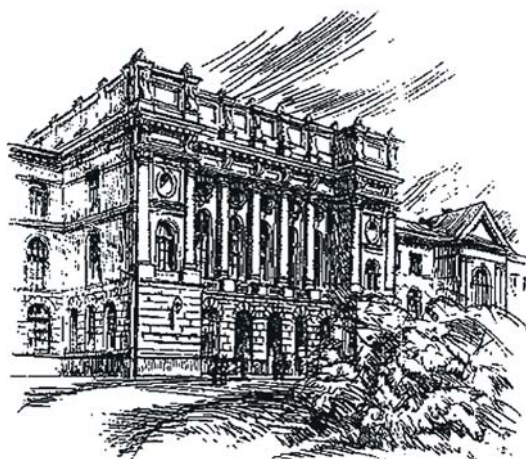


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

1(165) 2013

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2013

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Васильев Ю.С., академик РАН, Президент СПбГПУ — 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; *Форттов В.Е.*, академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Васильев Ю.С., академик РАН, Президент СПбГПУ — 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.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

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

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;
Кожевников 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 с 1995 г. издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» ISSN 1994-2354.

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Подписной индекс **71823** в каталоге «Газеты. Журналы» агентства «Роспечать».

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

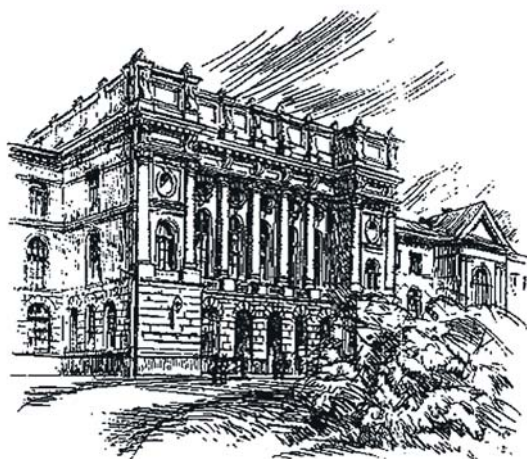
При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

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

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2013

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

1(165) 2013

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2013

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

EDITORIAL COUNCIL

Yu.S. Vasiliev – full member of RAS, President of St. Petersburg State Polytechnical University, editor-in-chief; *Zh.I. Alferov* – full member of RAS;
V.V. Kostiuk – full member of RAS;
V.A. Lopota – corresponding member of RAS; *V.V. Okrepilov* – full member of RAS;
B.E. Paton – full member of RAS and NAS of Ukraine;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS;
M.P. Fedorov – full member of RAS; *V.E. Fortov* – full member of RAS.

EDITORIAL BOARD

Yu.S. Vasiliev – full member of RAS, President of St. Petersburg State Polytechnical University, editor-in-chief;
D.G. Arseniev – Dr.Sc.(tech.), prof.;
A.V. Babkin – Dr.Sc. (econ.), prof., deputy editor-in-chief; *V.N. Boronin* – Dr.Sc.(tech.), prof.;
V.V. Glukhov – Dr.Sc. (econ.), prof.;
R.V. Degtyareva – Dr.Sc. (history), prof.;
A.V. Ivanov – Dr.Sc.(tech.), prof.; *V.K. Ivanov* – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
V.V. Kozlovsky – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.Yu. Raychuk* – deputy editor-in-chief;
R.M. Yusupov – corresponding member of RAS.

PHYSICS AND MATHEMATICS

EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
D.A. Varshalovich – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;
A.Ye. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
Ph.G. Rutberg – full member of RAS;
R.A. Suris – full member of RAS.

EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof. – head of the editorial board;
V.I. Antonov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *A.V. Blinov* – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
V.M. Kapralova – Candidate of phys.-math. sc., associate prof. – executive secretary;
N.M. Kozhevnikov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
V.V. Kozlovsky – Dr.Sc.(phys.-math.), prof. – deputy head of the editorial board;
V.M. Ostryakov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *V.O. Samoilov* – corresponding member of RAMS, prof.;
I.N. Topygin – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *E.A. Tropp* – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
D.A. Firsov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.;
A.E. Fotiadi – Dr.Sc.(phys.-math.), prof. – deputy head of the editorial board.

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tehnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate ПИ № ФС77-52144 issued December 11, 2012.

Subscription index **71823** in the "Journals and Magazines" catalogue, Rospechat agency.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database

© Scientific Electronic Library (<http://www.elibrary.ru>).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.
Phone: (812) 294-22-85.

© St. Petersburg State Polytechnical University, 2013

Содержание

Физика конденсированного состояния

Горяйнов Г.И., Каров Д.Д., Поликарпов Ю.И., Слуцкер А.И., Степанов А.Б. <i>Определение параметров разрывной долговечности эластомеров</i>	9
Горяйнов Г.И., Капралова В.М., Лобода В.В., Саракуз О.Н., Слуцкер А.И. <i>Характеристики молекулярной трехмерной сетки в новых полиэфируретаново-силоксановых эластомерах</i>	17
Матвеев С.А., Денисов С.А., Чалков В.Ю., Шенгуров В.Г., Степихова М.В. <i>Выращивание и исследование фотолюминесценции кремниево-германиевых структур, активированных эрбием, на подложках сапфира</i>	24
Андреева Н.В., Пестов Ю.И., Макин В.С., Привалов В.Е., Фотиади А.Э. <i>Управляемое формирование микроконусов на сверхтупоголавких металлах при многоимпульсном лазерном облучении</i>	29

Математическое моделирование физических процессов

Степанов А.Б. <i>Применение нейронных сетей при синтезе вейвлетов для непрерывного вейвлет-преобразования</i>	38
Привалов В.Е., Сетейкин А.Ю., Фотиади А.Э. <i>Моделирование распространения лазерного излучения в неоднородных средах со сложной геометрией</i>	45

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Шамина Е.Н. <i>Квантовохимическое исследование влияния растворителя бензола на электронное строение углеродных нанотрубок</i>	55
Ипатов А.Н. <i>Влияние межчастичного взаимодействия на оптические свойства систем фермионов</i>	60

Приборы и техника физического эксперимента

Быковский В.Ф., Мольков С.И., Степанов В.А., Хилов В.С., Хилов С.И. <i>Мощный источник когерентного излучения для оптической голографии и рамановской спектроскопии</i>	71
--	----

Физическая электроника

Мольков С.И., Савин В.Н. <i>Влияние процессов электронной эмиссии на заряд пылевых частиц в упорядоченных плазменно-пылевых структурах</i>	80
Бакшт Ф.Г., Лапшин В.Ф., Пелли А.В. <i>Моделирование переноса энергии излучением в аксиально-симметричной плазме газового разряда высокого давления</i>	86
Дубов В.В., Кораблев В.В. <i>Рассеяние медленных электронов на флуктуационном потенциале полупроводника</i>	93
Дубов В.В., Кораблев В.В., Сугаипов М.Ш. <i>Резонансное рассеяние электронов поверхностью полупроводника с естественными неоднородностями</i>	101

Физическая оптика

- Ильин Н.В., Кизеветтер Д.В.** Численное моделирование распределения интенсивности света вблизи выходного торца волоконного световода при наличии оптических вихрей..... 108

Физическое материаловедение

- Кочеткова А.С., Ефимов Н.Ю., Соснов Е.А.** Исследование нанокompозитов на основе поливинилхлорида методами атомно-силовой микроскопии..... 114

Биофизика и медицинская физика

- Якунина М.В., Воронцова Д.Н., Минахин Л.С.** Неканонические РНК-полимеразы гигантских бактериофагов типа φKZ..... 120
- Иванов Н.А., Лебедева Ж.С.** Оценка параметров пучка протонов для применения в офтальмологии..... 128

Физика молекул

- Побегалов Г.Е., Арсениев А.Н., Ведякин А.Д., Соколова М.Л., Федорова Я.В., Сабанцев А.В.** Изменение механических свойств молекулы ДНК при взаимодействии с интеркалирующим красителем YOYO-1..... 136

Ядерная физика

- Павлов Ф.Ф.** Методика вычисления упругого рассеяния поляризованного нуклона на поляризованном дейтроне в переменных светового конуса..... 144
- Бердников А.Я., Головин А.В., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г.** Выход электронов от полупертоновых распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, в протон-протонных столкновениях при энергии 200 ГэВ..... 159

Математика

- Козлов В.Н.** Операторы минимизации линейных и негладких функционалов на компактных множествах..... 164
- Блистанова Л.Д., Каляда Л.Г., Нечаев А.И., Стрекопытова М.В., Ужегов Н.Г.** Устойчивость консервативных систем с циклическими координатами..... 171

Механика

- Филиппев Р.А., Коновалов С.В., Громов В.Е.** Влияние контактных воздействий на микротвердость металлов..... 177
- Храбрый А.И., Смирнов Е.М., Зайцев Д.К.** Влияние модели турбулентности на результаты расчета обтекания препятствия потоком воды после обрушения дамбы..... 182

Радиофизика

- Никулин И.Л., Перминов А.В.** Моделирование индукционных процессов в проводящем цилиндре, помещенном в неоднородное переменное магнитное поле..... 188
- Карсеев А.Ю., Давыдов В.В., Дудкин В.И.** Изменение времени спин-решеточной релаксации чистой воды сильным электрическим полем в турбулентном потоке..... 196
- Клехта Н.С., Плешаков И.В., Дудкин В.И.** Импульсное управление откликами ядерной спиновой системы в магнетике с доменными границами..... 200

Contents

Condensed matter physics

Goryainov G.I., Karov D.D., Polykarpov Yu.I., Slutsker A.I., Stepanov A.B. <i>Breaking durability parameters estimation for elastomers</i>	9
Goryainov G.I., Kapralova V.M., Loboda V.V., Sarakuz O.N., Slutsker A.I. <i>Characteristics of 3D cross-linking in new poly(esterurethansiloxane) elastomers</i>	17
Matveev S.A., Denisov S.A., Chalkov V.Yu., Shengurov V.G., Stepikhova M.V. <i>Growing and photoluminescence investigation of silicon-germanium structures doped with erbium on sapphire substrates</i>	24
Andreeva N.V., Pestov Yu.I., Makin V.S., Privalov V.E., Fotiadi A.E. <i>Controlled microcones formation on high refractory metals under multipulsed laser irradiation</i>	29

Simulation of physical processes

Stepanov A.B. <i>The application of neural networks in the wavelet synthesis for the continuous wavelet transformation</i>	38
Privalov V.E., Seteikin A.Yu., Fotiadi A.E. <i>Simulation of laser radiation propagation in inhomogeneous media with complex geometries</i>	45

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Shamina E.N. <i>The quantum and chemical investigation of the benzene solvent influence on the electronic structure of the carbon nanotubes</i>	55
Ipatov A.N. <i>Influence of interparticle interaction on the optical properties of fermionic systems</i>	60

Experimental technique and devices

Bykovsky V.F., Molkov S.I., Stepanov V.A., Khilov V.S., Khilov S.I. <i>High power coherent light radiation source for optical holography and Raman spectroscopy</i>	71
--	----

Physical electronics

Molkov S.I., Savin V.N. <i>Influence of electron emission processes on the charge of dust particles in ordered plasma-dust structures</i>	80
Baksht F.G., Lapshin V.F., Pelli A.V. <i>Radiative energy transfer simulations in axial-symmetric high pressure gas discharge plasma</i>	86
Dubov V.V., Korablev V.V. <i>Slow electrons scattering by fluctuation potential of semiconductor</i>	93
Dubov V.V., Korablev V.V., Sugaipov M.S. <i>Resonance electron scattering by the surface of semiconductor with the natural nonuniformities</i>	101

Physical optics

- Ilyin N.V., Kieseewetter D.V.** *The numerical simulation of the light intensity distribution in proximity to the output end of optical fiber given the optical vortices* 108

Physical materials technology

- Kochetkova A.S., Efimov N.Yu., Sosnov E.A.** *The investigation of PVC-based nanocomposites by atomic force microscopy* 114

Biophysics and medical physics

- Yakunina M.V., Vorontsova D.N., Minakhin L.S.** *Non-canonical RNA-polymerases of ϕ KZ-like phages*.. 120
Ivanov N.A., Lebedeva Zh.S. *Proton beam characteristics estimation for using in ophthalmology*..... 128

Physics of molecules

- Pobegalov G.E., Arseniev A.N., Vedyaykin A.D., Sokolova M.L., Fedorova Ya.V., Sabantsev A.V.** *Changing of DNA molecule mechanical properties during interaction with YOYO-1 intercalating dye* 136

Nuclear physics

- Pavlov F.F.** *The calculation procedure of elastic scattering of a polarized nucleon on a polarized deuteron*..... 144
Berdnikov A.Ya., Golovin A.V., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G. *Yield of electrons from semileptonic decays of charm and bottom hadrons in proton-proton collisions at 200 GeV* 159

Mathematics

- Kozlov V.N.** *Operators for minimization of linear and nonsmooth functionals on compact sets* 164
Blistanova L.D., Kalyada L.G., Nechaev A.I., Strecopitova M.V., Uzhegov N.G. *The stability of conservative systems with cyclic coordinates*..... 171

Mechanics

- Filipiev R.A., Konovalov S.V., Gromov V.E.** *Influence of contact effects on microhardness of metals*..... 177
Khrabry A.I., Smirnov E.M., Zaytsev D.K. *Influence of turbulence model on the results of simulation of dambreak flow about an obstacle* 182

Radiophysics

- Nikulin I.L., Perminov A.V.** *Simulation of the induction processes in the conductive cylinder placed in the non-uniform variable magnetic field* 188
Karseev A.Yu., Davydov V.V., Dudkin V.I. *The variation of the distilled water spin-lattice relaxation time in turbulent stream by the strong electrical field* 196
Klekhta N.S., Pleshakov I.V., Dudkin V.I. *Pulse operation of the nuclear spin system responses in a magnetic material with domain walls* 200

УДК 620.22(075.8): 615.462

*Г.И. Горяйнов, Д.Д. Каров, Ю.И. Поликарпов,
А.И. Слуцкер, А.Б. Степанов*

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАЗРЫВНОЙ ДОЛГОВЕЧНОСТИ ЭЛАСТОМЕРОВ

*G.I. Goryainov¹, D.D. Karov²,
Yu.I. Polykarпов³, A.I. Slutsker⁴, A.B. Stepanov⁵*

¹ Tekhnologii polimernikh materialov, LLC,
5/7 Dvinskaya St., St. Petersburg, 198035, Russia.
^{2, 3, 4, 5} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

BREAKING DURABILITY PARAMETERS ESTIMATION FOR ELASTOMERS

Разрывная долговечность характеризует работоспособность объекта (имплантата), изготовленного из определенного материала. В работе предложен метод определения параметров: энергии диссоциации межатомных связей U_0 и коэффициента γ_0 , характеризующего снижение энергии разрыва связей приложенным напряжением для полиэфируретансилоксанового сополимера на основе измерения диаграмм растяжения до разрыва при вариации скорости растяжения образцов. Оценена работоспособность данного эластомера.

ЭЛАСТОМЕРЫ. РАЗРЫВНАЯ ДОЛГОВЕЧНОСТЬ. ПОЛИЭФИРУРЕТАНСИЛОКСАН. ДИАГРАММА РАСТЯЖЕНИЯ.

Breaking durability characterizes the operability of an object (an implant) made of certain material. Method is suggested to estimate poly(esterurethansiloxane) elastomer parameters such as interatomic bonds dissociation energy U_0 and coefficient γ_0 characterizing bond energy dissociation decrease by stress on basis of tension diagrams under tension rate variation.

ELASTOMERS. BREAKING DURABILITY. POLY(ESTERURETHANSILOXANE). TENSION DIAGRAM.

Долговечность изделий (конструкций) определяется в общем виде как время, в течение которого изделие способно выполнять предназначенные ему функции. Иными словами, долговечность – это время работоспособности изделия.

В тех случаях, когда время работоспособности изделия (конструкции) определяется

временем сохранения свойств материала (из которого изготовлено изделие), обеспечивающих его должное функционирование, появляется термин «долговечность материала» [1].

Для изделий, функционирующих в условиях действия на них механической нагрузки, важной является достаточная устойчивость материала таких изделий к сохранению целостности.

Соответственно, долговечностью материала будет такой период времени, на протяжении которого материал останется неразрушенным (разрывная долговечность).

Разумеется, что такая характеристика не считается константой материала, а зависит от условий, в которых находится изделие и его материал: прежде всего, — от величины и характера механической нагрузки, а также от температуры, от возможных химического и радиационного воздействий и т. п.

В связи с этим становится важным установление такой характеристики материала, которая бы определяла разрывную долговечность: время наступления разрушения в зависимости от условий действия нагрузки.

В настоящей статье предлагается способ определения основных функциональных характеристик — параметров разрывной долговечности для эластомеров, т. е. полимерных материалов, отличающихся большими предразрывными деформациями (до сотен процентов).

Физические основы разрывной долговечности эластомеров

Бытовавшее долгое время представление о критерии прочности материалов как «пределе прочности» — растягивающем напряжении, при котором тело разрывается, а ниже которого сохраняется целым, в настоящее время уступили место новому, «кинетическому пониманию» явления разрушения. Фундаментальными физическими исследованиями было показано, что приложение к твердому телу нагрузки запускает в нем процесс разрушения (накопление разрывов межатомных связей), который и при малом (даже ниже «предела прочности») напряжении приводит нагруженное тело к разрушению, т. е. разрыву и распаду тела на части. При этом период времени до наступления разрыва сильно (экспоненциально) зависит от величины приложенного напряжения. Таким образом, в науку о прочности твердых тел вошло понятие о долговечности — времени между моментами приложения нагрузки и разрыва тела [2 — 4].

Было установлено также, что долговечность сильно зависит не только от приложенного напряжения σ , но и от температуры тела T .

В итоге для всех твердых тел, а для полимеров — особенно, было установлено фундаментальное выражение для долговечности τ [4, 5]:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{U_0 - \gamma\sigma}{kT}\right), \quad (1)$$

где $\tau_0 \approx 10^{-12} - 10^{-13}$ с — период колебаний атомов в твердых телах; U_0 — энергия диссоциации межатомных связей (энергия активации в элементарном акте процесса разрушения); γ — коэффициент, характеризующий снижение исходной энергии диссоциации приложенным напряжением σ . Величина γ имеет размерность объема и включает «активационный объем» в элементарном акте процесса разрушения и коэффициент локальных перенапряжений; k — постоянная Больцмана.

Выражение (1) отражает общий механизм кинетики разрушения материалов: последовательный разрыв напряженных межатомных связей тепловыми флуктуациями энергии. Из выражения видно, что долговечность не является константой материала, а зависит от напряжения σ и температуры T . В приведенной зависимости фигурируют свойства (характеристики) данного тела: U_0 и γ .

Таким образом, чтобы описывать долговечность конкретного материала, требуется определить свойственные ему значения параметров U_0 и γ .

Методика определения параметров разрывной долговечности для эластомеров

Наиболее простой способ нахождения величин U_0 и γ — это прямое измерение долговечности τ при задаваемых значениях σ и T . Но такой способ показывает соответствие зависимости (1) и тем самым ведет к нахождению величин U_0 и γ для случая небольших деформаций образцов за время τ , а главное — в образцах за это время не происходит значительных структурных изменений.

Эластомеры — как полимеры, находящиеся в расстеклованном (высокоэластическом) состоянии, названным условиям измерения долговечности не отвечают. Предразрывные деформации эластомеров, как правило, весьма велики (сотни процентов). При этом в нагруженном эластомере при его сильном растяжении происходят интенсивные ориентационные изменения: формируется фибриллярная структура с ее свойствами, резко

отличными от исходного неориентированного состояния.

Таким образом, если к эластомеру приложена постоянная растягивающая сила, то растягивающее напряжение с течением времени меняется: оно нарастает и к моменту разрыва может значительно превысить начальное напряжение. С течением времени ввиду изменения структуры эластомера изменяется и величина коэффициента γ (при сохранении постоянным параметра U_0 [5]).

Поэтому для получения значений параметров U_0 и γ , характеризующих долговечность эластомеров, требуется применить другой способ изучения разрушения.

Если к эластомеру приложить не постоянное напряжение, а переменное, т. е. нарастающее во времени со скоростью $\dot{\sigma} = d\sigma/dt$, то образец разрушится через некоторое время t_p при некотором напряжении $\sigma_p = \dot{\sigma} \cdot t_p$.

Поскольку для долговечности τ при постоянном значении напряжения σ имеет место фундаментальное выражение (1), а процесс разрушения состоит из накопления элементарных актов разрывов напряженных межатомных связей, то действует закон суммирования порций разорванных связей при каждом значении меняющегося напряжения $\sigma(t)$ и параметра $\gamma(t)$ – принцип Бейли [6]:

$$\int_0^{t_p} \frac{dt}{\tau[\gamma(t)\sigma(t)]} = \int_0^{t_p} \frac{dt}{\tau_0 \exp\left[\frac{U_0 - \gamma(t)\sigma(t)}{kT}\right]} = 1. \quad (3)$$

Чтобы использовать соотношение (3), требуется задать зависимости $\sigma(t)$ и $\gamma(t)$. Подчеркнем, что здесь $\sigma(t)$ – текущее напряжение на образце.

Для выяснения параметров долговечности эластомеров в методе нарастающего со временем напряжения $\sigma(t)$ используем диаграммы растяжения образцов эластомеров.

Вид таких диаграмм показан на рис. 1, где ϵ – относительное растяжение образца (удлинение образца, отнесенное к исходной длине его рабочей части); S_0 – исходная площадь поперечного сечения образца; F – растягивающая сила.

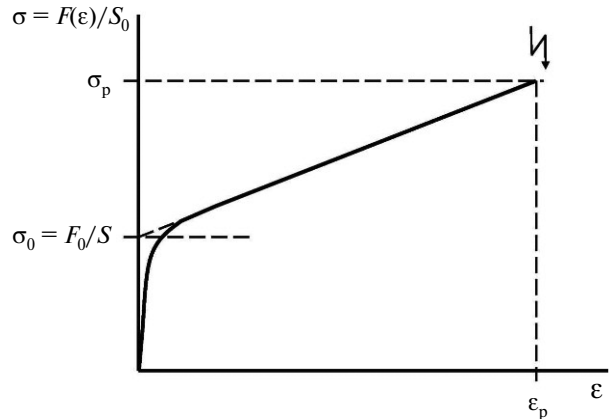


Рис. 1. Диаграмма растяжения эластомера (схема)

Диаграммы измеряются при задаваемой постоянной скорости растяжения $\dot{\epsilon} = d\epsilon/dt$, отсюда

$$\epsilon = \dot{\epsilon} \cdot t, \quad (4)$$

и доводятся до разрыва образца при значениях ϵ_p и σ_p .

Растягивающее напряжение σ отсчитывается на основе площади исходного поперечного сечения образца S_0 . Таким образом, форма зависимости $\sigma(\epsilon)$ на рис. 1 отвечает форме зависимости растягивающей силы $F(\epsilon)$ от времени (в силу соотношения (4)).

На основе графика $\sigma(\epsilon)$ (рис. 1) и его линейной экстраполяции к значению $\epsilon = 0$ указанную зависимость можно представить в форме

$$\sigma(\epsilon) = \sigma_0 + \epsilon(\Delta\sigma/\Delta\epsilon),$$

где σ_0 – результат экстраполяции $\sigma(\epsilon)$ к $\epsilon = 0$.

Тогда зависимость $F(\epsilon)$ для растягивающей силы имеет вид

$$F(\epsilon) = F_0 + \epsilon(\Delta F/\Delta\epsilon).$$

При растяжении образца эластомера площадь его поперечного сечения уменьшается:

$$S(\epsilon) = \frac{S_0}{1 + \epsilon}$$

(известно, что при одноосном растяжении образца полимера его объем изменяется весьма слабо: не более, чем на 1 – 2 % [7], так что при значениях растяжения в сотни процентов объем можно считать неизменным).

Тогда текущее напряжение $\sigma^*(\varepsilon)$ на растягиваемом эластомере имеет следующий вид:

$$\sigma^*(\varepsilon) = \frac{F(\varepsilon)}{S(\varepsilon)} = \frac{F_0}{S_0}(1+\varepsilon) + \frac{\Delta F}{\Delta\varepsilon} \cdot \frac{1}{S_0}(1+\varepsilon)\varepsilon.$$

Для оперирования выражением (3) требуется раскрытие функции произведения $\gamma(t) \cdot \sigma^*(t)$.

Установлено, что при растягивающем ориентирующем растяжении полимеров коэффициент γ уменьшается обратно пропорционально растяжению [8]:

$$\gamma(\varepsilon) = \gamma_0 \frac{1}{1+\varepsilon}.$$

Тогда приходим к следующей зависимости от растяжения:

$$\gamma(\varepsilon) \cdot \sigma^*(\varepsilon) = \gamma_0 \frac{F_0}{S_0} + \gamma_0 \frac{1}{S_0} \left(\frac{\Delta F}{\Delta\varepsilon} \right) \varepsilon.$$

От деформационной зависимости (через соотношение (4)) переходим к зависимости от времени:

$$\gamma(t) \cdot \sigma^*(t) = \gamma_0 \sigma_0 + \gamma_0 \left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon} \right) \cdot \dot{\varepsilon} \cdot t.$$

Отметим, что величина $\dot{\varepsilon}$ задается, а наклон $(\Delta\sigma/\Delta\varepsilon)$ определяется из измеряемых диаграмм растяжения $\sigma(\varepsilon)$.

Теперь, подставляя произведение $\gamma(t) \cdot \sigma^*(t)$ в равенство (3), можно проинтегрировать это выражение, в результате чего приходим к следующей формуле:

$$\frac{kT}{\tau_0 \gamma_0 \left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon} \right) \dot{\varepsilon}} \exp\left(-\frac{U_0 - \gamma_0 \sigma_p}{kT}\right) = 1. \quad (5)$$

При выводе формулы (5) использовалось очевидное соотношение

$$\sigma_0 + \left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon} \right) \cdot \dot{\varepsilon} \cdot t_p = \sigma_p,$$

где σ_p – разрывное напряжение, т. е. «обрыв» диаграммы растяжения (см. рис. 1); при этом сделано допущение

$$\frac{\gamma_0 \left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon} \right) \cdot \dot{\varepsilon} \cdot t_p}{kT} \gg 1,$$

справедливость которого будет подтверждена ниже.

Из выражения (5) получаем соотношение

$$U(\sigma_p) = U_0 - \gamma_0 \sigma_p = 2,3kT \lg\left(\frac{kT}{\gamma_0 \tau_0}\right) - 2,3kT \lg\left[\left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon}\right) \cdot \dot{\varepsilon}\right]. \quad (6)$$

Полученное выражение (6) позволяет произвести оценку параметров U_0 и γ_0 на основе экспериментальных диаграмм растяжения эластомера, по которым определяется также величина σ_p .

Видно, что в правую часть уравнения (6) включена скорость растяжения $\dot{\varepsilon}$ образца эластомера. Поэтому, задавая вариацию этой величины в достаточно широком диапазоне, мы можем находить зависимость энергии активации U от измеряемого разрывного напряжения σ_p , по которой и можно оценивать значения U_0 и γ_0 .

Определение параметров U_0 и γ для полиуретансилоксанового эластомера

Приведем пример использования экспериментальных диаграмм растяжения при вариации его скорости для оценки параметров долговечности U_0 и γ_0 конкретного эластомера.

Произведем количественные оценки с использованием выражения (6). Положим, что температура, при которой измерялись диаграммы растяжения, составляла $T = 293$ К, а фундаментальная величина $\tau_0 = 10^{-13}$ с [9].

Определение конкретных значений параметров U_0 и γ_0 для исследуемых эластомеров является задачей данного рассмотрения.

Видно, что в выражении (6), на котором и строится определение γ_0 из экспериментальных данных, параметр γ_0 присутствует в левой и правой частях уравнения (6).

В левую часть γ_0 входит в прямом, а в правую – в логарифмическом виде. Логарифмическая зависимость относится к слабым, поэтому для определения γ_0 из левой части уравнения (6) в правой можно принять некоторые характерные значения γ_0 , известные из литературных данных по полимерам, согласно которым значения γ лежат в диапазоне $10^{-28} - 10^{-27}$ м³ [4].

Подчеркнем, что использование в правой части значения γ в таком диапазоне весьма слабо влияет на значение γ_0 , определяемое из левой части.

Допустим, что $\gamma_0 = 10^{-27} \text{ м}^3$.

Тогда приходим к следующим значениям сомножителей в выражении (6):

$$2,3kT = 9,3 \cdot 10^{-21} \text{ Дж},$$

$$\lg\left(\frac{kT}{\gamma_0 \tau_0}\right) = 19,6.$$

В итоге выражение (6) переходит к виду

$$U(\sigma_p) = U_0 - \gamma_0 \sigma_p \approx 1,82 \cdot 10^{-19} \left\{ 1 - 0,051 \cdot \lg\left[\left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\varepsilon}\right) \cdot \dot{\varepsilon}\right] \right\}. \quad (7)$$

Обратимся к экспериментальным данным. Были измерены диаграммы растяжения до разрыва на образцах полиуретансилоксанового сополимера (эластомера) при трех скоростях растяжения: 500, 100 и 0,5 мм/мин. Измерения проводились при комнатной температуре.

При каждой скорости испытывалось пять образцов для определения средних значений. Пример диаграмм растяжения для одной из скоростей (100 мм/мин) представлен на рис. 2. Характеристики образцов даны в таблице.

Видно, что полученные нами диаграммы растяжения эластомера имеют такой же вид, как схематичная диаграмма, приведенная на рис. 1.

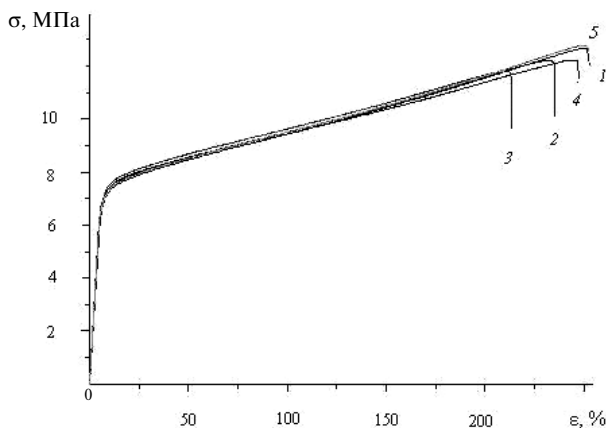


Рис. 2. Диаграммы растяжения пяти образцов эластомера (полиуретансилоксанового сополимера) со скоростью 100 мм/мин

Из экспериментальных данных на рис. 2 находим величины, входящие в уравнение (7): σ_p , $\Delta\sigma/\Delta\varepsilon$, которые требуются в соответствии с (7) для нахождения значения $U(\sigma_p)$:

$$\sigma_p = (12,3 \pm 0,3) \text{ МПа}; \Delta\sigma/\Delta\varepsilon = 2,1 \text{ МПа}.$$

Длина рабочей части образцов составляла 33 мм. Отсюда при абсолютной скорости растяжения 100 мм/мин следовала относительная скорость растяжения: $5 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$. Пользуясь выражением (7) для значения $\sigma_p = 12,3 \text{ МПа}$, мы нашли $U(\sigma_p) = 1,36 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$.

Диаграммы растяжения эластомера при других скоростях растяжения, а именно при 0,5 мм/мин ($\dot{\varepsilon} = 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$) и 500 мм/мин ($\dot{\varepsilon} = 2,5 \cdot 10^{-1} \text{ с}^{-1}$) имели форму, аналогичную приведенной на рис. 2. Полученные из этих диаграмм значения σ_p и $\Delta\sigma/\Delta\varepsilon$ приведены в таблице. Значения $U(\sigma_p)$, найденные с помощью выражения (7), а также значения $\dot{\varepsilon}$ и $\Delta\sigma/\Delta\varepsilon$ представлены в таблице.

Условия и результаты экспериментов по растяжению эластомера

Скорость растяжения		σ_p	$\Delta\sigma/\Delta\varepsilon$	$U(\sigma_p)$
мм/мин	$\dot{\varepsilon}, 10^{-3} \text{ с}^{-1}$	МПа		10^{-19} Дж
0,5	0,25	$10,9 \pm 0,2$	1,8	1,58
100	50	$12,3 \pm 0,3$	2,1	1,36
500	250	$13,2 \pm 0,3$	2,5	1,29

П р и м е ч а н и е. Проведено усреднение по данным диаграмм растяжения (см. пример на рис. 2); $T = 293 \text{ К}$, $\tau_0 = 10^{-13} \text{ с}$, $\gamma_0 = 10^{-27} \text{ м}^3$.

Видно, что разрывное напряжение σ_p (разрывная прочность) закономерно возрастает при увеличении скорости растяжения (и соответственно – скорости роста напряжения σ^*), что отвечает условию накопления элементов разрушения полимеров (накопления разрывов полимерных молекул) при термофлуктуационном механизме элементарных актов процесса разрушения [5]. Полученная связь потенциального барьера U и разрывного напряжения σ_p позволяет найти значения исходного потенциального барьера U_0 и коэффициента γ_0 . Это следует из графика зависимости $U(\sigma_p)$ на рис. 3, построенного по значениям $U(\sigma_p)$ и σ_p , представленных в таблице.

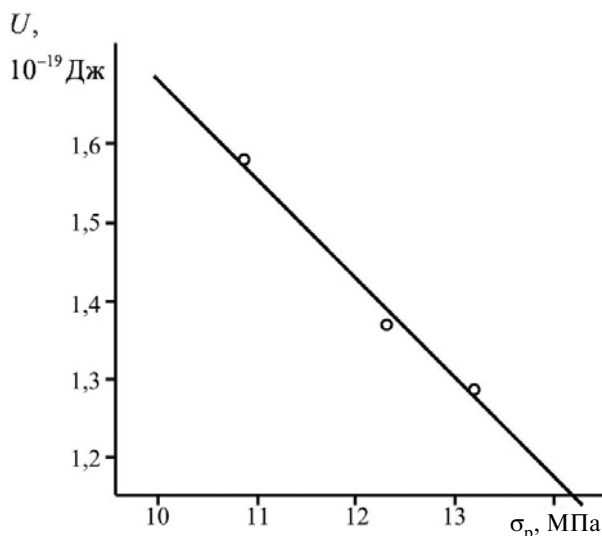


Рис. 3. Зависимость энергии активации разрушения эластомера – полиуретансилоксанового сополимера от разрывного напряжения

Уравнение (7) предсказывает линейную зависимость:

$$U(\sigma_p) = U_0 - \gamma_0 \sigma_p.$$

Как видно из рис. 3, линейная зависимость $U(\sigma_p)$ удовлетворительно выполняется. Это дает возможность оценки величины U_0 (значения $U(\sigma_p)$ при линейной экстраполяции к $\sigma_p = 0$) и γ_0 – по углу наклона $\Delta U / \Delta \sigma_p$:

$$U_0 \approx 3,0 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 1,9 \text{ эВ};$$

$$\gamma_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-26} \text{ м}^3.$$

Полученное значение энергии активации процесса разрушения эластомера $U_0 \approx 2,0$ эВ является характерным для полимеров, так как лежит в области энергий диссоциации межатомных связей в полимерах. Энергия диссоциации скелетных ковалентных связей составляет около 4 эВ, а простых межмолекулярных связей – приблизительно 1 эВ. Полиуретансилоксановый эластомер имеет сеточную структуру (трехмерную сетку из межмолекулярных связей), в условиях которой разрушение происходит при сложной комбинации разрывов как скелетных, так и различных межмолекулярных связей, что приводит к некоторой кооперативности элементарных актов деструкции эластомера.

С сеточным строением эластомера связано, очевидно, сравнительно большие значе-

ния параметра γ_0 . Этот параметр включает в виде произведения активационный объем и коэффициент локальных перенапряжений. Оба этих фактора в сеточной структуре имеют более высокие значения, чем в несшитых полимерах.

Найденное значение $\gamma_0 = 10^{-26} \text{ м}^3$ подтверждает справедливость допущения, сделанного при выводе формулы (5).

Подчеркнем, что полученное значение параметра γ_0 отвечает исходному (до нагружения) состоянию эластомера. Фундаментальное выражение для разрывной долговечности (1) дает значение этой величины при постоянном значении действующего напряжения σ и сохранении постоянным во времени коэффициента γ , т. е. при условиях $\sigma(t) = \text{const}$ и $\gamma(t) = \text{const}$.

Приложение к эластомеру растягивающей силы заданной величины F вызовет разрушение (разрыв) по истечении некоторого времени t в иных условиях. Действительно, сила F обусловит растяжение (и достаточно большое) эластомера и тем самым – изменение (уменьшение) его поперечного сечения, приводящее к изменению (возрастанию) действующего напряжения (т. е. $\sigma(t) \neq \text{const}$). Это же растяжение приведет к ориентационному изменению структуры эластомера (его фибриллизации), что вызовет изменение (уменьшение) коэффициента γ (т. е. $\gamma(t) \neq \text{const}$).

Отметим еще раз, что при изменении структуры эластомера значение параметра U_0 – энергии диссоциации межатомных связей не изменяется, поскольку разрушение эластомера связано с накоплением разрывов одних и тех же связей при различной структуре. Структура влияет на условия разрыва связей, что и отражается в величине параметра γ .

Казалось бы, что при условиях непостоянства во времени σ и γ формула (1) не позволяет описывать долговечность. Однако свойства эластомера таковы, что формула (1) дает значение долговечности при заданном начальном напряжении σ_0 ($\sigma_0 = F_0/S_0$, где S_0 – исходное поперечное сечение) и известном начальном (исходном) значении коэффициента γ_0 . Такая возможность связана с закономерностями изменения σ (при $F = \text{const}$) и γ .

Выше уже отмечалось, что



$$\sigma(t) = \frac{F}{S(t)} = \frac{F}{S_0(1+\varepsilon)^{-1}} = \sigma_0(1+\varepsilon);$$
$$\gamma(t) = \gamma_0(1+\varepsilon)^{-1}.$$

В результате фигурирующее в формуле (1) произведение $\gamma\sigma$ остается постоянным при изменении величин σ и γ :

$$\gamma(t) \cdot \sigma(t) = \gamma_0 \cdot \sigma_0,$$

поэтому формула (1) позволяет найти разрывную долговечность эластомера при задаваемом значении σ_0 и известных значениях U_0 и γ_0 (и при задаваемом значении температуры T).

В заключение следует отметить, что одним из важных направлений использования эластомеров является изготовление из них имплантатов – эндопротезов для различных участков человеческого тела. Для имплантатов требуется оценивать какую-либо из следующих величин:

время τ функционирования имплантата без его разрушения (долговечность) при действии нагрузки σ ;

величину нагрузки σ , при которой имплантат будет функционировать без разрушения в течение требуемого времени τ .

В первом случае расчет следует вести прямо по формуле (1), используя найденные значения: $U_0 \approx 1,9$ эВ, $\gamma_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-26}$ м³. Для имплантата, естественно, принимается температура человеческого тела: $T = 37^\circ\text{C} = 310$ К.

Если задать напряжение $\sigma_0 = 8$ МПа, тогда получается $\tau \approx 2,5 \cdot 10^6$ с ≈ 1 мес.

Во втором случае задается время функционирования имплантата (долговечность): $\tau \approx 10$ лет $\approx 3 \cdot 10^8$ с. Тогда разрешаемая величина нагрузки $\sigma_0 \approx 6,5$ МПа.

Таким образом, определение величины параметров U_0 и γ_0 , характеризующих исходное (до нагружения) состояние эластомера, позволяет прогнозировать разрывную долговечность эластомеров и тем самым – работоспособность изделий, материалом которых являются эластомеры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Государственный контракт от 12 апреля 2011 г. № 16.513.11.3049).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ратнер, С.Б. Физическая механика пластмасс. Как прогнозируют работоспособность? [Текст] / С.Б. Ратнер, В.П. Ярцев – М.: Химия, – 1992. – 320 с.
2. Журков, С.Н. Проблема прочности твердых тел [Текст] / С.Н. Журков // Вестник АН СССР. – 1957. – № 11. – С. 78 – 82.
3. Журков, С.Н. К вопросу о физической основе прочности [Текст] / С.Н. Журков // Физика твердого тела. – 1980. – Т. 22. – № 11. – С. 3343 – 3349.
4. Энциклопедия полимеров [Текст]: В 3 тт. Т. 1. А – К (Долговечность полимеров) / Гл. ред. В.А. Каргин. Ред. кол. М.С. Акутин, Е.В. Вонский, В.Ф. Евстратов [и др.]. – М.: Сов. энциклопедия, 1972. – С. 754.
5. Регель, В.Р. Кинетическая природа прочности твердых тел [Текст] / В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. – М.: Наука, 1974. – 560 с.
6. Bailey, J. Attempt to correlate some strength measurements of glass [Текст] / J. Bailey // Glass Industry. – 1939. – Vol. 20. – № 1. – P. 21 – 25.
7. Энциклопедия полимеров [Текст]: В 3 тт. Т. 2. Л – ПОЛИН (Механические свойства полимеров) / Гл. ред. В.А. Кабанов. Ред. кол. М.С. Акутин, Н.Ф. Бакеев, Е.В. Вонский, [и др.]. – М.: Сов. энциклопедия, 1974. – С. 230.
8. Энциклопедия полимеров [Текст]: В 3 тт. Т. 2. Л – ПОЛИО (Прочность химических волокон) / Гл. ред. В.А. Кабанов. Ред. кол. М.С. Акутин, Е.В. Вонский, В.Ф. Евстратов [и др.]. – М.: Сов. энциклопедия, 1977. – С. 234.
9. Физическая энциклопедия [Текст]: В 5 тт. Т. 2. Добротность – Магнитооптика / Гл. ред. А.М. Прохоров. – М.: Сов. энциклопедия, 1990. – С. 403.

