪЕМНЫЙ ГЕТЕРОПЕРЕХОД. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ОРГАНИЧЕСКИЕ-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ УСТРОЙСТВА.

Карабешкин К.В., Карасёв П.А., Беляков В.С., Архипов А.В., Титов А.И. ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ КАСКАДОВ СМЕЩЕНИЙ НА ТОПОГРАФИЮ И СДВИГ ПОВЕРХНОСТИ НИТРИДА ГАЛЛИЯ, ОБЛУЧАЕМОГО АТОМАРНЫМИ И МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ИОНАМИ.

В статье рассмотрено влияние плотности каскадов столкновений на изменение свойств поверхности GaN при его бомбардировке ускоренными атомарными и молекулярными ионами. Показано, что при малых плотностях свеллинг преобладает над распылением, а при больших — наоборот, доминирует распыление. Шероховатость поверхности увеличивается при увеличении массы иона/размера кластера. Установлен пороговый характер развития этих процессов и определены пороговые дозы начала развития особенностей топографии поверхности и изменения толщины модифицируемых слоев. Предложено физическое объяснение наблюдаемых закономерностей.

ИОННАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИОНЫ. НИТРИД ГАЛЛИЯ. СВЕЛЛИНГ. РАСПЫЛЕНИЕ. ТОПОГРАФИЯ ПОВЕРХНОСТИ. МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭФФЕКТ. КАСКАДЫ СТОЛКНОВЕНИЙ.

Карасёв П.А., Титов А.И., Улла М.В., Джурабекова Ф., Куронен А., Нордлунд К. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ GaN АТОМАРНЫМИ И МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ИОНАМИ.

Описаны результаты МД-моделирования бомбардировки открытой поверхности (0001) GaN ускоренными атомарными (F, P, Ag) и молекулярными (PF_2 , PF_4) ионами с энергией 50 эВ/а.е.м. Обнаружена сильная внутрикаскадная рекомбинация образующихся точечных дефектов, а их распределения после термализации каскадов смещений сильно сдвинуты к поверхности. Оба факта хорошо согласуются с экспериментальными данными по накоплению структурных нарушений в GaN. Обнаружена также повышенная, по сравнению с приближением парных столкновений, генерация простейших точечных дефектов тяжелыми ионами Ag и молекулами PF_4 , причем для последних указанный эффект наблюдается только вблизи поверхности.

НИТРИД ГАЛЛИЯ. GaN. ИОННАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИОНЫ. МД-МОДЕЛИРОВАНИЕ. ДЕФЕКТЫ. КАСКАДЫ СТОЛКНОВЕНИЙ. МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ЭФФЕКТ.

Кизеветтер Д.В., Савина А.Ю., Левин В.М., Баскаков Г.Г. ИЗМЕРЕНИЕ ЗАТУХАНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ, АКТИВИРОВАННЫХ ФЛУОРЕСЦИРУЮЩИМ КРАСИТЕЛЕМ.

Предложен новый способ измерения затухания во флуоресцирующих оптических волокнах, основанный на боковом облучении. Экспериментально измерен коэффициент затухания в различных полимерных оптических волокнах, активированных красителем родамином 6Ж. Выявлено влияние условий измерений на измеряемый коэффициент затухания.

ПОЛИМЕРНОЕ ОПТИЧЕСКОЕ ВОЛОКНО. ЗАТУХАНИЕ. ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ. ИЗМЕРЕНИЯ. КРАСИТЕЛЬ РОДАМИН 6Ж.

Копытов Г.Ф., Погорелов А.В. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ПЛОСКОЙ МОНОХРОМАТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЕ И ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

В работе проанализирована задача об энергетических характеристиках заряженной частицы во внешнем заданном поле плоской электромагнитной волны большой амплитуды и постоянном магнитном поле. Исследованы различные случаи начальных условий движения заряженной частицы и поляризации волны, а также различные соотношения частот.

ПЛОСКАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ВОЛНА. ОДНОРОДНОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ. УСКОРЕНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ. УСРЕДНЕННАЯ ПО ВРЕМЕНИ ЭНЕРГИЯ ЧАСТИЦЫ.



Котова М.С., Дронов М.А., Белогорохов И.А. ЭФФЕКТ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛАХ И ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМАЯ ПАМЯТЬ НА ЕГО ОСНОВЕ.

Эффект резистивного переключения в полистироле исследован при комнатной температуре и температуре жидкого гелия при приложении электрических полей, не превышающих 400 кВ/см, и при плотностях токов, меньших 8 мА/мм². Реализованы стабильные, быстрые (до 10 нс), многократно (до 10⁶ раз) повторяющиеся переключения для создания энергонезависимой резистивной памяти.