ГОРЯЙНОВ Георгий Иванович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ОАО «Технологии полимерных материалов».

198035, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7
ggcomposite@mail.ru

КАРОВ Дмитрий Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

ПОЛИКАРПОВ Юрий Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

СЛУЦКЕР Александр Ильич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

СТЕПАНОВ Андрей Борисович – инженер кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29



УДК 620.22(075.8): 615.462

*Г.И. Горяйнов, В.М. Капралова,
В.В. Лобода, О.Н. Саракуз, А.И. Слуцкер*

ХАРАКТЕРИСТИКИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ СЕТКИ В НОВЫХ ПОЛИЭФИРУРЕТАНОВО-СИЛОКСАНОВЫХ ЭЛАСТОМЕРАХ

*G.I. Goryainov¹, V.M. Kapralova²,
V.V. Loboda³, O.N. Sarakuz⁴, A.I. Slutsker⁵*

*^{1, 4} Tekhnologii polimernikh materialov, LLC,
5/7 Dvinskaya St., St. Petersburg, 198035, Russia.
^{2, 3, 5} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.*

CHARACTERISTICS OF 3D CROSS-LINKING IN NEW POLY(ESTERURETHANSILOXANE) ELASTOMERS

Определена молекулярная масса, приходящаяся на один узел пространственной сетки, по условиям синтеза и на основании измерения условно-равновесного модуля растяжения, а также равновесный коэффициент набухания, что доказывает образование трехмерной молекулярной сетки в новых полиэфируретаново-силоксановых эластомерах. ЭЛАСТОМЕРЫ. СОПОЛИМЕРЫ. ПОЛИЭФИРУРЕТАНСИЛОКСАН. СЕТКА. НАБУХАНИЕ.

The densi-equilibrium module measurements. Equilibrium swelling coefficients were investigated to confirm the formation of 3D of cross-linking in segmented poly(esterurethansiloxane) elastomers have been obtained from stoichiometry of synthesis and quasi-eD cross-linking in new elastomers. ELASTOMERS. COPOLYMERS. POLY(ESTERURETHANSILOXANE). CROSS-LINKING. SWELLING.

Новые трехмерно сшитые блок-сополимеры эфируретана и силоксана являются весьма перспективными для создания медицинских имплантатов нового поколения, обладающих повышенной прочностью и долговечностью.

Новые пространственно сшитые полиэфируретаново-силоксановые эластомеры обладают всем комплексом свойств, присущих сетчатым полимерам. К наиболее существенным их особенностям относятся способность к большим обратимым деформациям и возможность получения изделий нужной формы непосредственно на этапе отверждения. Кроме того, новые эластомеры, являясь сополимерами эфируретанов и силоксанов, сочетают достоинства, присущие этим полимерам по

отдельности, а именно прочность, стойкость к стиранию, биосовместимость. Разумеется, свойства конкретного эластомера зависят от соотношения блоков эфируретана и силоксана в составе сополимера и их молекулярных масс, а также от количества сшивок. Одно из основных достоинств нового материала – это возможность направленной вариации физико-механических свойств путем комбинирования трех параметров: числа сшивок, молекулярной массы блоков эфируретана и силоксана, а также их соотношения в процессе синтеза (путем регулирования молекулярных масс форполимеров и выбора отверждающего агента). Такое комбинирование и оказывает влияние на плотность образующейся трехмерной сетки [1].

Структурными параметрами, определяющими свойства сшитых полимеров, являются плотность поперечных связей или длина молекулярных цепей между узлами сетки; химический состав и распределение поперечных связей; исходная молекулярная масса полимера; структура полимерной цепи, входящая в сетку. В качестве численных характеристик статистических пространственных полимерных сеток наиболее часто используют следующие величины:

функциональность узлов f_y , определяемую как число цепей, сходящихся в узле;

молекулярная масса M_c отрезка цепи, заключенного между узлами;

число цепей между узлами в единице объема N_c ;

число молей цепей n_c , заключенных между узлами;

показатель сшивания γ_c – число поперечных связей на одну макромолекулу;

число узлов в единице объема v_c ;

степень сшивания β_c – доля сшитых звеньев на одну макромолекулу.

Поскольку сшивки распределены в основном статистически, то все перечисленные показатели являются средними величинами и связаны между собой следующими соотношениями [2]:

$$n_c = \rho / M_c = N_c / N_A;$$

$$v_c = (N_c f_y) / 2 = (N_A \rho f_y) / 2 M_c;$$

$$\gamma_c = M_n / M_c;$$

$$\beta_c = m / M_c;$$

$$\gamma_c = \beta_c n,$$

где ρ – плотность полимера; N_A – число Авогадро; M_n , m – средняя молекулярная масса полимера и молекулярная масса мономерного звена; n – степень полимеризации.

По плотности сшивания сетки можно разделить на редкие и густые. К редким относятся сетки, имеющие значения v_c до 10^{29} м^{-3} , а к густым – сетки с большей плотностью.

В общем случае густота (плотность) сшивок в химически сшитом полимере придает ему большие, по сравнению с несшитым полимером аналогичного строения, механическую прочность и жесткость, ограниченное

набухание в растворителях и другие свойства. Это обусловлено тем, что при сшивании цепей, начиная с некоторого значения M_c , зависящего от гибкости цепи и интенсивности межмолекулярного взаимодействия, происходит ограничение молекулярной подвижности и числа конформаций цепей между узлами сетки. Таким образом, можно управлять свойствами сшитого полимера, варьируя параметры пространственной сетки химических связей.

Для ряда образцов новых пространственно сшитых полиэфируретаново-силоксановых эластомеров молекулярная масса, приходящаяся на один узел сетки, определялась двумя способами: по соотношению реагентов при синтезе и на основании измеренного условно-равновесного модуля прочности. Совпадение значений M_c , полученных различными способами, служит подтверждением образования в синтезированных эластомерах пространственной сетки химических связей.

Образцы эластомеров изготавливались следующим образом. Компоненты композиции – жидкие олигомерные полиоксипропилен-триизоцианаты и жидкие олигомерные уретансодержащие силоксаны с концевыми группами NCO смешивались под вакуумом при комнатной температуре в двугорлой стеклянной колбе с мешалкой (для удаления пузырьков воздуха) в течение 5 – 10 мин. После этого туда же добавлялось расчетное количество отвердителя и катализатора, смесь еще 5 – 10 мин перемешивалась под вакуумом и затем заливалась в металлические шелевые формы (или открытые формы из фторопласта) для получения образцов в виде пластин. Время отверждения материалов при комнатной температуре составляло двое суток. Момент окончания процесса отверждения определяли по кинетическим кривым зависимости твердости по Шору отверждаемого материала от времени (до достижения постоянных значений этого показателя [1]).

Молекулярная масса M_c , приходящаяся на один узел разветвления (или на одну поперечную связь), или, другими словами, молекулярная масса повторяющегося Т-образного звена сшитого полимера, – это молекулярная масса полимера, деленная на число его узлов разветвления. Так, например, если полиуретан получен из 1000 г смеси компонентов при



их стехиометрическом соотношении, причем триола содержится в 1000 г 0,25 моль, а все остальные компоненты бифункциональные, то при условии полного расходования всех реакционноспособных групп $M = 1000/0,25$, то есть 4000. Полученное значение соответствует молекулярной массе повторяющегося Т-образного звена сшитого полимера, синтезированного из трехфункционального мономера.

Расчетное значение M_c изготовленных твердых эластомеров определялось с учетом того, что каждый моль трехфункционального компонента (полиоксипропилентриизоцианата или триола) образует полтора моля отрезков цепей между сшивками.

Экспериментальным методом величину M_c определяли, исходя из значений измеряемого условно-равновесного модуля растяжения образцов, по формуле:

$$E = \frac{G}{S_0} \left(\frac{l_0}{l - l_0} \right),$$

где E , МПа – условно-равновесный модуль; G , МПа – растягивающая образец нагрузка после часа растяжения; S_0 , см² – исходная площадь

поперечного сечения; l, l_0 – конечная и исходная длины рабочего участка образца, соответственно.

Условно-равновесный модуль растяжения определялся на разрывной машине с камерой для термостатирования после 1 ч растяжения на 50 % при 70 °С по методике для ненаполненных резин [3].

На основании кинетической теории высокоэластичности определяемый модуль связан с величиной M_c формулой

$$E = 3\rho RT/M_c;$$

тогда

$$M_c = 3\rho RT/E,$$

где ρ , г/см³ – плотность полимера; T , К – температура; R – универсальная газовая постоянная [4, 5].

Исходные данные для расчетов: $\rho = 1,1$ г/см³; $T = 343$ К; $l_0 = 2,5$ см; $S_0 = 0,12$ см².

Найденные экспериментальные и расчетные значения молекулярной массы, приходящейся на один узел сетки, а также физико-механические свойства серии эластомеров приведены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Характеристики образцов отвержденных полиэфируретаново-силоксановых сополимеров

№ образца	Отвердитель	Соотношение масс ПЭ:ПС	Молекулярная масса, Да		M_c , Да/ узел		G	E
			ПЭ	ПС	расчетная	экспериментальная		
1	Триол	80/20	872	1330	1200	1120	0,050	0,84
2		50/50			1350	1410	0,040	0,66
3	Диамин	80/20			1380	1254	0,045	0,75
4		50/50			1450	1400	0,040	0,67
5	Триол	80/20	2543	2470	1800	1720	0,033	0,55
6		50/50			2050	2180	0,026	0,43
7	Диамин	80/20			2100	2000	0,028	0,47
8		50/50			2300	2230	0,025	0,42
9	Триол	80/20	5730	5650	5400	5500	0,010	0,17
10		50/50			6750	6640	0,084	0,14
11	Диамин	80/20			5000	5190	0,011	0,18
12		50/50			5800	5680	0,096	0,16
21		90/10	1120	1075	1130	1190	0,045	0,79

ПЭ, ПС – полиуретановые и полисилоксановые звенья полимерной цепи;

M_c – удельная молекулярная масса, приходящаяся на один узел разветвления (или одну поперечную связь)

Как следует из данных табл. 1, имеется вполне хорошее соответствие расчетного и экспериментального значений M_c . Это свидетельствует о том, что метод использования олигомерных полисилоксанов и полиоксипропилентриолов примерно одинаковой молекулярной массы, примененный в данной работе для получения эластомеров с регулярным расположением в молекулярной цепи сегментов различной химической природы, а также варьирование массового соотношения этих сегментов и использование разветвленных полиэфируретанов и трехфункциональных отвердителей позволяют получить пространственно сшитые материалы с четко регулируемой плотностью их пространственной сетки. Нужно заметить, что полученные пространственные сетки являются густыми, поскольку v_c для них составляет в среднем $(2 - 8) \cdot 10^{32} \text{ м}^{-3}$.

При этом, как и следовало ожидать, применение в качестве отверждающего агента диамина приводит к получению материалов с большими расчетными и экспериментальными значениями M_c , по сравнению с таковыми для образцов с использованием триола (при равных значениях молекулярной массы полиэфирных и полисилоксановых сегментов и их массового соотношения) для малых (около 1000) и средних (около 2500) значений молекулярной массы полиуретановых и полисилоксановых фрагментов в сополимере. Это связано с тем, что диамин в большей степени выступает в роли удлинителя полимерной цепи и в меньшей — в качестве агента образования биуретовых химических узлов пространственной сетки (при взаимодействии мочевиновых групп с изоцианатными при дозировке диамина в количестве, меньшем эквивалентного). Для больших значений молекулярной массы форполимерных фрагментов (около 5500) этот факт, видимо, перестает играть основную роль, и как расчетные, так и экспериментальные значения M_c для образцов, полученных с использованием триола, немного выше, чем таковые для образцов, полученных с отвердителем диамином.

Наибольший интерес по совокупности физико-механических свойств представляют образцы № 5 и № 7, полученные с использованием полиэфирных и полисилоксановых сегментов средней молярной массы (2543 и 2470, соот-

ветственно) и при их соотношении 80 : 20. При этом образец № 5 (отвердитель триол) может быть использован для изготовления мягких имплантатов, а образец № 7 (отвердитель диамин) — для изготовления более жестких имплантатов.

Сополимеры с соотношением фрагментов 50 : 50 мало перспективны, так как имеют невысокие физико-механические показатели. Это согласуется с данными работы [6], где отмечается, что оптимальным содержанием полисилоксана в термопластичных полиэфируретановых блоксополимерах для медицинских имплантатов является 5 – 20 % масс.

На основании данных о значениях M_c и физико-механических свойствах образцов первой серии для дальнейших исследований были выбраны некоторые из них, и их состав был модифицирован с целью получить удовлетворительные физико-механические характеристики. Были использованы следующие параметры синтеза: высокое (до 90 %) содержание полиэфируретановых звеньев, невысокие молекулярные массы фрагментов, отвердитель — диамин. Для полученной дополнительной серии образцов эластомеров также было получено хорошее соответствие расчетных и экспериментальных значений M_c .

В качестве примера образца с удовлетворительными свойствами из дополнительной серии в табл. 1 приведены данные для образца № 21.

Видно, что, во-первых, хорошее совпадение значений молекулярной массы, приходящейся на один узел пространственной сетки, сохраняется. Во-вторых, образец № 21, отличающийся меньшими значениями молекулярных масс как полиэфируретанового, так и полисилоксанового фрагментов по сравнению с образцом № 11, имеет меньшее значение M_c , т. е. большую плотность сетки.

Важным подтверждением образования пространственной сетки в полимере является его ограниченное набухание в термодинамически хорошем растворителе.

Набухание представляет собой увеличение объема твердого тела вследствие поглощения им из окружающей среды жидкости или пара. Способность к набуханию — характерная особенность тел, образованных высокомолекулярными веществами. Набухание обусловлено



диффузионными процессами, которые обычно сопровождаются сольватацией, т. е. связыванием низкомолекулярного вещества полимером. Различают ограниченное и неограниченное набухание. В первом случае макромолекулы соединены достаточно прочно и набухание прекращается, достигнув определенного предела. Набухшее тело сохраняет форму и четкую границу раздела с жидкой средой. Во втором случае взаимная диффузия растворителя в полимерное тело и полимера в растворяющую среду постепенно приводит к исчезновению границы раздела между набухающим телом и жидкостью. Такое набухание завершается полным растворением полимера. Иногда ограниченное набухание с возрастанием температуры переходит в неограниченное.

На практике набухание характеризуется степенью набухания (или коэффициентом набухания) — отношением объема (массы) набухшего полимера к его исходному объему (массе):

$$Q_V = \frac{V_n - V_0}{V_0} \cdot 100\% \quad Q_m = \frac{m_n - m_0}{m_0} \cdot 100\%$$

где V_n , V_0 — объемы стандартного образца полимера после и до набухания; m_n , m_0 — масса стандартного образца полимера после и до набухания.

Иногда степень набухания удобно характеризовать отношением массы поглощенного растворителя к единице массы полимера. Скорость набухания может оцениваться либо по увеличению массы или объема образца за заданный отрезок времени (первый способ), либо по наклону зависимости степени набухания от времени (второй способ); чем наклон больше, тем выше скорость набухания [6].

Степень набухания увеличивается со временем, постепенно приближаясь к равновесному значению. Поглощение жидкости шитым полимером ограничивается наличием поперечных химических связей между макромолекулами (сшивками) в сетчатых полимерах. В первом случае степень набухания, как правило, невелика даже при относительно большом содержании аморфной фазы (набухание до двух-трехкратного объема), во втором — при малом числе поперечных химических связей. При этом полимер может поглощать очень большое количество жидкости, иногда значительно (в десятки раз)

превосходящее массу самого полимера, но при густой сетке поглощение растворителя невелико. Предел набухания обусловлен при этом изменением энтропии ввиду нарушения равновесной конформации отрезков цепи между узлами сетки при изменении объема полимера во время набухания.

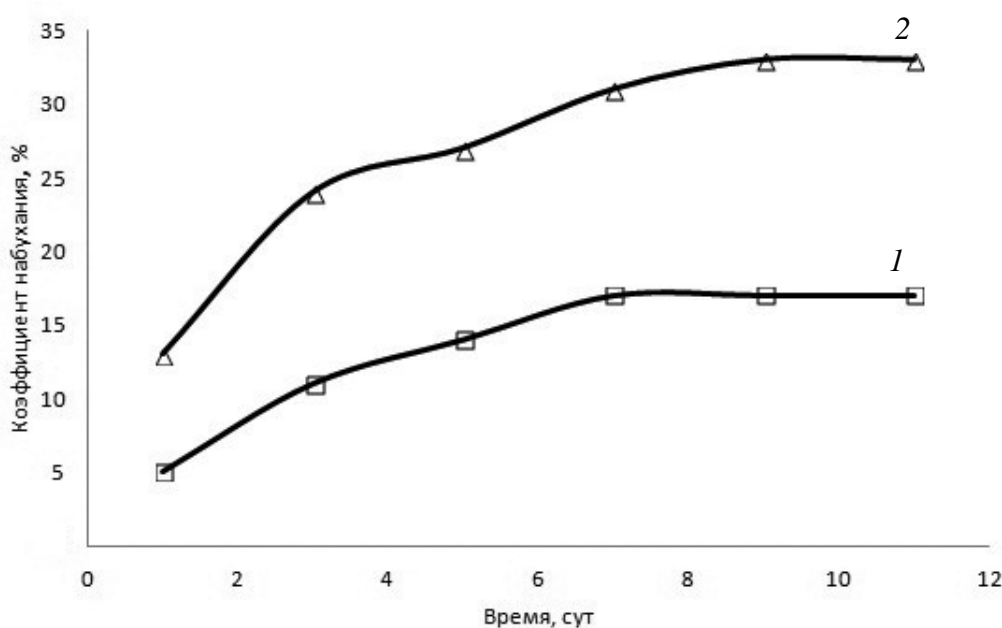
Были проведены эксперименты по набуханию в толуоле синтезированных образцов № 11 из первой партии и № 21 из дополнительной партии эластомеров (при комнатной температуре). Указанные образцы (см. табл. 1) различались молекулярной массой фрагментов полиэфируретана (ПЭ) и полисилоксана (ПС) и их соотношением, а отверждающий агент был использован один и тот же — диамин.

Результаты экспериментов по равновесному набуханию приведены в табл. 2 и на рисунке. Видно, что, во-первых, хорошее совпадение значений молекулярной массы, приходящейся на один узел пространственной сетки, сохраняется. Во-вторых, образец № 21, отличающийся меньшими значениями молекулярных масс как полиэфируретанового, так и полисилоксанового фрагментов, имеет меньшее значение M_c , по сравнению с образцом № 11, т. е. большую густоту сетки. Кроме того, видно, что наибольший рост коэффициента набухания происходит в первые 3 — 5 сут пребывания сополимеров в растворителе, а затем происходит замедление этого роста, и коэффициент набухания выходит на постоянное значение. Ограниченное набухание служит доказательством образования трехмерной сетки в полимере. Кроме того, видно, что окончательное значение коэффициента набухания зависит от молекулярной массы фрагментов сополимера и, следовательно, от значения молекулярной массы, приходящегося на один узел сетки, т. е. от густоты сетки. Образец № 11 с меньшей густотой пространственной сетки, т. е. с большим свободным объемом, набухает сильнее. Также видно, что скорость набухания (наклон начального участка зависимости степени набухания от времени) выше для образца № 21. Это естественно, поскольку плотность сетки шивок в этом образце ниже, что обеспечивает большую конформационную свободу отрезков цепей между сшивками и более свободное проникновение растворителя в межцепное пространство.

Т а б л и ц а 2

Кинетика набухания эластомеров различного состава

№ образца	Соотношение ПЭ : ПС	Молекулярная масса, Да		Равновесный коэффициент набухания, %, за период времени					
		ПЭ	ПС	1 сут	3 сут	5 сут	7 сут	9 сут	11 сут
11	80 /20	5730	5650	13	24	27	31	33	33
21	90/10	1120	1075	5	11	14	17	17	17



Кинетика равновесного набухания эластомеров № 11 (1) и № 21 (2) в толуоле. Температура комнатная

Следует заметить, что форполимеры – как олигоэфируретановые, так и олигосилоксановые – полностью растворимы в толуоле. Именно этот растворитель применялся в опытах по определению молекулярной массы форполимеров (указанной как молекулярная масса фрагментов сополимера) методом эбулиоскопии. Также для сравнения был проведен эксперимент по набуханию дивинилстирольного линейного несшитого блок-сополимера марки ДСТ-30, который полностью растворился в толуоле через 24 ч. Для новых же сополимеров с

пространственной сеткой свойственно ограниченное набухание.

Таким образом, доказано наличие в новых эластомерах пространственной сетки, плотность (или густоту) которой можно регулировать. Это позволяет считать, что поставленная задача получения нового полиэфируретановосилоксанового сополимера с трехмерной молекулярной сеткой успешно выполнена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Государственный контракт от 12 апреля 2011 г. № 16.513.11.3049).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Саракуз, О.Н.** Новые пространственно сшитые сегментированные полиэфируретансилоксановые эластомеры для медицинских имплантатов [Текст] / О.Н. Саракуз, Г.И. Горяйнов, В.М. Капралова, А.И. Слуцкер // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2012. – № 1 (141). – С. 100 – 107.
2. **Тугов, И.И.** Химия и физика полимеров [Текст] / И.И. Тугов, Г.И. Кострыкина. – М.: Химия, 1989. – 432 с.
3. Резина. Метод определения условно-равновесного модуля [Текст]: ГОСТ 11053–75. – Введ. 1973 – 01 – 01. – М.: Изд-во стандартов, 1979. – 7 с.
4. **Регель, В.Р.** Кинетическая природа прочности твердых тел [Текст] / В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. – М.: Наука, 1974. – 560 с.
5. **Хохлов, А.Р.** Статистическая физика макромолекул [Текст] / А.Р. Хохлов, А.Ю. Гросберг. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1989. – 344 с.
6. **Штильман, М.И.** Полимеры медико-биологического назначения [Текст] / М.И. Штильман // Высокомолек. соед. Сер. А. – 2010. – Т. 52. – № 9. – С. 1551 – 1569.
7. **Шур, А.М.** Высокомолекулярные соединения [Текст] / А.М. Шур. – М.: Химия, 1981. – 656 с.

ГОРЯЙНОВ Георгий Иванович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ОАО «Технологии полимерных материалов».

198035, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7
ggcomposite@mail.ru

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kapralova2006@yandex.ru

ЛОБОДА Вера Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vera_loboda@mail.ru

САРАКУЗ Олег Николаевич – кандидат химических наук, старший научный сотрудник ОАО «Технологии полимерных материалов».

198035, г. Санкт-Петербург, Двинская ул., 5/7

СЛУЦКЕР Александр Ильич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

УДК 533.376

*С.А. Матвеев, С.А. Денисов, В.Ю. Чалков,
В.Г. Шенгуров, М.В. Степихова*

**ВЫРАЩИВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
КРЕМНИЕВО-ГЕРМАНИЕВЫХ СТРУКТУР, АКТИВИРОВАННЫХ ЭРБИЕМ,
НА ПОДЛОЖКАХ САПФИРА**

*S.A. Matveev¹, S.A. Denisov², V.Yu. Chalkov³,
V.G. Shengurov⁴, M.V. Stepikhova⁵*

^{1, 2, 3, 4} N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
23/3 Gagarina Pr., Nizhny Novgorod, 603950, Russia.

⁵ Institute for Physics of Microstructures RAS,
7 Akademicheskaya St., Afonino, Kstovsky District, Nizhny Novgorod oblast, 607680, Russia.

**GROWING AND PHOTOLUMINESCENCE INVESTIGATION
OF SILICON-GERMANIUM STRUCTURES DOPED WITH ERBIUM
ON SAPPHIRE SUBSTRATES**

Получены эпитаксиальные слои SiGe:Er на подложках сапфира, обладающие фотолюминесценцией эрбия на длине волны 1,54 мкм. Изучена зависимость структурного совершенства и интенсивности фотолюминесценции слоев от параметров роста.

ПОЛУПРОВОДНИКИ. ОПТОЭЛЕКТРОНИКА. КРЕМНИЕВАЯ ФОТОНИКА. ЭРБИЙ. САПФИР.

Epitaxial SiGe:Er layers on sapphire substrates which have erbium photoluminescence at a wavelength of 1.54 microns have been obtained. The structural quality and the PL intensity dependencies of the layers on the growth parameters were studied.

SEMICONDUCTORS. OPTOELECTRONICS. SILICON PHOTONICS. ERBIUM. SAPPHIRE.

На протяжении всего периода существования микроэлектроники основными направлениями ее развития были миниатюризация элементов микросхем и увеличение быстродействия, повышение степени интеграции, одновременно – удовлетворение требований по радиационной стойкости. Одним из наиболее перспективных путей достижения этих целей является внедрение в технологию оптических и оптоэлектронных устройств. Замена электронных сигналов на оптические для связи между электронными компонентами дает возможность не только резко увеличить скорость

передачи информации, но и обеспечить защиту от электромагнитных наводок.

Поскольку современная оптоэлектроника основана на материалах A_3B_5 , которые несовместимы с кремниевой технологией, то возникает потребность в создании так называемой «кремниевой оптоэлектроники».

В этой сфере уже достигнуты определенные успехи: так, в 2006 г. был создан кремниво-германиевый (SiGe) фотодетектор [1], а в 2008 г. компания Intel продемонстрировала увеличение рабочей частоты до 340 ГГц, используя кремниво-германиевые диодные фотодетекторы [2].



На данный момент наиболее актуальная задача современной кремниевой оптоэлектроники – создание твердотельных светоизлучающих элементов, работающих в диапазоне длин волн 1,5 мкм. Наиболее перспективным в этом направлении является использование эпитаксиальных структур со слоями, легированными эрбием: Si:Er и SiGe:Er [3,4]. Основные усилия при этом направлены на поиск возможности достижения требуемого уровня интенсивности фото- и электролюминесценции. В планарных волноводных светодиодах на основе гетероструктур Si/SiGe:Er/Si(100) слой SiGe:Er (легированный эрбием) выполняет двойную роль: активного слоя и волноводного слоя.

В последнее время возрос интерес и к созданию оптоэлектронных устройств на подложках кремний-на-сапфире (КНС), которые наиболее подходят для создания радиационно-стойких приборов микроэлектроники [5]. В связи с этим открывается возможность интеграции интегральных схем и оптоэлектронных приборов на базе КНС-структур.

Целью данной работы являлось исследование особенностей роста и люминесцентных свойств гетероструктур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/\text{Si}(100)$, выращенных методом сублимации кремния в среде германа на сапфировых подложках.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Трудность поставленной в работе задачи исходит из сложности осаждения напряженного слоя SiGe:Er на уже напряженный слой кремния на сапфире. Возникновение напряжения в слоях обусловлено различием параметров кристаллической решетки этих материалов, а также различием их коэффициентов термического расширения.

Рост слоев кремния на подложках сапфира и последующий рост на них слоев SiGe:Er производился в одном технологическом цикле на сверхвысоковакуумной установке МЛЭ по методике, описанной в работе [6].

В качестве подложек использовались пластины сапфира ориентации $(1\bar{1}02)$ производства фирмы «Монокристалл» (г. Ставрополь). После химической обработки подложку помещали в ростовую камеру установки, которую затем герметизировали и проводили ее откачку до базового давления примерно $5 \cdot 10^{-9}$ торр. Затем

проводили отжиг сапфировой подложки при $T_s = 1400$ °С в течение получаса, а после снижения температуры подложки до заданной (около 565 °С) выращивали буферный слой Si толщиной 100 нм из высокоомного источника кремния. Затем, после снижения температуры подложки до $T_s = 350\text{--}500$ °С, напускали в камеру германий до давления $(2\text{--}4) \cdot 10^{-4}$ торр и растили слой SiGe:Er толщиной 50 – 600 нм. Покровный слой Si толщиной ~100 нм наращивали при $T_s = 500$ °С.

При выращивании слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}$ источником паров кремния и эрбия служила прямоугольная пластина, которую вырезали из слитка кремния, легированного эрбием (концентрация эрбия $\sim 10^{19}$ см⁻³), нагреваемая пропусканием тока до температуры 1330 °С. Слои Si выращивали из источника, вырезанного из кремния марки КЭФ-15, и нагретого до ~ 1375 °С.

Выращенные гетероструктуры исследовали методами электронографии, рентгеновской дифракции (РД), атомно-силовой микроскопии (АСМ), вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), сигнал фотолюминесценции (ФЛ) исследовался методом фурье-спектрологии высокого разрешения.

На рис. 1 приведено распределение концентрации атомов Si, Ge, Er, Al и O по глубине гетероструктуры Si/SiGe:Er/Si/Al₂O₃, измеренное методом ВИМС. Видно, что границы Si/SiGe:Er и Si/сапфир резкие, распределение германия и эрбия в слое SiGe:Er равномерное, а низкотемпературный рост позволяет избежать диффузии атомов алюминия из подложки в слой (рис. 1).

При исследовании методом электронографии структурного совершенства слоев SiGe:Er было установлено, что монокристаллические слои растут на подложках сапфира в интервале температур 360–410 °С. Выше и ниже указанного интервала наблюдается рост слоев со структурой текстурированного поликристалла. Данные РД также подтверждают немонотонную зависимость структурного совершенства слоя от температуры подложки: наименьшее значение ($0,35^\circ$) полуширины пика интенсивности рентгеновского излучения на полувысоте максимума (FWHM) наблюдается в слоях, выращенных при температуре около 380 °С. Немонотонный характер зависимости структурного совершенства слоев SiGe:Er на КНС-подложках от температуры

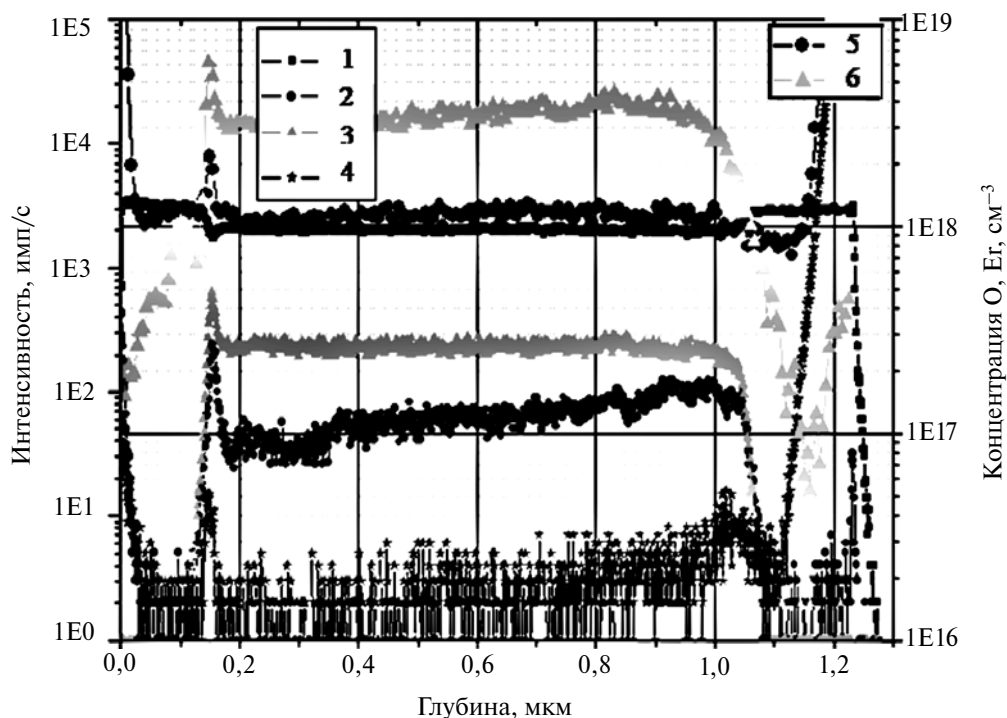


Рис. 1. ВМС-профиль распределения концентраций элементов по глубине слоев гетероструктуры Si/SiGe:Er/Si/Al₂O₃: Si (1), SiN(2), Ge₂ (3), Al (4), O(5), Er (6); T_s = 350 °C. Глубина, равная нулю, соответствует поверхности гетероструктуры, максимальная глубина — поверхности подложки

роста можно объяснить следующим образом: поскольку подвижность адатомов сильно зависит от температуры подложки, то при низких температурах роста адатомам трудно занимать энергетически более выгодное положение на поверхности, поэтому растут слои со структурой поликристалла. С повышением температуры роста подвижность адатомов увеличивается и структура слоев улучшается. Однако при дальнейшем повышении температуры роста, вероятно, происходит смена механизма роста: с послойного на трехмерный, что ухудшает структурное совершенство слоев.

Морфология поверхности слоев SiGe : Er также изменяется в зависимости от температуры роста: с понижением температуры роста шероховатость поверхности уменьшается и достигает величины RMS = 1 нм при T_s = 360 °C (рис. 2). Это объясняется тем, что чем ниже температура роста, тем больше центров зарождения слоя, и тем глаже получается слой.

Изменение содержания германия в слоях Si_{1-x}Ge_x: Er в интервале x = 0,11 – 0,25 (дав-

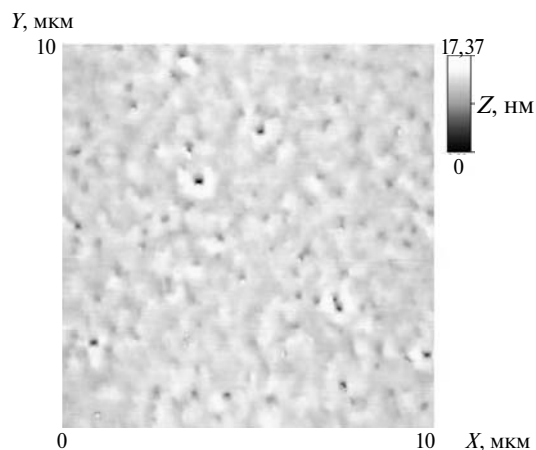


Рис. 2. АСМ-изображения, снятые от поверхности ГС Si/SiGe:Er/Si/Al₂O₃, выращенной при температуре T_s = 360 °C

ление от 2·10⁻⁴ до 4·10⁻⁴ торр) не влияло на их структурное совершенство, но приводило к увеличению шероховатости поверхности слоев. Это объясняется тем, что с увеличением содержания германия в слое твердого раствора увеличиваются параметр решетки слоя и напряженность слоя.

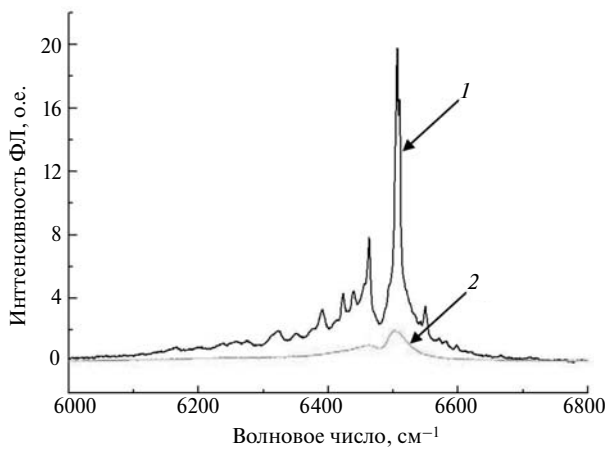


Рис. 3. Спектр фотолюминесценции гетероструктуры Si/SiGe:Er/Si/Al₂O₃, выращенной при разных температурах, °C: 375 (1), 400 (2)

Спектры фотолюминесценции снимались для серии образцов, выращенных при разных температурах подложки. Максимальная интенсивность ФЛ наблюдалась на структуре, выращенной при $T_s = 375$ °C (рис. 3). Увеличение и уменьшение температуры роста от этого значения T_s приводило к значительному спаду максимума интенсивности фотолюминесценции. Скорее всего, это связано со структурой слоя, так как именно при $T_s \sim 375$ °C наблюдалось наилучшее структурное совершенство (ширина кривой качания минимальна, на электронограммах наблюдаются кичуци-линии). О высоком структурном совершенстве слоя свидетельствует, в том числе, и присутствие в спектре ФЛ серий линий, соответствующих оптически активным центрам иона Er³⁺ с выделенной симметрией кристаллического поля. В спектре ФЛ

структуры, выращенной при $T_s = 375$ °C, можно выделить серии линий кислородсодержащего центра иона Er³⁺ (центр Er – O) и центра иона Er³⁺ кубической симметрии (центр Er – C) [7]. В структуре, выращенной при $T_s = 400$ °C, наблюдается уширенный спектр, характерный для редкоземельной примеси, локализованной в аморфных матрицах и преципитатных включениях в кремнии. Таким образом, можно предположить, что именно структурное совершенство слоя оказывает наибольшее влияние на интенсивность люминесцентного отклика структур.

Этот вывод хорошо согласуется с данными ПЭМ (рис. 4). Исследование поперечного сечения структуры Si/SiGe:Er/Si, выращенной на подложке Si(100), показало, что дислокации в активном слое локализуются вблизи границы активный слой/буферный слой, и не прорастают в глубь слоя SiGe:Er. Поэтому при исследовании тонких слоев наблюдается слабый сигнал фотолюминесценции. При толщинах слоев Si_{1-x}Ge_x:Er ≥ 50–200 нм формируется некоторая критическая плотность дислокаций во всем активном слое, начиная от границы с буферным слоем Si. В таких слоях сигнал эрбиевой фотолюминесценции отсутствует. Но при дальнейшем увеличении толщины слоя SiGe:Er дислокации уже не прорастают дальше в активный слой, а остаются локализованными вблизи гетерограницы, и таким образом вышележащий слой растет бездефектным. Сигнал эрбиевой фотолюминесценции становится тем интенсивнее, чем толще слой.

Таким образом, гетероструктуры Si/SiGe:Er/Si/Al₂O₃ (1 102), выращенные комби-

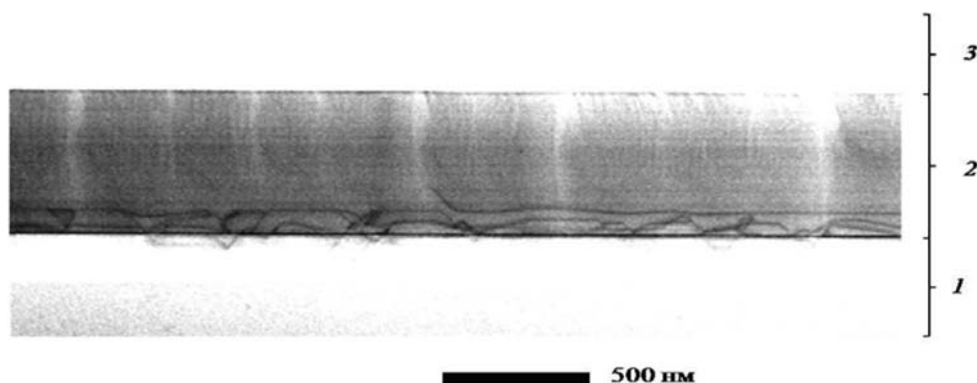


Рис. 4. ПЭМ-изображение структуры Si/SiGe:Er/Si, выращенной при температуре $T_s = 350$ °C, где показаны буферный слой/подложка Si (1), слой SiGe:Er (2), покровный слой Si (3)

нированным методом молекулярно-лучевой эпитаксии с сублимационным источником кремния и газовым источником германия, проявляют интенсивную фотолюминесценцию на длине волны 1,54 мкм, которая определяется преимущественно их структурным совершенством. Наиболее совершенные слои SiGe:Er на КНС-подложках были выращены при температуре $T_s \sim 375^\circ\text{C}$. Шероховатость поверхности слоев при этих условиях роста не превышает значения $\text{RMS} = 1\text{--}2\text{ нм}$.

Авторы выражают благодарность к.ф.-м.н., с.н.с. ИФМ РАН М.Н. Дроздову за проведение исследований гетероструктур методом ВИМС и А.И. Боброву за проведение исследований гетероструктур методом ПЭМ.

Работа выполнена при поддержке проекта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы (грант №14.В37.21.0337) и при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 8735.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Yamada, A.** Photo detection characteristics of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ *p-i-n* diodes integrated with optical waveguides [Text]/ A. Yamada, M. Sakuraba, J. Murota // *Thin Solid Films*. – 2006. – Vol. 508. – P. 399.

2. Достижения Intel в области кремниевой фотоники ускоряют развитие компьютеров [Электронный ресурс]// Пресс-центр Intel. 2008. URL: http://newsroom.intel.com/community/ru_ru/blog/2008/12/07/достижения-intel-в-области-кремниевой-фотоники-ускоряют-развитие-компьютеров-и-систем-связи (дата обращения 24.12.2012).

3. **Reed, G.T.** Silicon photonics: The state of the art [Text]/ G.T. Reed // Wiley – Interscience. – 2008.

4. **Stepikhova, M.V.** Observation of the population inversion of erbium ion states in $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x:\text{Er}/$

Si structures under optical excitation [Text]/ M.V. Stepikhova, L.V. Krasil'nikova, Z.F. Krasil'nik, [et al.]// *Optical Materials*.—2006.—Vol.28. — P. 893 – 896.

5. **Адонин, А.** Новые возможности технологии БИС со структурами «Кремний на сапфире» [Текст]/ А. Адонин // *Электронные компоненты*. – 2000. – № 3. – С. 2 – 6.

6. **Stepikhova, M.V.** Properties of optically active Si:Er and $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers grown by the sublimation MBE method [Text]/ M.V. Stepikhova, B.A. Andreev, V.B. Shmagin, [et al.] // *Thin Solid Films*.—2000. – Vol. 369. – P. 426 – 430.

7. **Przybylinska, H.** Optically active erbium centers in silicon [Text]/ H. Przybylinska, W. Jantsch, Yu. Suprun-Belevitch, [et al.]// *Physical Review B*. – 1996. –Vol. 54. – P. 2532–2547.

МАТВЕЕВ Сергей Александрович — аспирант кафедры физики полупроводников и оптоэлектроники Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, инженер Научно-исследовательского физико-технического института ННГУ.

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23/3
matveevsa.sou@gmail.com

ДЕНИСОВ Сергей Александрович — научный сотрудник лаборатории электроники твердого тела Научно-исследовательского физико-технического института Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23/3
denisov@nifti.unn.ru

ЧАЛКОВ Вадим Юрьевич — научный сотрудник лаборатории электроники твердого тела Научно-исследовательского физико-технического института Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23/3
chalkov@nifti.unn.ru

ШЕНГУРОВ Владимир Геннадьевич — заведующий лабораторией электроники твердого тела Научно-исследовательского физико-технического института Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23/3
denisov@nifti.unn.ru

СТЕПИХОВА Маргарита Владимировна — научный сотрудник Института физики микроструктур Российской академии наук (ИФМ РАН).

607680, Нижегородская обл., Кстовский район, д. Афонино, Академическая ул., 7
mst@ipm.sci-nnov.ru



УДК 536.421

*Н.В. Андреева, Ю.И. Пестов, В.С. Макин,
В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади*

**УПРАВЛЯЕМОЕ ФОРМИРОВАНИЕ МИКРОКОНУСОВ
НА СВЕРХТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛАХ
ПРИ МНОГОИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ОБЛУЧЕНИИ**

*N.V. Andreeva¹, Yu.I. Pestov², V.S. Makin³,
V.E. Privalov⁴, A.E. Fotiadi⁵*

^{1, 4, 5} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

^{2, 3} Scientific Research Institute for Optoelectronic Instrument Engineering, PLC,
P.O. Box 23, Sosnovy Bor, 188540, Russia.

**CONTROLLED MICROCONES FORMATION ON HIGH
REFRACTORY METALS UNDER MULTIPULSED LASER
IRRADIATION**

Рассмотрена проблема управляемого формирования единичных острых микро- и наноструктур под действием серии импульсов лазерного излучения. Экспериментально показана возможность формирования выступов конического типа высотой порядка 50 мкм на поверхностях сверхтупоплавких металлов под действием серии из ста и более субмиллисекундных импульсов.

ЛАЗЕРНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ПЛАВЛЕНИЕ. КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ. СВЕРХТУГОПЛАВКИЙ МЕТАЛЛ. НАНООСТРИЕ. ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ. СМАЧИВАНИЕ.

The problem of controlled formation of single tip-shaped micro- and nanostructures under the action of series of laser pulses have been considered. The possibility of production of tip-shaped bumps with heights up to 50 micrometers on the surface of high refractory metals under the action of the order of 100 submillisecond pulses have been experimentally shown.

LASER IRRADIATION. MELTING. CRYSTALLIZATION. HIGH REFRACTORY METAL. TIP-SHAPED NANOSTRUCTURE. SURFACE TENSION. WETTING.

В настоящее время наблюдается повышение интереса к методам формирования структур острейного типа на поверхности материалов и практическому применению как одиночных микро- и наноострий конического типа, так и их неупорядоченных и упорядоченных ансамблей (растров). Лазерно-индуцированное формирование микро- и наноструктур рельефа на поверхности полупроводников и металлов [1 – 9] обладает преимуществами по сравнению с методами фотолитографии и ионного

травления, так как позволяет получать структуры рельефа быстро и за меньшее число стадий. Однако, поскольку физические процессы (плавление, испарение, плазмообразование, термоэмиссия заряженных частиц, течение расплава, капиллярные явления, химические реакции, конденсация, затвердевание и т. п.), протекающие при импульсном лазерном облучении, в том числе многократном, и после его окончания, многочисленны и взаимосвязаны, до настоящего времени не существует удовлет-

ворительного понимания причин и механизмов формирования лазерно-индуцированных конусообразных выступов рельефа в широком диапазоне параметров лазерного облучения, важного для управления характеристиками структур рельефа.

В то же время можно выделить работы по управляемому формированию микроконусов на поверхности полупроводников и металлов в том смысле, что микроконус формируется в заданном месте после облучения одним импульсом лазера, длительность которого, как правило, превышает несколько наносекунд, а высота микроконуса зависит от энергии импульса облучения [5 – 9]. Управляемое формирование микроконусов на сверхтугоплавких металлах – вольфраме, тантале и молибдене было изучено в работах [8, 9], где был предложен физический механизм их формирования. Было показано, что изменение поверхностного натяжения расплава в окислительной атмосфере приводит к увеличению краевого угла (угла смачивания) расплавом своей твердой фазы относительно величины краевого угла в вакууме. В свою очередь, величина краевого угла определяет высоту микроконуса, формируемого в результате кристаллизации ванны расплава. В частности, в работе [9] экспериментально получены в атмосфере воздуха конусообразные выступы рельефа с радиусом кривизны вершины $r = 200 - 250$ нм – минимальным из известных в настоящее время, в рамках задачи их лазерного управляемого формирования на поверхности вольфрама.

С точки зрения расширения возможностей управления геометрическими параметрами конусообразных выступов рельефа представляет интерес изучение их формирования при многократном импульсном лазерном облучении. Отметим, что затравочные периодические неоднородности рельефа могут возникать в рамках универсальной поляритонной модели формирования периодической модуляции микрорельефа поверхности [10]. В работе [11] предложена модель формирования структур рельефа при многократном наносекундном импульсном облучении, в которой определяющую роль играет течение расплава под действием термокапиллярных сил. При этом максимумы высоты рельефа формируются на периферии распределения интенсивности облучения.

В данной работе в экспериментах на сверхтугоплавких металлах (вольфраме, тантале и молибдене) в атмосфере воздуха показано, что в некотором диапазоне значений плотности энергии импульса облучения с увеличением числа импульсов облучения N наблюдается существенное увеличение высоты вершины микроконуса над уровнем исходной поверхности металла. Предложен физический механизм данного явления, связанный с течением (перераспределением) расплава под действием капиллярных сил и с частичным смачиванием расплавом своей твердой фазы. С использованием атомно-силовой микроскопии изучена тонкая структура рельефа микроконуса, сформированного на поверхности вольфрама в атмосфере воздуха.

Эксперимент и его обсуждение

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. Импульсы излучения импульсно-периодического лазера 1 (ЛТИ-205 на АИГ: Nd^{3+} , $\lambda = 1,06$ мкм), работавшего на частоте 14 Гц, выделялись электромеханическим затвором 3, ослаблялись фильтрами 4 и поворотным зеркалом 5 направлялись на линзу 6 ($F = 35$ мм), которая фокусировала лазерное излучение в пятно диаметром $D = 80 - 170$ мкм на поверхность пластины образца 7 толщиной d по нормали к ней. Параметры излучения лазера контролировались с помощью измерителя энергии и мощности лазерного излучения 11 (ИМО-2Н) и фотодиода 9 (ФД-25К). Использовался режим свободной генерации лазера 1 (длительность импульса излучения $\tau_{1/2} \cong 60$ мкс, $\tau_{1/10} \cong 100$ мкс). Для юстировки оптической схемы использовался непрерывный полупроводниковый лазер 12 ($\lambda = 650$ нм). Образец 7 в виде плоской пластинки был изготовлен из массивного тантала ($d = 1 - 2$ мм), вольфрамовой фольги ($d = 500$ мкм) или молибденовой фольги ($d = 200$ мкм). Поверхность образца из тантала перед облучением подвергалась шлифовке для удаления окисной пленки и промывалась этиловым спиртом. Образец устанавливался на XYZ-координатный стол 8, управляемый от персональной ЭВМ 10. Шаг координатного стола по X и $Y - 2,5$ мкм, шаг по $Z - 0,625$ мкм. Управление затвором 3 для выделения заданного количества импульсов лазера для облучения

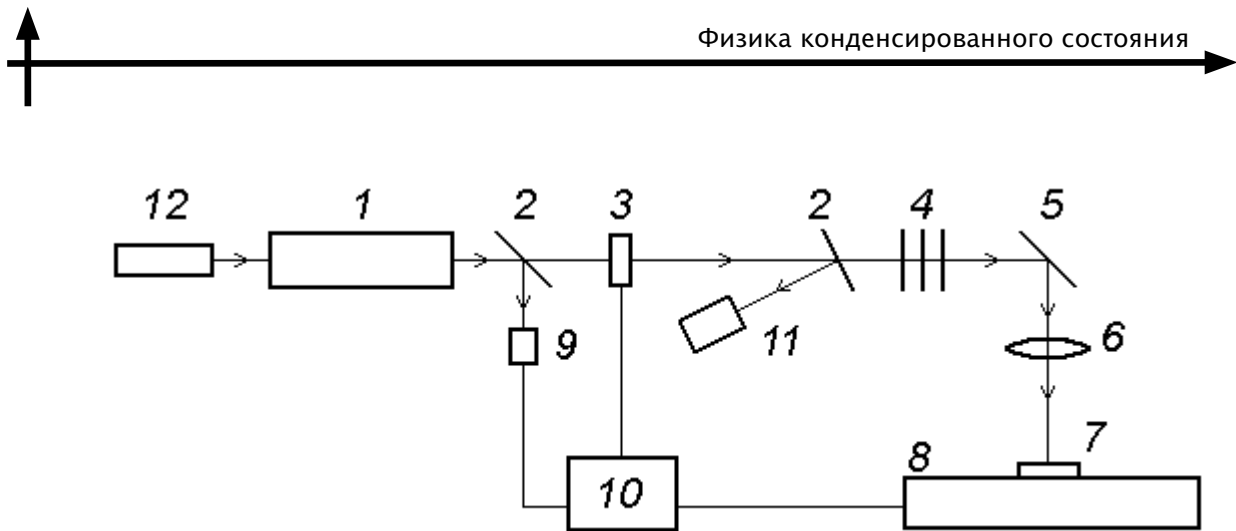


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 – импульсно-периодический лазер; 2 – светоделительные пластинки; 3 – электромеханический затвор; 4 – ослабляющие светофильтры; 5 – поворотное зеркало; 6 – линза; 7 – облучаемый образец; 8 – XYZ-координатный стол; 9 – фотодиод; 10 – персональная ЭВМ; 11 – измеритель мощности и энергии лазерного излучения; 12 – юстировочный полупроводниковый лазер

образца также осуществлялось с помощью ЭВМ 10, которая получала информацию о следовании импульсов лазера с фотоприемника 9. Облучение образца осуществлялось в атмосфере лабораторного воздуха. В эксперименте свежий участок поверхности образца облучался серией из N лазерных импульсов. Затем образец перемещался параллельно своей поверхности и перпендикулярно лучу лазера на расстояние 0,5 мм; после этого он подвергался облучению $(N + 1)$ импульсами лазерного излучения и т. д. Таким образом, в каждой серии импульсов облучался свежий участок поверхности образца. Плотность энергии облучения Q выбиралась выше порога плавления, но ниже порога выноса жидкой фазы давлением паров из сформированной ванны расплава. В процессе облучения визуально наблюдалось яркое белое свечение поверхности образца. В результате в зоне облучения наблюдалось формирование микроконуса, высота которого зависела от количества импульсов лазерного облучения. Высота H вершины микроконуса относительно уровня исходной поверхности образца измерялась как с помощью оптического микроскопа, так и с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ).

На рис. 2,а представлено полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа изображение типичного микроконуса, сформированного на поверхности вольфрама ($N = 1$, $H = 40$ мкм). Видно, что микроконус покрыт толстым слоем рыхлого окисла, который под-

вергся сильному растрескиванию вследствие уменьшения объема (увеличения плотности) при остывании. При наблюдении в оптический микроскоп цвет окисла имел коричневатый оттенок, что свидетельствует о том, что с высокой вероятностью окисел состоял в основном из двуокиси вольфрама WO_2 . Окраски микроконуса в цвета, характерные для других окислов вольфрама, а именно в лимонно-желтый (WO_3) и синий (W_4O_{11}), не наблюдалось.

Отметим, что вольфрам в жидкой фазе при температуре, близкой к точке плавления ($3407^\circ C$), не может покрываться слоем окисла, так как все окислы, образующиеся на поверхности расплава вольфрама, мгновенно испаряются: их температура кипения существенно ниже температуры плавления вольфрама (точка кипения WO_2 – около $1727^\circ C$, а WO_3 – около $1800^\circ C$). Это утверждение справедливо также для тантала и молибдена. Следовательно, вольфрам покрывается слоем окисла уже в твердой фазе при остывании до температур, меньших температуры кипения окислов. При этом значительная часть материала окисной пленки может формироваться за счет конденсации окисла, испарившегося ранее из газовой фазы. Другая часть материала окисной пленки формируется за счет окисления вольфрама в твердой фазе. Отметим также, что при температурах выше $1500^\circ C$ возможно образование нитридов и оксинитридов вольфрама. Радиус кривизны вершины микроконуса на вольфраме ($N = 1$), покрытого окислом, находился в диа-

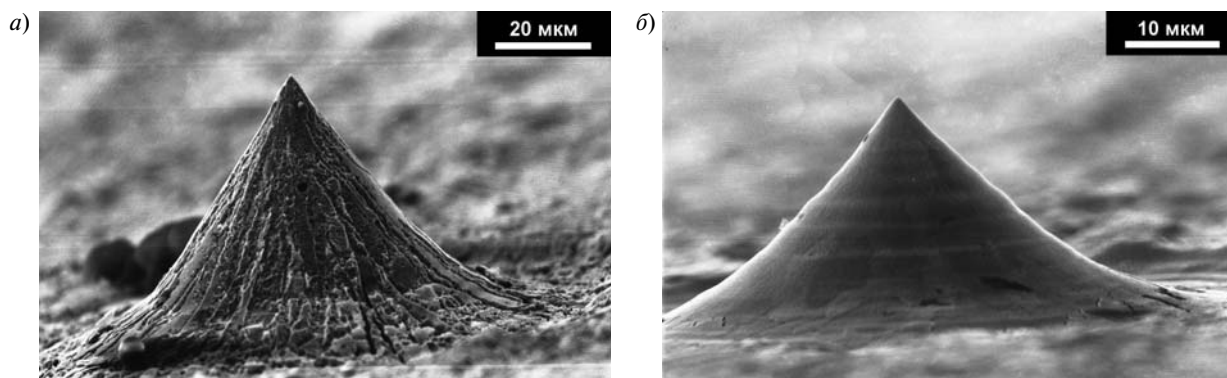


Рис. 2. Полученные с помощью СЭМ изображения типичного микроконуса до (а) и после (б) удаления окисла.

Объект сформирован на поверхности вольфрама в атмосфере воздуха ($N = 1$, $D = 80$ мкм, $Q = 550$ Дж/см²); высота $H = 40$ мкм (а) и $H \approx 20$ мкм (б), углы наблюдения относительно направления нормали к поверхности образца составляли 75° (а) и 85° (б)

пазоне от 150 до 500 нм и, по всей видимости, зависел от случайного процесса растрескивания окисной пленки.

Для определения геометрических характеристик находящегося под слоем окисла металлического вольфрамового микроконуса производилось удаление окисной пленки путем ее растворения в воде, так как окислы вольфрама обладают малой, но конечной растворимостью в этом растворителе (например, растворимость $WO_3 - 0,02$ г/л). Растворение окисной пленки осуществлялось путем погружения того же образца в 500 мл дистиллированной воды при температуре $80^\circ C$ на период времени более 200 ч. Затем образец повторно исследовался на сканирующем электронном микроскопе. На рис. 2,б представлено полученное таким способом изображение типичного вольфрамового микроконуса высотой $H \approx 20$ мкм (после удаления окисла). Характерное измеренное значение радиуса кривизны r вершины вольфрамового микроконуса составляло 230 нм. Отметим, что к вероятным процессам, препятствующим получению меньшего значения r , относятся окисление вольфрама в твердой фазе при температурах ниже точки плавления металла и выше точки кипения окисла ($1727^\circ C$), а также его частичное растворение в жидкофазном окисле WO_2 в интервале температур от точки кипения до точки плавления окисла. Сравнение изображений микроконусов до и после удаления окисла (см. рис. 2,а и б) показывает, что высота металлического микроконуса почти в два раза

меньше его первоначальной высоты. Соответственно, угол при вершине металлического конуса (84°) больше угла при вершине исходного конуса (70°). Простая оценка показывает, что объем диоксида вольфрама (плотность — 11 г/см³) в исходном микроконусе сопоставим с объемом микроконуса из вольфрама (плотность — 19 г/см³).

Таким образом, микроконус, сформированный в атмосфере воздуха под действием импульса лазерного излучения, имеет двухслойную структуру. Наружный слой состоит в основном из относительно легкоплавкой двуокиси вольфрама (WO_2), которую можно удалить путем растворения в воде. Под слоем окисла находится собственно металлический вольфрамовый микроконус. Первоначально в процессе кристаллизации ванны расплава, образованной под действием лазерного облучения, формируется вольфрамовый микроконус. При этом одновременно происходит накопление диоксида вольфрама в газовой фазе (температура кипения — $1727^\circ C$), образующегося за счет взаимодействия сильно разогретого вольфрама с кислородом воздуха; вольфрам разогревается до температуры плавления ($3407^\circ C$) и испаряется с поверхности. Физический механизм формирования металлического микроконуса подробно описан ранее в работе [8] и связан с течением расплава под действием капиллярных сил, а также неполным смачиванием расплавом своей твердой фазы. Физический механизм формирования микроконуса из окисла поверх

металлического микроконуса будет рассмотрен ниже. Отметим, что микроконус, сформированный под действием многоимпульсного облучения, также должен иметь двухслойную структуру.

На рис. 3, 4 представлены экспериментальные зависимости высоты H микроконусов на вольфраме, тантале и молибдене от количества импульсов лазерного облучения N при различной средней плотности энергии в импульсе облучения Q .

Видно, что при относительно низких значениях Q высота микроконуса H возрастает с увеличением N для всех сверхтугоплавких металлов (см. рис. 3 и 4,а), хотя и не всегда монотонно. Так, при относительно низкой плотности энергии излучения $Q \approx 85$ Дж/см² на молибдене наблюдается квазимонотонное увеличение высоты острых выступов (см. рис. 4,а) вплоть до $N=100$. Однако при $Q \approx 170$ Дж/см² наблюдаются только осцилляции величины H с увеличением N (рис. 4,б). Отметим, что при частоте следования импульсов $\nu = 14$ Гц (период следования $T = 70$ мс) расплав успевает полностью закристаллизоваться до прихода следующего импульса. Экспериментально измеренная величина радиуса кривизны вершины сформированного острия была тем меньше, чем меньше был диаметр зоны облучения, и в опытах составляла примерно 0,3 мкм.

Предложим сначала качественное объяснение эффекта увеличения высоты металлического микроконуса при многоимпульсном локальном облучении, полагая, что при воздействии

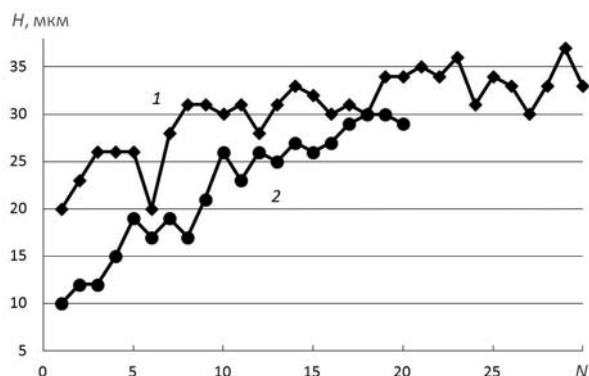


Рис. 3. Экспериментальные зависимости высоты микроконуса на поверхности сверхтугоплавких металлов от количества импульсов лазерного облучения:

- 1 — вольфрам ($D = 140$ мкм, $Q = 250$ Дж/см²);
- 2 — тантал ($D = 110$ мкм, $Q = 200$ Дж/см²)

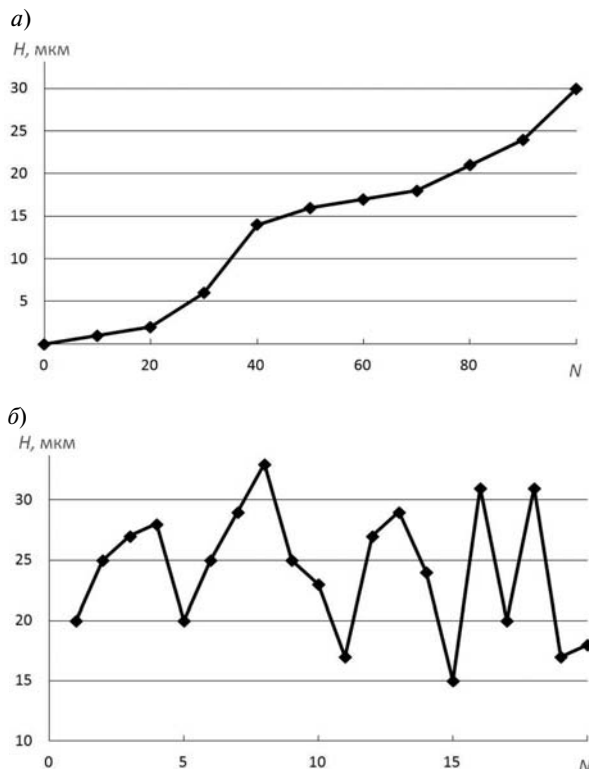


Рис. 4. Экспериментальные зависимости высоты микроконуса на поверхности молибдена от количества лазерных импульсов при различных значениях плотности энергии облучения:

- а — $Q = 85$ Дж/см² ($D = 170$ мкм);
- б — $Q = 170$ Дж/см² ($D = 120$ мкм)

каждого импульса слой окисла с тугоплавкого металла в области облучения полностью удаляется (плавится и испаряется) и происходит плавление металла. Полагаем, что распределение плотности энергии облучения является радиально симметричным, имеет максимум на оси симметрии и ось симметрии совпадает с осью микроконуса. При воздействии импульса излучения на металлический микроконус происходит формирование ванны расплава, так же как и при воздействии на исходно плоскую поверхность материала [8]. Однако, в отличие от случая плоской поверхности, при воздействии на микроконус дно сформированной ванны расплава (в момент начала кристаллизации) в месте его пересечения с осью микроконуса образует выступ твердой фазы. Формирование данного выступа на рельефе дна ванны наиболее очевидно при малой, по сравнению с высотой микроконуса H , глубине проплавления

материала. При кристаллизации работает механизм, связанный с неполным смачиванием расплавом своей твердой фазы [8]. Вследствие неполного смачивания расплав перед началом кристаллизации под действием сил поверхностного натяжения и ввиду симметрии вытесняется с периферии ванны к ее центру, стремясь свернуться в каплю, которая обволакивает выступ твердой фазы. Радиус кривизны капли определяется геометрией выступа, количеством расплава и квазиравновесным углом смачивания θ расплавом своей твердой фазы. Затухание колебаний поверхности расплава может продолжаться уже в процессе кристаллизации (см. работу [9]). Указанный выступ на рельефе дна ванны расплава и служит основой для последующей послойной кристаллизации капли расплава, приводящей к формированию микроконуса с еще большей высотой H . Причиной формирования микроконуса является самоподобие области расплава (капли) на заключительных стадиях кристаллизации [8]. В конечном счете, увеличение высоты H есть следствие перемещения нового, охваченного плавлением, материала от периферии к центру области облучения под действием капиллярных сил. Отметим, что с уменьшением глубины ванны расплава возрастает роль вязкого трения, препятствующего быстрому перемещению расплава под действием сил поверхностного натяжения, и роль термокапиллярных сил.

На поверхности металлического (для определенности, вольфрамового) микроконуса увеличенной высоты H по мере ее остывания ниже температуры кипения диоксида вольфрама происходит накопление окисла вольфрама в жидкой фазе в основном за счет его конденсации из газовой фазы и дальнейшего окисления твердофазного металла. Вследствие неполного смачивания окислом своей твердой фазы его расплав перед началом кристаллизации под действием сил поверхностного натяжения и ввиду симметрии вытесняется с периферии ванны к ее центру и стремится свернуться в каплю, которая обволакивает металлический микроконус. Следует ожидать, что ванна расплава диоксида будет обладать радиальной симметрией относительно оси металлического микроконуса. При остывании ванны (капли) диоксида вольфрама ниже температуры плавления окис-

ла ($\cong 1270^\circ\text{C}$) начинается ее послойная кристаллизация. При этом в процессе кристаллизации происходит формирование микроконуса из окисла вольфрама поверх металлического микроконуса по механизму, описанному выше для металлического микроконуса. В дальнейшем, вследствие уменьшения объема окисла при охлаждении, происходит растрескивание поверхности микроконуса из окисла. За счет увеличения от импульса к импульсу высоты металлического микроконуса и за счет накопления окисла следует также ожидать увеличения высоты результирующего двухслойного микроконуса от импульса к импульсу.

Немонотонный рост высоты H с увеличением числа импульсов N может быть связан с капиллярными колебаниями ванны расплава и с частичным выносом окислов металла и металла из зоны облучения в виде капель или пара, особенно при повышенных значениях Q . Наиболее отчетливо эти эффекты, вероятно, проявляются на молибдене при $Q = 170 \text{ Дж/см}^2$ (см. рис. 4, б).

Отметим, что при увеличении плотности энергии облучения Q энергия капиллярных колебаний ванны (капли) расплава будет возрастать, и при некотором значении Q ее может оказаться достаточно для полного отрыва части расплава в виде капли, полностью отделенной газовой фазой от исходного образца облучаемого материала. Расплав на определенном этапе кристаллизации представляет собой каплю жидкой фазы на пьедестале из твердой фазы [8]. При этом периметр сечения перетяжки, соединяющей твердую и жидкую фазы, уменьшается, что облегчает отрыв капли. Скорость таких капель может быть очень мала, так как энергия капиллярных колебаний тратится в основном на их отрыв. Вылет капли может привести к тому, что вершина микроконуса не сформируется, т. е. сформируется усеченный микроконус. Вылет капель и формирование усеченных микроконусов наблюдалось нами при облучении кремния, германия и других материалов. Данное явление и предложенный механизм генерации капель требует дальнейшего изучения.

Для исследования рельефа поверхности микроконуса, сформированного на поверхности вольфрама в воздухе, использовался атомно-силовой микроскоп Nano-DST (Santa Clara, Калифорния). Результаты исследований пред-



ставлены на рис. 5. Были обнаружены два типа структуры рельефа: зернистая и полоскообразная. Статистический анализ зернистой структуры, выполненный в программе Gwyddion, показал, что средний размер зерна составляет 90 нм, высота – 5 нм (рис. 5,а,б). Предполагается, что зернистая структура формируется при конденсации окисла из паровой фазы. Полоскообразная структура (рис. 5,в,г) с периодом $s \approx 1$ мкм и высотой полосы порядка 10 нм сформировалась, вероятно, в процессе роста кристалла окисла вольфрама из ванны в результате капиллярных колебаний ванны расплава или скачкообразного движения линии контакта трех фаз (жидкой, твердой и газообразной). Следует отметить, что выявленные структуры рельефа микроконусов сформированы на поверхности окисла вольфрама WO_2 .

Обращает на себя внимание примерное совпадение характерного периода полос с длиной волны лазерного излучения ($s \approx \lambda \approx 1$ мкм). Фрагмент полоскообразной структуры, приведенный на рис. 5,в,г, является частью кольцевых структур, которые с хорошей точностью представляют собой concentрическую резонансную решетку, на которой может осуществляться возбуждение поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), распространяющихся в радиальных направлениях: от центра и к центру симметрии структуры [12, 13]. Волна, идущая к центру симметрии, фокусируется и рассеивается в металле, приводя к дополнительному разогреву центральной области расплава. Для областей (зон) воздействия лазерного излучения радиуса $R \leq L$ возможно преобразование ППП плоской границы раздела в волну цилиндрической

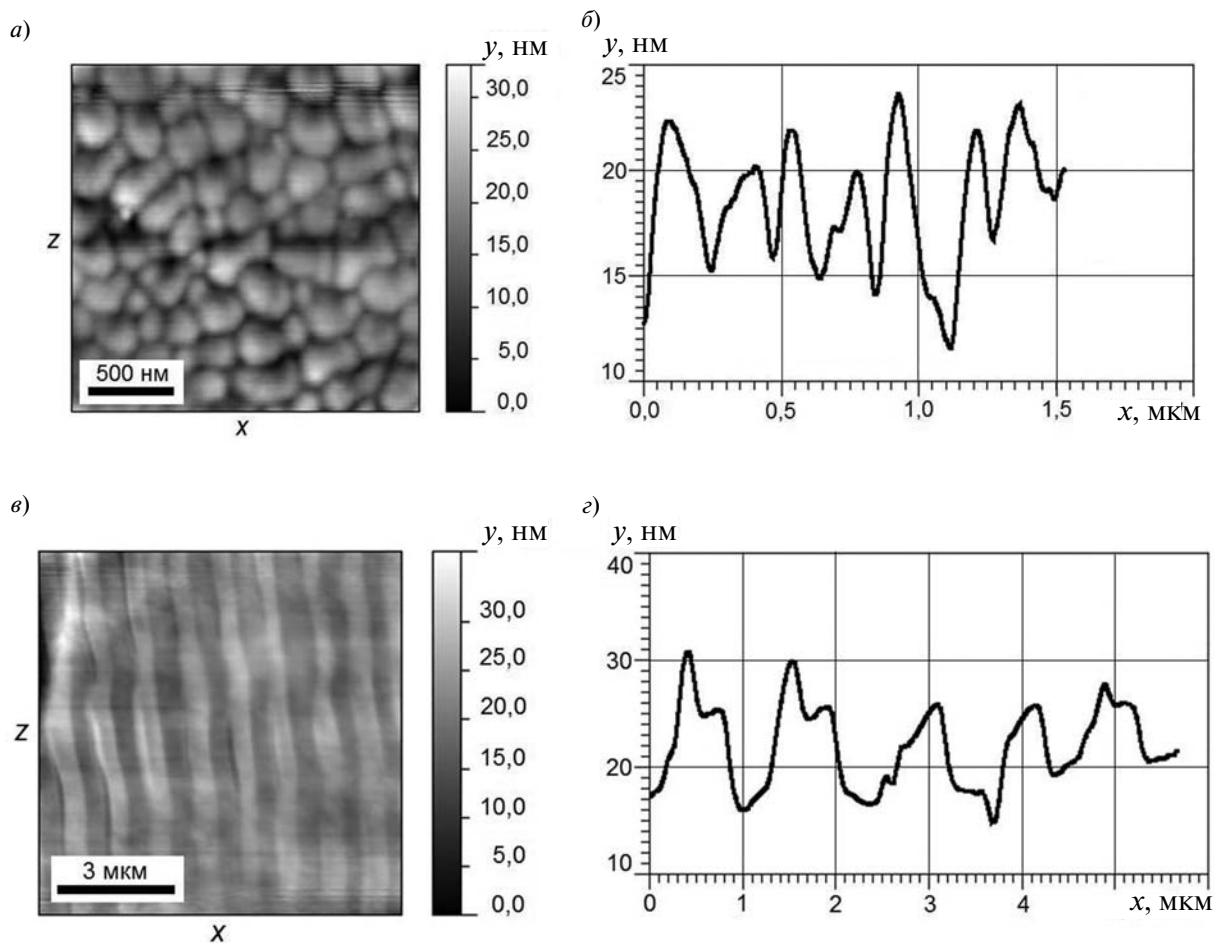


Рис. 5. Структуры рельефа на поверхности микроконуса, сформированного на вольфраме при его облучении импульсом лазера в атмосфере воздуха: а – зернистая структура, б – профиль рельефа поверхности зернистой структуры, в – полоскообразная структура, г – профиль рельефа поверхности полоскообразной структуры

дрического типа, распространяющуюся вдоль поверхности заужающегося конуса с уменьшающейся фазовой скоростью. Здесь L — длина распространения поверхностного плазмон-поляритона плоской слоистой системы металл — окисел — воздух. На вершине острия ее скорость уменьшается до нулевой: происходит преобразование цилиндрической волны в локализованный плазмон (вершины острия) [14]. Таким образом, дополнительная энергия, подводимая к вершине острия, будет запаздывать по отношению к импульсу лазерного излучения, что при ультракороткоимпульсном воздействии излучения будет влиять на характер полевого и термического испарения материала вершины острия.

Более конкретные механизмы формирования обнаруженных наноструктур рельефа требуют дальнейшего изучения.

Экспериментально исследовано формирование конусообразного выступа рельефа на поверхности сверхтугоплавких металлов в окислительной атмосфере воздуха в результате многократного воздействия импульсов лазерного излучения длительностью около 60 мкс в режиме локального плавления поверхности. Обнаружен режим квазимонотонного роста высоты микроконуса с ростом числа импульсов лазерного излучения, наблюдаемый при умеренной средней плотности его энергии. Предложено качественное объяснение эффекта увеличения высоты микроконуса при многоимпульсном облучении, согласно которому происходит плавление материала (ранее не охваченного плавлением) на периферии пятна облучения каждым последующим лазерным импульсом и перемещение этого

расплава к центру пятна под действием сил поверхностного натяжения и вследствие частичного смачивания расплавом своей твердой фазы. При повышении средней плотности энергии облучения наблюдался немонотонный рост или осцилляции высоты микроконуса с увеличением числа импульсов, что может быть связано с капиллярными колебаниями ванны расплава в процессе кристаллизации и с частичным выносом окислов металла и металла из зоны облучения в виде капель или пара.

Экспериментально обнаружена и изучена структура нанорельефа поверхности микроконуса, сформированного на поверхности вольфрама в атмосфере воздуха, в виде двумерных и линейных структур глубиной порядка 10 нм и характерными пространственными масштабами: примерно 200 нм и 1 мкм, соответственно. Высказано предположение, что на «линейных» микроструктурах рельефа может осуществляться дополнительное поглощение энергии лазерного излучения за счет резонансного возбуждения поверхностных плазмон-поляритонов и концентрации их энергии в центральной части области воздействия излучения. Механизмы формирования обнаруженных структур нанорельефа требуют дальнейшего изучения.

Микроконусы из сверхтугоплавких металлов с малым радиусом кривизны поверхности вершины, полученные предложенным методом, перспективны для применения в зондовой микроскопии, полевой эмиссионной электронике, в сенсорах, биомедицине и т. п.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (2009-2013), контракт №16.740.11.0463 от 10.05.2011.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Watanabe, S.** *In situ* observation of self-organizing nanodot formation under nanosecond-pulsed laser irradiation on Si surface [Текст] / S. Watanabe, Y. Yoshida, S. Kayashima, [et al.] // *J. Appl. Phys.* — 2010. — Vol. 108. — P. 103510.
2. **Воронов, В.В.** Формирование конических микроструктур при импульсном лазерном испарении твердых тел [Текст] / В.В. Воронов, С.И. Долгаев, С.В. Лавришев [и др.] // *Квантовая электроника.* — 2000. — Т. 30. — № 8. — С. 710 — 714.
3. **Reinhardt, C.** Replica molding of picosecond laser fabricated Si microstructures [Текст] / C. Reinhardt, S. Passinger, V. Zorba [et al.] // *Appl. Phys. A.* — 2007. — Vol. 87. — P. 673 — 677.
4. **Nayak, B.K.** Spontaneous formation of nanospiked microstructures in germanium by femtosecond laser irradiation [Текст] / B.K. Nayak, M.C. Gupta, K.W. Kolasinski // *Nanotechnology.* — 2007. — Vol 18. — P. 195302.
5. **Wysocki, G.** Single-step fabrication of silicon-cone arrays [Текст] / G. Wysocki, R. Denk, K. Pigimayer, [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* — 2003. — Vol. 82. — P. 692 — 693.
6. **Georgiev, D.G.** Controllable excimer-laser fabrication of conical nano-tips on silicon thin films



[Текст] / D.G. Georgiev, R.J. Baird, I. Avrutsky, [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2004. – Vol. 84. – P. 4881 – 4883.

7. Пат. Российская Федерация МПК⁷ С 30 В 29/62.

Способ формирования выступа типа острия [Текст] / Макин В.С., Пестов Ю.И.; заявители и патентообладатели В.С. Макин, Ю.И. Пестов. – 98113601/28; заявл. 07.07 1998; опубл. 10.10 1999. Бюл. № 28, 1999. – 295 с.: ил.

8. Пестов, Ю.И. Лазерно-индуцированное формирование конусообразных выступов на поверхности сверхтугоплавких металлов [Текст] / Ю.И. Пестов, В.С. Макин // Оптический журнал. – 2008. – Т. 75. – № 6. – С. 34 – 42.

9. Пестов, Ю.И. Формирование микроконусов на поверхности вольфрама и других сверхтугоплавких металлов под действием излучения лазера [Текст] / Ю.И. Пестов, В.С. Макин, В.Е. Привалов // Сб. докл. 21 Международной конференции «Лазеры. Измерения. Информация». – 2011. – Т. 3. – С. 369 – 381.

10. Макин, В.С. Поверхностные плазмон-поляритонные моды и наноструктурирование поверхности полупроводников фемтосекундными лазерными им-

пульсами [Текст] / В.С. Макин, Ю.И. Пестов, Р.С. Макин, А.Я. Воробьев // Оптический журнал. – 2009. – Т. 76. – № 9. – С. 38 – 44.

11. Кириченко, Н.А. Крупномасштабные структуры на поверхности металлов при лазерном воздействии большим числом импульсов [Текст] / Н.А. Кириченко // Квантовая электроника. – 2009. – Т. 39. – № 5. – С. 442 – 448.

12. Макин, В.С. Резонансное взаимодействие радиально поляризованного лазерного излучения с конденсированной средой [Текст] / В.С. Макин, Р.С. Макин // Сб. научн. тр. II Всерос. конф. по фотонике и информационной оптике. Москва, 23 – 25 января 2013 г., НИЯУ МИФИ – С. 97 – 98.

13. Zhan, Q. Evanescent Bessel beam generated via surface plasmon resonance excitation by radially polarized beam [Текст] / Q. Zhan // Optics Lett. – 2006. – Vol. 31. – Iss. 11. – P. 1726 – 1728.

14. Libenson, M.N. Surface polaritons propagation along micropipettes [Текст] / M.N. Libenson, V.S. Gurevich // Ultramicroscopy. – 1995. – Vol. 57. – P. 277 – 281.

АНДРЕЕВА Наталья Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nvandr@gmail.com

ПЕСТОВ Юрий Иванович – старший научный сотрудник ОАО НИИ оптико-электронного приборостроения.

188540, г. Сосновый Бор, Ленинградская область, п/я 23

МАКИН Владимир Сергеевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ОАО НИИ оптико-электронного приборостроения.

188540, г. Сосновый Бор, Ленинградская область, п/я 23

ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vaevpriv@yandex.ru

ФОТИАДИ Александр Эпяминонович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
fotiadi@rphf.spbstu.ru



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 519.6: 612

А.Б. Степанов

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ПРИ СИНТЕЗЕ ВЕЙВЛЕТОВ ДЛЯ НЕПРЕРЫВНОГО ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

A.B. Stepanov

The Bonch-Bruевич St. Petersburg State University of Telecommunications,
22 Bolshevikov Pr., St. Petersburg, 193232, Russia

THE APPLICATION OF NEURAL NETWORKS IN THE WAVELET SYNTHESIS TO THE CONTINUOUS WAVELET TRANSFORMATION

Рассматриваются основные принципы синтеза вейвлетов для непрерывного вейвлет-преобразования с применением искусственных нейронных сетей. Приводятся теоретические и практические обоснования выбора математического аппарата.

ВЕЙВЛЕТ. ИСКУССТВЕННАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ. СИНТЕЗ. ПОЛИНОМ. ЭЛЕКТРОЭНЦЕФАЛОГРАММА.

The article analyses the basic principles of the wavelet synthesis for continuous wavelet-transformation with the use of artificial neural networks. Theoretical and practical substantiations for the choice of a mathematical apparatus are presented.

WAVELET. ARTIFICIAL NEURAL NETWORK. SYNTHESIS. POLYNOMIAL. ELECTROENCEPHALOGRAM.

Работа посвящена синтезу вейвлетов для непрерывного вейвлет-преобразования одномерных сигналов с применением искусственных нейронных сетей.

Вейвлеты – это обобщенное название особых функций сложной формы, с нулевым интегральным значением, локализованных по оси независимой переменной времени, способных к сдвигу по ней и масштабированию [1].

Актуальность работы обусловлена необходимостью дополнения математического аппарата вейвлетов, с тем, чтобы создать воз-

можности для разработки методов, которые бы позволили выявлять так называемые тонкие особенности сигналов – графоэлементы малой протяженности во времени (как правило, менее 1 с). Последние соответствуют тем или иным физическим или физиологическим состояниям источника сигнала.

Подобные методы могут применяться к одномерным сигналам различной природы, к которым относятся и биомедицинские. В качестве примера в работе рассматривается электроэнцефалограмма (ЭЭГ).



Электроэнцефалограмма – это сложный сигнал, зарегистрированный с поверхности головы. Такой сигнал есть результат суммирования и фильтрации элементарных электрических процессов отдельных нейронов головного мозга [2]. Под фильтрацией в данном случае необходимо понимать процесс ослабления ряда частотных составляющих при прохождении через покровы головы. Кроме того, в состав аппаратной части электроэнцефалографа, как правило, входит набор фильтров и устройств, позволяющих ограничить высокочастотную и удалить постоянную составляющие.

В качестве тонких особенностей ЭЭГ могут выступать графоэлементы патологической активности либо артефакты (явления, не связанные с деятельностью мозга).

Рассмотрим фрагмент ЭЭГ (рис. 1), соответствующий кратковременному нарушению сознания человека (абсансу).