РЕЗИСТИВНАЯ ПАМЯТЬ. ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМАЯ ПАМЯТЬ. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ. ПОЛИМЕРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ. МОДЕЛЬ ПРОВОДЯЩИХ КАНАЛОВ.

Кузнецов В.Е., Киселев А.А., Овчинников Р.В., Дудник Ю.Д. ЭЛЕКТРОДЫ ОДНОФАЗНЫХ ПЛАЗМОТРОНОВ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА И МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ИХ ИЗГОТОВЛЕНИЯ.

Статья рассматривает вопросы, решение которых необходимо для обеспечения максимальной долговечности электродов плазменных генераторов переменного тока. Работа посвящена исследованию эрозионной стойкости различных материалов, предназначенных для изготовления электродов. Приводятся экспериментальные результаты, полученные в ходе выполнения длительных ресурсных испытаний плазмотронов.

ЭЛЕКТРОД. ТРЕХФАЗНЫЙ ГЕНЕРАТОР ПЛАЗМЫ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА. КОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ. РЕСУРС. ЭРОЗИЯ.

Курапцев А.С., Соколов И.М. СРАВНЕНИЕ МАКРО- И МИКРОСКОПИЧЕСКОГО МЕТОДОВ РАСЧЕТА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПЛОТНЫХ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ АТОМНЫХ ОБЛАКОВ.

В статье рассмотрены проблемы теоретического описания взаимодействия света с комплексными атомными системами, охлажденными до сверхнизких температур. Изложены основные актуальные в настоящее время подходы, а также произведено сравнение результатов.

ХОЛОДНЫЕ АТОМЫ. ПЛОТНЫЕ УЛЬТРАХОЛОДНЫЕ АТОМНЫЕ ОБЛАКА. СИЛЬНАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ. КВАНТОВАЯ ОПТИКА. РЕЗОНАНСНОЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ.

Магомедов А.М., Магомедов Т.А. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПОДГРАФА МАКСИМАЛЬНОЙ ПСЕВДОПЛОТНОСТИ.

В статье найден новый подход к эффективному вычислению подграфа с максимальной псевдоплотностью. Последняя принята как отношение $|E|/|V|$ графа $G = (V, E)$. Рассмотрено применение нового подхода для решения задачи о непрерывном расписании.

ГРАФ. ДВУДОЛЬНЫЙ ГРАФ. НЕПРЕРЫВНОЕ РАСПИСАНИЕ. ПАРОСОЧЕТАНИЕ. NP-ТРУДНЫЙ.

Мороз А.П., Серебряков А.С., Бердников Я.А. ВЛИЯНИЕ КОНСТРУКТИВНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ КРЕМНИЙ-ЛИТИЕВОГО ДЕТЕКТОРА НА ФОРМУ АМПЛИТУДНОГО СПЕКТРА.

В статье рассмотрены некоторые аспекты влияния конструктивных особенностей детекторов на форму получаемого амплитудного спектра на примере Si(Li)-детектора. Приведены результаты работы моделирующей программы детектора. Описан эффект частичного сбора заряда из мертвых зон детектора.

Si(Li)-ДЕТЕКТОР. АМПЛИТУДНАЯ ФОРМА СПЕКТРА. НЕПОЛНЫЙ СБОР ЗАРЯДА. МЕРТВАЯ ЗОНА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. НЕОДНОРОДНЫЙ ОБРАЗЕЦ.

Нгуен Ван Тханг, Арсеньев Д.Г., Беляев А.К. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ВРАЩЕНИЯ ВТУЛКИ В УПОРНОМ ПОДШИПНИКЕ СКОЛЬЖЕНИЯ С УЧЕТОМ ГИДРОДИНАМИКИ СМАЗКИ И ЦЕНТРОБЕЖНЫХ СИЛ.

В статье рассмотрены проблемы теоретического представления вопросов скорости вращения втулки в упорном подшипнике скольжения с учетом гидродинамики смазки и центробежных сил. Изложены основные результаты применительно к исследованию короткого подшипника.

ЦЕНТРОБЕЖНЫЕ СИЛЫ. УРАВНЕНИЕ РЕЙНОЛЬДСА. МОМЕНТ. КОРОТКИЙ ПОДШИПНИК. ГИДРОДИНАМИКА СМАЗКИ.

Перминов А.В. РАВНОВЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ОБОБЩЕННОЙ НЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ.

В работе получен общий вид осредненного тензора вязких напряжений для обобщенной ньютоновской жидкости, находящейся в поле высокочастотных вибраций. Сформулированы условия равновесного и квазиравновесного состояний для обобщенной ньютоновской жидкости, находящейся в замкнутой полости произвольной формы. Для вязкопластичной жидкости Бингама сформулировано условие существования жесткого состояния.