Для выявления тонких особенностей сигналов будем использовать математический аппарат вейвлетов. Как известно [3], для этих целей наиболее пригодно непрерывное вейвлет-преобразование (НВП) функции $f(t) \in L^2(R)$:

$$W(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \overline{\psi\left(\frac{t-b}{a}\right)} dt, \quad (1)$$

где $\psi(t)$ – базисная функция вейвлета; a – параметр, который определяет размер вейвлета; b – параметр, который задает сдвиг по оси времени, так что $a, b \in R, a \neq 0$.

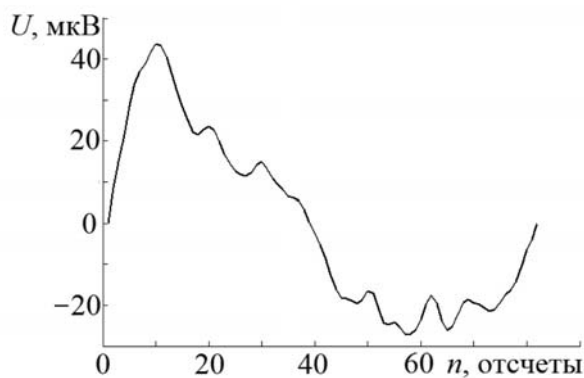


Рис. 1. Фрагмент электроэнцефалограммы, соответствующий абсансу

На практике для дискретного сигнала $f(t_n)$ ($t_n = n\Delta t$, где $n = 0, 1, \dots, N-1$) вместо формулы (1) может быть использовано выражение [3]:

$$W(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{n=0}^{N-1} f(t_n) \overline{\psi\left(\frac{t_n-b}{a}\right)}. \quad (2)$$

В этом случае необходимо говорить об оценке непрерывного вейвлет-преобразования (в литературе термин «оценка» часто опускается). Для краткости далее мы также будем опускать указанный термин, однако все необходимые расчеты будем выполнять на основе выражения (2).

Результаты непрерывного вейвлет-преобразования можно визуализировать в виде вейвлет-спектрограммы – трехмерного графика, отображающего корреляцию между базисной функцией вейвлета, помещенной в точку b , и деталью анализируемого сигнала с центром в той же точке, для различных значений масштаба [3]. Изображение вейвлет-спектрограммы осуществляется в трехмерном пространстве координат: $a, b, W(a,b)$. На приведенных графиках значения по оси $W(a,b)$ откладываются для наглядности насыщенностью тона.

Как следует из выражений (1), (2), важным этапом при проведении процедуры непрерывного вейвлет-преобразования является выбор базисной функции вейвлета.

Проведенные исследования [1] показали, что традиционные вейвлеты не позволяют получить локализованного отображения особенности на вейвлет-спектрограмме. Продемонстрируем это на примере вейвлета Морле (рис. 2).

Сгенерируем тестовый сигнал (рис. 3, а). Используя фрагмент ЭЭГ, соответствующий абсансу, дополним его слева и справа нулями.

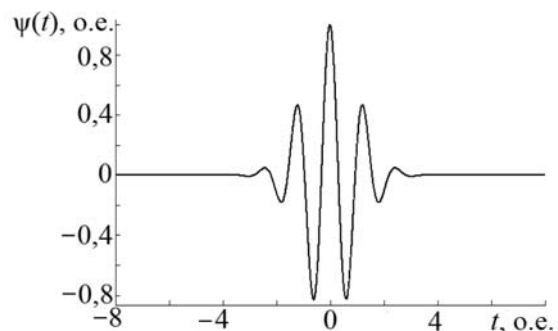


Рис. 2. Вейвлет Морле

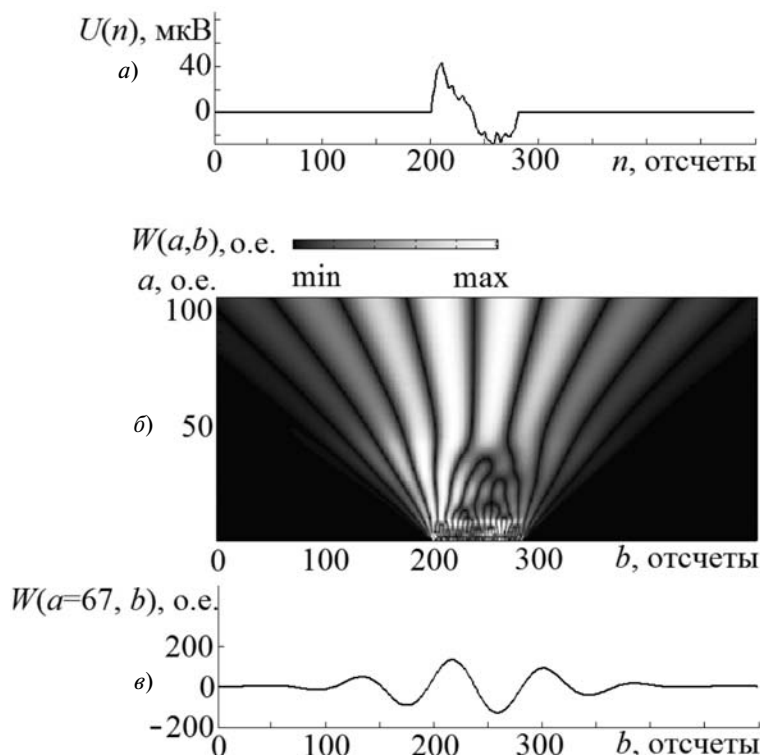


Рис. 3. Вейвлет-спектрограмма (б) и график вейвлет-коэффициентов (в) тестового сигнала, содержащего особенность (а); использован вейвлет Морле

На рис. 3, б, в показаны вейвлет-спектрограмма и график вейвлет-коэффициентов (ГВК) тестового сигнала, полученные с применением вейвлета Морле. При построении ГВК (рис. 3, в) были выбраны вейвлет-коэффициенты, соответствующие основной частоте особенности (3 Гц, что соответствует значению $a = 67$).

Как следует из рис. 3, особенность плохо локализована на вейвлет-спектрограмме и графике вейвлет-коэффициентов. Решить проблему локализации позволяет применение при НВП синтезированных вейвлетов.

Процедура синтеза предполагает выбор фрагмента реального сигнала, называемого образцом, в качестве основы для будущего вейвлета. Далее производится математическое описание образца и его проверка на соответствие достаточному условию допустимости и дополнительным линейным ограничениям. В случае необходимости применяются меры, направленные на модификацию образца. С этой целью может использоваться метод прямого приближения.

Математическое описание образца – важный этап проведения процедуры синтеза. Чем лучше полученный вейвлет приближен к оригинальному сигналу, тем более он пригоден для анализа этого сигнала.

При этом рекомендуется использовать аппроксимацию, так как данная методика позволяет избежать информационной избыточности, что актуально в свете особенностей НВП, требующего больших вычислительных затрат.

Рассмотрим пример синтеза вейвлета с применением аппроксимации методом наименьших квадратов и полинома степени m :

$$F(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m.$$

В качестве достоинства данного метода можно отметить возможность аналитического представления базисной функции вейвлета, в качестве недостатка – ограничения, накладываемые на выбор максимальной степени полинома, что связано с проблемой плохой обусловленности.



На рис. 4,а показан вейвлет, полученный при помощи данного метода. В процессе моделирования был выбран полином степени $m = 20$, позволяющий получить минимальное значение среднего квадратического отклонения (СКО = 1,7725 мкВ). При этом максимальное отклонение (МО) составило 4,8170 мкВ (см. таблицу). Дальнейшее увеличение степени полинома было связано с увеличением среднеквадратического отклонения. Приведенные результаты свидетельствуют о значительных искажениях полученной базисной функции вейвлета. Визуальный анализ подтверждает количественный неудовлетворительный результат оценки.

Таким образом, можно заключить, что данный подход не позволяет получить приемлемых результатов при синтезе вейвлетов для НВП.

Для выхода из такой ситуации нами предлагается использовать для процедуры аппроксимации искусственные нейронные сети.

Как известно [4], нейронная сеть может рассматриваться как универсальный аппроксиматор. При этом возможно применение многослойного персептрона, имеющего один и более скрытых слоев, или нейронных сетей на основе радиальных базисных функций.

На рис. 5,а показан пример многослойного персептрона с одним скрытым слоем. Для фрагмента электроэнцефалограммы длительностью 82 отсчета, соответствующего абсансу, экспериментальным путем была получена однонаправленная нейронная сеть, содержащая 16 нейронов в скрытом слое и один в выходном, позволяющая получить минимальную ошибку аппроксимации. При этом использовались следующие функции активации: в скрытом слое — функция гиперболического тангенса, в выходном — линейная. Важно, что принципиальное условие нелинейности выполняется.

Обучение нейронной сети осуществлялось согласно алгоритму Левенберга — Марквардта, главным достоинством которого является скорость обучения [5].

Синтезированный вейвлет (рис. 4, б) лучше приближен к образцу, чем вейвлет, полученный первым методом. Визуальные оценки

базисной функции подтверждают и количественные. Среднее квадратическое отклонение вейвлета от оригинального сигнала составляет 1,2877 мкВ, что значительно меньше, чем при использовании полинома степени $m = 20$, однако максимальное отклонение составило 5,9422 мкВ.

Основным преимуществом многослойного персептрона с одним скрытым слоем является относительно простая организация. К недостаткам следует отнести сложность управления аппроксимацией, наличие эффекта глобального взаимодействия нейронов, которое может приводить к значительной ошибке аппроксимации. Для решения данной проблемы могут применяться нейронные сети, содержащие два скрытых слоя. Таким образом, процесс аппроксимации образца может быть более управляемым: извлечение локальных признаков происходит в первом слое, а глобальных — во втором [4].

На рис. 5,б показан пример нейронной сети с двумя скрытыми слоями. Число нейронов в каждом слое определялось в ходе эксперимента. При использовании данной сети был получен вейвлет (см. рис. 4,в), который лучше приближен к образцу. Максимальное и среднее квадратическое отклонения вейвлета от оригинального сигнала составляют 2,4583 и 1,0685 мкВ соответственно, что меньше, чем при использовании многослойного персептрона с одним скрытым слоем.

Применение нейронных сетей на основе радиальных базисных функций позволило значительно уменьшить ошибку аппроксимации. На рис. 4,г приведен вейвлет, полученный при использовании нейронной сети на основе РБФ с 82 нейронами в скрытом слое (рис. 5,в). В качестве функции активации применялась функция Гаусса.

Как следует из рисунка, полученный вейвлет достаточно точно приближен к образцу оригинального сигнала. Максимальное и среднее квадратическое отклонения вейвлета от оригинального сигнала составляют $20,783 \cdot 10^{-14}$ и $4,1879 \cdot 10^{-14}$ мкВ соответственно, что меньше, чем при использовании многослойного персептрона с двумя скрытыми слоями.

Результаты всех экспериментов сведены в таблицу.

Использованные методы и количественные оценки синтезированных вейвлетов

Поз. на рис. 4	Использованная конструкция метода синтеза	СКО, мкВ	МО, мкВ
a)	Полином степени $m = 20$	1,7725	4,8170
б)	Многослойный перцептрон с одним скрытым слоем	1,2877	5,9422
в)	То же с двумя скрытыми слоями	1,0685	2,4583
г)	Нейронная сеть на основе радиальных базисных функций	$4,1879 \cdot 10^{-14}$	$20,783 \cdot 10^{-14}$

СКО, МО – среднеквадратическое и максимальное отклонения полученного вейвлета от оригинального сигнала

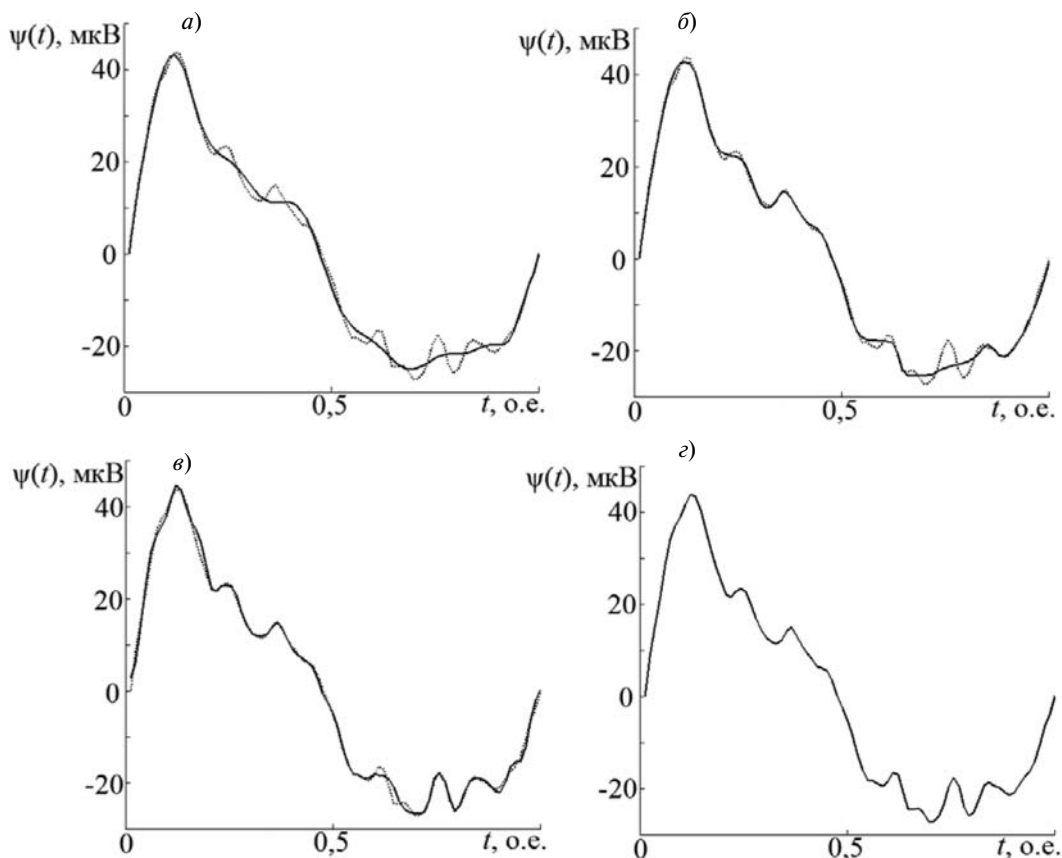


Рис. 4. Синтезированные вейвлеты (сплошные линии) и образец реального сигнала (пунктиры); использованные методы приведены в таблице

СКО позволяет оценить отклонение полученного вейвлета от образца оригинального сигнала, МО – отдельные выбросы.

Результаты, приведенные в таблице, свидетельствуют о том, что при процедуре синтеза могут применяться все рассмотренные методы,

но наилучшее приближение к образцу реального сигнала обеспечивает применение нейронных сетей на основе радиальных базисных функций.

Построим и оценим график вейвлет-спектрограммы для вейвлета, полученного с применением данной нейронной сети (рис. 6,б).

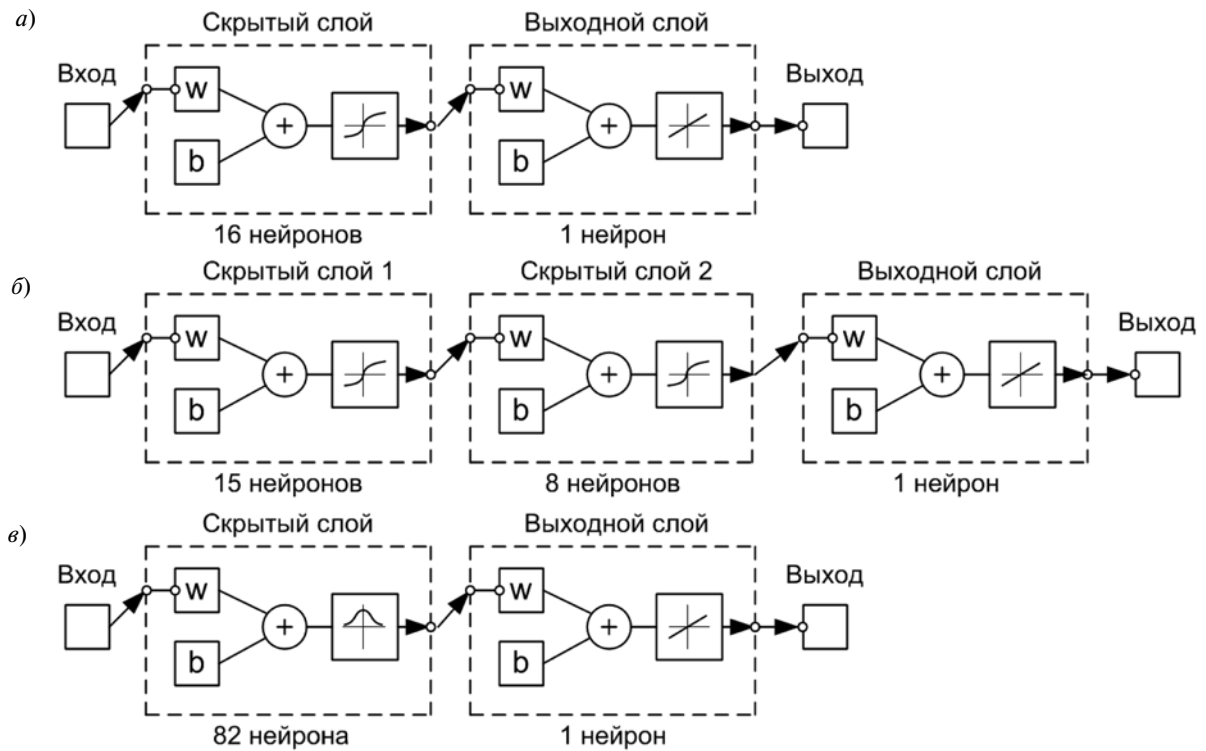


Рис. 5. Используемые нейронные сети: многослойный персептрон с одним (а) и двумя (б) скрытыми слоями, а также сеть на основе радиальных базисных функций (в)

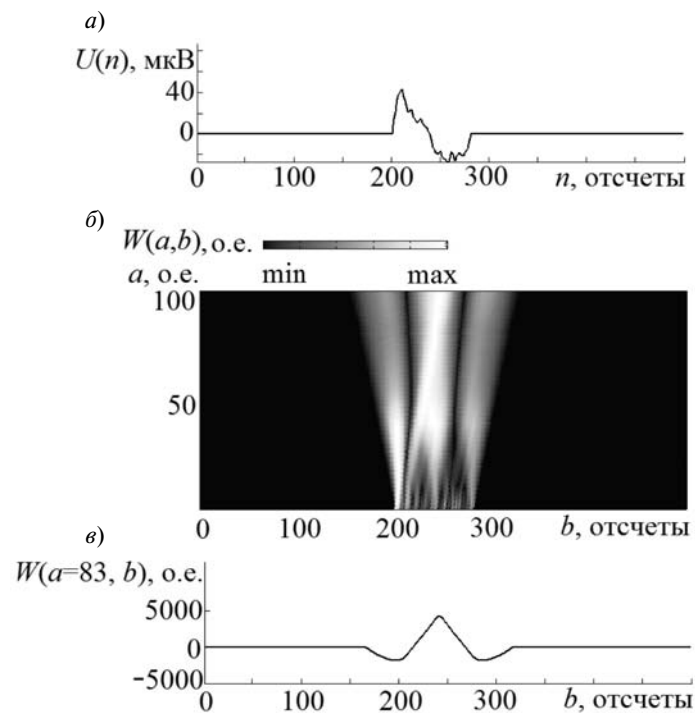


Рис. 6. Вейвлет-спектрограмма (б) и график вейвлет-коэффициентов (в) тестового сигнала (а).
 Использован вейвлет, полученный с применением нейронной сети на основе радиальных базисных функций

Как следует из рисунка, тонкая особенность хорошо локализована на вейвлет-спектрограмме. График вейвлет-коэффициентов для частоты 3 Гц (соответствует значению параметра $a = 83$) также служит удобным инструментом для индикации особенностей подобного рода.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что при процедуре синтеза вейвлетов для непрерывного вейвлет-преобразования на этапе математического описания наиболее предпочтительным является метод аппроксимации нейронной сетью на основе радиальных базисных функций.

Точное приближение вейвлета к образцу оригинального сигнала позволяет получить локализованное отображение на вейвлет-спектрограмме, даже сдвинутой во времени, и масштабированной тонкой особенностью сигнала, что объясняется основными свойствами НВП. Существенные изменения сравнительного положения и амплитуд отдельных пиков особенности приведет к расширению соответствующей области на вейвлет-спектрограмме и графике вейвлет-коэффициентов, однако результаты НВП останутся информативными, что подтверждается многочисленными экспериментами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Арбузов, С.М.** Применение методов вейвлет-анализа в электроэнцефалографии [Текст] / С.М. Арбузов, А.Б. Степанов. — СПб.: Линк, 2009. — 104 с.
2. **Зенков, Л.Р.** Функциональная диагностика нервных болезней: руководство для врачей [Текст] / Л.Р. Зенков, М.А. Ронкин; 4-е изд. — М.: МЕДпресс-информ, 2011. — 488 с.
3. **Витязев, В.В.** Вейвлет-анализ временных рядов [Текст] / В.В. Витязев. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2001. — С. 9 – 27.
4. **Хайкин, С.** Нейронные сети: полный курс [Текст]: Пер. с англ.; 2-е изд. — М.: ИД «Вильямс», 2008. — С. 282 – 287.
5. Нейронные сети. STATISTICA Neural Networks: Методология и технологии современного анализа данных [Текст] / Под редакцией В.П. Боровикова.; 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Горячая линия – Телеком, 2008. — С. 94.

СТЕПАНОВ Андрей Борисович — старший преподаватель кафедры цифровой обработки сигналов Санкт-Петербургского государственного университета телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича.
193232, г. Санкт-Петербург, пр. Большевиков, 22
sabiko@yandex.ru



УДК 57+615.47+621.373.8+535.8

В.Е. Привалов, А.Ю. Сетейкин, А.Э. Фотиади

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ СО СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

V.E. Privalov¹, A.Yu. Seteikin², A.E. Fotiadi³

^{1,3}St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

²Amur State University,
21 Ignatievskoe shosse, Blagoveshchensk, 675097, Amur Oblast, Russia.

SIMULATION OF LASER RADIATION PROPAGATION IN INHOMOGENEOUS MEDIA WITH COMPLEX GEOMETRIES

Построена математическая модель, позволяющая с помощью предложенной модификации метода Монте-Карло анализировать процесс трехмерного распространения лазерного излучения в неоднородных средах со сложной геометрией. Модель позволяет проводить расчет распределения плотности поглощенной энергии лазерного излучения в многослойных материалах сложной геометрии и может использоваться при решении задач анализа визуализации тепловых полей, возникающих в облучаемых тканях.

ЛАЗЕРНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. МНОГОСЛОЙНАЯ БИОЛОГИЧЕСКАЯ СРЕДА. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. НЕОДНОРОДНОСТЬ. МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ.

A mathematical model has been developed. It makes possible to analyze the process of the three-dimensional propagation of laser radiation in inhomogeneous media with a complex geometry using the proposed modification of the Monte Carlo method. The model also allows to carry out the calculation of the distribution of the absorbed laser energy density in multilayered materials with complex geometry and can be used in solving problems of analysis of thermal fields visualization. Those problems arise in irradiated tissues.

LASER RADIATION. MULTIBIOLOGICAL TISSUE. MONTE CARLO METHOD. INHOMOGENEITY. MULTIPLE SCATTERING.

Оптические методы диагностики биологических сред приобретают в настоящее время все более широкое распространение. Основным преимуществом этих методов является их неинвазивность. Использование в качестве зондирующего сигнала низкоинтенсивного лазерного излучения в видимом и ближнем ИК диапазонах не оказывает заметного разрушающего воздействия на изучаемую биологическую среду. В связи с этим вопросы, связанные с использованием математических моделей, адекватно описывающих распространение света в биологических тканях, приобретают дополнительную актуальность. Такие модели должны описывать не только процесс распространения

излучения в условиях многократного рассеяния, но также решать задачу определения потока излучения, выходящего из среды со стороны освещаемой поверхности. Это обусловлено тем, что большинство современных методов диагностики строится на регистрации отраженного и обратнорассеянного света.

Одним из наиболее распространенных теоретических описаний распространения света в мутных средах является теория переноса излучения. Однако аналитическое решение задачи распространения света в многокомпонентных биологических тканях оказывается довольно сложным даже для простых случаев. Если же рассматриваемая ткань неоднородна или име-

ет сложную геометрию, то получить аналитическое решение практически невозможно. В таких случаях требуемые решения получают с помощью численных методов. Однако большинство известных методов не позволяют в полной мере определять изменения оптических и геометрических параметров исследуемой среды, связанные с наличием в ней различных неоднородностей. С точки зрения моделирования «визуализации» подобных объектов наиболее целесообразно использовать статистический метод Монте-Карло (МК). Он основывается на представлении о распространении излучения в среде в виде потока модельных волновых пакетов, каждый из которых образуется совокупностью фотонов определенного «сорта» с заданной энергией и направлением распространения. Это означает, что модельный пакет не проявляет таких свойств, как фаза и поляризация, а представляет собой некую квазичастицу, несущую энергию и способную образовывать при взаимодействии со средой аналогичные, но менее энергичные частицы.

Метод МК не имеет внутренних ограничений, что позволяет решать задачу распространения излучения в среде, учитывая оптические параметры, которые, как предполагается, могут изменяться во времени и пространстве. Он довольно прост в реализации, гибок и дает результаты с нужной точностью за приемлемое время.

В статье построена математическая модель, отражающая процесс трехмерного распространения оптического излучения в живых тканях. При этом предполагается, что объем модельной среды представляет собой совокупность адресуемых (индексиремых) объемных элементов трехмерного пространства. Выбор возможного для модельного пакета события вычисляется при его взаимодействии либо с элементарным объемом, либо с его поверхностью, если последняя есть граница раздела между слоями с различными оптическими характеристиками.

Основная идея метода Монте-Карло

Основная идея данного метода заключается в получении большого числа реализаций случайного процесса, который построен таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи. Моделирование какого-либо

физического процесса данным методом подразумевает моделирование поведения отдельных элементарных частей физической системы.

Применительно к задаче распространения света моделируется движение фотонов в среде. Другими словами, на основе законов, определяющих распространение излучения в ткани, моделируется «случайный ход» фотонов. Траектория их движения выражается через функции плотности вероятности $p(x)$, которые зависят от макроскопических оптических параметров среды [1 – 5]. К таким параметрам относятся коэффициент поглощения, коэффициент рассеяния и параметр анизотропии. Для учета отражения или преломления на границе раздела двух подобластей используется закон Френеля. На рис. 1, а показан пример траектории движения фотона в среде. В основе модели лежит уравнение переноса излучения.

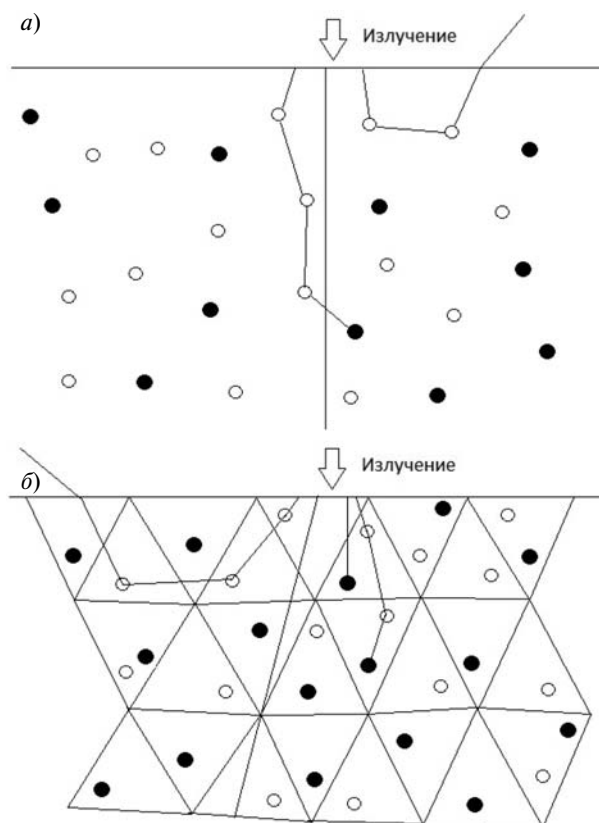


Рис. 1. Пример траектории движения фотона в среде (а) и пример использования сетки для описания геометрии среды (б).

Затушеванные и незатушеванные кружки – соответственно поглощающие и рассеивающие центры



Рассматривается многослойная биологическая среда с включенными неоднородностями произвольной формы, на которую направлен поток фотонов. Каждому пакету фотонов присваивается статистический вес, первоначально равный единице. Этот статистический вес показывает, какая часть фотонов содержится в пакете в конкретный момент времени. При каждом взаимодействии пакета со средой часть фотонов из пакета будет поглощаться, соответственно будет уменьшаться статистический вес пакета.

Моделируемая среда задается следующими параметрами: толщиной, коэффициентами рассеяния и поглощения, средним косинусом угла рассеяния, относительным показателем преломления. Среда представляется совокупностью случайных центров, рассеивающих и поглощающих фотоны.

Падающий световой пучок (источник излучения) состоит из одного миллиона пакетов фотонов, входящих в среду вдоль оси z перпендикулярно ее поверхности (x, y) в точке с координатами $(0, 0, 0)$. Число фотонов в пакете определяет энергию падающего пучка. Все расчеты производятся в трехмерной декартовой системе координат.

Считается, что частицы среды, на которых происходит рассеяние и поглощение, сферически симметричны, поэтому можно применять усредненную индикатрису рассеяния. Использование данной модели и сравнение численных расчетов с экспериментальными результатами показали, что данное приближение удовлетворительно описывает свойства большинства биологических тканей. Для учета преломления на границе раздела двух подобластей используется закон Френеля.

Схема моделируемого эксперимента

При описании распространения лазерного излучения в биотканях необходимо учитывать реальную геометрию среды, которая может быть достаточно сложной, а также размеры и угловое распределение падающего излучения.

Учет угловой расходимости пучка осуществлялся следующим образом. По известным из литературы оптическим параметрам каждого слоя, в частности коэффициентов поглощения, рассеяния и параметра анизотропии (среднего косинуса угла рассеяния), рассчитывалось рас-

пределение плотности поглощенной энергии внутри среды. Принималось, что на каждом шаге моделирования фотоны рассеиваются на малые углы, поэтому френелевские отражения на границах биоткань – биоткань не учитывались.

Наиболее важная задача – это задание геометрии среды и ее оптических параметров. Биологическая среда неоднородна, ее оптические параметры представляют собой сложные функции от пространственных координат. В данной работе геометрия среды описывается в виде конечно-элементной сетки (рис. 1, б). Применение метода МК для моделирования распространения излучения в такой среде имеет ряд особенностей. Чем проще форма элементов разбиения, тем меньше вычислительных ресурсов понадобится для расчетов. Для определения качества построенной сетки требуется выработать некоторый критерий. Сетка, с помощью которой производится аппроксимация расчетной области разбиением на элементарные ячейки, является одним из основных факторов, определяющих точность и сходимость численного решения задачи.

Согласно теории [6], свойства сетки зависят в основном от формы элементов. При такой оценке отвечают требованиям сетки, где каждый элемент является правильным тетраэдром или близким к нему. Следовательно, сетка, содержащая вырожденные или близкие к вырождению элементы, будет считаться неудачной. При таком подходе исходная геометрия расчетной области может быть произвольной. Практический интерес может представлять случай, когда среда, в данном случае кожа, содержит внутреннюю замкнутую неоднородность. Поэтому для оценки точности и адекватности разработанного алгоритма в качестве тестовых были выбраны задачи распространения излучения с длинами волн 400 нм (первая задача) и 800 нм (вторая). Кожа имеет неоднородную структуру, и ее оптические параметры представляют собой сложные функции от пространственных координат. В качестве расчетной области была выбрана среда, состоящая из нескольких слоев (рогового слоя, эпидермиса и дермы) с замкнутой неоднородностью сложной формы. Замкнутая неоднородность представлена в виде сложной фигуры, ограниченной двумя эллип-

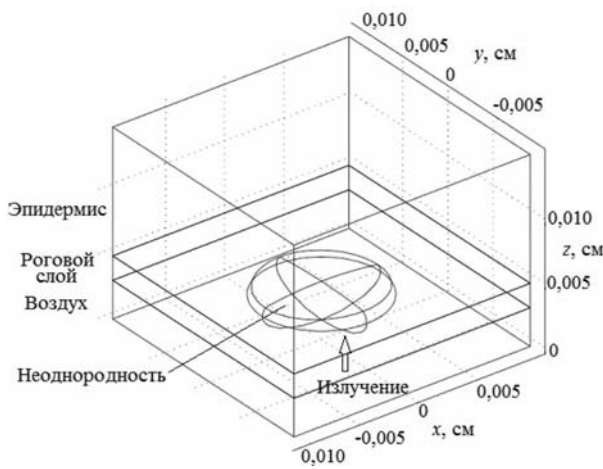


Рис. 2. Геометрия расчетной среды

соидальными поверхностями; дополнительно введен слой, моделирующий воздух.

На рис. 2 приведена геометрия расчетной среды – кожи, которая подвергнута лазерному облучению. Лазерный пучок смещен относительно начала координат вдоль оси x на $0,001$ см и направлен перпендикулярно вверх; его радиус равен $0,001$ см.

Реализованный в программе алгоритм и применимость метода

Метод Монте-Карло основывается на определении переменных, выбранных случайным образом из известных распределений вероятности. Будем рассматривать некоторую случайную переменную x , которая определяет вероятностное уравнение Монте-Карло. Пусть имеется функция плотности вероятности $p(x)$, которая определяет распределение x в интервале $a \leq x \leq b$;

$$\int_a^b p(x)dx = 1. \tag{1}$$

Вероятность того, что x попадет в интервал $[a, x_1]$ ($a < x < x_1$), задается функцией распределения $F_x(x)$, которая определена как

$$F_x(x_1) = \int_a^{x_1} p(x)dx. \tag{2}$$

Используя генератор случайных чисел компьютера, создадим случайную переменную ζ , которая в свою очередь определит уникальное значение x , совместимое с функцией плотности вероятности $p(x)$. Функция плотности вероят-

ности для ζ постоянна: $p(\zeta) = 1$ в интервале $[0, 1]$. Соответствующее распределение вероятности $F_\zeta(\zeta_1)$ определено как

$$F_\zeta(\zeta_1) = \int_0^{\zeta_1} p(\zeta)d\zeta = \zeta_1 \tag{3}$$

для $0 \leq \zeta_1 \leq 1$.

Приравнявая $F_x(x_1)$ к $F_\zeta(\zeta_1)$ и заменяя ζ_1 и x_1 непрерывными переменными ζ и x , получаем:

$$F_\zeta(\zeta) = F_x(x), \tag{4}$$

или

$$\zeta = \int_a^x p(x)dx, \tag{5}$$

где ζ – случайная переменная в интервале $[0, 1]$.

Полученное уравнение (5) – это основное для метода МК.

Функцию плотности вероятности $P(x, y, z, s)$ свободного пробега s фотона до взаимодействия (размерность s – см) можно определить из закона Бугера – Ламберта – Бера следующим образом:

$$P(x, y, z, \vec{s}) = \exp\left(-\int_{(x_1, y_1, z_1)}^{(x_2, y_2, z_2)} \mu_t(x, y, z)ds\right), \tag{6}$$

где μ_t – полный коэффициент ослабления, равный $\mu_a + \mu_s$ (μ_a, μ_s – коэффициенты поглощения и рассеяния); все величины имеют размерность см^{-1} .

Интегрируя в интервале $[0, s_1]$, где s_1 – размер элемента, получаем показатель распределения

$$T(s_1) = \exp(-\mu_t s_1); \tag{7}$$

$T(s_1)$ представляет собой вероятность возникновения длины пробега фотона большей, чем s_1 , с вероятностью $P\{s \geq s_1\}$.

Преобразуя выражение (7), получаем:

$$P\{s < s_1\} = 1 - \exp(-\mu_t s_1). \tag{8}$$

Тогда функция плотности вероятности $p(s_1)$ для длины свободного пробега s будет следовать выражению

$$p(s_1) = \frac{dP\{s < s_1\}}{ds_1} = \mu_t \exp(-\mu_t s_1). \tag{9}$$

Применяя уравнение (5), получим:



$$\zeta = \int_0^s p(s) ds = \int_0^s \mu_l \exp(-\mu_l s) ds = 1 - \exp(-\mu_l s). \quad (10)$$

Правые стороны обоих уравнений (8) и (10) равны. Для начала необходимо установить $p(s)$, затем применить уравнение (5). Преобразовав уравнение (10), мы получаем равенство

$$\exp(-\mu_l s) = 1 - \zeta \quad (11)$$

и разрешаем его относительно s :

$$s = \frac{-\ln(1 - \zeta)}{\mu_l}. \quad (12)$$

Учитывая, что величины $-\ln(1 - \zeta)$ и $-\ln(\zeta)$ имеют одинаковые диапазоны значений, где ζ – случайная переменная в интервале $[0, 1]$, формулу (12) можно переписать как

$$s = \frac{-\ln(\zeta)}{\mu_l}. \quad (13)$$

Когда фотон рассеивается, его траектория отклоняется на угол θ в интервале $[0, \pi]$. Фазовая функция, т. е. функция плотности вероятности, определяющая вероятность фотона рассеяться на заданный угол, обычно определяется эмпирически. Наиболее часто используемой в оптике тканей является функция Хени – Гринштейна [7]:

$$p(s, s') = p(\cos \theta) = \frac{(1 - g^2)}{4\pi(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{3/2}}. \quad (14)$$

Видно, что эта рассеивающая функция зависит от параметра g , который определяет ее форму и носит название фактора анизотропии рассеянного излучения.

Формально параметр g определяет средний косинус угла отклонения и записывается в виде

$$g = \iint_{4\pi} s s' p(s, s') d\Omega', \quad (15)$$

где $d\Omega'$ – бесконечно малый элемент угла.

Когда фотон рассеивается, его направление движения изменяется на угол θ в интервале $[0, \pi]$. Удобно произвести замену $\mu = \cos \theta$, и, следовательно, μ распределено в интервале $[-1, 1]$. Эта функция плотности $p(\mu)$ интересна тем, что при такой замене формула (15) запишется как

$$g = \int_{-1}^1 p(\mu) \mu d\mu = \langle \mu \rangle. \quad (16)$$

Следовательно, значение фактора анизотропии находится в промежутке $[-1, 1]$. Нулевое значение указывает на изотропное рассеяние, а значение, близкое к единице, – на сильное рассеяние вперед. Вид траекторий фотонов для впереднаправленного, изотропного и обратного типов рассеяния показан на рис. 3. Экспериментально определено, что функция Хени – Гринштейна описывает функцию плотности вероятности рассеяния в ткани (коже). Значения g для тканей лежат между 0,30 и 0,98, но весьма часто g равно 0,90 [7].

Применяя уравнение (5), получаем:

$$\zeta = \int_{-1}^{\mu} p(\mu) d\mu = \int_{-1}^{\mu} \frac{1 - g^2}{2(1 + g^2 - 2g\mu)^{3/2}} d\mu. \quad (17)$$

Разрешая уравнение (17) относительно μ , получим:

$$\mu = \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 - g + 2g\zeta} \right)^2 \right] \quad (18)$$

для $g \neq 0$.

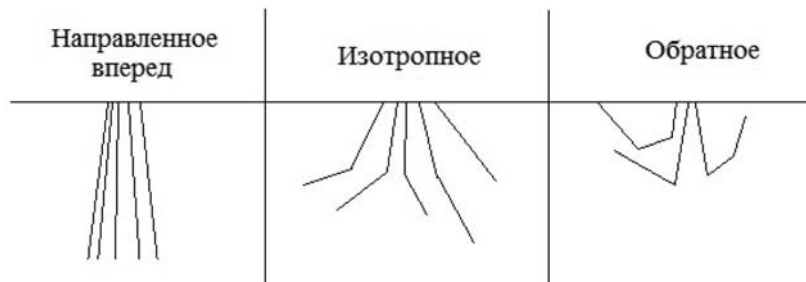


Рис. 3. Примеры траекторий движения фотонов для различных типов рассеяния

При приближении g к нулю уравнение (18) становится неопределенным. Но при значении $g=0$ рассеяние становится изотропным и функция плотности вероятности (14) становится равной $1/2$. Применяя уравнение (5), получаем:

$$\zeta = \int_{-1}^{\mu} \frac{1}{2} d\mu = \frac{1}{2}(\mu + 1) \quad (19)$$

Из формулы (19) следует, что

$$\mu = 2\zeta - 1. \quad (20)$$

для $g = 0$.

Когда фотон отклоняется на угол θ , предполагается, что он отклоняется осесимметрично первоначальному направлению распространения на азимутальный угол ψ , значение которого лежит в пределах интервала $[0, 2\pi]$. Асимметричное рассеяние в данной работе не рассматривается. Функция плотности вероятности $p(\psi)$ является постоянной и равняется $1/2\pi$. Применяя уравнение (5), записываем:

$$\zeta = \int_0^{\psi} \frac{1}{2\pi} d\psi = \frac{\psi}{2\pi}. \quad (21)$$

Тогда можно выразить ψ в следующей форме:

$$\psi = 2\pi\zeta. \quad (22)$$

Для учета поглощения часто используется прием, называемый неявным захватом фотонов. При моделировании рассматривается движение не каждого фотона в отдельности, а их пакета. Пакет фотонов (в дальнейшем для простоты используются названия фотон или пакет) моделирует движение множества фотонов по сходным траекториям, и в результате при взаимодействии со средой поглощается только часть фотонов из пакета, а оставшаяся часть продолжает свое движение [8, 9].