НЕНЬЮТОНОВСКИЕ ЖИДКОСТИ. ВИБРАЦИИ. КОНВЕКЦИЯ. РАВНОВЕСИЕ. КВАЗИРАВНОВЕСИЕ.

Петриченко М.Р. РАСЩЕПЛЯЮЩИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В ПРЕДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ КВАЗИЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ.

Процедура расщепления приводит квазилинейную предельную задачу к последовательности линейных предельных задач. Уравнения расщепленной последовательности образуют Гамильтоновы системы, связанные с условиями экстремума.

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ РЯД. ПРЕДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА. ПРИСТЕНОЧНОЕ ТЕЧЕНИЕ. ГРУППА ПРЕОБРАЗОВАНИЙ. ГАМИЛЬТониан.

Сабанцев А.В., Побегалов Г.Е., Мурашов С.В., Мельников А.С., Ходорковский М.А. МОДЕРНИЗАЦИЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО МИКРОСКОПА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР С СУБДИФРАКЦИОННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ.

Неинвертированный флуоресцентный микроскоп, являющийся частью установки «Лазерный пинцет», модернизирован для осуществления локализационной микроскопии. Продемонстрировано разрешение 50 нм на тестовом объекте. Сформулированы рекомендации по модернизации уже используемых или вновь приобретаемых микроскопов для осуществления локализационной микроскопии, а также по калибровке и тестированию таких установок.

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ МИКРОСКОПИЯ. ЛОКАЛИЗАЦИОННАЯ МИКРОСКОПИЯ. УСТАНОВКА «ЛАЗЕРНЫЙ ПИНЦЕТ». ДНК. YOYO-1.

Стукова Е.В., Королева Е.Ю., Трюхан Т.А., Барышников С.В. ИЗМЕНЕНИЕ ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ НЕСОРАЗМЕРНОЙ ФАЗЫ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ КОМПОЗИТЕ $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$.

Исследованы температурно-частотные зависимости диэлектрических свойств сегнетоэлектрических композитов $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$. Показано, что в композитах, как и в твердых растворах, может происходить взаимовлияние компонент, приводящее к расширению области существования несоизмерной фазы в нитрите натрия. Наибольший вклад в низкочастотную диэлектрическую проницаемость композита обусловлен поляризацией Максвелла – Вагнера.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ. КОМПОЗИТЫ. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД. СПОНТАННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ.

Тихомиров В.В. АНТИПЛОСКАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ТРЕЩИНЫ, ПРОНИКАЮЩЕЙ В УПРУГОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ ПРИ НЕИДЕАЛЬНОМ КОНТАКТЕ ФАЗ.

В статье рассматривается взаимодействие полубесконечной трещины продольного сдвига с упругим круговым включением. Контакт включения и матрицы предполагается неидеальным. В качестве условий на интерфейсе используется модель линейных пружин. Считается, что напряжения на границе раздела фаз непрерывны и пропорциональны скачку смещений. В результате использования обобщенного интегрального преобразования Меллина задача сведена к одномерному гиперсингулярному интегральному уравнению, для которого построено точное решение. Для КИН получено простое замкнутое выражение. Рассмотрены две предельных ситуации: случай идеального контакта и случай скользящего контакта.

ТРЕЩИНА ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТРЕЩИНЫ С ВКЛЮЧЕНИЕМ. НЕИДЕАЛЬНЫЙ КОНТАКТ.

Трегулов В.В. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕЗКИХ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ CdS/p-Si.

Представлена методика определения энергетической плотности поверхностных состояний в резких несимметричных гетероструктурах, основанная на измерении высоко- и низкочастотной вольт-фарадных характеристик. Методика может применяться в случае, когда заряд поверхностных состояний зависит от напряжения постоянного обратного смещения. Приведены результаты исследования гетероструктуры CdS/p-Si, изготовленной методом гидрохимического осаждения.

ГЕТЕРОСТРУКТУРА. ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ. ГЛУБОКИЕ УРОВНИ. ВОЛЬТ-ФАРАДНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ. ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ.

Филимонов А.В., Бурковский Р.Г., Бронвальд Ю.А., Вахрушев С.Б., Шаганов А.П., Фотиади А.Э. УЖЕСТОЧЕНИЕ МЯГКОЙ МОДЫ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ РЕЛАКСОРОВ.

В статье рассмотрены результаты исследования тонких пленок магнониобата свинца методом неупругого рассеяния синхротронного излучения. На основании полученных результатов можно предположить, что в тонких пленках релаксоров формирование полярных нанобластей обусловлено механизмами, отличными от конденсации поперечной оптической моды.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ. РЕЛАКСОРЫ. ТОНКИЕ ПЛЕНКИ. МАГНОНИОБАТ СВИНЦА. НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ. СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ПОЛЯРНЫЕ НАНООБЛАСТИ.