Для учета поглощения фотонов из пакета каждому из них первоначально присваивается статистический вес $W = 1$. При каждом акте поглощения статистический вес уменьшается на величину

$$\Delta Q = W \frac{\mu_a}{\mu_t}.$$

Этот вес добавляется либо к ближайшему узлу сетки, либо распределяется между всеми узлами

элемента, в котором произошло поглощение.

Может возникнуть ситуация, когда вес пакета уменьшится настолько, что вклад от него станет незначительным. Для того чтобы корректно завершить его движение и гарантировать сохранение энергии, не искажая картины пространства, используется «рулетка». Если вес становится меньше порогового значения W_n , «рулетка» дает пакету один шанс из m продолжить движение с весом mW . В противном случае вес пакета обнуляется и он уничтожается. Величина m и пороговое значение статистического веса связаны следующим образом:

$$W_n = 1/m. \quad (23)$$

Величину W_n для каждого элемента сетки либо задают постоянной величиной, либо пересчитывают через определенное число шагов, используя следующее выражение:

$$W_n = \frac{\mu_t}{\mu_a} \left(\alpha \bar{X} + \beta \sqrt{S^2} \right), \quad (24)$$

где \bar{T} – математическое ожидание полученного веса элементом сетки; $\sqrt{S^2}$ – выборочная дисперсия; α, β – некоторые константы, выбранные таким образом, чтобы $W_n \in (0,1)$

Примером выбора значений для данных коэффициентов может служить случай, когда $\alpha = 1$ и $\beta = -1$. При таком выборе «рулетка» будет использоваться для фотонов, статистический вес которых меньше среднего значения на величину большую, чем выборочная дисперсия.

Упрощенную схему алгоритма моделирования методом МК можно представить в виде следующей схемы (рис. 4). Фотон инициализируется с единичным весом. Размер шага фотона для первого случая взаимодействия найден, и фотон перемещен. Если фотон покинул ткань, то проверяется возможность внутреннего отражения. Если фотон внутренне отражен, то положение фотона соответственно изменено, и программа продолжается, иначе происходит удаление фотона и регистрируется случай отражения (или пропускания). С каждым шагом вес фотона уменьшается. Потерянный вес добавляется к локально связанному элементу массива, связанного с положением фотона, который указывает энергию фотона, поглощенную тканью. Остающийся вес фотона рассчитывается ста-

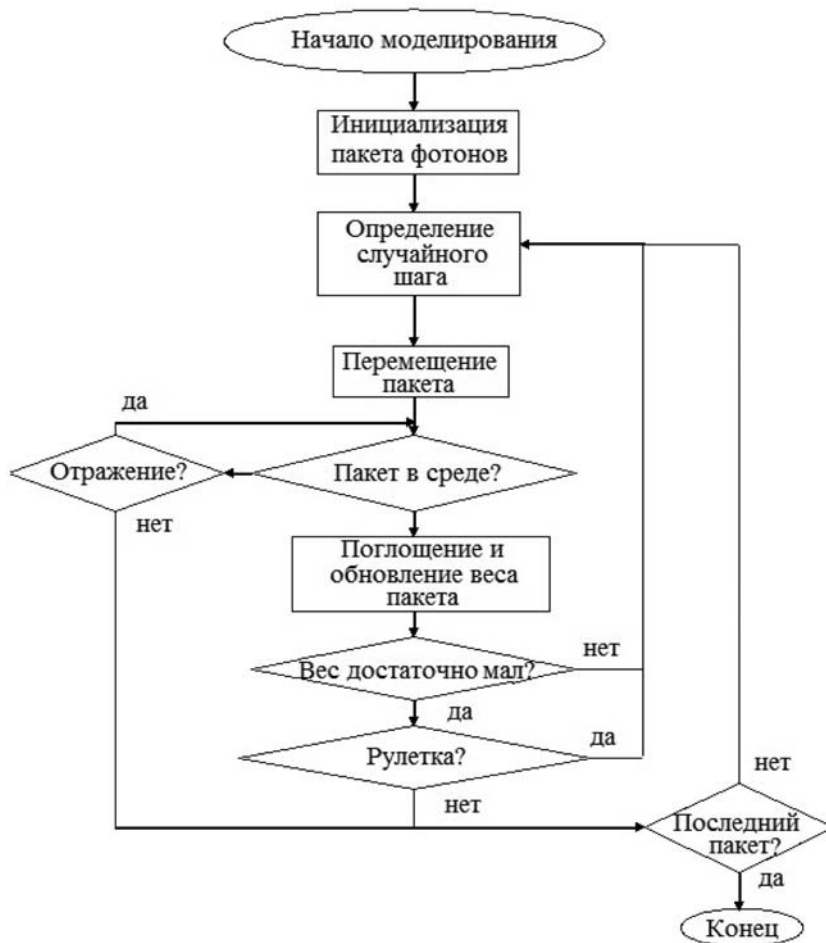


Рис. 4. Алгоритм моделирования распространения лазерного излучения в среде методом Монте-Карло

статистически, выбирается новое направление и рассчитывается новый шаг. Если вес фотона падает ниже порогового минимального значения, то «играется рулетка», чтобы либо уничтожить фотон, либо продолжать его двигать.

После запуска N фотонов для каждого узла сетки мы имеем некоторую выборку статистических весов (X_1, X_2, \dots, X_n) , полученных средой в его окрестности. Для этих величин производится статистическая обработка. Наиболее важными являются математическое ожидание и выборочная дисперсия.

Пусть вес всех N фотонов соответствует некоторому значению энергии q . Тогда математическое ожидание веса, полученного узлом сетки, имеет вид

$$\bar{X} = (1/n) \sum_{i=1}^n X_i, \quad (25)$$

где n – число поглощений в окрестности рассматриваемого узла; X_i – статистический вес, поглощенный в окрестности рассматриваемого i -го узла.

Значение математического ожидания может быть использовано для вычисления плотности энергии следующим образом:

$$Q = (\bar{X}q) / V, \quad (26)$$

где V – объем окрестности рассматриваемого узла; q – энергия, которой соответствует полный статистический вес N пакетов фотонов.

Метод Монте-Карло – это численный статистический метод, причем моделируемый процесс является нормальным, т. е. имеет Гауссово распределение. Для определения точности воспользуемся правилом «трех сигм»:

$$P(|Q - \bar{X}| < 3\sigma) = 0,997, \quad (27)$$

т. е. погрешность метода почти наверняка равна 3σ .

Но величина σ нам заранее неизвестна. Оценкой этой величины является выборочная дисперсия:

$$S^2 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2. \quad (28)$$

Тогда можно считать, что

$$\sigma \approx \sqrt{S^2}. \quad (29)$$

Усредненные параметры неоднородности и каждого слоя представлены в таблице. Для излучения длиной волны 400 нм коэффициент поглощения достаточно высок, таким образом, оно должно сильно поглощаться, не проникая глубоко внутрь среды.

Для графического представления распространения излучения в среде были выбраны плоскости сечения xz . На рис. 5,а показано распределение плотности поглощенной энергии в этой плоскости для первой задачи (когда длина волны $\lambda = 400$ нм). Для инфракрасного излучения (вторая задача, $\lambda = 800$ нм) коэффициент

Значения параметров расчетной среды (кожи) на двух лазерных длинах волн [10]

Параметр	Значение для участка среды			
	Неоднородность	Роговой слой	Эпидермис	Дерма
n	$\frac{1,53}{1,45}$	$\frac{1,53}{1,40}$	$\frac{1,40}{1,36}$	— 1,40
$\mu_a, \text{см}^{-1}$	$\frac{116}{1,0}$	$\frac{230}{1,0}$	$\frac{66}{4,0}$	— 0,8
$\mu_s, \text{см}^{-1}$	$\frac{1160}{20}$	$\frac{2000}{25}$	$\frac{800}{45}$	— 57
g	$\frac{0,80}{0,80}$	$\frac{0,90}{0,90}$	$\frac{0,74}{0,85}$	— 0,90
$d, \text{см}$	$\frac{0,0040}{-}$	$\frac{0,0019}{-}$	$\frac{0,0100}{-}$	— —

Обозначения: n — показатель преломления, μ_a, μ_s — коэффициенты поглощения и рассеяния, g — параметр анизотропии, d — толщина слоя (размер неоднородности).

Верхнее значение — для $\lambda = 400$ нм, нижнее — для $\lambda = 800$ нм.

поглощения значительно меньше коэффициента рассеяния, и моделируется сильно рассеивающей средой. Следовательно, глубина проникновения излучения, по сравнению с решением первой задачи, должна быть больше. Поэтому к расчетной области добавлен еще один слой толщиной 0,05 см. На рис. 5,б показано распределение плотности поглощенной энергии в плоскости xz для второй задачи.

Характер взаимодействия лазерного излучения с биологической тканью зависит от коэффициента поглощения для данной длины волны. В ультрафиолетовой области спектра преобладает поглощение, поэтому вклад рассеяния сравнительно мал и излучение проникает внутрь среды сравнительно неглубоко. Для из-

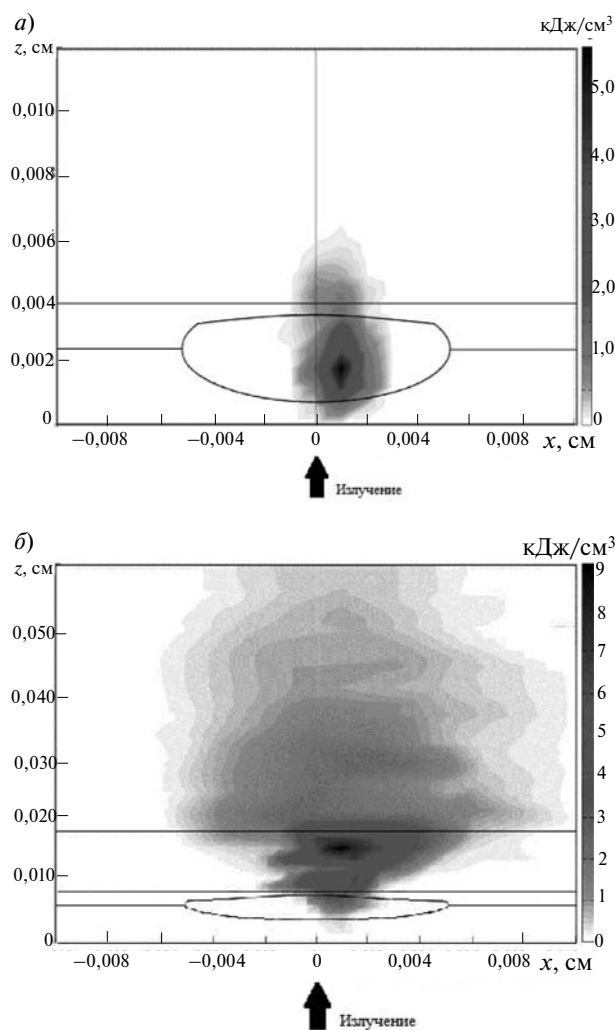


Рис. 5. Распределение плотности поглощенной лазерной энергии в плоскости сечения xz для значений длины волны 400 нм (а) и 800 нм (б)



лучения с длиной волны от 600 до 1500 нм – так называемого «терапевтического окна» – рассеяние превалирует над поглощением и глубина проникновения излучения значительно больше, чем для ультрафиолетовой области спектра.

В обеих задачах лазерное излучение имеет одинаковую мощность и энергию. Для излучения с длиной волны 400 нм большая часть энергии будет поглощена в области малого объема. Поэтому плотность поглощенной энергии значительно больше, чем в случае с длиной волны 800 нм. С практической точки зрения подобные расчеты необходимы для корректного определения дозы облучения при фототерапии.

Таким образом, рассмотренный в работе модифицированный метод Монте-Карло обладает рядом преимуществ. Данный метод применим для сред с различной геометрией и позволяет получать трехмерную информацию о распределении света в тканях. При запуске 1 млн. пакетов фотонов погрешность метода не превышает 1 % от полученной величины. Полученное пространственное распределение плотности поглощенной энергии хорошо согласуется с другими работами авторов [10 – 16].

Для описания сложных сред наиболее удобен конечно-элементный метод. Геометрия среды представляется в виде сетки, с помощью которой производится аппроксимация расчет-

ной области путем разбиения на элементарные ячейки, формы элементов которой являются одним из основных факторов, определяющих точность и скорость сходимости численного решения задачи. Чем проще форма элементов разбиения, тем меньше вычислительных ресурсов требуется для расчетов.

Отвечающими требованиям считаются сетки, где каждый элемент является правильным тетраэдром или близким к нему. Использование такой аппроксимации моделируемой среды существенно упрощает решение задачи перехода между элементами (выхода за пределы элемента) и нахождения фотона внутри элемента сетки.

Принципиальное отличие модели от известных существующих [7, 17 – 24] состоит в независимости алгоритма от геометрии среды. Это существенно выделяет данную модель среди прежних, использующих плоскопараллельные и сплошные гомогенные расчетные области. При расчетах могут использоваться любые параметры среды [22] и различные включения, например наночастицы [25].

Таким образом, предложенная модель позволяет проводить расчет распределения плотности поглощенной энергии лазерного излучения в многослойных материалах и может использоваться при решении задач анализа тепловых полей, возникающих при облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Сетейкин, А.Ю.** Модель расчета температурных полей, возникающих при воздействии лазерного излучения на многослойную биоткань [Текст] / А.Ю. Сетейкин // Оптический журнал. – 2005. – Т. 72. – № 7. – С. 42 – 47.
2. **Сетейкин, А.Ю.** Оптико-теплофизическая модель взаимодействия лазерного излучения с многослойными материалами [Текст] / А.Ю. Сетейкин // Известия вузов. Физика. – 2005. – № 6. Приложение. – С. 99 – 101.
3. **Сетейкин, А.Ю.** Анализ по методу Монте-Карло процессов распространения лазерного излучения в многослойных биоматериалах [Текст] / А.Ю. Сетейкин // Оптика и спектроскопия. – 2005. – Т. 99. – Вып. 4. – С. 685 – 689.
4. **Сетейкин, А.Ю.** Моделирование температурных полей с учетом распространения света в биоткани [Текст] / А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников, Н.И. Фогель // Изв. вузов. Приборостроение. – 2007. – Т. 50. – № 9. – С. 24 – 28.
5. **Seteikin, A.Yu.** Research on thermal influence of laser radiation on skin with non-trivial geometry [Text] / A.Yu. Seteikin, I.V. Krasnikov // Proc. of SPIE. – 2007. – Vol. 6826. – P. 127 – 131.
6. **Шайдуров, В.В.** Многосеточные методы конечных элементов [Текст] / В.В. Шайдуров. – М.: Наука, 1989. – 288 с.
7. Оптическая биомедицинская диагностика [Текст]: В 2 т. Т. 1 / Под ред. В.В. Тучина. – М.: Изд-во физ.-мат. лит.-ры, 2007. – 560 с.
8. Optical-thermal response of laser-irradiated tissue [Text] / Ed. by A.J. Welch, M.J.C. van Gemert. – New York: Plenum Press, 1995. – 952 p.
9. **Сетейкин, А.Ю.** Моделирование распространения оптического излучения методом Монте-Карло в биологических средах с замкнутыми внутренними неоднородностями [Текст] / А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников, М.С. Павлов // Оптический журнал. – 2010. – Вып. 77. – № 10. – С. 15 – 19.

10. **Van Gemert, M.J.C.** Skin optics [Text] / M.J.C. van Gemert, S.L. Jacques, H.J.C.M. Sterenborg, W.M. Star // IEEE Transactions on Biomedical Engineering. – 1989. – Vol. 36. – № 12. – P. 1146 – 1154.
11. **Голуб, И.Е.** Лазерные технологии в медицине: современные аспекты теории и применение [Текст] / И.Е. Голуб, А.Н. Малов, Л.В. Сорокина [и др.]. – Иркутск: ИГМУ, 2009. – 172 с.
12. **Meglinski, I.V.** Quantitative assessment of skin layers absorption and skin reflectance spectra simulation in the visible and near-infrared spectral regions [Text] / I.V. Meglinski // Physiological measurement. – 2002. – № 23. – P. 741–753.
13. **Meglinski, I.V.** Influence of refractive index matching on the photon diffuse reflectance [Text] / I.V. Meglinski // Physics in Medicine and Biology. – 2002. – № 47. – P. 4271–4285.
14. **Сетейкин, А.Ю.** Взаимодействие света с биологическими тканями и наночастицами [Текст] / А.Ю. Сетейкин, А.П. Попов. – Saarbrücken, Germany: LAP Lambert Academic Publishing, 2011. – 212 с.
15. **Сетейкин, А.Ю.** Теплофизическая модель взаимодействия лазерного излучения с многослойной биотканью [Текст] / А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников // Вестник АмГУ. – 2005. – № 31. – С. 13 – 15.
16. **Сетейкин, А.Ю.** Расчет температурных полей, возникающих при взаимодействии лазерного излучения с многослойным биоматериалом [Текст] / А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников // Оптический журнал. – 2006. – Т. 73. – № 3. – С. 31 – 34.
17. **Arridge, S.R.** Optical tomography: forward and inverse problems [Text] / S.R. Arridge, J.C. Schotland // Inverse Problems. – 2009. – Vol. 25. – № 12. – P. 950 – 957.
18. **Bassi, A.D.** Propagation of spatial information in turbid media [Text] / A.D. Bassi, C. Andrea, G. Valentini [et al.] // Optics Letters. – 2008. – Vol. 33. – № 23. – P. 2836 – 2838.
19. **Fischer, D.G.** Monte Carlo modeling of spatial coherence: free-space diffraction [Text] / D.G. Fischer, S.A. Prahl, D.D. Duncan // J. Opt. Soc. Am. A. – 2008. – Vol. 25. – P. 2571 – 2581.
20. **Arridge, S.R.** Statistical basis for the determination of optical pathlength in tissue [Text] / S.R. Arridge, M. Hiraoka, M. Schweiger // Phys. Med. Biol. – 1995. – Vol. 40. – P. 1539–1558.
21. Photon migration in tissue and biomedical applications of lasers [Text] / Ed. by M. Motamedi // Appl. Opt. – 1993. – Vol. 32. – P. 367 – 434.
22. **Привалов, В.Е.** Фотоабляция биологических тканей [Текст] / В.Е. Привалов, А.Ю. Сетейкин // Вестник Санкт-Петербургского университета. – 2010. – Сер.11. – Вып. 2. – С. 225 – 237.
23. **Кривцун, А.М.** Анализ процессов распространения оптического излучения в биологических средах с использованием вычислений на графических процессорах [Текст] / А.М. Кривцун, А.Ю. Сетейкин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (116). – С. 55 – 60.
24. **Фадеев, Д.А.** Анализ многократного рассеяния лазерного излучения в биологических средах с пространственными флуктуациями оптических параметров [Текст] / Д.А. Фадеев, А.Ю. Сетейкин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. – № 2 (98). – С. 102 – 106.
25. **Красников, И.В.** Температурная реакция содержащих наночастицы биотканей на облучение светом УФ-А и УФ-В диапазонов [Текст] / И.В. Красников, А.Ю. Сетейкин, А.П. Попов, А.Э. Фотиади // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2009. – № 1 (73). – С. 113 – 118.

ПРИВАЛОВ Вадим Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.


195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vaevpriv@yandex.ru

СЕТЕЙКИН Алексей Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной и теоретической физики Амурского государственного университета.

675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
seteikin@mail.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
fotiadi@rphf.spbstu.ru



АТОМНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА КЛАСТЕРОВ И НАНОСТРУКТУР

УДК 539.1

Е.Н. Шамина

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЯ БЕНЗОЛА НА ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

E.N. Shamina

Volgograd State University,
100 Universitetsky Pr., Volgograd, 400062, Russia

THE QUANTUM AND CHEMICAL INVESTIGATION OF THE BENZENE SOLVENT INFLUENCE ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE CARBON NANOTUBES

В работе представлены результаты квантовохимических полуэмпирических исследований процессов адсорбции молекулы бензола на поверхности однослойных углеродных нанотрубок различного диаметра. Расчеты выполнены на основе модели молекулярного кластера с граничными псевдоатомами с использованием полуэмпирической расчетной схемы MNDO/RM1. Определены энергетические характеристики процессов адсорбции.

УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ. АДсорбция. БЕНЗОЛ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ.

The article presents the semi-empirical quantum and chemical study of the processes of adsorption of benzene molecules on the surface of one-layer carbon nanotubes with varied diameters. The calculations were carried out on the basis of the model of molecular cluster with borderline pseudoatoms using semi-empirical MNDO/RM1 scheme. The adsorption process energy characteristics were determined.

CARBON NANOTUBES. ADSORPTION. BENZENE. ENERGY AND GEOMETRICAL CHARACTERISTICS.

На сегодняшний день в качестве активных сорбентов широко применяются углеродные материалы. Особое внимание исследователей привлекают углеродные нанотрубки (УНТ) – структуры с уникальными физико-химическими свойствами [1]. Поскольку УНТ представляет собой поверхностную структуру, вся ее масса заключена в поверхности ее слоев; поэтому рас-

сматриваемый объект имеет аномально высокую удельную поверхность ($\approx 2000 \text{ м}^2/\text{г}$), что, в свою очередь, определяет особенности его сорбционных характеристик [2]. Один из вариантов использования нанотрубок в химической технологии и обусловлен высокой реакционной активностью внешних стенок цилиндра; это позволяет присоединять к поверхности нано-

трубок различные атомы, молекулы и функциональные группы. Окислительная обработка нанотрубок приводит к образованию кислородосодержащих групп на их поверхности и может способствовать увеличению адсорбционной активности по отношению к органическим молекулам ароматического ряда.

Высокая чувствительность электронных характеристик к присутствию молекул, сорбированных на поверхности, а также рекордная величина удельной поверхности, способствующая такой сорбции, делают УНТ перспективной основой для создания сверхминиатюрных биохимических сенсоров [3]. Сенсоры на основе УНТ благодаря удачному сочетанию таких качеств, как миниатюрные размеры, хорошая электропроводность, а также химическая и термическая стабильность являются предметом интенсивных разработок во многих лабораториях. Принцип их действия основан на изменении электронных характеристик нанотрубок (ширина запрещенной зоны, концентрация и подвижность носителей и т. п.) при сорбции молекул определенного сорта.

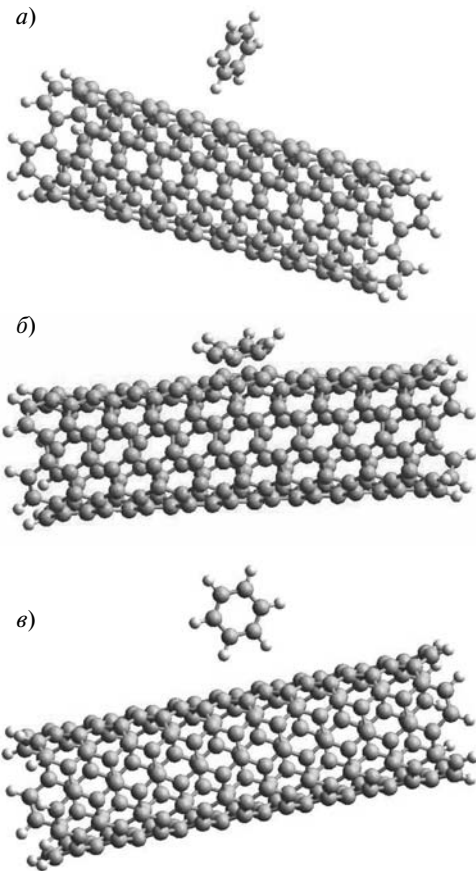
В работе [4] авторы изучали адсорбцию фенола и бензола на гранулах пористых углеродных волокон. Исследованы свойства пористых гранул, произведенных агломерацией каталитически выращенных нановолокон углерода. Предел прочности при сдавливании одной гранулы составляет 1,6 – 2,5 МПа. Они обладают аномально высокой удельной поверхностью, составляющей в среднем 72 – 141 м²/г, и большинство имеющихся пор являются мезо- или макропорами. Показано, что адсорбция бензола и фенола при температуре 298 К на гранулах происходит интенсивнее, чем на активированном углероде, и зависит не только от величины удельной поверхности углеродного материала, но и от шивки структуры гранул и морфологии углеродных нановолокон. Кроме того, обработка образцов разбавленной азотной кислотой существенно снижает такую адсорбцию.

Выбор модели

В данной работе представлены результаты расчета энергетических характеристик для процессов адсорбции молекулы бензола на однослойных углеродных нанотрубках. Расчеты электронного строения данных структур

выполнены в рамках модели молекулярного кластера с граничными псевдоатомами [5] с использованием квантовохимического полуэмпирического метода MNDO/RM1 [5]. Последний есть новая параметризованная версия метода MNDO для набора химических элементов H, C, N, O, P, S, F, Cl, Br и I. Данный метод, как и исходный, позволяет проводить качественные расчеты электронной и атомной структур органических, а также биологических молекул. Он учитывает все одноцентровые взаимодействия электронов, а также модифицированное двухцентровое отталкивание электронов. С физической точки зрения, приближение MNDO/RM1 включает высшие мультиполи распределения заряда и их взаимодействия. Результаты расчетов большого числа молекул методом MNDO/RM1 показывают, что средняя абсолютная ошибка для большинства свойств основного состояния уменьшается почти в два раза, по сравнению с аналогичными расчетами, выполненными более ранними методами [6].

Исследованы закономерности адсорбции молекулы бензола на однослойных углеродных ахиральных нанотрубках (*n, n*)-типа (*n* = 5, 6). В качестве геометрических моделей изучаемых нанотрубок выбраны кластеры, содержащие *n* шестиатомных циклов (гексагонов) по периметру трубки и 8 – 10 элементарных ячеек вдоль оси трубки (см. рисунок). Количество атомов углерода варьировалось от 64 до 100, в зависимости от типа УНТ. По окружности все трубки геометрически замкнуты. Граничные разорванные химические связи замыкались атомами водорода, которые выбирались в качестве граничных псевдоатомов. Начальные расстояния между ближайшими атомами углерода принимались равными 1,44 Å и получены в процессе предварительной оптимизации геометрии с помощью метода молекулярной механики [7]. Данный расчетный метод использует классическую механику для построения структуры молекул и проведения предварительной оптимизации ее геометрии. Атомы (ядра с электронами) представляются точечными массами с соответствующими зарядами. Взаимодействия между соседними атомами включают упругие взаимодействия (соответствующие химическим связям) и силы Ван-дер-Ваальса, которые описываются, например, потенциалом Леннарда –



Фрагменты структуры углеродных нанотрубок (n,n) -типа с различными вариантами ориентации молекулы бензола над поверхностью углеродной нанотрубки: *a* – над центром гексагона, а плоскость молекулы перпендикулярна плоскости гексагона (I); *b* – там же, но плоскость молекулы параллельна плоскости гексагона (II); *c* – плоскость молекулы бензола параллельна плоскости нанотрубки (III)

Джонса. Электростатические взаимодействия вычисляются по закону Кулона.

Трудности исследования поверхностной сорбции многоатомной молекулы, по сравнению с двухатомной, связаны с наличием анизотропии, присущей многоатомным молекулам. В силу анизотропии сорбционные характеристики молекулы зависят не только от температуры и состояния поверхности, но также и от ориентации молекулы относительно поверхности сорбента (стерический фактор).

В данной работе изучены три варианта ориентации молекулы бензола над поверхностью углеродной нанотрубки:

I – над центром гексагона, а плоскость молекулы перпендикулярна плоскости гексагона (рис. 1,*a*);

II – там же, но плоскость молекулы параллельна плоскости гексагона (рис. 1,*b*);

III – плоскость молекулы бензола параллельна плоскости нанотрубки (рис. 1,*c*).

В каждом из трех случаев молекула располагалась в центре кластера, чтобы уменьшить влияние граничных условий.

Рассчитаны значения длины химической связи R_{a-tub} , энергии адсорбции $E_{ад}$, энергий верхней заполненной молекулярной орбитали $E_{ВЗМО}$ и нижней вакантной молекулярной орбитали $E_{НВМО}$, ширины запрещенной щели E_g как энергии синглет-триплетного перехода, изменения ширины запрещенной щели ΔE_g в результате адсорбции частиц, а также заряда q_{mol}

Энергетические и геометрические характеристики углеродных нанотрубок

Ориентация молекулы ^{*)}	(n,n)	Значение параметра						
		$E_{ВЗМО}$	$E_{НВМО}$	$E_{ад}$	E_g	ΔE_g	R_{a-tub}	q_{mol}
		эВ					Å	ед. элем. заряда
I	(5,5)	-7,05	-3,10	0,01	1,5	0,0	2,98	-0,003
	(6,6)	-6,87	-3,24	0,03	1,4		2,78	-0,004
II	(5,5)	-7,10	-2,85	2,49	1,6	0,1	1,61	0,280
	(6,6)	-6,90	-3,03	2,84	1,4		1,60	0,260
III	(5,5)	-7,05	-3,10	0,01	1,5	0,0	2,64	-0,003
	(6,6)	-6,90	-3,24	0,02	1,4		2,73	

^{*)} См. рисунок и подпись под ним.

на молекуле. Результаты квантовохимических расчетов представлены в таблице .

Обсуждение результатов

Анализ результатов квантовохимических расчетов (см. таблицу) показал, что в рамках полуэмпирического метода MNDO энергия верхней заполненной молекулярной орбитали увеличивается, а энергия нижней вакантной молекулярной орбитали уменьшается с ростом диаметра трубки. Изменение величин граничных энергий $E_{ВЗМО}$ и $E_{НВМО}$ свидетельствует об изменении свойств нанотрубок в результате адсорбции, в частности, об увеличении реакционной способности данных систем. Другими словами, адсорбированные на поверхности трубки частицы увеличивают сродство УНТ к другим частицам. Адсорбированные частицы можно рассматривать как дефект структуры — квантовую точку, поляризующую поверхность трубки. Указанная точка на поверхности трубки создает дополнительные локальные квантовые состояния электронов, на которые могут переноситься электроны других адсорбирующихся частиц.

Анализ длины адсорбционных химических связей между молекулой бензола и УНТ показал, что в случаях I и III образовывались только водородные связи, а в случае II образовывалась устойчивая химическая связь (см. таблицу).

По величине зарядов на молекуле бензола можно сделать вывод, что в результате адсорбции образовался донорно-акцепторный комплекс. Причем в случаях I и III на молекуле скапливается малый отрицательный заряд, т. е. произошел перенос заряда между молекулами донора (УНТ) и акцептора (бензол) без образования между ними химической связи. А в случае II на молекуле скапливается положительный заряд, существенно превышающий абсолютные значения зарядов в случаях I и III, т. е. имеет место донорно-акцепторное взаимодействие с переносом электронной плотности на углеродную нанотрубку с образованием устойчивой химической связи.

Энергия адсорбции атомов и молекул рассчитывалась как разность полных энергий продуктов реакции и реагентов. Анализ зависимости энергии адсорбции от диаметра (см. таблицу), приводит к выводу, что значение

энергии увеличивается для всех трех случаев ориентации молекулы бензола с ростом диаметра трубки.

Рассмотренные нанотрубки обладают положительной энергией адсорбции, вследствие чего система находится в энергетически менее выгодном состоянии, и она геометрически неустойчива. Это означает, что тепловой нагрев данной системы может привести к разрушению образовавшихся структур. Полученные результаты качественно согласуются с ранее полученными в работе [8], где они рассчитаны в рамках неэмпирического метода DFT [5]. Энергия адсорбции $E_{ад}$ молекулы бензола, ориентированной параллельно плоскости гексагона, в указанной публикации также оказалась положительной и составила 0,15 эВ. Количественное отличие значения энергии от наших данных можно объяснить различным типом рассматриваемых нанотрубок, а также использованием разной расчетной схемы.

Анализ величины ΔE_g (см. таблицу) показал, что в результате адсорбции атомов и молекул ширина запрещенной зоны меняется мало. Но это приводит к изменению физических свойств УНТ, в частности проводимости и прозрачности.

На практике этот эффект можно использовать для разработки химических сенсоров [3], направленных на регистрацию рассмотренных в работе частиц, и создания слабоактивных оптических сред на основе растворов углеродных нанотрубок в бензоле. Подобные растворы позволяют исследовать нелинейные оптические свойства самих углеродных нанотрубок [9 — 12].

В заключение сформулируем основные результаты и выводы данной работы.

Проведено моделирование адсорбции молекул бензола на поверхности углеродных нанотрубок и расчет электронного строения образовавшихся комплексов в рамках квантовохимического полуэмпирического метода MNDO в параметризации RM1. Исследованы различные варианты ориентации молекулы на поверхности трубки.

Полученные результаты квантовохимических расчетов показали возможность образования адсорбционного комплекса с водородной и химической связями для разных ориентаций



молекулы бензола, а также донорно-акцепторного комплекса с переносом заряда на молекулу, знак которого зависит от ее ориентации.

Исследование выявило зависимость электронного строения и адсорбционных характеристик углеродных нанотрубок от их геоме-

трических параметров, в частности диаметра.

Расчеты свидетельствуют, что образовавшиеся структуры оказываются энергетически квазиустойчивыми. Это подтверждает, что бензол служит хорошим растворителем для углеродных нанотрубок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Харрис, П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века [Текст] / П. Харрис. — М.: Техносфера, 2003.—336 с.
2. Елецкий, А.В. Сорбционные свойства углеродных наноструктур [Текст] / А.В. Елецкий // Успехи физических наук.—2004.—Т. 174.—№ 11.—С. 1191 — 1231.
3. Эггинс, Б. Химические и биологические сенсоры [Текст] / Б. Эггинс. —М.: Техносфера, 2005.—336 с.
4. Chen, J. Characterization and adsorption properties of porous carbon nanofiber granules [Text] / J. Chen, Q. Chen, Y. Li // China Particuology.—2006.—Vol. 4.—№ 5.—P. 238 — 242.
5. Степанов, Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] / Н.Ф. Степанов.—М.: Мир, 2001. — 519 с.
6. Жидомиров, Г.М. Кластерное приближение в квантовохимических исследованиях хемосорбции и поверхностных структур [Текст] / Г.М. Жидомиров, И.Д. Михайкин // Итоги науки и техники. ВИНТИ АН СССР. Сер. Строение молекул и химическая связь. —1984.—Т. 9. —С. 153 — 161.
7. Кларк, Т. Компьютерная химия [Текст] / Т. Кларк. — М.: Мир, 1990. —383 с.
8. Woods, L.M. Adsorption of simple benzene derivatives on carbon nanotubes [Text] / L.M. Woods, S.C. Bădescu, T.L. Reinecke // Phys. Rev. B. — 2007.—Vol. 75.—Iss. 15.—P. 155415(9 p).
9. Акимов, Д.А. Генерация второй и третьей оптических гармоник при прохождении фемтосекундных импульсов через систему углеродных нанотрубок [Текст] / Д.А. Акимов, М.В. Алфимов, С.О. Коноров [и др.] // ЖЭТФ. — 2004. — Т. 125.—Вып. 2.—С. 247 — 255.
10. Jin, Z. Nonlinear optical properties of some polymer/multi-walled carbon nanotube composites [Text] / Z. Jin, X. Sun, G. Xu, [et al.] // Chem. Phys. Lett.—2000.—Vol. 318.— P. 505 — 510.
11. Ильичев, Н.Н. Нелинейное пропускание одностенных углеродных нанотрубок в тяжелой воде на длине волны 1,54 мкм; получение режима самосинхронизации мод в лазере на стекле с Er^{3+} с помощью пассивного затвора на основе этих нанотрубок [Текст] / Н.Н. Ильичев, Е.Д. Образцова, С.В. Гарнов, С.Е. Мосалева // Квантовая электроника.—2004.—Т. 34.—№ 6.— С. 572 — 574.
12. Таусенев, А.В. Эрбиевый волоконный лазер ультракоротких импульсов с использованием насыщающегося поглотителя на основе одностенных углеродных нанотрубок, синтезированных методом дугового разряда [Текст] / А.В. Таусенев, Е.Д. Образцова, А.С. Лобач [и др.] // Квантовая электроника.—2007.—Т. 37.—№ 9.—С. 847 — 852.

ШАМИНА Елена Николаевна — аспирантка кафедры теоретической физики и волновых процессов Волгоградского государственного университета, преподаватель кафедры математики и информатики Волгоградского государственного медицинского университета.

400062, г. Волгоград, Университетский пр., 100
shamina.alena@gmail.com

УДК 539.1.01, 539.189.2

А.Н. Ипатов

ВЛИЯНИЕ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМ ФЕРМИОНОВ

A.N. Ipatov

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

INFLUENCE OF INTERPARTICLE INTERACTION ON THE OPTICAL PROPERTIES OF FERMIONIC SYSTEMS

В статье обсуждается влияние многочастичных корреляций в конечных ферми-системах, содержащих равное количество частиц противоположного заряда, на их оптические свойства.

ФЕРМИОНЫ. КОРРЕЛЯЦИИ. ПЛАЗМОН. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ.

An influence of many-particle correlations in finite fermionic systems with equal numbers of opposite charge particles on their optical properties is discussed in the article.

FERMIONS. CORRELATIONS. PLASMON. POLARIZABILITY.

В последние десятилетия в мире ведутся интенсивные исследования свойств наноразмерных ферми-систем, содержащих конечное число частиц. Примерами подобных систем являются микроскопические атомные кластеры, в частности кластеры из атомов щелочных металлов, в которых валентные электроны полностью делокализованы по всему объему системы и образуют оболочечную структуру. Обобществленные электроны определяют такие физические свойства подобных систем, как высокая дипольная поляризуемость и наличие гигантских резонансов в их спектрах фотопоглощения [1]. Особенности оптических характеристик конечных систем, в которых свободные электроны движутся в поле ионного ко́ра, хорошо описываются в рамках модели «желе», где положительный остов представляется в виде заряженного фона с некоторой непрерывной функцией распределения [2], причем полная энергия системы зависит от выбора функции распределения плотности заряда остова. Оказалось, что абсолютный минимум полной энер-

гии достигается в рамках оптимизированной желе-модели (ОЖМ) [3–6] при условии локальной электронейтральности системы, когда кулоновские потенциалы электронной и ионной подсистем взаимно компенсируют друг друга. Интересным примером конечных ферми-систем, в которых взаимодействующие частицы полностью делокализованы, являются электрон-позитронные кластеры, возможность существования которых была предсказана в ряде недавних теоретических работ [7–9]. Подобные объекты предположительно могут находиться в связанном состоянии благодаря кулоновским и поляризационным силам притяжения между электронной и позитронной подсистемами и, таким образом, принципиально отличаются от недавно обнаруженной экспериментально [10] молекулы дипозитрония, в которой две электрон-позитронных пары (атомы позитрония) связаны между собой ван-дер-ваальсовым взаимодействием [11, 12]. В электрон-позитронной «капле» подсистемы электронов и позитронов движутся в совместно создаваемом самосогла-



сованном поле, сохраняя всю систему в целом электронейтральной. Если исходить из полной симметрии капли относительно положительно и отрицательно заряженных частиц, то их плотности должны быть по абсолютной величине равны друг другу во всем объеме. При этом, как было продемонстрировано в работах [7–9], оптимальное распределение плотности обеих подсистем, обеспечивающее абсолютный минимум полной энергии, соответствует оптимизированной желе-модели. Однако, в отличие от ситуации с металлическими кластерами, ионный остов которых при описании их физических свойств в рамках модели желе считается неподвижным, в электрон-позитронных системах квантованным оказывается движение как электронов, так и позитронов.

Характерные свойства металлических кластеров, в частности наличие плазмонных резонансов в спектре возбужденных состояний [1], высокая поляризуемость и непосредственно связанная с ней способность к образованию отрицательных ионов [6], проявляются благодаря корреляциям в системе делокализованных валентных электронов. Определенное сходство между микроскопическими кластерами щелочных металлов и наноразмерными электрон-позитронными каплями, обусловленное наличием свободно движущихся фермионов, дает основания полагать, что в системах, образованных из электронов и позитронов, коллективные многочастичные эффекты также будут играть заметную роль.

Цель данной работы – исследование влияния корреляционных эффектов на оптические свойства электрон-позитронных кластеров. В рамках поставленной задачи было выведено уравнение, описывающее возбужденные состояния системы, состоящей из фермионов противоположного знака, в приближении случайных фаз с обменом (ПФСО). На основании предложенной теоретической модели были вычислены статические дипольные поляризуемости для ряда наиболее стабильных систем, содержащих «магические» числа частиц обоих типов, а также исследованы спектры возбужденных состояний в окрестности предполагаемого дипольного резонанса. Основное внимание уделялось исследованию влияния взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами на

оптические свойства кластеров, в связи с чем был проведен сравнительный анализ результатов расчетов, полученных в рамках оптимизированной желе-модели с учетом движения позитронов и при «замороженном» распределении положительного заряда. Следует отметить, что в рамках данной работы не принимались во внимание процессы, связанные с возможным аннигиляционным распадом кластеров, и время жизни исследуемых подсистем предполагалось большим, чем характерный период колебаний коллективных дипольных возбуждений [1].

В статье использовалась атомная система единиц: $\hbar = |e| = m_e = 1$.

Теоретический подход

Рассмотрим систему взаимодействующих фермионов, содержащую равное количество частиц положительного и отрицательного заряда, связанных между собой кулоновским полем. Примером такого кластера является электрон-позитронная капля, содержащая по N частиц каждого вида, то есть система, состоящая из отрицательно и положительно заряженных фермионов с одинаковыми массами $m_e = m_p = m = 1$. Полная волновая функция основного состояния подобной системы, описываемой полным гамильтонианом \hat{H}_0 с потенциалом парного межчастичного взаимодействия

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N -\frac{\Delta_i}{2} - \sum_{a=1}^N \frac{\Delta_a}{2} + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i^{(e)} - \mathbf{r}_j^{(e)}) + \sum_{a \neq b} V(\mathbf{r}_a^{(p)} - \mathbf{r}_b^{(p)}) + \sum_{i,a} V(\mathbf{r}_i^{(e)} - \mathbf{r}_a^{(p)}), \quad (1)$$

может быть представлена в виде произведения

$$\Xi(\mathbf{r}_1^{(e)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(e)}, \mathbf{r}_1^{(p)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(p)}) = \Psi^{(e)}(\mathbf{r}_1^{(e)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(e)}) \Phi^{(p)}(\mathbf{r}_1^{(p)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(p)}). \quad (2)$$

При этом выполняются условия нормировки

$$\langle \Psi^{(e)} | \Psi^{(e)} \rangle = \langle \Phi^{(p)} | \Phi^{(p)} \rangle = 1.$$

Здесь и далее индексы i, j обозначают заполненные, индексы m, n – незаполненные

(виртуальные) одночастичные состояния, а $\mathbf{r}^{(e)}$, $\mathbf{r}^{(p)}$ – электронные и позитронные координаты, соответственно.

В приближении Хартри–Фока многочастичные функции представляются в виде детерминантов

$$\begin{aligned} \Psi^{(e)} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_1(\mathbf{r}_1^{(e)}) \times \\ &\times \varphi_2(\mathbf{r}_2^{(e)}) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N^{(e)}); \\ \Phi^{(p)} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_1(\mathbf{r}_1^{(p)}) \times \\ &\times \varphi_2(\mathbf{r}_2^{(p)}) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N^{(p)}), \end{aligned} \quad (3)$$

составленных из одночастичных функций, являющихся собственными функциями системы уравнений Хартри–Фока:

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta_i}{2} \varphi_i(\mathbf{r}) + U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) - U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) + \\ + U_{\text{ex}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^{(e)} \varphi_i(\mathbf{r}); \\ -\frac{\Delta_a}{2} \varphi_a(\mathbf{r}) + U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) - U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) + \\ + U_{\text{ex}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) = \varepsilon_a^{(p)} \varphi_a(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4)$$

где $U_{\text{H}}^{(e)}$, $U_{\text{H}}^{(p)}$ – соответствующие хартриевские потенциалы. В случае системы, имеющей заполненные оболочки, они выражаются как

$$\begin{aligned} U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_j^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'; \\ U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_b^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_b^*(\mathbf{r}') \varphi_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (5)$$

а $U_{\text{ex}}^{(e)}$, $U_{\text{ex}}^{(p)}$ – нелокальные обменные потенциалы:

$$\begin{aligned} U_{\text{ex}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) &= - \sum_j^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \varphi_j(\mathbf{r}); \\ U_{\text{ex}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) &= - \sum_b^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_b^*(\mathbf{r}') \varphi_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \varphi_b(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (6)$$

При этом в рассматриваемом случае системы, обладающей центральной симметрией,

одночастичные волновые функции могут быть представлены в виде произведения радиальной, угловой и спиновой составляющих:

$$\varphi(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\mu}(\sigma) \quad (7)$$

и характеризуются набором квантовых чисел n, l, m, μ [13].

В рамках оптимизированной желе-модели [3], обеспечивающей абсолютный минимум полной энергии системы, в случае равенства масс $m_e = m_p = m$ взаимодействующих частиц хартриевские потенциалы удовлетворяют условию локальной эквипотенциальности

$$U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) = U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

в сочетании с условием локальной электронейтральности системы:

$$\rho^{(e)}(\mathbf{r}) + \rho^{(p)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \rho^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i^{\text{occ}} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}); \\ \rho^{(p)}(\mathbf{r}) &= -2 \sum_a^{\text{occ}} \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (10)$$

Выбор знаков электронной и позитронной плотностей в формулах (10) сделан условно и на конечный результат влияния не оказывает.

Таким образом, при выполнении условий (8), (9) уравнения (4) имеют одинаковые наборы одночастичных волновых функций и энергий для обеих подсистем. Уравнения (4) с учетом (8) и условия ортонормированности и идентичности одночастичных функций в рамках модели ОЖМ также могут быть переписаны в матричном виде:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle + \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha i | | \beta i \rangle - 2 \sum_a^{\text{occ}} \langle \alpha a | | \beta a \rangle = \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle - \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha \beta | ii \rangle = \delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{(e)}; \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle + \sum_a^{\text{occ}} \langle \alpha a | | \beta a \rangle - 2 \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha i | | \beta i \rangle = \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle - \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha \beta | aa \rangle = \delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{(p)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь и далее по тексту индексы $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ обозначают как заполненные, так и виртуальные состояния электронной и позитронной подсистем.

Матричные элементы

$$\langle \alpha\beta || \gamma\delta \rangle = 2\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\gamma | \beta\delta \rangle$$

межчастичного взаимодействия состоят из «прямой» (хартриевской) и обменной (фоковской) компонент, множитель 2 учитывает суммирование по проекции спина в хартриевском члене, $\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle$ – кулоновский матричный элемент;

$$\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle = \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\gamma} \delta_{\sigma_\beta \sigma_\delta} \iint dr dr' \frac{\varphi_\alpha^*(r) \varphi_\gamma(r) \varphi_\beta(r') \varphi_\delta^*(r')}{|r-r'|}, \quad (12)$$

а индексы $\sigma_\alpha, \sigma_\beta, \sigma_\gamma, \sigma_\delta$ обозначают проекции спина соответствующих одночастичных состояний.

Уравнения, описывающие оптический отклик рассматриваемой системы, могут быть получены в рамках метода слабого внешнего возмущения [14, 15]. Рассмотрим малое внешнее возмущение в виде $\delta U = \mathbf{E}(t)\mathbf{r}$, в линейном режиме вызывающее изменение одночастичных функций системы (3):

$$\begin{aligned} \varphi_i(\mathbf{r}, t) &= a_i(t) \left(\varphi_i(\mathbf{r}) + \sum_m C_{im}(t) \varphi_m(\mathbf{r}) \right); \\ \phi_a(\mathbf{r}, t) &= b_a(t) \left(\phi_a(\mathbf{r}) + \sum_s D_{as}(t) \phi_s(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} a_i(t) &= \left(1 + \sum_m |C_{im}(t)|^2 \right)^{-1/2}, \\ b_a(t) &= \left(1 + \sum_s |D_{as}(t)|^2 \right)^{-1/2} \end{aligned}$$

– нормировочные множители.

Здесь и далее индексы i, j, a, b соответствуют заполненным, а m, n, s, t – незаполненным (виртуальным) одночастичным состояниям.

Отклонения электронной и позитронной плотности от равновесного распределения (10), возникающие под действием возмущения, могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i^{occ} \delta \left(\varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) \right) = \\ &= 2 \left(\sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \sum_m C_{im} \varphi_m(\mathbf{r}) + \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \sum_m C_{im}^* \varphi_m^*(\mathbf{r}) \right); \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(p)}(\mathbf{r}) &= -2 \sum_a^{occ} \delta \left(\phi_a^*(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r}) \right) = \\ &= -2 \left(\sum_a \phi_a^*(\mathbf{r}) \sum_s D_{as} \phi_s(\mathbf{r}) + \sum_a \phi_a(\mathbf{r}) \sum_s D_{as}^* \phi_s^*(\mathbf{r}) \right). \end{aligned}$$

Изменяющаяся во времени полная волновая функция (2) удовлетворяет уравнению

$$\langle \Xi^*(t) | \widehat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} | \Xi(t) \rangle = 0, \quad (15)$$

где $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \delta U$.

В приближении слабого внешнего поля, сохраняя только первые неисчезающие члены разложения по коэффициентам $C_{im}(t)$, $D_{as}(t)$, после суммирования по спиновым переменным из уравнения (15) получим:

$$\begin{aligned} & i \sum_{im} C_{im}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} C_{im}(t) + i \sum_{as} D_{as}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} D_{as}(t) = \\ &= \sum_{im} |C_{im}|^2 \left(\varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \sum_{as} |D_{as}|^2 \left(\varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{im, jn} \left(C_{im}^* C_{jn}^* \langle jm || ni \rangle + C_{im} C_{jn} \langle ji || nm \rangle + \right. \\ &+ \left. C_{im}^* C_{jn} \langle nm || ji \rangle + C_{im} C_{jn} \langle ni || jm \rangle \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{as, bt} \left(D_{as}^* D_{bt}^* \langle bs || ta \rangle + D_{as} D_{bt} \langle ba || ts \rangle + \right. \\ &+ \left. D_{as}^* D_{bt} \langle ts || ba \rangle + D_{as} D_{bt} \langle ta || bs \rangle \right) + \\ &+ \sum_{im, as} \left(2C_{im}^* D_{as}^* \langle am | si \rangle + 2C_{im} D_{as} \langle ai | sm \rangle + \right. \\ &+ \left. 2C_{im}^* D_{as} \langle sm | ai \rangle + 2C_{im} D_{as} \langle si | am \rangle \right) + \\ &+ \sum_{im} \left(C_{im}^* \langle m | \delta U | i \rangle + C_{im} \langle i | \delta U | m \rangle \right) + \\ &+ \sum_{as} \left(D_{as}^* \langle s | \delta U | a \rangle + D_{as} \langle a | \delta U | s \rangle \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Варьируя равенство (16) по независимым коэффициентам $C_{im}^*(t)$ и $D_{as}^*(t)$, опустив при этом слагаемые, которые не изменяются под действием возмущения, и вновь сохраняя толь-

ко первые не исчезающие члены разложения, получаем систему линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} C_{im}(t) &= C_{im} \left(\varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{jn} \left(C_{jn}^* \langle jm || ni \rangle + C_{jn} \langle nm || ji \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{as} \left(2D_{as}^* \langle am || si \rangle + 2D_{as} \langle sm || ai \rangle \right) + \langle m | \delta U | i \rangle; \\
 i \frac{\partial}{\partial t} D_{as}(t) &= D_{as} \left(\varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(D_{bt}^* \langle bs || ta \rangle + D_{bt} \langle ts || ba \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{im} \left(2C_{im}^* \langle am || si \rangle + 2C_{im} \langle ai || sm \rangle \right) + \langle s | \delta U | a \rangle.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Уравнения для $C_{im}^*(t)$ и $D_{as}^*(t)$ могут быть получены аналогично в результате комплексного сопряжения (17):

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} C_{im}^*(t) &= C_{im}^* \left(\varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{jn} \left(C_{jn}^* \langle ji || nm \rangle + C_{jn} \langle ni || jm \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{as} \left(2D_{as}^* \langle ai || sm \rangle + 2D_{as} \langle si || am \rangle \right) + \langle i | \delta U | m \rangle; \\
 i \frac{\partial}{\partial t} D_{as}^*(t) &= D_{as}^* \left(\varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(D_{bt}^* \langle ba || ts \rangle + D_{bt} \langle ta || bs \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{im} \left(2C_{im}^* \langle sm || ai \rangle + 2C_{im} \langle si || am \rangle \right) + \langle a | \delta U | s \rangle.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Полагая возмущение $\delta U(t)$ гармоническим, будем искать решения системы уравнений (17), (18) в форме

$$\begin{aligned}
 C_{im}(t) &= X_{im}^{(e)} \exp(-i\Omega t) + Y_{im}^{*(e)} \exp(i\Omega t); \\
 D_{ab}(t) &= X_{ab}^{(p)} \exp(-i\Omega t) + Y_{ab}^{*(p)} \exp(i\Omega t),
 \end{aligned} \tag{19}$$

где $X_{im}^{(e)}$, $Y_{im}^{(e)}$ ($X_{as}^{(p)}$, $Y_{as}^{(p)}$) – так называемые амплитуды «вперед-во-времени» и «назад-во-времени» для электронной (позитронной) подсистемы.

Комбинируя слагаемые с одинаковыми экспоненциальными множителями, получаем

систему линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов «вперед-» и «назад-во-времени», полагая их действительными и вводя обозначения для частот переходов между одночастичными состояниями:

$$\omega_{im}^{(e)} = \varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)}, \quad \omega_{as}^{(p)} = \varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)}.$$

В отсутствие внешнего поля, то есть при условии $\delta U = 0$, уравнения для собственных частот и колебательных амплитуд системы выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}
 &\sum_{jn} \left(X_{jn}^{(e)} A_{im,jn}^{(e)} + Y_{jn}^{(e)} B_{im,jn}^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(X_{bt}^{(p)} C_{im,bt} + Y_{bt}^{(p)} D_{im,bt} \right) = \Omega X_{im}^{(e)}; \\
 &\sum_{jn} \left(X_{jn}^{(e)} B_{im,jn}^{(e)} + Y_{jn}^{(e)} A_{im,jn}^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(X_{bt}^{(p)} D_{im,bt} + Y_{bt}^{(p)} C_{im,bt} \right) = -\Omega Y_{im}^{(e)}; \\
 &\sum_{jn} \left(X_{jn}^{(e)} C_{as,jn} + Y_{jn}^{(e)} D_{as,jn} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(X_{bt}^{(p)} A_{as,bt}^{(p)} + Y_{bt}^{(p)} B_{as,bt}^{(p)} \right) = \Omega X_{as}^{(p)}; \\
 &\sum_{jn} \left(X_{jn}^{(e)} D_{as,jn} + Y_{jn}^{(e)} C_{as,jn} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left(X_{bt}^{(p)} B_{as,bt}^{(p)} + Y_{bt}^{(p)} A_{as,bt}^{(p)} \right) = -\Omega Y_{as}^{(p)},
 \end{aligned} \tag{20}$$

где элементы эрмитовых матриц **A**, **B**, **C**, **D** в предположении того, что кулоновские матричные элементы (12) от одночастичных функций, полученных в результате решения уравнений (4), являются действительными, записываются как

$$\begin{aligned}
 A_{im,jn}^{(e)} &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle nm || ji \rangle = \\
 &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle ji || nm \rangle; \\
 B_{im,jn}^{(e)} &= \langle jm || ni \rangle = \langle ni || jm \rangle; \\
 A_{as,bt}^{(p)} &= \delta_{ab} \delta_{st} \omega_{as}^{(p)} + \langle ts || ba \rangle = \\
 &= \delta_{ab} \delta_{st} \omega_{as}^{(p)} + \langle ba || ts \rangle; \\
 B_{as,bt}^{(p)} &= \langle bs || ta \rangle = \langle ta || bs \rangle; \\
 C_{im,as} &= 2 \langle ai || sm \rangle = 2 \langle sm || ai \rangle; \\
 D_{im,as} &= 2 \langle am || si \rangle = 2 \langle si || am \rangle.
 \end{aligned} \tag{21}$$

В матричном виде система уравнений (20) может быть переписана в виде задачи на собственные числа, имеющей $2(N_{eh} + N_{ph})$ независимых решений, где будем полагать, что $N_{eh} = N_{ph}$ – число учитываемых одночастичных электрон-дырочных и позитрон-дырочных пар:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(e)} & \mathbf{B}^{(e)} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{B}^{(e)*} & \mathbf{A}^{(e)*} & \mathbf{D}^* & \mathbf{C}^* \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} & \mathbf{A}^{(p)} & \mathbf{B}^{(p)} \\ \mathbf{D}^* & \mathbf{C}^* & \mathbf{B}^{(p)*} & \mathbf{A}^{(p)*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(e)} \\ \mathbf{Y}^{(e)} \\ \mathbf{X}^{(p)} \\ \mathbf{Y}^{(p)} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(e)} \\ -\mathbf{Y}^{(e)} \\ \mathbf{X}^{(p)} \\ -\mathbf{Y}^{(p)} \end{pmatrix} \quad (22)$$

При этом из симметрии уравнения (22) следует, что для каждого собственного числа Ω_v с соответствующим собственным вектором $(\mathbf{X}_v^{(e)}, \mathbf{Y}_v^{(e)}, \mathbf{X}_v^{(p)}, \mathbf{Y}_v^{(p)})$ существует парное ему решение $-\Omega_v$, $(\mathbf{Y}_v^{(e)}, \mathbf{X}_v^{(e)}, \mathbf{Y}_v^{(p)}, \mathbf{X}_v^{(p)})$, в силу чего имеет смысл рассматривать только $(N_{eh} + N_{ph})$ решений с положительными собственными числами.

Следует отметить, что уравнение (22) с матрицей размера

$$2(N_{eh} + N_{ph}) \times 2(N_{eh} + N_{ph})$$

имеет общий характер и может быть использовано при описании собственных колебательных мод системы, состоящей из двух взаимодействующих фермионных подсистем, причем необязательно состоящих из частиц одинаковой массы и не только в рамках модели ОЖМ.

В случае если одна из подсистем, например позитронная, оказывается «замороженной» по отношению к малому возмущению, то есть $\delta\rho^{(p)}(\mathbf{r}) = 0$, уравнение (22) приобретает вид стандартного уравнения ПСФО [15, 16]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ -\mathbf{Y} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Элементы собственных векторов матрицы уравнения (22) удовлетворяют условиям ортонормированности:

$$\begin{aligned} \sum_{mi} (X_{mi}^v X_{mi}^\mu - Y_{mi}^\mu Y_{mi}^v) &= \delta_{v\mu}; \\ \sum_v (X_{mi}^{v*} X_{nj}^v - Y_{mi}^{v*} Y_{nj}^v) &= \delta_{mn} \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (24)$$

где v – индекс собственного вектора уравнения (25), соответствующего собственному числу Ω_v , равному частоте перехода из основного в v -е многочастичное возбужденное состояние системы.

Для системы, состоящей из равного числа частиц противоположного заряда и одинаковой массы, примером которой является электрон-позитронная «капля», в рамках модели ОЖМ из соображений симметрии между подсистемами, а также исходя из условий (8), (10) и эквивалентности решений уравнений (4) для обеих подсистем, следует искать решение уравнения (22) при дополнительном требовании для матриц, входящих в уравнение

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^{(e)} &= \mathbf{X}^{(p)}, \\ \mathbf{Y}^{(e)} &= \mathbf{Y}^{(p)}, \\ \mathbf{A}^{(e)} &= \mathbf{A}^{(p)}, \\ \mathbf{B}^{(e)} &= \mathbf{B}^{(p)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Данное условие позволяет преобразовать уравнение (22) к эквивалентной форме с матрицей того же размера $2N_{eh} \times 2N_{eh}$, что и у уравнения (23):

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}} & \tilde{\mathbf{B}} \\ \tilde{\mathbf{B}}^* & \tilde{\mathbf{A}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ -\mathbf{Y} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{im,jn} &= A_{im,jn} + C_{im,jn} = \\ &= \omega_{im} \delta_{ij} \delta_{mn} + 4 \langle nm | ij \rangle - \langle ni | mj \rangle; \\ \tilde{B}_{im,jn} &= B_{im,jn} + D_{im,jn} = \\ &= 4 \langle jm | ni \rangle - \langle in | mi \rangle, \end{aligned} \quad (27)$$

а собственные векторы по-прежнему удовлетворяют условиям (24).

Статическая дипольная поляризуемость электронейтральной электрон-позитронной капли может быть представлена в виде суммы равных по величине поляризуемостей электронной и позитронной подсистем:

$$\alpha^{(e+p)} = \alpha^{(e)} + \alpha^{(p)} = 2\alpha^{(e)}. \quad (28)$$

При этом ее значение каждой из подсистем, составляющих кластер, может быть вычислено следующим образом [15]:

$$\alpha^{(e)} = \sum_{\nu} \frac{f_{\nu}}{\Omega_{\nu}^2}. \quad (29)$$

Здесь суммирование проводится по всем возбужденным состояниям системы, а f_{ν} – сила осциллятора дипольного перехода между основным и ν -м многочастичным возбужденным состоянием, частота которого Ω_{ν} определяется в результате решения уравнения (25):

$$f_{\nu} = \frac{4}{3} \Omega_{\nu} D_{\nu}^2. \quad (30)$$

Матричные элементы D_{ν} , в свою очередь, вычисляются путем суммирования по всем одночастичным возбуждениям:

$$D_{\nu} = \sum_{im} (X_{im}^{\nu} d_{im} + Y_{im}^{\nu} d_{mi}), \quad (31)$$

где d_{im} – одночастичные дипольные амплитуды [15]:

$$d_{im} = \int P_{n,l_i}(r) r P_{n,l_m}(r) dr, \dots, l_m = l_i \pm 1. \quad (32)$$

Результаты расчетов и обсуждение

В результате проведенных численных расчетов были получены распределения сил осцилляторов f_{ν} (29) для спектров фотопоглощения и статические дипольные поляризуемости $\alpha^{(e+p)}$ (28) электрон-позитронных кластеров, содержащих различное число частиц. Одночастичные волновые функции и энергии, необходимые для вычисления матричных элементов (27), были получены путем численного решения уравнений Хартри-Фока (4) при соблюдении дополнительных условий (8), (9). Следует отметить, что практический расчет радиальных компонент всех волновых функций проводился с использованием нулевых граничных условий для некоторого конечного радиуса R_{\max} . Таким образом, состояния как дискретной, так и непрерывной (выше потенциала ионизации) областей спектра были представлены в виде набора дискретных базисных функций.

Амплитуды X_{im}^{ν} , Y_{im}^{ν} , а также энергии многочастичных возбужденных состояний Ω_{ν} , необходимые для расчета оптических характеристик исследуемых систем, в свою очередь,

были получены в результате численного решения матричного уравнения (25). Поскольку одной из основных целей работы являлось исследование влияния корреляционного взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами на оптические характеристики всей системы, для сравнения были проведены аналогичные расчеты спектров фотопоглощения и статических дипольных поляризуемостей $\alpha^{(e0)}$ для кластеров, у которых распределение плотности положительного (позитронного) заряда в процессе возбуждения оставалось «замороженным» (FCM – Frozen Core Model). Для этого амплитуды «вперед-» и «назад-во-времени», а также частоты Ω_{ν} определялись из уравнения (23), матричные элементы которого вычислялись с использованием того же набора хартри-фоковских одночастичных функций, что и для уравнения (26).

На рис. 1 представлены результаты расчетов спектров фотопоглощения электронейтральных электрон-позитронных капель, содержащих различное число частиц. Обращает на себя внимание присутствующая в спектрах кластеров с $N=2$ (рис. 1,а) и $N=8$ (рис. 1,б) доминирующая линия, соответствующая гигантскому дипольному резонансу (поверхностному плазмону), что также является отличительной особенностью спектров фотопоглощения металлических кластеров [1], валентные электроны которых делокализованы по всему объему системы. При этом, как видно из рис. 1,а,б, взаимодействие между электронной и позитронной системами при дипольном возбуждении уже при малых значениях N приводит к заметному уменьшению силы осциллятора плазмонного резонанса по сравнению с резонансной линией в поле «замороженного» остова (FCM) и смещением плазмонной частоты в сторону более высоких энергий. Дальнейший рост числа частиц в кластере, как показано на рис. 1,в,г, сопровождается снижением силы осциллятора дипольного резонанса как по отношению к остальной части спектра, так и по отношению к ее значению, соответствующему «замороженному» распределению положительного заряда.

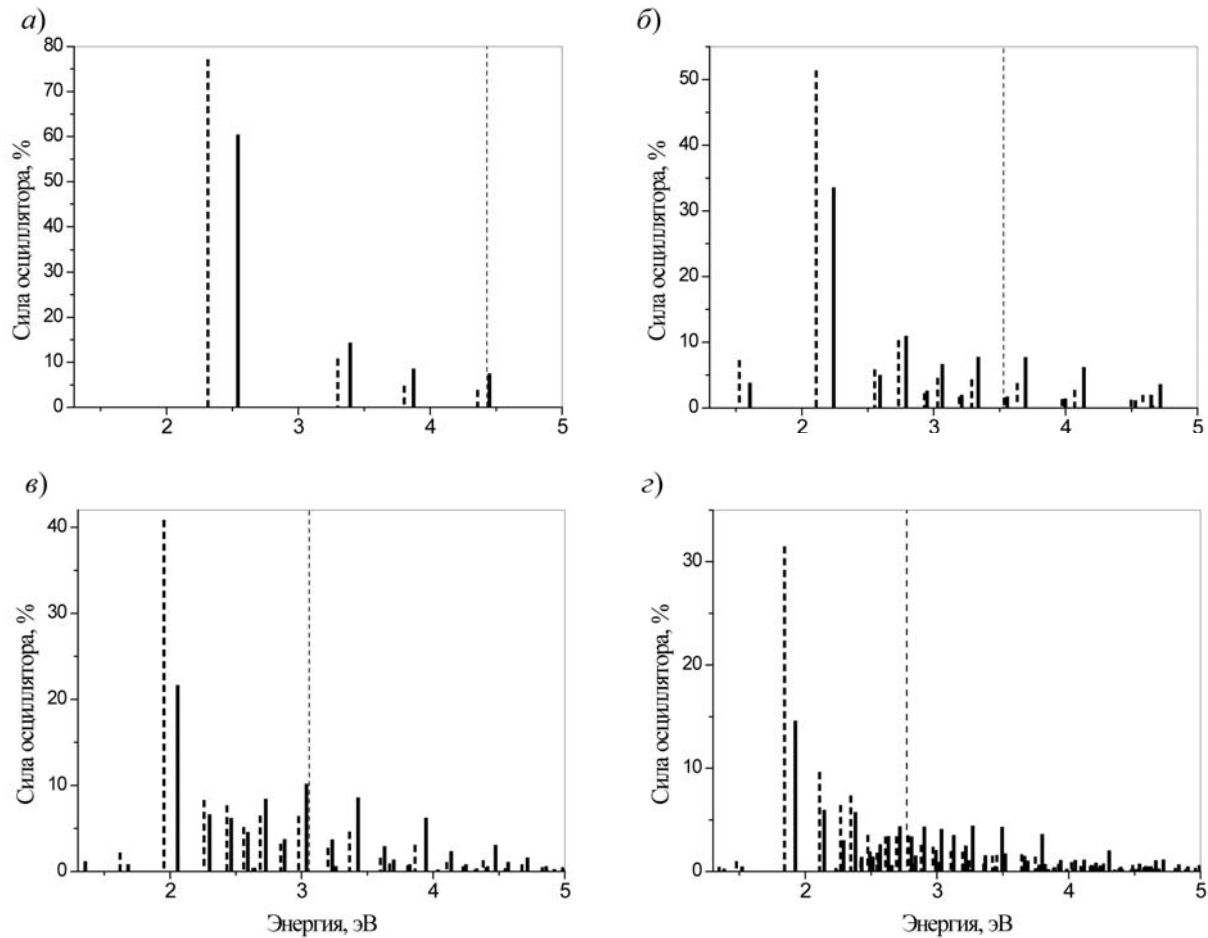


Рис. 1. Спектры дипольных возбуждений электрон-позитронных кластеров (сплошные линии), содержащих 2 (а), 8 (б), 20 (в) и 40 (г) частиц каждого вида. Жирными пунктирами показаны результаты расчетов в поле «замороженного остова» (FCM), тонкими пунктирами – положения потенциала ионизации системы

Зависимость расчетных параметров электрон-позитронных кластеров от числа частиц N в системе

N	IP , эВ	$\sum_{\Omega_v < IP} f_v^{(e0)}, \%$	$\sum_{\Omega_v < IP} f_v^{(e+p)}, \%$	$\alpha^{(e+p)}$, ат.ед.	$\alpha^{(e0)}$, ат.ед.	$\alpha^{(e+p)}/\alpha^{(e0)}$
2	4,429	95,4	82,3	348	236	1,47
8	3,534	86,0	70,4	1598	1116	1,43
18	3,067	85,0	51,4	3504	2456	1,43
20	3,058	81,2	61,9	4092	2894	1,42
34	2,770	73,5	41,8	6450	4561	1,42
40	2,772	71,1	44,5	8260	5898	1,41
58	2,567	60,0	26,3	10768	7685	1,41
92	2,421	51,9	15,1	16864	12120	1,40

Обозначения: IP – потенциал ионизации; $\Sigma \dots, \Sigma \dots$ – процентные доли сил осцилляторов, приходящихся на область энергий ниже IP ; $\alpha^{(e+p)}, \alpha^{(e0)}$ – статические дипольные поляризуемости.

Примечание. Расчеты проводились как с учетом взаимодействия между подсистемами ($e+p$), так и в поле «замороженного» положительного остова ($e0$).

При этом, как видно из таблицы, по мере роста числа частиц в системе заметно уменьшается доля сил осцилляторов, приходящаяся на дискретную область спектра с энергиями переходов ниже потенциала ионизации IP . В случае «замороженного» остова уменьшение относительной доли дискретного спектра может быть объяснено снижением потенциала ионизации системы по мере увеличения числа частиц, что приводит к более интенсивному взаимодействию плазмонной моды с возбужденными состояниями из области непрерывного спектра и фрагментации резонансной линии.

Как видно из представленных на рис. 1, в, г спектров дипольных возбуждений, при увеличении числа частиц в кластере включение взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами практически приводит к полному распаду плазмонной моды в дискретной области спектра, что проявляется также в существенном снижении доли сил осцилляторов в этой области энергий по сравнению с результатами, полученными в рамках модели РСМ. Подобное перераспределение сил осцилляторов из дискретной области в непрерывный спектр может быть связано с тем, что по мере увеличения размеров системы распределение плотности заряда по объему становится более равномерным. С ростом N кластер по своим оптическим свойствам приближается к однородной электрон-позитронной плазме, для которой выполняется асимптотическое соотношение для частоты плазменных колебаний [17]:

$$\Omega_{pl}^{(e+p)} = \sqrt{2}\Omega_{pl}^{(e0)},$$

где $\Omega_{pl}^{(e+p)}$, $\Omega_{pl}^{(e0)}$ — соответственно, частоты с учетом динамического взаимодействия между электронной и позитронной системами и в поле «замороженного» положительного заряда.

С другой стороны, как было показано в работах [18, 19], в системах конечного размера многочастичные корреляции приводят к систематическому сдвигу резонансной частоты в область более низких энергий. Таким образом, заметный на рис. 1 сдвиг частоты доминирующего пика вправо по отношению к его положению в системе с «замороженным» остовом, сопровождаемый уменьшением его доли по

отношению к переходам в возбужденные состояния с более высокими энергиями, предположительно является результатом совместного влияния вышеупомянутых факторов.

Помимо изменений в спектрах возбужденных состояний в результате взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами, интерес представляет влияние многочастичных корреляций на поляризуемость системы. В таблице приведены также результаты расчетов статической дипольной поляризуемости электрон-позитронных кластеров различного размера, полученные с учетом взаимодействия между подсистемами $\alpha^{(e+p)}$ и в поле «замороженного» положительного остова $\alpha^{(e0)}$. Включение динамического взаимодействия между электронами и позитронами вызывает увеличение поляризуемости системы $\alpha^{(e+p)}$ (28) по отношению к $\alpha^{(e0)}$. Однако, как видно из таблицы, корреляции между подсистемами приводят к тому, что полная поляризуемость кластера получается существенно меньше суммы поляризуемостей невзаимодействующих систем, т. е.

$$\alpha^{(e+p)} < \alpha^{(e0)} + \alpha^{(p0)} = 2\alpha^{(e0)},$$

а соотношение между их значениями оказывается практически одинаковым для кластеров, содержащих различное число частиц. Интересно отметить, что это соотношение остается практически постоянным независимо от сопутствующих изменений в спектре фотопоглощения.

В настоящей работе исследованы корреляционные эффекты в конечных системах, состоящих из противоположно заряженных фермионов на примере электрон-позитронных кластеров. Выведено уравнение, описывающее спектр многочастичных состояний подобной системы, учитывающее взаимодействие между подсистемами электронов и позитронов в рамках приближения случайных фаз с обменом. На основании предложенной теоретической модели проведены численные расчеты спектров дипольных возбуждений и статической дипольной поляризуемости электронейтральных электрон-позитронных капель, содержащих различное число частиц. Обнаружено, что учет



динамического взаимодействия между подсистемами приводит к заметным изменениям оптических свойств кластеров по сравнению с результатами, полученными в рамках модели, где электроны движутся в поле «замороженного» распределения положительного заряда. Оказалось, что взаимные корреляции вызывают существенный сдвиг частоты резонансной линии в сторону более высоких энергий с последующим смещением максимума фотопоглощения в область непрерывного спектра по мере увеличения числа частиц в кластере. Кроме того, наблюдается значительное уменьшение полной статической дипольной поляризуемости коррелированной системы по сравнению с суммой поляризуемостей электронной и позитронной

подсистем, полученных в рамках модели «замороженного остова». При этом обнаружено, что соотношение между ними остается практически постоянным для кластеров различного размера.

Учитывая существенное влияние корреляционного взаимодействия на оптические свойства конечных фермионных систем, в заключение следует отметить, что дальнейшее изучение многочастичных эффектов может, в частности, помочь решить вопрос о стабильности и времени жизни электрон-позитронных кластеров. Кроме того, исследование подобных объектов само по себе представляет немалый интерес в связи с развитием методов квантовой теории многих тел.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kreibig, U.** Optical properties of metal clusters [Текст]: Springer Series in Materials Science. Vol. 25. / U. Kreibig, M. Vollmer. — Berlin: Springer — Verlag, 1995. — 532 p.
2. **Ivanov, V.K.** Many-body calculations for metallic clusters using the jellium model [Текст] / V.K. Ivanov, A.N. Ipatov // Correlations of clusters and related systems. New perspectives on the many-body problem; ed. J.P. Connerade. — Singapore: World Scientific, 1996. — P. 141 — 167.
3. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для металлических кластеров [Текст] / В.К. Иванов, В.А. Харченко, А.Н. Ипатов, М.Л. Жижин // Письма в ЖЭТФ. — 1994. — Т. 60. — С. 345 — 351.
4. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для металлических кластеров с экранированным кулоновским взаимодействием [Текст] / В.К. Иванов, А.Н. Ипатов, В.А. Харченко // ЖЭТФ. — 1996. — Т. 109. — С. 902 — 916.
5. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для кластеров с экранированным кулоновским взаимодействием [Текст] / В.К. Иванов, А.Н. Ипатов, В.А. Харченко // Известия РАН. Сер. физическая. — 1997. — Т. 61. — С. 1795 — 1807.
6. **Ipatov, A.N.** Many-particle effects in atomic clusters [Текст] / A.N. Ipatov, V.K. Ivanov, B.D. Agar'ev // Physics of clusters; Eds. V.D. Lakhno, G.N. Chuev. — Singapore: World Scientific, 1998. — P. 224 — 273.
7. **Solov'yov, A.V.** Electron-positron quantum droplets [Текст] / A.V. Solov'yov, V.K. Ivanov, R.G. Polozkov // Eur. Phys. J.; D. — 2006. — Vol. 40. — P. 313 — 316.
8. **Иванов, В.К.** К возможности существования электрон-позитронного кластера [Текст] / В.К. Иванов, Р.Г. Полозков, А.В. Соловьев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. — 2007. — № 1 (49). — С. 233 — 238.
9. **Яцышин, П.И.** Структура электрон-позитронных кластеров. Приближение Хартри — Фока [Текст] / П.И. Яцышин, В.К. Иванов, Р.Г. Полозков, А.В. Соловьев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 1 (73). — С. 9 — 16.
10. **Cassidy, D.B.** The production of molecular positronium [Текст] / D.B. Cassidy, A.P. Mills, Jr. // Nature. — 2007. — Vol. 449. — P. 195 — 197.
11. **Kinghorn, D.B.** Nonadiabatic variational calculations on dipositronium using explicitly correlated Gaussian basis functions [Текст] / D.B. Kinghorn, R.D. Poshusta // Phys. Rev. A. — 1993. — Vol. 47. — P. 3671 — 3681.
12. **Yabu, H.** Many positron and positronium interactions [Текст] / H. Yabu // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. — 2004. — Vol. 221. — P. 144 — 148.
13. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика [Текст]: в 10 тт. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Наука, 1989. — 766 с.
14. **Amusia, M.Ya.** Collective effects in photoionization of atoms [Текст] / M.Ya. Amusia // Adv. At. Mol. Phys. — 1981. — Vol. 17. — P. 1 — 121.
15. **Амусья, М.Я.** Атомный фотоэффект [Текст] / М.Я. Амусья. — М.: Наука, 1987. — 272 с.
16. **Амусья, М.Я.** Процессы в многоэлектронных атомах [Текст] / М.Я. Амусья, В.К. Иванов, Н.А. Черепков, Л.В. Чернышева. — М.: Наука, 2006. — 326 с.
17. **Бучельникова, Н.С.** Начальные возмущения и ленгмюровские волны в электрон-позитронной плазме [Текст] / Н.С. Бучельникова, Е.П. Маточкин // Новосибирск: Изд-во ИЯФ, 1992. — 26 с.
18. **Gerchikov, L.G.** Multiple plasmons and anharmonic effects in small metallic clusters [Текст] / L.G. Gerchikov,

C. Guet, A.N. Ipatov // Phys. Rev. A. —2002. — Vol. 66. — P. 053201-1 – 053201-8.

19. **Ипатов, А.Н.** Нелинейное резонансное фотопоглощение металлическими кластерами в

сильном лазерном поле [Текст] /А.Н. Ипатов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 1 (73). — С. 17 – 27.

ИПАТОВ Андрей Николаевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
andrei_ipatov@mail.ru



ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

УДК 535.8

*В.Ф. Быковский, С.И. Мольков,
В.А. Степанов, В.С. Хилов, С.И. Хилов*

МОЩНЫЙ ИСТОЧНИК КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОЙ ГОЛОГРАФИИ И РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

*V.F. Bykovsky¹, S.I. Molkov²,
V.A. Stepanov³, V.S. Khilov⁴, S.I. Khilov⁵*

^{1, 4, 5} LaserVarioRakurs, CJSC,
5/25-a Yablochkova pass., Ryazan, 390023, Russia.

² Karelian State Pedagogical Academy,

17 Pushkinskaya St., Petrozavodsk, 185680, Russia

³ Ryazan State University named for S.A. Esenin,
46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russia.

HIGH POWER COHERENT LIGHT RADIATION SOURCE FOR OPTICAL HOLOGRAPHY AND RAMAN SPECTROSCOPY

Рассмотрена задача создания мощного источника когерентного излучения для оптической голографии на основе одночастотного аргонового лазера. Определены условия получения одночастотной генерации для однородно уширенной спектральной линии в газоразрядных лазерах с протяженными резонаторами. Показана возможность реализации такого одночастотного аргонового лазера с излучением в сине-зеленой области спектра.

КОГЕРЕНТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ОДНОЧАСТОТНЫЙ РЕЖИМ. ГЕНЕРАЦИЯ. ЛАЗЕР. РЕЗОНАТОР. СЕЛЕКТОР ЧАСТОТЫ. ИНТЕРФЕРОМЕТР. ОДНОРОДНОЕ УШИРЕНИЕ. ГАЗОВЫЙ РАЗРЯД. АКТИВНЫЙ ЭЛЕМЕНТ.

The problem of development of a high power coherent light radiation source for optical holography based on single frequency argon laser has been reviewed.

The conditions for obtaining single-frequency generation for a homogeneously broadened spectral line in the gas-discharge lasers with long resonators were determined. The possibility of realization of the single-frequency argon laser emitting in the blue-green range of the spectrum was demonstrated.

COHERENT RADIATION. SINGLE FREQUENCY MODE. OSCILLATION. LASER. RESONATOR. FREQUENCY SELECTOR. INTERFEROMETER. HOMOGENEOUS BROADENING. GAS DISCHARGE. LASER TUBE.

Необходимость создания надежного мощного источника когерентного излучения для рамановской спектроскопии и производства

голографических оптических элементов определяет актуальность данной работы. В качестве такого источника излучения может служить си-

не-зеленый аргоновый ионный лазер непрерывного действия при обеспечении одночастотного режима в его работе.

Одночастотная генерация

Указанная генерация при однородном уширении реализуется в газоразрядных лазерах на частоте, соответствующей максимуму усиления, а при неоднородном – когда в пределы контура усиления попадает одна собственная частота резонатора. Для получения одночастотной генерации, когда в пределы контура усиления попадает несколько продольных частот, необходимо использовать селективный элемент, например интерферометр Фабри – Перо. Если генерация происходит на приведенной частоте y_m , то для интенсивностей прямой и обратной волн $I^\pm(y)$ на приведенной частоте y имеем:

$$I^\pm(y) = I_m^\pm \delta(y_m - y), \quad (1)$$

где I_m^\pm – интенсивности прямой и обратной волн; $\delta(y_m - y)$ – дельта-функция Дирака; $y = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_0}$ – приведенная частота; ν_0 – центральная частота линии; $\Delta\nu_0$ – величина, связанная с шириной доплеровской линии $\Delta\nu_D$ соотношением

$$\Delta\nu_D = 2\sqrt{\ln 2} \Delta\nu_0.$$

Тогда, используя результаты работы [1], для спектральной плотности вероятности индуцированного перехода $W(x)$ на приведенной частоте x получаем:

$$W(x) = \frac{\sigma_{ab} I_m}{2h\nu_0} [F(y_m - x) + F(y_m + x)], \quad (2)$$

где

$$F(y_m - x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{(y - x)^2 + a^2}$$

– нормированная на единицу дисперсионная функция ($a = \Delta\nu_L / 2\Delta\nu_0$ – приведенная ширина лоренцевской линии $\Delta\nu_L$; $\sigma_{ab} = \lambda^2 A_{ab} / 8\pi\Delta\nu_0$ – радиационное сечение перехода $a \rightarrow b$ (λ , A_{ab} – длина волны и коэффициент Эйнштейна). Также учтено, что при малых потерях $I_m^+ \approx I_m^-$,

и введена интенсивность внутрирезонаторного излучения $I_m = I_m^+ + I_m^-$.