Ходорковский М.А., Мурашов С.В., Беляева А.А., Сердобинцев П.Ю., Ракчеева Л.П. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ АРГОН-КСЕНОН В ОБЛАСТИ ДАЛЕКОГО ВАКУУМНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТА, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДОМ (3+1) REMPI.

Методом трехфотонного возбуждения молекул с последующей однофотонной ионизацией, так называемого (3+1)REMPI, исследованы фотоионизационные спектры димерных молекул ArXe вблизи возбужденных состояний $\text{Xe}^* 7p, 6d$ в области от 87500 до 90000 см^{-1} , близкой к энергии ионизации молекул. Эта область содержит 12 состояний Xe^* , из них два разрешенных при трехфотонном возбуждении. Сложная картина спектра наблюдается при регистрации молекулярных ионов ArXe^+ . Для двух колебательных систем были определены диссоционные пределы, к которым они сходятся: $\text{ArXe}^* \rightarrow \text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^* 7p[5/2]_2$ и $\text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^* 6d[7/2]_3^0$. Для соответствующих возбужденных состояний определены молекулярные постоянные и построены потенциальные кривые. Эти данные получены впервые.

РЕЗОНАНСНАЯ МНОГОФОТОННАЯ ИОНИЗАЦИЯ. МОЛЕКУЛЫ. ИОНЫ. ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ. БЛАГОРОДНЫЕ ГАЗЫ. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ. ДИССОЦИАЦИЯ. МАСС-СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ.

Чернышева Е.А., Сахаров А.В., Черкашин Н.А., Лундин В.В., Цацульников А.Ф. ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ В РЕАКТОРЕ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР InGaN, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ГФЭ МОС.

Исследовано влияние давления в реакторе на оптические свойства InGaN при их выращивании методом газовой эпитаксии из металлоорганических соединений. Обнаружено, что изменение указанного давления приводит как к модификации вхождения индия, так и к существенному изменению оптических свойств структур.

НИТРИДЫ III ГРУППЫ. СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИЕ ДИОДЫ. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ДАВЛЕНИЕ. ЭПИТАКСИЯ.

Шемякина Т.А. ТЕОРЕМА СУЩЕСТВОВАНИЯ ОГРАНИЧЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ СИСТЕМЫ ФРАНКЛЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА.

В работе получены условия разрешимости задачи Коши для гиперболической системы квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка. Исследование качественных свойств этих решений основано на методе дополнительного аргумента.

КВАЗИЛИНЕЙНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ ПЕРВОГО ПОРЯДКА. СИСТЕМА ФРАНКЛЯ. СИСТЕМА ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА. ЗАДАЧА КОШИ. МЕТОД ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО АРГУМЕНТА.

Шиляев А.В., Баженов Н.Л., Мынбаев К.Д., Зегря Г.Г. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ Теллурида Кадмия и Ртуты.

Представлены результаты экспериментов по исследованию фотолюминесценции наногетероструктур CdHgTe. Проведен расчет положения уровней размерного квантования для реальных образцов CdHgTe с квантовыми ямами с учетом эффекта непараболичности закона дисперсии. Экспериментально подтверждена возможность наблюдения оптических переходов с участием электронов и легких дырок в структурах с квантовыми ямами.

ТВЕРДЫЙ РАСТВОР. КАДМИЙ-РТУТЬ-ТЕЛЛУР. ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР. НЕПАРАБОЛИЧНОСТЬ ЗАКОНА ДИСПЕРСИИ.

ABSTRACTS

KEY WORDS

Antipina N.A., Peshcherenko S.N. MATHEMATICAL MODELING OF SOLID PARTICLES MOTION IN SUBMERSIBLE SEPARATORS.

Mathematical model of solid particles tracking in submersible gravity and hydrocyclone separators has been put forward. Optimal geometry parameters of the devices were chosen. The calculated and experimental data were compared.

GRAVITY SEPARATOR. HYDROCYCLONE. MODELING. OPTIMIZATION.

Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G., Samsonov V. M. THE MEASUREMENT OF MAIN CHARACTERISTICS OF LIGHT HADRONS IN GOLD NUCLEI COLLISIONS AT 39.0 AND 62.4 GeV.

π - and ϕ -mesons resulting spectra and nuclear modification factors measured in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 39.0$ and 62.4 GeV have been presented. Comparison of nuclear modification factors measured for π^0 -mesons in Cu+Cu and Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 22.4, 39.0, 62.4$ and 200 GeV was carried out. It is shown that maximum energy of SPS synchrotron at CERN is not enough to reveal the jet-quenching effect.

QUARK-GLUON PLASMA. MESONS. PRODUCTION. CRITICAL POINT. ANALYSIS.

Chernysheva E.A., Sakharov A.V., Cherkashin N.A., Lundin V.V., Tsatsulnikov A.F. REACTOR PRESSURE EFFECT ON OPTICAL PROPERTIES OF MOVPE-GROWN InGaN HETEROSTRUCTURES.

Influence of reactor pressure during MOVPE growth on optical properties of InGaN heterostructures has been studied. It was found that reactor pressure influences not only indium incorporation, but also strongly modifies optical properties of structures.

III-NITRIDES. LIGHT-EMITTING DIODES. OPTICAL PROPERTIES. PRESSURE. EPITAXY.

Denisov A.V. THE PROOF OF EFFECT OF SHIELDING OF A HARMONIOUS WAVE OF VERTICAL POLARIZATION BY AN ISOTROPIC PLASMA LAYER.

The elementary proof of effect of shielding of a harmonious wave of vertical polarization by an isotropic plasma layer with a maximum electronic concentration is obtained as losses in a layer tend to zero if a frequency of a wave is equal to the maximum plasma frequency of a layer.

WAVE OF VERTICAL POLARIZATION. TRANSMISSION COEFFICIENT. ELECTRODYNAMIC BOUNDARY CONDITIONS.

D'yachkov P.N., Bochkov I.A. TERAHERTZ NANOANTENNA BASED ON CARBON NANOTUBES MODIFIED CHEMICALLY WITH BORON OR NITROGEN.

The effects of chemical modification of the carbon nanotubes (CNTs) due to injection of the boron or nitrogen atoms on the electromagnetic properties of CNTs are studied. The calculation of the band structure of carbon nanotubes modified chemically is performed using the linear augmented cylindrical wave method. Semiclassical model for the dynamics of electrons is used to calculate the linear conductance of CNTs. To investigate the antenna characteristics of CNT a scattering of plane electromagnetic wave on CNT is considered and a boundary problem for Maxwell's equations is analyzed. It is demonstrated that the substitution of carbon atoms for boron or nitrogen is an effective way to improve antenna characteristics of CNTs.

ANTENNA. CARBON NANOTUBES. SIMULATION. BAND STRUCTURE. AUGMENTED CYLINDRICAL WAVE METHOD.



Filimonov A.V., Burkovski R.G., Bronwald Yu.A., Vakhrushev S.B., Shaganov A.P., Fotiadi A.E. TIGHTENING OF THE SOFT MODE IN EPITAXIAL THIN FILMS OF RELAXOR FERRO-ELECTRIC MATERIALS.

The paper presents the results of inelastic scattering of synchrotron radiation in epitaxial thin films of magnesium niobate. It is shown on the basis of obtained results that polar nano-regions in relaxor films is governed by mechanisms other than soft mode condensation.

FERROELECTRIC. RELAXORS. THIN FILMS. MAGNESIUM NIOBATE. INELASTIC SCATTERING. SYNCHROTRON RADIATION. POLAR NANOREGIONS.

Karabeshkin K.V., Karaseov P.A., Belyakov V.S., Arkhipov A.V., Titov A.I. THE INFLUENCE OF COLLISION CASCADE DENSITY ON GaN SURFACE TOPOGRAPHY AND SURFACE SHIFT UNDER ATOMIC AND MOLECULAR ION BOMBARDMENT.

Effect of collision cascade density on GaN surface properties under molecular and atomic ion bombardment have been studied. At low level of cascade density swelling prevails sputtering. In the case of molecular ion irradiation, when cascade is high, sputtering is more effective than swelling. Threshold behavior of these phenomena is established and corresponding values are found. Physical reasons are suggested.

ION IMPLANTATION. MOLECULAR IONS. GALLIUM NITRIDE. SWELLING. SPUTTERING. SURFACE TOPOGRAPHY. MOLECULAR EFFECT. COLLISION CASCADE.

Karaseov P.A., Titov A.I., Ullah M.-W., Djurabekova F., Kuronen A., Nordlund K. MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF DAMAGE FORMATION IN GaN UNDER ATOMIC AND MOLECULAR ION BOMBARDMENT.

Results of atomistic simulation of (0001) GaN surface bombardment by 50 eV/a.m.u. atomic (F, P, Ag) and molecular (PF_2 and PF_4) ions are presented. Strong in-cascade recombination of generated point defects is found. Final defect distributions are significantly shifted towards the surface. Both these findings are in good agreement with experimental data on formation of structural defects in GaN under accelerated ion irradiation. Enhanced defect generation as compared to approximation given by binary collisions is found for heavy atomic (Ag) and molecular (PF_4) ions. In the case of molecular ion the mentioned effect is observed close to the sample surface only.

GALLIUM NITRIDE. GaN. ION IMPLANTATION. MOLECULAR IONS. MD SIMULATIONS. DEFECTS. COLLISION CASCADE. MOLECULAR EFFECT.