Однородная лоренцевская ширина линии $\Delta\nu_L$ определяется упругими столкновениями, нарушающими когерентность взаимодействия частиц с полем, и конечностью времен жизни лазерных уровней τ_a, τ_b . Дополнительное уширение обусловлено индуцированными переходами [2], которые описываются спектральными плотностями вероятности W_{ab} и W_{ba} . Если ν_β – частота упругих столкновений, вызывающих нарушение когерентности взаимодействия частиц с полем, то

$$\begin{aligned} \Delta\nu_L &= \frac{1}{2\pi} \left[2 \sum_{\beta} \nu_{\beta} + \frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_b} + W_{ab} + W_{ba} \right] = \\ &= \Delta\nu_{L0} + \frac{g_a + g_b}{2\pi g_b} W, \end{aligned} \quad (3)$$

где суммирование ведется по всем β -компонентам плазмы, включая и столкновения с частицами собственного газа; $\Delta\nu_{L0}$ – лоренцевская ширина линии при отсутствии генерации;

$$W(x) = W_{ab} = \frac{g_a}{g_b} W_{ba},$$

g_a, g_b – статистические веса лазерных уровней.

Поскольку величина $W(x)$ зависит от x , или от частоты ν , то будут зависеть от частоты как величина $\Delta\nu_L$, так и приведенная ширина лоренцевской линии a . Переходя в выражении (3) для величин $\Delta\nu_L, \Delta\nu_{L0}$ к нормированным величинам $a = \Delta\nu_L / 2\Delta\nu_0, a_1 = \Delta\nu_{L0} / 2\Delta\nu_0$ и, используя формулу (2), получаем:

$$\frac{a}{a_1} = 1 + P_1 \frac{\pi a_1}{2} [F(y_m - x) + F(y_m + x)], \quad (4)$$

где P_1 – нормированная интенсивность, характеризующая отклонение контура линии от простой дисперсионной формы:

$$P_1 = \frac{g_a + g_b}{g_b} \frac{\lambda^2 A_{ab} I_m}{8\pi^3 h\nu_0 \Delta\nu_{L0}^2}. \quad (5)$$

Выражение (4) представляет собой уравнение, связывающее однородную ширину линии при генерации $a/a_1 = \Delta\nu_L / \Delta\nu_{L0}$ с частотами

$$x / 2a_1 = (\nu - \nu_0) / \Delta\nu_{L0}; \quad y_m / 2a_1 = (\nu_m - \nu_0) / \Delta\nu_{L0},$$

где ν_m – частота генерации.

На рис. 1 приведены рассчитанные с помощью уравнения (4) зависимости нормированной ширины лоренцевской линии a/a_1 от частоты $x/2a_1$ при различных значениях частоты генерации $y_m/2a_1$ и двух значениях параметра P_1 . Видно, что дополнительное уширение излучением играет большую роль в процессах в ионных аргоновых лазерах на сильноточном разряде ($P_1 \approx 100$) и в гелий-неоновых лазерах ($P_1 \approx 10$). В обоих типах лазеров уширение линий неоднородное, но в разной степени. Без дополнительного уширения излучением $a = a_1 = \text{const}$. Поэтому его учет необходим.

Коэффициент усиления и условия для селекции частоты излучения лазера

Коэффициент усиления газового лазера для прямой и обратной волн генерации на приведенной частоте y определяется выражением [2]:

$$g^\pm(y) = \sigma_{ab} \int_{-\infty}^{\infty} F(y \mp x) \Delta N(x) dx, \quad (6)$$

где F – нормированная дисперсионная функция, определяемая из выражения (2), а $\Delta N(x)$ – спектральная плотность инверсии заселенностей на приведенной частоте x , которая для стационарного режима работы ионного сильноточного аргонового лазера определяется из решений полного управления баланса [1] и имеет вид:

$$\Delta N(x, \mathbf{r}) = \frac{\Delta N_0(x, \mathbf{r})}{1 + W(x, \mathbf{r})T_1}; \quad (7)$$

$$\Delta N_0 = S_a \tau_a^3 \left[1 - \frac{g_a}{g_b} \tau_b \left(\kappa_{ab} + \frac{S_b}{S_a} \frac{1}{\tau_a} \right) + \frac{S_b}{S_a} \kappa_{ba} \tau_b \right] = S_a \tau_a^3 \xi_{ab}; \quad (8)$$

$$T_1 = \tau_{a3} \left[1 - \tau_b \kappa_{ba} + \frac{g_a}{g_b} \tau_b \left(\frac{1}{\tau_a} - \kappa_{ab} \right) \right] = \tau_{a3} \zeta_{ab}, \quad (9)$$

где $\tau_{a3} = \tau_a (1 - \tau_a \tau_b \kappa_{ab} \kappa_{ba})^{-1}$; S_a, S_b – спектральные плотности скоростей заселения верхнего и нижнего лазерных уровней; κ_{ab}, κ_{ba} – частоты столкновительных переходов между уровнями.

Коэффициент усиления на приведенной частоте y при генерации на частоте y_m , согласно формулам (6), (7), (2), определяется выражением

$$g^\pm(y, y_m) = g_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(y \mp x) \exp(-x^2) dx}{1 + P_0 \frac{\pi a_1}{2} [F(y_m - x) + F(y_m + x)]}, \quad (10)$$

где P_0 – нормированная на величину $\pi I_0 a_1$ интенсивность внутрирезонаторного излуче-

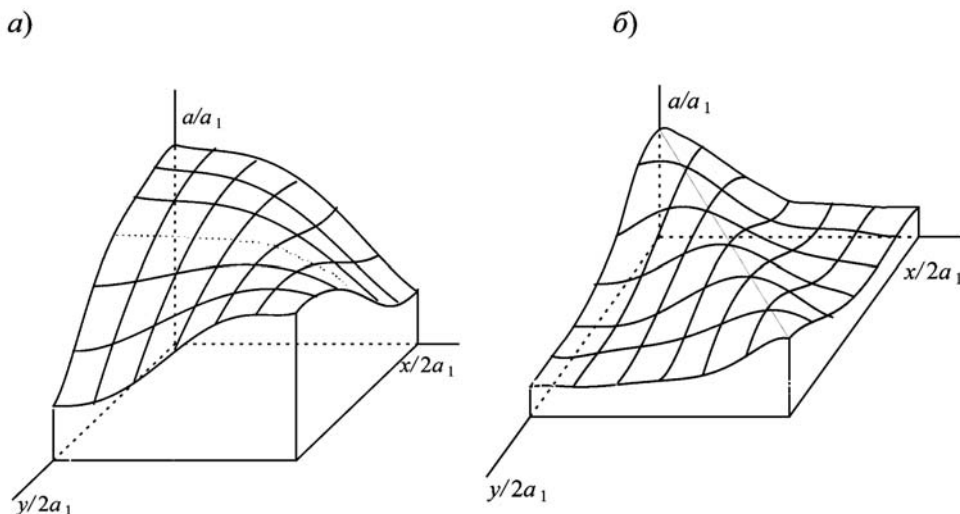


Рис. 1. Зависимость отношения $a/a_1 = \Delta \nu_L / \Delta \nu_{L0}$, характеризующего ширину линии генерации, от частот $x/2a_1$ и $y/2a_1$ при различных значениях нормированной интенсивности линии P_1 : 100 (а) и 10 (б)

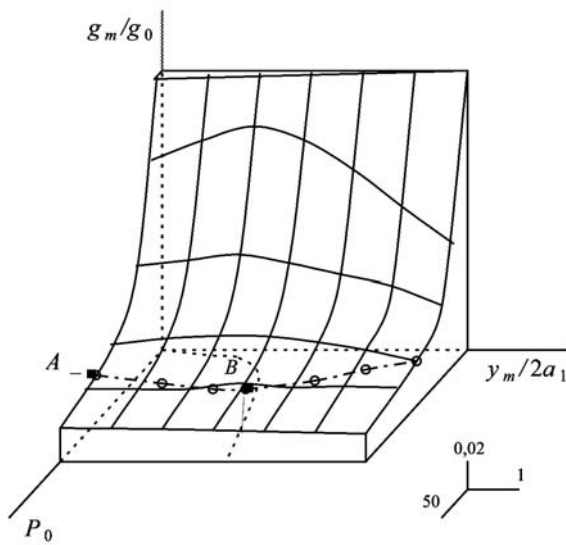


Рис. 2. Зависимость коэффициента усиления g_m/g_0 от расстройки частоты $y_m/2a_1$ и нормированной интенсивности P_0 при значениях $I_1/I_0 = 10$ и $a_1 = 0,1$; а также на горизонтальной плоскости – зависимость от P_0 оптимальной расстройки $(y_m/2a_1)^{opt}$, соответствующей максимальному значению g_m/g_0 . Уровень постоянного усиления $K_{пот}/g_0 = 0,032$

ния; $P_0 = I_m / \pi I_0 a_1$ ($I_0 = hv_0 / \sigma_{ab} \tau_{a3} \zeta_{ab}$); $g_0 = \sigma_{ab} \Delta n_0 / \sqrt{\pi}$ ($\Delta n_0 = S_{a0} \tau_{a3} \xi_{ab}$; величины ζ_{ab} , ξ_{ab} определяются формулами (8), (9), S_{a0} – интегральная плотность скорости заселения верхнего лазерного уровня).

Введем обозначение $g_m = g^\pm(y_m, y_m)$ для коэффициента усиления на частоте генерации

y_m . На рис. 2 приведена зависимость g_m/g_0 , рассчитанная по формуле (10) с использованием уравнения (6), от расстройки частоты

$$y_m/2a_1 = (v_m - v_0)/\Delta v_{L0}$$

и нормированной интенсивности P_0 при $I_1/I_0 = 10$, где

$$I_1 = \frac{2\pi h v_0}{\sigma_{ab}} \frac{g_b}{g_a + g_b} \Delta v_{L0}.$$

На этом же рисунке в горизонтальной плоскости показана зависимость от P_0 оптимальной расстройки $(y_m/2a_1)^{opt}$, соответствующей максимальному значению g_m/g_0 . В стационарном режиме значение I_m устанавливается таким, чтобы g_m было равно коэффициенту потерь $K_{пот}$. Так, в случае генерации с уровнем потерь $K_{пот}/g_0 = 0,032$ при $y_m/2a_1 = 0$, параметр P_0 принимает значение 130 (точка A), а при оптимальной расстройке, когда $y_m/2a_1 = 3,1$, – $P_0 = 150$ (точка B), т. е. внутриврезонаторная мощность на 13 % выше.

На рис. 3 представлены полученные с помощью выражения (10) зависимости g^\pm/g_0 от $y/2a_1$ при различных значениях расстройки $y_m/2a_1$. Видно, что наиболее узкий провал в контуре усиления наблюдается при нулевой расстройке. Если кривая потерь $K_{пот}(y)$ в селективном резонаторе оказывается уже провала в контуре усиления при $y_m = 0$, то это служит гарантией одночастотной генерации при любой расстрой-

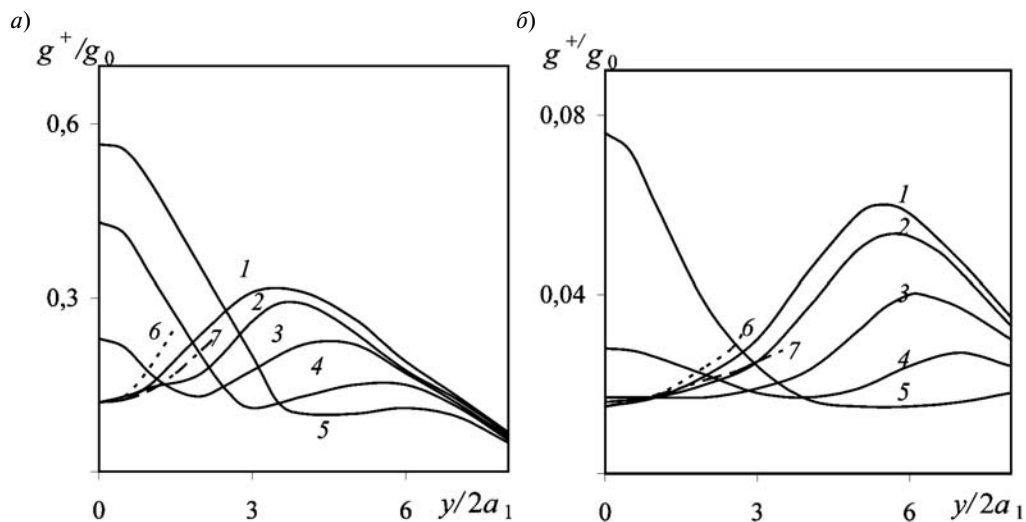


Рис. 3. Зависимости коэффициента усиления $g^+(y, y_m)/g_0$ от частоты $y/2a_1$ при различных значениях нормированной интенсивности P_0 : 30 (а) и 300 (б); $I_1/I_0 = 10$, $a_1 = 0,1$; значения $y_m/2a_1 = 0$ (1), 2 (2), 4 (3), 6 (4), 8 (5); 6, 7 – кривые потерь, обеспечивающие и не обеспечивающие одночастотную генерацию, соответственно

ке. Условие одночастотной генерации запишем в виде:

$$\left. \frac{\partial^2 K_{\text{пот}}(y)}{\partial^2 y} \right|_{y=0} \geq \left. \frac{\partial^2 g(y,0)}{\partial^2 y} \right|_{y=0} = \frac{2g_0}{a_1^2} F_2 =$$

$$= 2\pi^2 g_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2} F^3(x)}{1 + \pi a_1 P_0 F(x)} \frac{3x^2 - a^2}{a^2} dx, \quad (11)$$

где выражение для производной $\frac{\partial^2 g(y,0)}{\partial^2 y}$ получено из формулы (10).

На рис. 4 представлены для иллюстрации результаты расчета функции F_2 от параметров P_0, a_1 при значении $I_1/I_0 = 10$.

В случае использования в качестве селектора интерферометра Фабри – Перо, учитывая данные работы [3], для расчета величины $\partial^2 K_{\text{пот}} / \partial^2 y$ неравенство (11) преобразуем к виду:

$$R_{\text{и}} \left(\frac{l_{\text{и}}}{T_{\text{и}}} \right)^2 \geq \left(\frac{e}{2\pi \Delta \nu L_0} \right)^2 g_0 L_a F_2(P_0, a_1, I_1 / I_0), \quad (12)$$

где $R_{\text{и}}, T_{\text{и}}$ – коэффициенты отражения и пропускания покрытий интерферометра; $l_{\text{и}}$ – его оптическая толщина; L_a – длина активной среды.

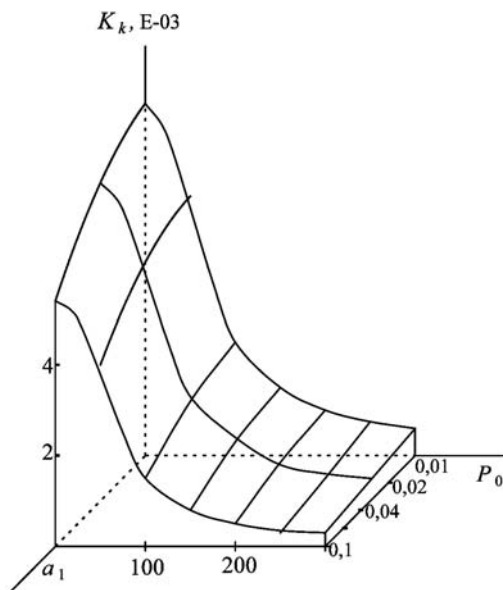


Рис. 4. Зависимость функции $K_2 = a_1^2 F_2 / g_0$ от параметров P_0, a_1 при значении $I_1/I_0 = 10$

Оптическая толщина интерферометра выбирается из условия попадания в пределы контура усиления одного максимума отражения интерферометра, что приводит к неравенству

$$l_{\text{и}} \leq \frac{l}{2\Delta \nu_0}. \quad (13)$$

Следует отметить, что условие (12) не является достаточным при сильном уширении линии излучением, поскольку форма провала в коэффициенте усиления (см. кривую l на рис. 3, где $I_1/I_0 = 10, P_0 = 300$) сильно отличается от квадратичной, параметры интерферометра при этом необходимо определить, исходя непосредственно из зависимости насыщенного усиления от частоты.

Приведем пример расчета интерферометра Фабри – Перо для аргонового лазера. Пусть данный лазер работает в многочастотном режиме с ненасыщенным усилением на проход: $g_0 L_a = 0,5; a_1 = 0,1; I_1/I_0 = 10; P_0 = 300; \Delta \nu_0 = 3,0$ ГГц (при генерации одной частоты в центре линии). В отсутствие потерь в интерферометре ($R_{\text{и}} + T_{\text{и}} = 1$) и из условий (12), (13) получаем:

$$0,74(1 - R_{\text{и}}) / \sqrt{R_{\text{и}}} \text{ (см)} \leq l_{\text{и}} \leq 8,3 \text{ см.}$$

При $R = 0,04$ и $0,06$ имеем:

$$0,36 \text{ см} \leq l_{\text{и}} \leq 8,3 \text{ см}; 0,28 \text{ см} \leq l_{\text{и}} \leq 8,3 \text{ см,}$$

соответственно.

Выражения (12), (13) позволяют определить область параметров интерферометра Фабри – Перо, встраиваемого внутрь резонатора лазера и обеспечивающего в нем одночастотную генерацию.

Ионный аргоновый лазер

Нами разработан многофункциональный ионный аргоновый лазер GS-10F длиной 1830 мм, конструкция излучателя которого приведена на рис. 5. Излучатель лазера имеет следующие основные функциональные узлы: активный элемент; оптический резонатор; соленоид; фотоприемник лазерного излучения; реле протока охлаждающей жидкости; устройство поджига; блокировочное устройство, отключающее источник питания при нарушении эксплуатационных режимов работы лазера.

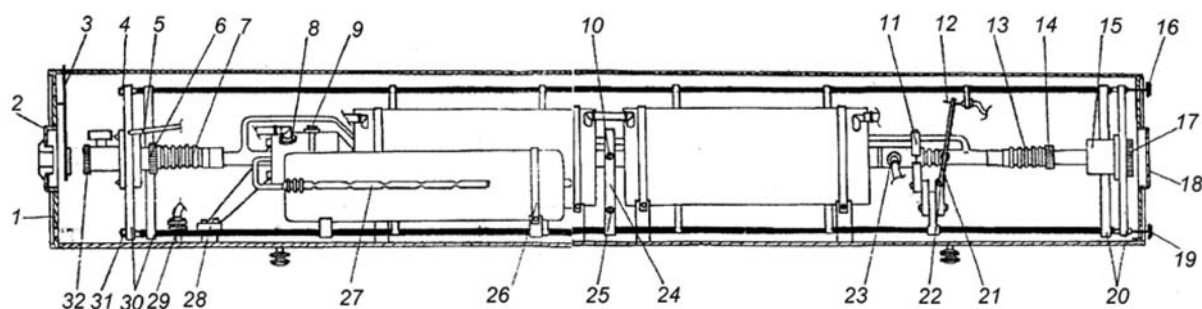


Рис. 5. Конструкция излучателя:

1 – передняя панель; 2 – крышка передней панели; 3 – экран; 4, 16 – винты вертикальной юстировки зеркал; 5 – трубка подачи азота; 6, 14 – крышки узлов герметизации; 7, 13 – узлы герметизации оптических элементов; 8, 23, 28 – места соединения шлангов охлаждения; 9 – винт крепления катодной колбы; 10, 25 – винты юстировки центра активного элемента; 11 – призма; 12 – контактный винт; 15 – втулка узла герметизации; 17 – крышка задней панели; 19, 31 – винты горизонтальной юстировки зеркал; 20, 30 – механизмы юстировки; 21 – рычаг блокировочного устройства; 22 – ось; 24 – стойка; 26 – хомут; 28 – колодка подсоединения накальных выводов катодов; 27 – дозатор газа; 32 – крышка

Активный элемент представляет собой двухэлектродную газоразрядную трубку с прямонакальным катодом, наполненную аргоном. В качестве разрядообразующего канала в конструкции использована керамическая составная цельнополая длинномерная трубка из окиси бериллия с внутренним диаметром 2,5 мм, обеспечивающим одномодовый режим работы лазера. Для отвода тепла, выделяемого током разряда, активный элемент охлаждается хладагентом (дистиллированная вода).

Соленоид предназначен для создания вдоль разрядного канала продольного магнитного поля, снижающего термическую нагрузку на стенки канала и напряжение поддержания разряда, а также увеличивающего мощность излучения. Конструктивно он выполнен в виде катушки, охлаждаемой водой. Катушка соленоида намотана медным проводом диаметром 1,0 мм, и через нее протекает ток 5 – 8 А.

Оптический резонатор излучателя образован двумя зеркалами: сферическим ($R = 10$ м) и плоским – соответственно выходным и плотным («глухим»).

Излучатель конструктивно включает в себя трехстержневую (из суперинвара, с очень низким КТР) жесткую систему, механически связанную с его корпусом. Механизм настройки (юстировки) зеркал позволяет выставлять зеркала параллельно друг другу и перпендикулярно оси разрядного канала активного элемента. Юстировка производится вращением винтов

вертикальной и горизонтальной настроек. Оптические элементы излучателя защищены устройством герметизации, поглощающим озон.

Выходное лазерное излучение, отраженное от делительной пластинки, подается на приемную поверхность фотодиода VD3, блок которого крепится к юстировочному кронштейну. Сигнал с фотодиода поступает на индикатор мощности «Р» пульта управления. Настройка излучателя на многолинейный и однолинейный, одномодовый и одночастотный режимы излучения осуществляется за счет применения оптических элементов, схема и устройство которых представлены на рис. 6. Вращением винта вертикальной настройки 16 (см. рис. 5), связанного с призмой Брюстера 4 (см. рис. 6), достигается изменение длины волны лазерного излучения в спектральном диапазоне 457,9 – 514,5 нм (6 линий) с суммарной мощностью до 17 – 18 Вт при токе 36 А.

Одночастотный режим. Интерферометр Фабри – Перо 3 (см. рис. 6), представляющий из себя плоскопараллельные пластины из кристаллического кварца толщиной 12,4 и 11,1 мм для длин волн 514,5 и 488,0 нм соответственно, устанавливается в резонаторе лазера, генерирующего на одной длине волны. Механизм юстировки интерферометра (селектора частот) имеет винты 2 вертикальной и горизонтальной настроек.

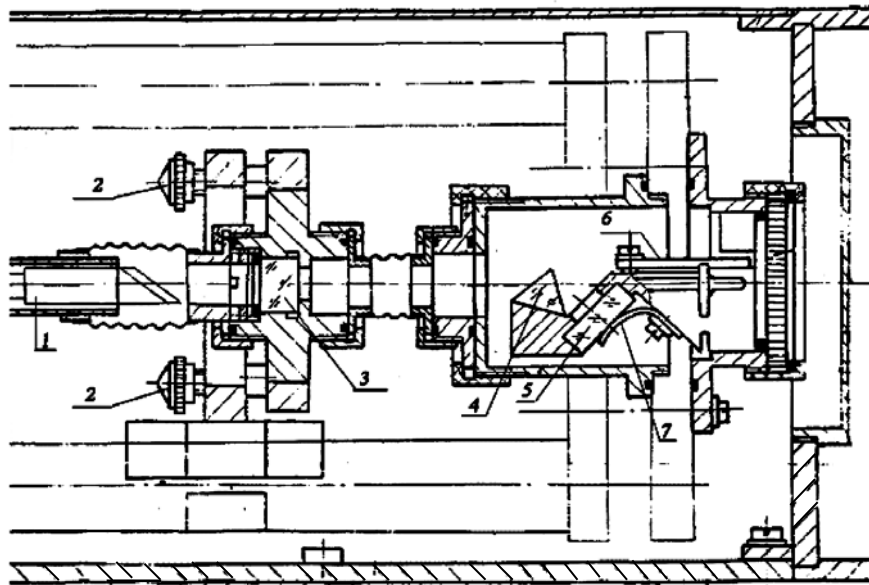


Рис. 6. Блок крепления оптических элементов 3 – 5:
1 – активный элемент; 2 – юстировочные головки интерферометра; 3 – интерферометр Фабри – Перо; 4 – дисперсионная призма; 5 – плоское «плотное» зеркало; 6 – компенсатор; 7 – пружина

Настройка оптического резонатора лазера с селектором частоты (интерферометром Фабри – Перо) производится по сканирующему интерферометру или по нахождению максимумов мощности излучения соответствующих порядков – нулевого, первого, второго, третьего и т. д. с использованием индикатора мощности. Цель настройки – нахождение максимума первого или второго порядка с последующей юстировкой зеркал резонатора и интерферометра на максимальную мощность излучения лазера в одночастотном режиме. По окончании настройки осуществляется герметизация оптических элементов излучателя, включая герметизацию интерферометра и выходных узлов.

Спектральный диапазон интерферометра (селектора частоты) определяется соотношением

$$\Delta\nu_{\text{и}} = \frac{c}{2l_{\text{и}}n}. \quad (18)$$

Для селектора частоты толщиной 10 мм спектральный диапазон равен примерно 10 ГГц.

Резкость интерференционной картины F_R интерферометра Фабри – Перо определяется отношением ширины спектрального диапазона $\Delta\nu_{\text{и}}$ к ширине максимума пропускания $\delta\nu_{\text{и}}$. Для идеального селектора резкость F_R определяется только коэффициентом отражения R зеркальных покры-

тий интерферометра (при этом обе поверхности должны иметь строго одинаковое отражение):

$$F_R = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R}. \quad (19)$$

На практике наилучшие результаты достигнуты при коэффициенте отражения, равном примерно 0,3. Поэтому, в соответствии с формулой (19), $F_R = 2,5$ и ширина максимума пропускания такого селектора частот

$$\delta\nu_{\text{и}} = \frac{\Delta\nu_{\text{и}}}{F_R} = 4 \text{ ГГц.}$$

Одним из основных условий эффективной работы селектора частоты является наличие плоской волны в месте его расположения. Поэтому устанавливать интерферометр рекомендуется у плоского зеркала в зоне «перетяжки».

Условие стабильности частоты излучения в селекторе частоты с минимальными потерями определяется постоянством произведения длины $l_{\text{и}}$ и коэффициента преломления материала n , из которого изготавливается интерферометр, а также зависимостью этого произведения от температуры, т. е. $l_{\text{и}}n = \text{const}$, так как

$$l_{\text{и}}n = l_0(1 + \alpha\Delta t)(n_0 \pm \beta\Delta t), \quad (20)$$

где α – коэффициент термического расширения материала интерферометра, β – температурный коэффициент изменения показателя преломления, Δt – изменение температуры интерферометра.

Условие температурной стабильности для идеального материала интерферометра имеет вид:

$$F(t) = \alpha n_0 + \beta = 0. \quad (21)$$

Видно, что главным условием термокомпенсации интерферометра является разность знаков α и β . Если интерферометр изготовлен из плавленого кварца, то для $\lambda = 488,0$ нм

$$n_0 = 1,462, \alpha = 4 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C},$$

$$\beta = 100 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}; F_{\text{пл.кв.}}(t) = 105,85 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}.$$

У плавленого кварца коэффициенты α и β положительные, и влияние удлинения на температурную стабильность частоты интерферометра в 20 раз меньше, чем влияние температурного изменения показателя преломления.

Кристаллические оптические материалы, обладая анизотропией оптических свойств, имеют отрицательный коэффициент β . Поэтому, если интерферометр изготовлен из кристаллического кварца, то для $\lambda = 488,0$ нм

$$n_0 = 1,56 \alpha_{\text{оси C}} = 71 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}, \alpha_{\text{оси C}} = 132 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C},$$

$$\beta = -60 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}, F_{\text{кр.кв.}}(t) = 51 \cdot 10^{-7} \text{ 1/}^\circ\text{C}.$$

Следовательно, интерферометр (селектор частоты) из кристаллического кварца, главная ось которого совпадает с осью резонатора, в два раза менее критичен к изменению температуры, чем селектор из плавленого кварца.

При изготовлении пластины селектора частоты необходимо учитывать также вращательную поляризацию, происходящую в кристаллах вдоль оптической оси. Исходя из справочных данных [4] и результатов измерения вращательной дисперсии вдоль оси Z кристаллического кварца, мы построили зависимость $\varphi = f(\lambda)$; она приведена на рис. 7 и хорошо удовлетворяет эмпирическому уравнению

$$\varphi = -\frac{5,87}{\lambda^{2,35}} \text{ град/мм.} \quad (22)$$

Видно, что вращательная дисперсия от длины волны носит нелинейный характер и увеличивается при уменьшении длины волны

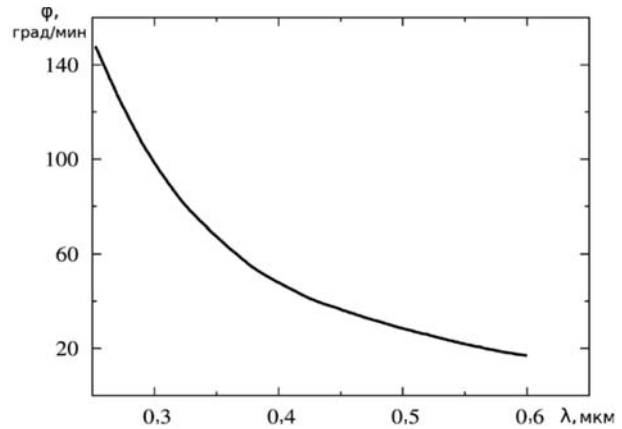


Рис. 7. Экспериментальная зависимость вращательной дисперсии вдоль оси Z кристаллического кварца

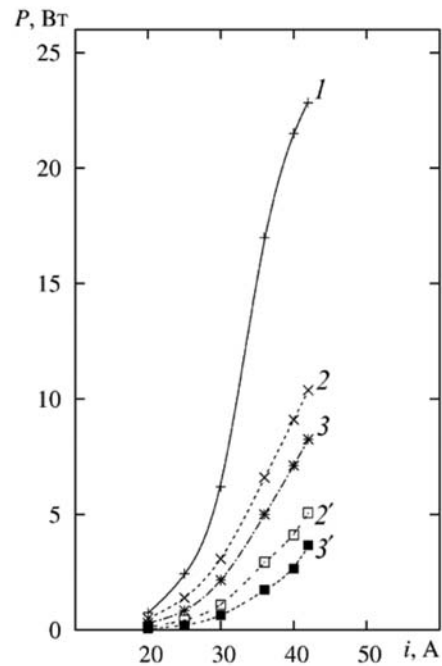


Рис. 8. Зависимости мощности излучения аргонного ионного лазера GS-10F в режиме одномодовой генерации от тока разряда на различных длинах волн: 1 – в диапазоне 457,9 – 514,5 нм (6 линий); 2, 3 – 514,5 и 488,0 нм (1 – 3 – интегральное излучение; 2', 3' – в одночастотном режиме)

излучения лазера. Отсюда изменяется и оптическая длина интерферометра Фабри – Перо. Так, для длины волны 351,0 нм оптимальная толщина интерферометра составляет 5,24 мм, а для 488,0 нм – 11,1 мм. Угол вращения вектора поляризации излучения будет равен 360° .

Зависимости мощности излучения одночастотного аргонного лазера от тока разряда на длинах волн 488,8 и 514,5 нм приведены на рис. 8.



Одночастотное излучение аргонового лазера на длинах волн 488,8 и 514,5 нм достигло соответственно 3,3 и 4,8 Вт, что является доказательством осуществления нами мощных когерентных источников света в сине-зеленой области спектра. Разработанный в данной работе аргоновый лазер нашел широкое применение для создания элементов голографической оптики (ГОИ, ИТМО, «Хологрейт» в Санкт-Петербурге и др.) и в рамановской спектроскопии (МГУ им. М.В. Ломоносова, ФИАН в Москве и др.) при исследовании релеевского и комбинационного рассеяния. На рис. 8 приведена также интегрированная одномодовая мощность излучения аргонового лазера в диапазоне 457,9 – 514,5 нм (6 линий). При токе разряда 42 А мощность излучения составляет 24 Вт. Видно, что при больших токах интегральная мощность и мощность излучения в одночастотном режиме на длинах волн 488,0 и 514,5 нм начинают стремиться к насыщению.

Таким образом, в данной работе получены следующие результаты:

1. Определены условия селекции частоты излучения газоразрядного лазера с протяженными резонаторами.

2. Показано, что при расчете провала в контуре усиления необходимо учитывать деформацию, связанную с влиянием индуцированного излучения. В противном случае селективный элемент, расположенный внутри протяженного резонатора, может не обеспечить одночастотный режим генерации лазера.

3. Разработан одночастотный аргоновый лазер GS-10F длиной 1,83 м с излучением на длинах волн 488,0 и 514,5 нм и соответствующими значениями мощности около 3,5 и 5,0 Вт. Лазер представляет собой мощный источник когерентного излучения в сине-зеленой области спектра. Имея гарантированную долговечность более 1000 ч, он уже более 5 лет является единственным промышленным лазером такого типа в России.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов, С.Н. Одночастотная генерация газовых лазеров со смешанным контуром усиления [Текст] / С.Н. Кузнецов, С.И. Мольков // Электронная техника. Сер. 11. – 1993. – № 32. – С. 42 – 51.

2. Величко, А.Г. Коэффициент усиления газового лазера [Текст] / А.Г. Величко // ЖПС. – 1996. – Т. 4. – № 1. – С. 30 – 36.

3. Троицкий, Ю.В. Одночастотная генерация газовых лазеров [Текст] / Ю.В. Троицкий. – Новосибирск: Наука, 1975. – 159 с.

4. Ландсберг, Г.С. Оптика [Текст] / Г.С. Ландсберг. – М.: Наука, 1976. – С. 137 – 140, 609 – 610.

БЫКОВСКИЙ Валерий Фёдорович – заведующий лабораторией ЗАО «ЛазерВариоРакурс». 390023, г. Рязань, проезд Яблочкова, 5, стр. 25-а info@laser.ru

МОЛЬКОВ Сергей Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и методики преподавания физики Карельской государственной педагогической академии. 185680, г. Петрозаводск, Пушкинская ул., 17 tandem@nego.ru

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина. 390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46 vl.stepanov@rsu.edu.ru

ХИЛОВ Вадим Сергеевич – аспирант кафедры общей и теоретической физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, директор ЗАО «ЛазерВариоРакурс». 390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46

ХИЛОВ Сергей Иванович – главный конструктор ЗАО «ЛазерВариоРакурс». 390023, г. Рязань, проезд Яблочкова, 5, стр. 25-а

УДК 537.53

С.И. Мольков, В.Н. Савин

**ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ
НА ЗАРЯД ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В УПОРЯДОЧЕННЫХ
ПЛАЗМЕННО-ПЫЛЕВЫХ СТРУКТУРАХ**

S.I. Molkov, V.N. Savin

Karelian State Pedagogical Academy,
17 Pushkinskaya St., Petrozavodsk, 185680, Russia

**INFLUENCE OF ELECTRON EMISSION PROCESSES ON THE CHARGE OF
DUST PARTICLES IN ORDERED PLASMA-DUST STRUCTURES**

В статье на качественном и количественном уровнях рассмотрено влияние эмиссионных процессов и степени шероховатости поверхности на величину электрического заряда пылевых частиц.

ПЫЛЕВАЯ ЧАСТИЦА. ПЫЛЕВАЯ ПЛАЗМА. ЭМИССИЯ ЭЛЕКТРОНОВ. КОЭФФИЦИЕНТЫ ЭМИССИИ. СТЕПЕНЬ ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ. ТЕРМОЭМИССИЯ.

In the article the influence of electron emission processes and roughness parameter on a dust particle electric charge are considered quantitatively and qualitatively.

DUST PARTICLE. DUSTY PLASMA. ELECTRON EMISSION. EMISSION FACTORS. DEGREE OF SURFACE ROUGHNESS. TERMOEMISSION.

Пылевая, или комплексная, плазма представляет собой ионизированный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества. Погруженные в объем плазмы, эти пылевые частицы приобретают электрический заряд за счет потока на их поверхность заряженных частиц плазмы. Заряженные микрочастицы образуют упорядоченные плазменно-пылевые структуры. Интерес к изучению таких структур обусловлен широкой распространенностью пы-

левой плазмы в природе и технике и возможностью изучения с ее помощью фундаментальных физических явлений, таких как фазовые переходы, колебания, волны и неустойчивости [1]. Важной характеристикой пылевой плазмы является заряд микрочастиц; в процессе их зарядки существенную роль играет эмиссия электронов [1]. В настоящей работе количественно рассмотрено влияние разных видов эмиссии электронов и микронеровности поверхности



пылевых частиц на зависимость их заряда от параметров невозмущенной плазмы.

Заряд пылевых частиц определяется уравнением баланса зарядов, которое с учетом процессов эмиссии вторичных и термоэлектронов имеет вид:

$$J_i = J_e - P_f \left[\bar{r} J_e \kappa_r + \bar{\delta} J_e \kappa_\delta + \gamma J_i \kappa_\gamma + Y J_{ph} \kappa_{pe} + J_{th} \kappa_W \right], \quad (1)$$

где J_i, J_e, J_{ph}, J_{th} – плотности потоков ионов, электронов, резонансных фотонов и термоэлектронов; $\bar{r}, \bar{\delta}$ – коэффициенты вторичной электронной эмиссии для упруго отраженных и истинно вторичных электронов, усредненные по функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ); γ – коэффициент ионно-электронной потенциальной эмиссии; Y – квантовый выход фотоэффекта; P_f – вероятность выхода электрона с шероховатой поверхности пылевой частицы без повторного столкновения (для гладкой поверхности $P_f = 1$); κ – фактор, определенный ниже.

Плотность потока термоэлектронов определяется температурой пылевой частицы, и для ее определения уравнение баланса заряда должно решаться совместно с уравнением баланса энергии:

$$J_a \alpha_a 2(T_W - T_a) + J_{th} P_f \kappa_W 2T_W + a_0 \sigma_0 T_W^4 = J_i \left[E_a + \alpha_i (\varepsilon_{iW} - 2T_W) - P_f \gamma \varepsilon_\gamma \kappa_\gamma \right] + J_e \left[2T_e - P_f (\bar{r} 2T_e \kappa_r + \bar{\delta} \varepsilon_\delta \kappa_\delta) \right] + J_{ph} (E_{ex} - P_f Y \varepsilon_{pe} \kappa_{pe}), \quad (2)$$

где J_a – плотность потока атомов; α_a, α_i – коэффициенты аккомодации атомов и ионов; – постоянная Стефана – Больцмана; a_0 – интегральная поглощательная способность пылевой частицы (степень черноты); $T_a \cong T_i, T_e, T_W$ – температуры атомов (ионов), электронов и вещества пылевой частицы, выраженные в энергетических единицах; $\varepsilon_{iW}, \varepsilon_\gamma, \varepsilon_\delta, \varepsilon_{pe}$ – кинетическая энергия ионов и вторичных электронов при ионно-электронной эмиссии, истинно вторичных электронов и фотоэлектронов; E_a, E_{ex} – энергии ионизации и возбуждения резонансных уровней.

Левая часть уравнения (2) включает члены, учитывающие охлаждение пылевой частицы атомами, термоэлектронами и излучением, а правая – члены, учитывающие нагрев пылевой частицы ионами, электронами, резонансными фотонами и охлаждение соответствующими вторичными электронами. В табл. 1 приведены использованные при расчетах плотности потоков частиц и энергии, переносимые на поверхность пылевой частицы или с ее поверхности.

Выражения для плотности потоков частиц J_i и J_e соответствуют приближению ограниченного орбитального движения [1]. Здесь m_a, m_e – массы атомов (ионов) плазмообразующего газа и электронов; ϕ_W, W_0 – потенциал и работа выхода для пылевой частицы; $e\Delta\phi$ – снижение работы выхода за счет эффекта Шоттки; Q_{ex}, β_i – константа скорости возбуждения резонансных уровней атомов, распадающихся спонтанно, и коэффициент ионизации; n_a, n_0 – концентрации атомов и электронов (ионов) в невозмущенной плазме. Величина Q_{ex}/β_i в зависимости от n_0 и T_e определялась по методике [2]. В расчетных формулах использованы безразмерные величины

$$\tau = T_e/T_a; \quad \tau_W = T_W/T_a; \quad \mu = m_e/m_a,$$

$$z = e\phi_W/T_e = eq/4\pi\epsilon_0 a T_e,$$

где a – радиус пылевой частицы; q – заряд. В расчетах принималась $T_a = 300 \text{ К} = 0,026 \text{ эВ}$.

В табл. 2 представлены использованные нами для расчетов выражения для коэффициентов эмиссии и энергии вторичных электронов. Здесь r_m, ε_m и A, a, ε_n – параметры аппроксимации функциональных зависимостей коэффициентов эмиссии $r(\varepsilon, \theta)$ и $\delta(\varepsilon, \theta)$ (ε – энергия, θ – угол падения электронов на поверхность пылевой частицы); $\Gamma(x)$ – гамма-функция. Усреднение проводилось по максвелловской ФРЭЭ с температурой T_e . Рекомендуемые нами значения параметров аппроксимации, полученные по данным [3] для диэлектриков, равны 0,55; 4,0 эВ; 0,18; 0,54; 4,5 эВ, соответственно.