Khodorkovskii M.A., Murashov S.V., Belyaeva A.A., Serdobintsev P.Yu., Rakcheeva L.P. THE EXCITED STATES OF ARGON-XENON MOLECULES IN THE FAR ULTRAVIOLET AREA STUDIED USING THE (3+1) REMPI METHOD.

The photoionization spectra of ArXe dimer molecules near the excited states $\text{Xe}^* 7p, 6d$ in the high-energy area $87500 - 90000 \text{ cm}^{-1}$ close to the energy of ionization of molecules were recorded by the method of three-photon excitation of molecules followed by one-photon ionization, (3+1)REMPI method. There are 12 states of Xe^* in this area, two of these states are allowed at three-photon excitation. The spectrum recorded by monitoring the molecular ions ArXe^+ has the complicated image. The dissociation limits of two vibrational systems were measured: $\text{ArXe}^* \rightarrow \text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^*7p[5/2]_2$ and $\text{Ar}^1S_0 + \text{Xe}^*6d[7/2]_3^0$. For these excited states the molecular constants and the potential curves were calculated. These data were obtained for the first time.

RESONANCE MULTIPHOTON IONIZATION. MOLECULES. IONS. EXCITED STATES. RARE GASES. ELECTRONIC STATES. DISSOCIATION. MASS-SPECTROSCOPY. LASER EXCITATION.

Kiesewetter D.V., Savina A.Yu., Levin V.M., Baskakov G.G. THE MEASUREMENT OF ATTENUATION IN POLYMER OPTICAL FIBERS DOPED WITH FLUORESCENT DYE.

The new method of measurement of attenuation in dye-doped polymer optical fiber based on side illumination is put forward. Attenuation coefficient of different polymer optical fiber doped with Rhodamine 6G dye is measured. The influence of conditions of measurements on measuring attenuation coefficient is detected.

POLYMER OPTICAL FIBER. ATTENUATION. FLUORESCENCE. MEASUREMENTS. RHODAMINE 6G DYE.

Kopytov G.F., Pogorelov A.V. ENERGY CHARACTERISTICS OF A CHARGED PARTICLE IN A PLANE MONOCHROMATIC WAVE AND IN A MAGNETOSTATIC FIELD.

The problem of a charged particle motion in an external field of a plane electromagnetic wave and a uniform magnetostatic field has been analyzed. The motion of particles with different initial conditions was considered. The dependence of particle energy on the intensity of electromagnetic wave and the frequency ratio was obtained.

PLANE ELECTROMAGNETIC WAVE. UNIFORM MAGNETIC FIELD. ACCELERATION OF CHARGED PARTICLES. PARTICLE ENERGY AVERAGED OVER TIME.

Kotova M.S., Dronov M.A., Belogorokhov I.A. THE RESISTIVE SWITCHING EFFECT IN POLYMER MATERIALS AND NONVOLATILE MEMORY BASED ON THIS EFFECT.

Resistive switch effect in polystyrene has been investigated at room temperature and at the liquid helium temperature. Applied fields did not exceed 400 kV/cm, values of current density were less than 8 mA/mm². Stable, fast (down to 10 ns), multiple (up to 10⁶ times) reiterative switches were fulfilled for creation nonvolatile resistive memory.

RESISTIVE MEMORY. NONVOLATILE MEMORY. ELECTRICAL SWITCHES. POLYMER MATERIALS. MODEL OF CONDUCTING FILAMENTS.

Kuraptsev A.S., Sokolov I.M. A COMPARISON OF MACROSCOPIC AND MICROSCOPIC METHODS OF CALCULATION OF DIELECTRIC PERMITTIVITY OF DENSE ULTRACOLD ATOMIC CLOUDS.

In this article we discuss the problems of theoretical description of light interaction with complex atomic systems, chilled down to very low temperatures. Basic actual approaches are outlined and the results are compared.

COLD ATOMS. DENSE ULTRACOLD ATOMIC CLOUDS. STRONG LOCALIZATION. QUANTUM OPTICS. RESONANCE DIPOLE-DIPOLE INTERACTION.

Kuznetsov V.E., Kiselev A.A., Ovchinnikov R.V., Dudnik Yu. D. ELECTRODES OF SINGLE-PHASE ALTERNATING CURRENT PLASMA TORCHES AND MATERIALS FOR ITS PRODUCTION.

The paper deals with problems which solution is necessary to provide maximal lifetime of electrodes for alternating current plasma torches. Investigation of erosion resistance of various materials intended for electrode production is represented in the paper. The experimental data obtained in the course of the long-time lifetime testing of the plasma torches are reported.

ELECTRODE. THREE-PHASE ALTERNATING CURRENT PLASMA TORCH. COMPOSITE MATERIALS. LIFETIME. EROSION.

Magomedov A.M., Magomedov T.A. THE CALCULATION OF THE SUBGRAPH WITH THE MAXIMAL PSEUDO-DENSITY.

In this paper a new approach to effective calculation of a subgraph with the maximal density has been found. A pseudo-density is defined as the $|E|/|V|$ ratio of the $G = (V, E)$ graph. The use for solving consecutive scheduling problem is considered.

GRAPH. BIPARTITE GRAPH. CONSECUTIVE SCHEDULE. MATCHING. NP-HARD.

Moroz A.P., Serebryakov A.S., Berdnikov Ya.A. THE INFLUENCE OF CONSTRUCTIONAL FEATURES OF Si(Li) DETECTOR ON THE AMPLITUDE SPECTRUM FORM.

The paper considers some aspects of the influence of the detector constructional features on the shape of the amplitude spectrum of Si(Li) detector as an example. The results of the detector imitation program and of the incomplete charge collection from dead layers are described.

Si(Li) DETECTOR. AMPLITUDE SPECTRUM SHAPE. INCOMPLETE CHARGE COLLECTION. DEAD LAYER. COMPUTER SIMULATION. MONTE CARLO METHOD. HETEROGENEOUS SAMPLE.

Nguyen Van Thang, Arseniev D.G., Belyaev A.K. THE ROTATIONAL SPEED DETERMINATION FOR A BUSH IN THE FLOATING RING BEARING WITH ALLOWANCE OF LUBRICATION HYDRODYNAMICS AND CENTRIFUGAL FORCES.

Our study gives the theoretical representation of the rotational speed determination for the bush in the floating ring bearing with allowance of lubrication hydrodynamics and centrifugal force. The basic results are referred to the short bearing investigation.

CENTRIFUGAL FORCES. REYNOLD'S EQUATION. TORQUE. SHORT BEARING. LUBRICATION HYDRODYNAMICS.

Perminov A.V. EQUILIBRIUM STATES OF INTEGRATED NEWTONIAN FLUID.

General form of viscous tension tensor for integrated Newtonian fluid in the high-frequency vibration field has been obtained in this work. Conditions of equilibrium and quasi-equilibrium states of integrated Newtonian fluid in the free shape closed cavity were formulated. Besides solid state existence condition for Bingham liquid was described.

NON-NEWTONIAN LIQUID. VIBRATIONS. CONVECTION. EQUILIBRIUM. QUASI-EQUILIBRIUM.

Petritchenko M.R. SPLITTING EXPANSIONS FOR THE ORDINARY QUASI-LINEAR DIFFERENTIAL EQUATIONS IN THE LIMITING PROBLEMS.

The splitting procedure transforms a quasi-linear limiting problem into a sequence of linear limit problems. The split sequence equations form Hamilton's systems connected to the conditions of the extremum.

FUNCTIONAL SERIES. LIMITING PROBLEM. BOUNDARY FLOW. TRANSFORMATION GROUP. HAMILTONIAN.



Sabantsev A.V., Pobegalov G.E., Murashov S.V., Mel'nikov A.S., Khodorkovskii M.A. THE FLUORESCENT MICROSCOPE UPGRADING TO INVESTIGATE BIOLOGICAL STRUCTURES WITH SUBDIFFRACTIONAL RESOLUTION.

An upright fluorescence microscope, which is a part of the Optical Tweezers set-up, is upgraded to perform localization microscopy. The resolution of 50 nm was obtained with a test object. Recommendations on upgrading already existing or newly bought microscopes to perform localization microscopy and on calibrating and testing upgraded microscopes are proposed.

FLUORESCENCE MICROSCOPY. LOCALIZATION MICROSCOPY. LASER TWEEZERS SET-UP. DNA. YOYO-1.

Shemyakina T.A. THE THEOREM ON EXISTENCE OF A BOUNDED SOLUTION OF THE CAUCHY PROBLEM FOR THE FRANKL SYSTEM OF HYPERBOLIC TYPE.

The conditions of resolvability of the Cauchy problem have been obtained for a hyperbolic system of first order quasilinear partial differential equations. The investigation of the characteristic properties of the solutions was based on the method of an additional argument.

FIRST ORDER QUASILINEAR PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS. FRANKL SYSTEM. SYSTEM OF HYPERBOLIC TYPE. METHOD OF AN ADDITIONAL ARGUMENT.

Shilyaev A.V. Bazhenov N.L. Mynbaev K.D. Zegrya G.G. ENERGY SPECTRUM AND OPTICAL TRANSITIONS IN CdHgTe NANOHETEROSTRUCTURES.

Experimental results of photoluminescence in CdHgTe nanoheterostructures are presented. Calculations of size-quantization levels in CdHgTe with quantum wells were performed with account for the effect of nonparabolicity of the energy-versus-wave vector dependence. Our experiments confirmed possibility of observation optical transitions involving electrons and light holes in the quantum-well structures.

SOLID SOLUTION. MERCURY CADMIUM TELLURIDE. PHOTOLUMINESCENCE. ENERGY SPECTRUM. NONPARABOLICITY OF DISPERSION LAW.

Stukova E.V., Koroleva E.Yu., Tryukhan T.A., Baryshnikov S.V. A CHANGE IN INCOMMENSURATE PHASE EXISTENCE IN $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$ FERROELECTRIC COMPOSITE.

The temperature and frequency dependences of dielectric properties of $(\text{NaNO}_2)_{1-x}(\text{BaTiO}_3)_x$ ferroelectric composites have been studied. It was shown that in the composites as well as in solid solutions, the mutual influence of the components may lead to the expansion of incommensurate phase existence in NaNO_2 . The greatest contribution to the low-frequency dielectric constant of the composite is due to the Maxwell-Wagner polarization.

FERROELECTRIC. PERMITTIVITY. COMPOSITES. PHASE TRANSITION. SPONTANEOUS POLARIZATION.

Tikhomirov V.V. AN ANTIPLANE PROBLEM FOR A CRACK PENETRATING INTO AN ELASTIC INCLUSION PROVIDED THE PHASE CONTACT IS IMPERFECT.

In the paper we consider an interaction of the semi-infinite crack of mode III with circular elastic inclusion. Imperfect contact at the interface is supposed. The interface conditions are described by a spring-type model assuming that the traction continuity remains intact, while the displacement experiences a jump proportional to the interfacial traction. As a result the use of the generalized integral transform of Mellin the problem reduced to hypersingular integral equation. Exact analytical solution in closed form of this equation is founded. For the stress intensity factor the simple mathematical formula is obtained. Two limiting situations are studied: the case of perfect contact and the case of sliding contact.

ANTIPLANE CRACK. CRACK INTERACTION WITH INCLUSION. IMPERFECT CONTACT.

Tregulov V.V. THE TECHNIQUE OF INVESTIGATION OF SURFACE STATES IN A SHARP NONSYMMETRICAL CdS/p-Si HETEROSTRUCTURES.

The technique for determining the energy density of surface states in a sharp nonsymmetrical heterostructures, based on the measurement of high- and low-frequency capacitance-voltage characteristics, is presented. The technique can be applied in the case, where the charge of surface states depends on the voltage of a reverse bias. The results of investigation of the CdS/p-Si heterostructure produced by hydro-chemical deposition are presented.

HETEROSTRUCTURE. PHOTOELECTRICAL CONVERTER. DEEP LEVELS. CAPACITANCE-VOLTAGE CHARACTERISTICS. SURFACE STATES.

Veis A.N., Ilyin V.I., Tropina N.E. FEATURES OF ENERGY SPECTRA AND PROPERTIES OF POLYCRYSTALLINE $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ FILMS FORMED ON CALCIUM FLUORIDE AND GLASS SUBSTRATES.

High-temperature treatment of films on the glass substrates creates composite films of main materials and dielectric phase in the oxygen-containing medium. In this case the concentration of free holes in the vicinity of the crystallites surface

decreases and photoluminescence of films grows up. Annealing in iodide vapor leads to the appearance of photoconductivity and to sharp intensification of photoluminescence of films. The effects are explained by inversion of surface conductivity in PbSe crystallites because of formation of localized states having the donor character.

LEAD SELENIDE. COMPOSITE FILM. OPTICAL ABSORPTION. PHOTOLUMINESCENCE. BAND GAP. LATTICE PARAMETER.

Ziminov V.M., Zakharova I.B. THE RECTIFYING PROPERTIES OF C₆₀ FULLERENE-BASED STRUCTURES.

The structure, composition and electrical properties of the films produced by the vacuum evaporation method from a mixture of C₆₀ with organic or inorganic donor semiconductor were investigated. Diode current-voltage characteristics with a rectification ratio, depending on the composition and structure of the films were found. A comparative study of the composite structures was carried out, conclusions about the prospects of using a mixture of inorganic semiconductor with a fullerene to make a bulk heterojunction-based diode with a high rectification ratio were done.

FULLERENE. THIN FILMS. BULK HETEROJUNCTION. ELECTRICAL PROPERTIES. ORGANIC-INORGANIC HYBRIDS.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

№ 2 (146) 2012

Серия «Физико-математические науки»

Учредитель — Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Издание зарегистрировано в Госкомпечати РФ, свидетельство № 013165 от 23.12.94

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* — председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* — зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* — ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* — научный редактор, корректор
А.С. Колгатина — технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *С.В. Горячевой*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 21.06.2012. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 24,0. Уч.-изд. л. 24,0. Тираж 1000. Заказ 224.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России.
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.