Для металлов, у которых разброс параметров аппроксимации больше, в табл. 3 приведены значения этих параметров для ряда веществ. Там же приведены значения степени

Таблица 1

Выражения и расчетные формулы для плотностей потоков и энергий частиц различного типа

Тип частиц	Плотность потоков частиц	Расчетная формула для J , $\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$	Энергия частиц, эВ
Атомы	$J_a = n_a \sqrt{\frac{T_a}{2\pi m_a}}$	$2,69 \cdot 10^6 n_a \sqrt{\mu}$	$2T_a = 0,052$
Ионы	$J_i = n_0 \sqrt{\frac{T_a}{2\pi m_a}} \Phi$, $\Phi = \begin{cases} 1 - e\phi_W / T_a, & \phi_W < 0 \\ \exp[-e\phi_W / T_a], & \phi_W > 0 \end{cases}$ [1]	$2,69 \cdot 10^6 n_0 \sqrt{\mu} \Phi$, $\Phi = \begin{cases} 1 - z\tau, & z < 0; \\ e^{-z\tau}, & z > 0 \end{cases}$	$\varepsilon_{iW} = \begin{cases} 2T_a - e\phi_W, & = \\ 2T_a & = \\ \begin{cases} 0,026(2 - z\tau), & z < 0; \\ 0,052, & z > 0 \end{cases} \end{cases}$
Электроны	$J_e = n_0 \sqrt{\frac{T_a}{2\pi m_a}} \exp\left\{\frac{e\phi_W}{T_a}\right\}$ [1]	$2,69 \cdot 10^6 n_0 \sqrt{\tau} e^z$	$2T_e = 0,052\tau$
Фотоны	$J_{ph} = n_0 \sqrt{\frac{T_a}{2\pi m_a}} \frac{Q_{ex}}{\beta_i}$	$2,69 \cdot 10^6 n_a \sqrt{\mu} \frac{Q_{ex}}{\beta_i}$	E_{ex}
Термоэлектроны	$J_{th} = A_0 T_W^2 \exp\left\{\frac{W_0 - e\Delta\phi}{T_W}\right\}$ [1]	$6,75 \cdot 10^{25} \tau_W^2 \times$ $\times \exp\left\{-\frac{38,5(W_0 - e\Delta\phi)}{\tau_W}\right\};$ $e\Delta\phi =$ $= \begin{cases} 6,13 \cdot 10^{-3} \sqrt{\frac{ z \tau}{a[\text{МКМ}]}}; & z < 0; \\ 0, & z > 0 \end{cases}$	$2T_W = 0,052\tau_W$

черноты поверхности и работы выхода электронов W_0 . Фактор κ , входящий в уравнения (1) и (2), равен единице при отрицательном заряде пылевой частицы ($q < 0$) и равен $\exp\{-e\phi_W / T\}$ при положительном заряде. Температура принимает значения $T_e, T_\delta, T_\gamma, T_{pe}$ для процессов, приведенных в табл. 2, и T_W для термоэлектронов.

Вероятность вылета электронов P_f определяется среднеквадратичным отклонением σ радиуса частицы от среднего уровня и радиусом корреляции высот шероховатости [4]:

$$P_f = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \arctg \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\rho}{\sigma}}$$

Коэффициенты accommodation атомов и ионов при столкновениях с шероховатой поверхностью пылевых частиц равны [4]:

$$\alpha_a = \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + P_f(1 - \alpha_0)};$$

$$\alpha_i = \frac{\alpha_0(1 + 0,5P_f)}{\alpha_0 + P_f(1 - \alpha_0)},$$

где $\alpha_0 = 2,4\mu / (1 + \mu)^2$ [7], $\mu = m_a / m_W$ — отношение массы атома (иона) к массе атома поверхности пылевой частицы.

Из сравнительного анализа членов, входящих в уравнение (1), следует, что влияние термоэмиссии необходимо учитывать, когда

$$T_W \geq (W_0 - e\Delta\phi) / (50 - \ln n_0).$$

Для иллюстрации этого утверждения на рис. 1 приведены зависимости заряда z от температуры электронов τ при разных значениях температуры поверхности частицы τ_W , рассчи-



Т а б л и ц а 2

Выражения и расчетные формулы, использованные для нахождения эмиссионных характеристик

Наименование процесса	Коэффициент эмиссии	Расчетная формула коэффициента эмиссии для диэлектриков	Энергия вторичных электронов, эВ
Эмиссия упруго отраженных электронов	$\bar{r} = 5,44 \frac{r_m \varepsilon_m^2 T_e}{(\varepsilon_m + T_e)^3}$ [4]	$\frac{1,24\tau}{(4+0,026\tau)^3}$	$2T_e$
Эмиссия истинно вторичных электронов	$\bar{\delta} = A\Gamma(1+a) \left(1+a+\frac{\varepsilon_n}{T_e}\right) T_e^a \times \exp\left\{-\frac{\varepsilon_n}{T_e}\right\}$ [4]	$3,48 \cdot 10^{-2} \left(1+\frac{112}{\tau}\right) \tau^{0,54} \times \exp\left(-\frac{137}{\tau}\right)$	$\varepsilon_{\delta} \approx 1 \text{ эВ}, T_{\delta} \approx 0,7 \text{ эВ}$
Электрон-ионная эмиссия	$\gamma = 0,016(E_a - 2W_0)$ [5]	$\approx 0,22 (\text{Ne} + \text{Al}_2\text{O}_3)$ $W_0 = 3,9 \text{ эВ} (\text{Al}_2\text{O}_3)$	$\varepsilon_{\gamma} \approx 0,5(E_a - 2W_0) \approx T_{\gamma}$
Фотоэмиссия	Y [5]	$\approx 10^{-1} (\text{He}, \text{Ne})$ $\approx 10^{-2} (\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe})$	$e_{pe} \approx 0,5(E_{ex} - W_0) \approx T_{pe}$

Т а б л и ц а 3

Параметры аппроксимации коэффициентов эмиссии и соответствующие характеристики для некоторых металлов

Вещество	r_m	$\varepsilon_m, \text{эВ}$	A	a	$\varepsilon_n, \text{эВ}$	a_0 [6]	$W_0, \text{эВ}$ [5]
Cu	0,13	10	0,044	0,73	6,0	0,03	4,40
W	0,20	10	0,036	0,71	5,5	0,39	4,54
Al	0,14	4,0	0,016	0,87	5,0	0,04	4,25
Ni	0,11	2,5	0,012	0,92	4,0	0,045	4,50

таные согласно уравнению (1) для разряда в неоне с пылевыми частицами из оксида алюминия ($W_0 = 3,9$ эВ).

Начиная с некоторого порогового значения ($\tau_w = 5$), влияние термоэмиссии на величину заряда частицы становится существенным.

В случае, когда влияние термоэмиссии мало, заряд пылевой частицы зависит только от температуры электронов или при немаксвелловской ФРЭЭ – от эффективной температуры «хвоста» функции распределения.

На рис. 2 представлены зависимости заряда от температуры электронов для различных видов эмиссии с поверхности гладкой частицы, а на рис. 3 – зависимости $z(\tau)$ с учетом трех видов эмиссии при различных степенях шероховатости поверхности пылевой частицы. С ростом степени шероховатости влияние эмиссии ослабевает, и зависимость $z(\tau)$ приближается к соответствующей зависимости для гладкой частицы без учета эмиссии.

Как показывает анализ членов уравнения баланса энергии (2), нагрев пылевой частицы осуществляется, в основном, ионами, а охлаждение – излучением и атомами. Влияние остальных процессов невелико. Заряд пылевых

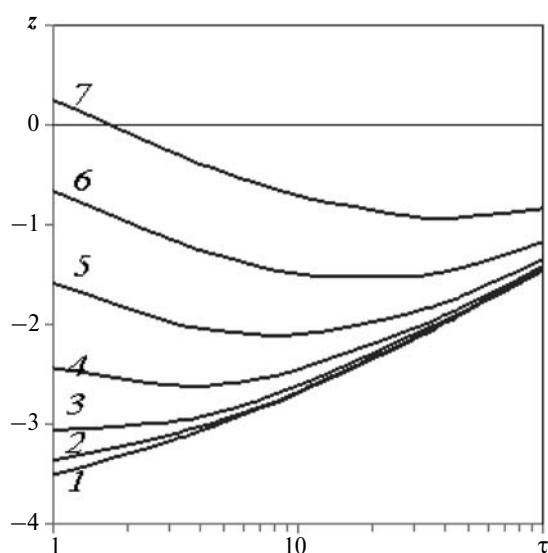


Рис. 1. Расчетные зависимости заряда гладкой пылевой частицы от температуры электронов при различных значениях нормированной температуры поверхности этой частицы τ_w : 1,0 (1); 5,0 (2); 5,2 (3); 5,4 (4); 5,6 (5); 5,8 (6); 6,0 (7)

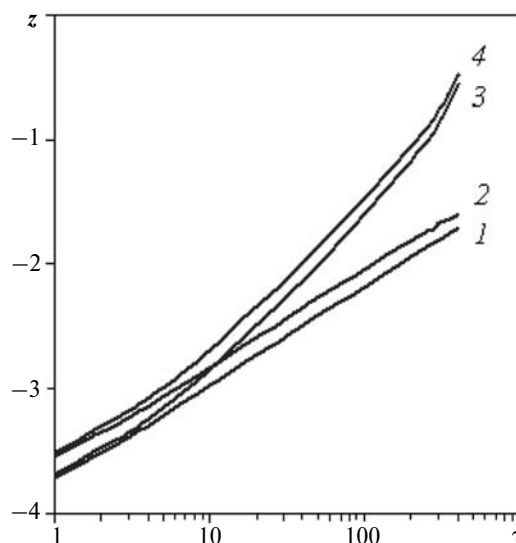


Рис. 2. Расчетные зависимости заряда гладкой пылевой частицы от температуры электронов при различных вариантах учета эмиссии: без учета (1), с учетом ион-электронной и фотоэмиссии (2), вторичной эмиссии электронов (3), всех трех видов эмиссии (4)

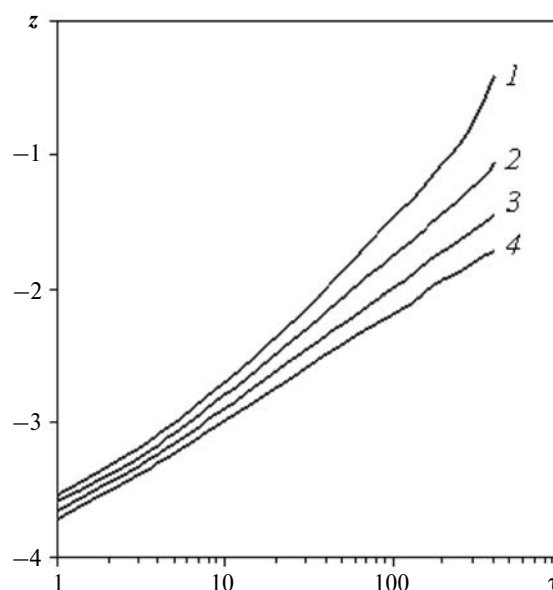


Рис. 3. Расчетные зависимости заряда пылевой частицы от температуры электронов при различных значениях степени шероховатости ее поверхности $P_s = \sigma / \rho$: 0, гладкая (1); 0,08 (2); 0,8 (3); 4 – гладкая частица без учета эмиссии

частиц при наличии термоэмиссии, помимо электронной температуры, зависит также от концентрации электронов и атомов.

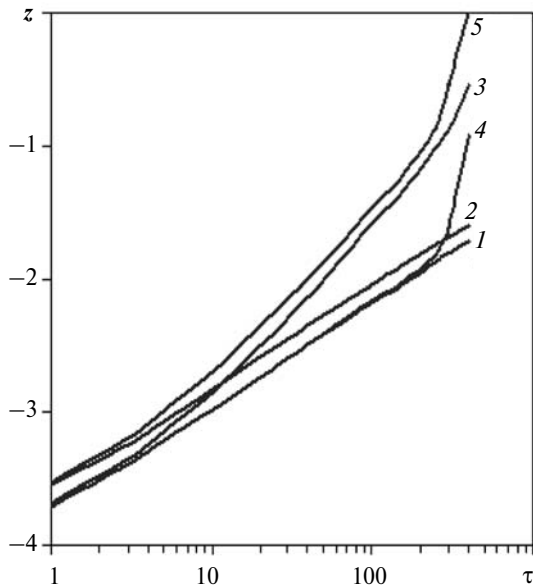


Рис. 4. Расчетные зависимости заряда гладкой пылевой частицы от температуры электронов. Кривые 1–3 соответствуют рис. 2; 4 – учтена только термоэмиссия, 5 – все виды эмиссии ($n_0 = 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $n_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $a_0 = 0,05$)

С ростом n_0 влияние термоэмиссии растет, а с ростом n_a падает. Так, при повышенных давлениях ($p \approx 10$ торр) разогрев пылевых частиц до температур, при которых термоэмиссия

существенна, не происходит. С уменьшением давления ($p \approx 0,1$ торр) и ростом T_e , начиная с некоторого порогового значения, при малых степенях черноты ($a_0 \leq 0,1$) и достаточно высоких концентрациях заряженных частиц в невозмущенной плазме ($n_0 \approx 10^{10} - 10^{11} \text{ см}^{-3}$) влияние термоэмиссии становится существенным. На рис. 4 приведены зависимости $z(\tau)$ для различных видов эмиссии, включая термоэмиссию, полученные при совместном решении системы уравнений (1) и (2). В случаях, когда a_0 близко к единице, охлаждение излучением становится заметным и термоэмиссия затрудняется.

Таким образом, эффекты электронной эмиссии оказывают существенное влияние на величину заряда пылевой частицы, приводя в ряде случаев к существенному уменьшению заряда по абсолютной величине: в два раза и более, вплоть до смены знака заряда (см. рис. 1, $\tau_W = 6,0$). Указанное влияние делает необходимым при теоретическом описании процессов в пылевой плазме и при анализе экспериментальных данных учитывать эмиссию электронов, зависящую от параметров невозмущенной плазмы, материала микрочастиц и характера их поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Фортов, В.Е.** Пылевая плазма [Текст] / В.Е. Фортов, А.Г. Храпак, С.А. Храпак [и др.] // Успехи физических наук. – 2004. – № 5. – С. 494–544.
2. **Биберман, Л.М.** Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы [Текст] / Л.М. Биберман, В.С. Воробьев, И.Т. Якубов. – М.: Наука, 1982. – 376 с.
3. **Бронштейн, И.М.** Вторичная электронная эмиссия [Текст] / И.М. Бронштейн, Б.С. Фрайман. – М.: Наука, 1969. – 408 с.
4. **Мольков, С.И.** Влияние процессов на стенках капилляра на параметры плазмы положительного столба разряда низкого давления [Текст] / С.И. Мольков // Уч. зап. Петрозаводского гос. ун-та. Сер. Естественные и технические науки. – 2012. – № 2 (123). – С. 88–95.
5. **Райзер, Ю.П.** Физика газового разряда [Текст] / Ю.П. Райзер; 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1992. – 592 с.
6. **Крейт, Ф.** Основы теплопередачи [Текст] / Ф. Крейт, У. Блэк. – М.: Мир, 1983. – 512 с.
7. **Баранцев, Р.Г.** Взаимодействие газов с поверхностями [Текст] / Р.Г. Баранцев. – М.: Наука, 1975. – 228 с.

МОЛЬКОВ Сергей Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и методики преподавания физики Карельской государственной педагогической академии.

185680, г. Петрозаводск, Пушкинская ул., 17
tandem@onego.ru

САВИН Василий Николаевич – аспирант кафедры теоретической физики и методики преподавания физики Карельской государственной педагогической академии.

185680, г. Петрозаводск, Пушкинская ул., 17
moped@onego.ru

УДК 537.52

Ф.Г. Бакшт, В.Ф. Лапшин, А.В. Пелли

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ИЗЛУЧЕНИЕМ В АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ПЛАЗМЕ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

F.G. Baksht¹, V.F. Lapshin², A.V. Pelli³

^{1, 2} Ioffe Physical Technical Institute,
26 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

² Petersburg State Transport University,

9 Moskovsky Pr., St. Petersburg, 190031, Russia

³ St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

RADIATIVE ENERGY TRANSFER SIMULATIONS IN AXIAL-SYMMETRIC HIGH PRESSURE GAS DISCHARGE PLASMA

В статье излагается метод прямого интегрирования для расчета теплообмена излучением в условиях аксиально-симметричной плазмы высокого давления. Выполнено сравнение с результатами расчета в диффузионном приближении.

ТЕПЛООБМЕН ИЗЛУЧЕНИЕМ. ГАЗОВЫЙ РАЗРЯД. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ЦЕЗИЙ. ДИФфуЗИОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ. СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ РАЗРЯДА. ПЛАЗМЕННЫЕ ИСТОЧНИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ.

Direct integration method for radiative heat transfer calculation in the conditions of axial-symmetric high pressure gas discharge plasma is described. The comparison with results of calculation in the diffusion approach is made.

RADIATIVE HEAT TRANSFER. GAS DISCHARGE. MODELING. CAESIUM. DIFFUSION APPROXIMATION. SPECTRUM OF PLASMA RADIATION. RADIATIVE PLASMA SOURCES.

Излучение является важным, а в целом ряде случаев — основным, механизмом переноса энергии в газовых разрядах высокого давления. В таких разрядах, благодаря большой скорости столкновительных процессов, электронная компонента находится в состоянии локального термодинамического равновесия (ЛТР), т. е. имеют место распределение Максвелла и соотношения Саха — Больцмана, выполняющиеся при температуре электронов T_e . В этих условиях уравнение переноса излучения в плазме существенно упрощается [1]. Несмотря на это, расчет теплообмена излучением (особенно в нестационарных случаях) остается самой трудоемкой частью задачи моделирования излучающих разрядов. Усилия, направленные на решение

проблемы расчета радиационного теплообмена, традиционно сосредоточены на двух направлениях. Во-первых, развиваются методы, основанные на непосредственном решении уравнения переноса излучения. Среди последних работ этого направления отметим [2, 3], где изложен метод дискретных ординат и приведены ссылки на другие подходы. Во-вторых, используются различного рода приближения: метод объемных коэффициентов излучения [4], метод парциальных характеристик [5], методы усреднения коэффициента поглощения [6] и другие.

В настоящей работе излагается метод прямого интегрирования (МПИ) уравнения переноса излучения для аксиально-симметричной ЛТР-плазмы. Расчеты, выполненные с по-



мощностью МПИ, сравниваются с результатами, полученными в рамках диффузионного приближения, и асимптотическими формулами для теплообмена излучением в линии. Расчеты проведены для столба плазмы, возникающего в условиях, характерных для импульсно-периодического разряда (ИПР) высокого давления в цезии. ИПР в цезии представляет интерес в связи с возможностью его использования для создания эффективного экологически чистого источника света [7, 8]. Такой разряд реализуется в сапфировой трубке с внутренним радиусом $R \approx 2 - 3$ мм. При этом в трубке с помощью дежурного разряда с током приблизительно в 0,5 А поддерживается слабоионизованное состояние плазмы, через которую периодически, с частотой $\nu \approx 1000$ Гц, пропускается импульс тока заданной формы амплитудой $I_{\max} \approx 10 - 100$ А [9].

Метод прямого интегрирования

Для аксиально-симметричной плазмы, находящейся в условиях ЛТР, уравнение переноса излучения вдоль заданного направления Ω при отсутствии рассеяния света имеет вид [1]:

$$\frac{\partial}{\partial s} I_\lambda = k'_\lambda (I_{\lambda P} - I_\lambda), \quad (1)$$

где $I_\lambda = I_\lambda(r, \Omega)$ – спектральная интенсивность излучения с длиной волны λ ;

$$I_{\lambda P} = 2hc^2\lambda^{-5} [\exp(hc/\lambda k_B T_e) - 1]^{-1}$$

– равновесная (планковская) спектральная интенсивность (r – радиальная координата; s – координата вдоль светового луча; $T_e = T_e(r)$ – температура электронов); $k'_\lambda(r)$ – коэффициент поглощения плазмы с учетом свободно-свободных (ff), связанно-свободных (bf) и связанно-связанных (bb) переходов электронов.

С учетом поправки на вынужденное излучение

$$k'_\lambda = \left(k_\lambda^{(ff)} + k_\lambda^{(bf)} + k_\lambda^{(bb)} \right) [1 - \exp(-hc/\lambda k_B T_e)].$$

Подробное описание расчета k'_λ в цезиевой плазме приведено в работе [7]. Интегрируя уравнение (1) вдоль луча, получаем его решение в интегральной форме:

$$I_\lambda(s, \Omega) = \int_{s_B}^s k'_\lambda I_{\lambda P} \exp\left(-\int_{s'}^s k'_\lambda ds''\right) ds', \quad (2)$$

где s_B – координата точки B , лежащей на поверхности плазменного столба разряда.

Используя решение (2), можно найти все основные спектральные величины, характеризующие радиационный теплообмен (радиальную плотность потока лучистой энергии F_λ , объемную плотность энергии электромагнитного излучения U_λ , объемную мощность радиационных потерь энергии W_λ):

$$\begin{aligned} F_\lambda &= \int_{(4\pi)} (\Omega \cdot e_r) I_\lambda d\Omega = \\ &= 4 \int_0^\pi d\theta \cos\theta \int_0^{\pi/2} d\psi \cos\psi \times \\ &\times \int_0^{l_w} k'_\lambda I_{\lambda P} \exp\left(-\int_0^{l'} k'_\lambda \frac{dl'}{\cos\psi}\right) dl'; \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} U_\lambda &= \frac{1}{c} \int_{(4\pi)} I_\lambda d\Omega = \\ &= \frac{4}{c} \int_0^\pi d\theta \int_0^{\pi/2} d\psi \int_0^{l_w} k'_\lambda I_{\lambda P} \exp\left(-\int_0^{l'} k'_\lambda \frac{dl'}{\cos\psi}\right) dl'; \end{aligned} \quad (4)$$

$$W_\lambda = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r F_\lambda) = c k'_\lambda (U_{\lambda P} - U_\lambda). \quad (5)$$

Здесь углы ψ и θ задают направление луча интегрирования,

$$l_w = r \cos\theta + (R^2 - r^2 \sin^2\theta)^{1/2},$$

R – радиус столба плазмы, $U_{\lambda P} = 4\pi I_{\lambda P}/c$ – равновесная (планковская) плотность энергии излучения.

Значения полных величин F , U и W в настоящей работе находятся прямым (точным) интегрированием по длине волны:

$$F(r) = \int F_\lambda d\lambda; \quad U(r) = \int U_\lambda d\lambda; \quad W(r) = \int W_\lambda d\lambda. \quad (6)$$

Число используемых для интегрирования точек определяется сложностью спектра поглощения и необходимым уровнем точности результата.

В реальном спектре всегда можно выделить участки, для которых плазма разряда является оптически прозрачной или оптически плотной. Для записи соответствующих приближенных формул и условий их применения введем следующие величины:

$$\tau_{\min} = \int_r^R k'_\lambda(r') dr';$$

$$\tau_{\max} = \tau_R(\lambda) + \int_0^r k'_\lambda(r') dr'; \quad \tau_R(\lambda) = \int_0^R k'_\lambda(r) dr, \quad (7)$$

где τ_{\max} и τ_{\min} – значения максимальной и минимальной оптических толщин, отделяющих точку с радиальной координатой r от границы плазмы в сечении, перпендикулярном оси разряда.

При $\tau_{\max} \ll 1$ из выражения (5) для величины радиационных потерь энергии W_λ следует приближение оптически прозрачной плазмы:

$$W_\lambda(r) = ck'_\lambda U_{\lambda P}(r) (1 + O(\tau_{\max})). \quad (8)$$

При $\tau_{\min} \gg 1$ можно найти главный член асимптотического разложения (3) по параметру $\varepsilon = A/k'_\lambda R \ll 1$, где $A = hc/\lambda k_B T_e$. Для этого дважды проинтегрируем внутренний интеграл в выражении (3) по частям. После этого внешний интеграл по θ в (3) вычисляется и, с учетом (5), получаем приближение лучистой теплопроводности:

$$F_\lambda(r) = -f_\lambda \frac{\partial T_e}{\partial r}; \quad W_\lambda = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r f_\lambda \frac{\partial T_e}{\partial r}, \quad (9)$$

где

$$f_\lambda = \frac{4\pi hc}{3k_B T_e^2 \lambda k'_\lambda} I_{\lambda P} \frac{1}{1 - \exp(-hc/\lambda k_B T_e)}.$$

Отметим, что при записи соотношений (9) были опущены члены порядка $(A/k'_\lambda R)^3$.

Диффузионное приближение

В том случае, когда поле излучения слабоанизотропно, можно разложить спектральную интенсивность излучения I_λ в ряд по сферическим гармоникам и ограничиться двумя первыми членами разложения [1]:

$$I_\lambda(r, \Omega) = I_\lambda^{(0)}(r) + 3\Omega \cdot \mathbf{F}_\lambda(r) / 4\pi, \quad (10)$$

где симметричная часть спектральной интенсивности $I_\lambda^{(0)} = cU_\lambda/4\pi$.

Условием применимости равенства (10) является малость второго слагаемого в правой части (8) по сравнению с первым:

$$3F_\lambda/cU_\lambda \ll 1.$$

Подстановка выражения (10) в уравнение (1) и усреднение по всему телесному углу с весом Ω приводит к соотношению

$$F_\lambda(r) = -\frac{c}{3k'_\lambda} \frac{\partial}{\partial r} U_\lambda. \quad (11)$$

Далее, с учетом формулы (5) получаем уравнение диффузионного приближения:

$$-\frac{c}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{k'_\lambda} \frac{\partial}{\partial r} U_\lambda \right) = ck'_\lambda (U_{\lambda P} - U_\lambda). \quad (12)$$

Граничные условия к уравнению (12) имеют вид [1]:

$$\left. \frac{\partial U_\lambda}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad -\left. \frac{1}{3k'_\lambda} \frac{\partial U_\lambda}{\partial r} \right|_{r=R} = \frac{1}{2} U_\lambda(R). \quad (13)$$

Граничное условие при $r = R$ соответствует случаю, когда излучение, выходящее с поверхности плазмы, распределено по углам изотропно.

Основное преимущество диффузионной модели состоит в том, что уравнения (11) – (13) существенно проще соответствующих точных выражений (3) – (5). Использование этой модели позволяет относительно легко (с малым временем загрузки CPU) выполнять расчеты радиационных величин U , W , F даже в случае нестационарной плазмодинамики и сложного спектра излучения.

Отметим здесь, что в оптически прозрачной плазме (при $k'_\lambda R \ll 1$), когда длина пробега фотона больше размеров системы, условие применимости равенства (10) нарушается и уравнение диффузии (12) теряет смысл. В этом случае найти значения U_λ в рамках диффузионной модели нельзя. Однако в этом случае $U_\lambda \ll U_{\lambda P}$, и величину W_λ , в соответствии с выражением (8), можно найти, не решая уравнения (12). Значения F_λ в этом случае удобно находить по интегральной формуле:

$$F_\lambda(r) = \frac{1}{r} \int_0^r r' W_\lambda(r') dr'. \quad (14)$$

В оптически плотной плазме (при $k'_\lambda R \gg 1$) в большей части объема плазмы (вдали от границ) в соотношении (11) можно использовать $U_\lambda \approx U_{\lambda P}$ и для нахождения W_λ вычислять дивергенцию потока F_λ . Таким образом, используемой модели оказывается достаточно для нахождения правильных значений W_λ и F_λ в случаях

оптически прозрачной и оптически плотной плазмы. Точность диффузионной модели в случае промежуточных значений оптической плотности столба плазмы может быть оценена только путем сравнения численных расчетов в рамках различных подходов.

Теплообмен излучением в линии

В газоразрядной плазме часто реализуется ситуация, когда она оптически прозрачна для непрерывного излучения, но является оптически плотной для излучения в центре линии. В этом случае формулы (3) – (5) становятся аддитивными относительно коэффициентов поглощения $k_{\lambda}^{(ff)}$, $k_{\lambda}^{(bf)}$, $k_{\lambda}^{(bb)}$ и потери энергии на излучение в континууме и в линиях могут рассчитываться независимо друг от друга:

$$W = W^{(ff)} + W^{(bf)} + W^{(bb)}.$$

Если формалинии излучения заранее известна, то при вычислении $W^{(bb)}$ интегрирование по длине волны можно выполнить аналитически и расчеты существенно упрощаются. В настоящей работе рассматривается плазма дуги высокого давления, когда реализуется столкновительный механизм уширения линий. Это приводит к формированию дисперсионного контура линий:

$$k'_{\lambda} = \frac{k'_0}{1 + \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{w}\right)^2}, \quad (15)$$

где

$$k'_0 = \frac{\lambda_0^4 g_k n_m A_{km}}{8\pi^2 c g_m w} \left[1 - \exp\left(-\frac{hc}{\lambda k_B T_e}\right) \right]$$

– коэффициент поглощения в центре линии [10] с длиной волны λ_0 ; w – полуширина линии на полувысоте контура; g_k, g_m – статистические веса верхнего и нижнего состояний атома соответственно; A_{km} – коэффициент Эйнштейна; n_m – концентрация атомов в нижнем состоянии.

Соотношение (15) позволяет выполнить в формуле (5) интегрирование по длине волны в тех случаях, когда плазма является оптически плотной для излучения в центре линии. Тогда потери энергии на излучение в линии можно представить в виде:

$$W^{(bb)}(r) = W^{(h)} + \Delta W^{(inh)}, \quad (16)$$

где $W^{(h)}$ – потери энергии на излучение в однородной плазме с параметрами, соответствующими точке r (при $k'_{\lambda} = k'(r) = \text{const}$ и $T_e = T_e(r) = \text{const}$); $\Delta W^{(inh)}$ – добавочный член, учитывающий неоднородность плазмы:

$$W^{(h)}(r) = a \frac{E_{km} A_{km} n_k}{\sqrt{k'_0(r)} R} \frac{\zeta(r/R)}{\sqrt{1 - (r/R)^2}}; \quad (17)$$

$$\Delta W^{(inh)}(r) = 0,5a \frac{E_{km} A_{km} n_k}{\sqrt{k'_0(r)} R} \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\alpha_w} d\alpha \times \left[\frac{1}{\alpha^{3/2}} - \frac{q(\alpha)}{\left(\int_0^{\alpha} s(\alpha') d\alpha'\right)^{3/2}} \right]. \quad (18)$$

Здесь $a = \Gamma(1/4)/6\Gamma(3/4) = 0,493111$; $E_{km} = hc/\lambda_0$ и введена функция

$$\zeta(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \sqrt{\sqrt{1 - x^2 \sin^2 \theta} - x \cos \theta}. \quad (19)$$

Отметим, что при $r = 0$ соотношения (14), (15) совпадают с соответствующими выражениями, приведенными в работе [11].

В добавочный член (18), кроме того, введены новые переменные $\alpha = l/R$, $\alpha_w = l_w(r, \theta)/R$ и вспомогательные функции

$$q(\alpha) = \frac{n_k(\alpha) w(\alpha)}{n_k(r) w(r)}; \quad s(\alpha) = \frac{k'_0(\alpha) \left(\frac{w(\alpha)}{w(r)}\right)^2}{k'_0(r)}.$$

Отметим, что $\zeta(x)$ – гладкая функция, медленно убывающая вдоль радиуса от значения $\zeta(0) = 1$ до значения $\zeta(1) = (2/\pi)^{1/2}/3a = 0,539354$. Эта функция хорошо (с погрешностью < 1%) аппроксимируется выражением

$$\zeta(x) = c_0 + c_1(1 - x^2)^{0,42},$$

где $c_0 = \zeta(1)$, $c_1 = 1 - c_0$.

Соотношения (17), (18) справедливы для тех точек плазмы, где выполнены соотношения

$$\delta_1 = k'_0(r)(R - r) \gg 1;$$

$$\delta_2 = \frac{w}{\lambda_0} \frac{hc}{k_B T} \sqrt{k'_0(r)(R - r)} \ll 1. \quad (20)$$

Расчет теплообмена излучением в линии

В качестве модельной задачи рассматривался теплообмен излучением в резонансной линии цезия $6P_{3/2} \rightarrow 6S_{1/2}$ (центру линии соответствует $\lambda_0 = 852,1$ нм). При вычислении полуширины линии w учитывались два механизма уширения: резонансная передача возбуждения и штарковское уширение электронами (см. подробнее [10]). Расчеты выполнены для случая однотемпературной плазмы с модельным профилем температуры, единой для электронов и тяжелых частиц:

$$T(r) = T_0 - (T_0 - T_w)(r/R)^2,$$

$T_0 = 3500$ К, $T_w = 1500$ К при давлении плазмы $p = 240$ Торр.

Результаты расчетов величины спектральных потерь энергии на излучение $W_\lambda(0)$ на оси столба плазмы приведены на рис. 1. Отметим, что в областях спектра, где плазма является оптически тонкой ($\tau_R(\lambda) < 0,2$) и оптически толстой ($\tau_R(\lambda) > 4$), результаты расчетов, полученные в рамках МПИ и диффузионного подхода, практически совпадают с соответствующими асимптотическими решениями (8), (9). Диффузионное приближение дает завышенные значения потерь энергии на излучение во всем диапазоне длин волн. Максимальные значения ошибки достигаются при $\tau_R(\lambda) \approx 1$ и не превышают 25%.

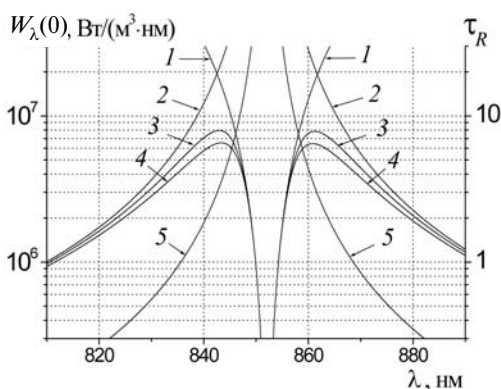


Рис. 1. Зависимости от длины волны основных расчетных величин для излучения в резонансной линии цезия $6P_{3/2} \rightarrow 6S_{1/2}$: спектральной плотности потерь энергии на излучение $W_\lambda(0)$, полученное различными методами (1 – 4), и радиальной оптической плотности плазмы τ_R (5).

Использованы приближения оптически толстой (1) и оптически тонкой (2) плазмы (см. формулы (9) и (8)), диффузионное (3), а также метод прямого интегрирования (4)

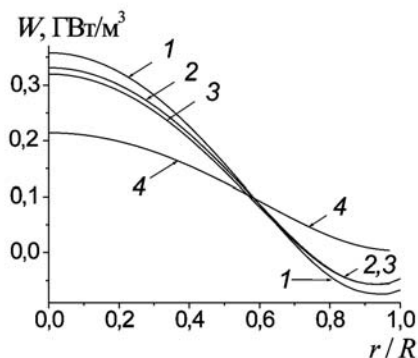


Рис. 2. Расчетное радиальное распределение радиационных потерь энергии в резонансной линии цезия, полученное разными методами: диффузионное приближение (1), теплообмен излучением в приближении однородной (4) и неоднородной (2) плазмы (см. формулы (17) и (18)), методом прямого интегрирования (3)

На рис. 2 приведены результаты расчетов радиационных потерь энергии $W(r)$ на излучение в линии, выполненные различными методами. Результаты, полученные по формулам (18) теплообмена в линии, практически совпадают с результатами МПИ. Некоторое отличие связано с точностью выполнения критериев (20): величина $\delta_2 \approx 0,07$ не слишком мала (параметр $\delta_1 \approx 10^{-5}$ всюду, кроме узкой пристеночной области). Простые формулы (17) для нахождения $W(r)$ в приближении однородной плазмы дают качественно правильный результат в пристеночной области, что позволяет использовать их для предварительных расчетов и оценок. Различие между МПИ и диффузионным приближением невелико и не превышает 15% во всем спектральном диапазоне.

Результаты расчетов для плазмы импульсно-периодического разряда

На рис. 3 и 4 приведены результаты расчетов радиационного теплообмена для столба цезиевой плазмы, параметры которой соответствуют характерному для ИПР режиму [8, 9] при $\nu = 1000$ Гц, $I_{\max} = 78$ А, $R = 2,5$ мм и давлении $P = 744$ Торр в момент окончания импульса тока. На рис. 3 приведены (в относительных единицах) использованные в расчете профили электронной температуры $T_e(r)/T_{e\max}$ и температуры тяжелых частиц $T_h(r)/T_{e\max}$; результаты расчетов потери энергии (тоже в относительных единицах) на излучение $W(r)/W_{\max}$ и радиально-

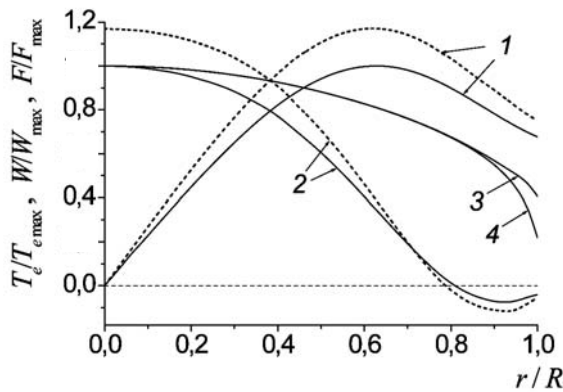


Рис. 3. Расчетные радиальные распределения радиационных величин в столбе плазмы импульсного разряда в цезии, полученные разными методами: потока радиационной энергии $F(r)/F_{\max}$ (1), потери энергии на излучение $W(r)/W_{\max}$ (2), температуры электронов $T_e(r)/T_{e\max}$ (3), температуры тяжелых частиц $T_h(r)/T_{e\max}$ (4). Используются методы прямого интегрирования (сплошные линии) и диффузионное приближение (пунктир)

го потока энергии излучения $F(r)/F_{\max}$, выполненные методом прямого интегрирования и в диффузионном приближении. Максимальные значения величин, использованные для нормировки графиков, составляют соответственно:

$$T_{e\max} = 5711 \text{ К}, W_{\max} = 2,95 \cdot 10^{10} \text{ Дж/м}^3,$$

$$F_{\max} = 1,6 \cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2.$$

Отметим основные особенности радиационного теплообмена в плазме ИПР: немонотонный ход радиальной зависимости потока энергии $F(r)$ и противоположные значения знака потерь энергии $W(r)$ на излучение в приосевой и внешней частях столба дуги. Радиальный поток энергии излучения $F(r)$ в приосевой области (в соответствии с геометрией задачи) линейно увеличивается по мере удаления от оси. Затем, при удалении от оси, снижение температуры плазмы приводит сначала к уменьшению потерь энергии на излучение $W(r)$, а потом и к изменению знака этих потерь, что соответствует поглощению излучения горячей плазмы в более холодной внешней части столба дуги. По этой причине поток энергии $F(r)$ по мере удаления от оси сначала достигает максимальной величины, а затем убывает в холодной области.

На рис. 4 приведены результаты расчетов спектральной плотности потерь энергии $W_\lambda(0)$

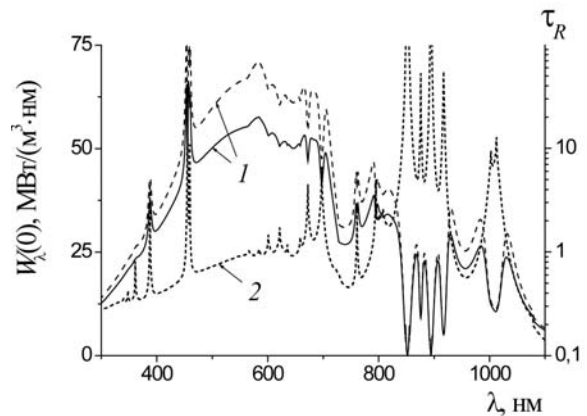


Рис. 4. Зависимости от длины волны основных радиационных величин в столбе плазмы импульсного разряда в цезии: спектральной плотности потерь энергии на излучение $W_\lambda(0)$ (1) и радиальной оптической плотности τ_R (2); 1 – использованы метод МПИ (сплошная линия) и диффузионное приближение (пунктир)

на оси разряда и радиальной оптической плотности столба плазмы $\tau_R(\lambda)$. Хорошо видно, что величина $\tau_R(\lambda)$ является сложной немонотонной функцией длины волны. При этом максимальные значения $W_\lambda(0)$ достигаются в тех частях спектра, где $\tau_R(\lambda) \approx 1$. Это указывает на определяющую роль этих частей спектра в теплообмене излучением.

Сравнение результатов, полученных в диффузионном приближении и в рамках МПИ, показывает, что отличие между ними не превышает 25% во всех рассмотренных режимах ИПР. Отметим, что это касается как спектральных величин F_λ и W_λ , так и интегральных по спектру F и W . Это позволяет использовать диффузионное приближение для качественного анализа процессов радиационного теплообмена и моделирования излучающих разрядов (при сохранении периодического контроля результатов с помощью точных методов).

Итак, в настоящей работе изложен метод прямого интегрирования для расчетов спектральных и интегральных характеристик радиационного теплообмена в аксиально-симметричном столбе плазмы высокого давления. Рассмотрены частные случаи МПИ для расчета радиационного теплообмена в оптически тонкой и толстой плазме и для теплообмена

излучением в линии. Приведены критерии применимости полученных формул. Развита методика использована для расчета теплообмена излучением в столбе плазмы импульсного разряда высокого давления в цезии. Анализ потерь энергии на излучение показал, что теплообмен излучением носит нелокальный характер и наиболее эффективно протекает в спектральных областях, где $\tau_R(\lambda) \approx 1$. В работе выполнено сравнение диффузионного

приближения с МПИ. Разница между результатами расчетов не превышает 25% во всех рассмотренных режимах горения разряда. Это позволяет использовать существенно более эффективное (по затратам времени счета) диффузионное приближение для качественного рассмотрения теплообмена излучением. Результаты, полученные в работе, могут быть использованы при моделировании плазменных источников излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Зельдович, Я.Б.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений [Текст] / Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. — М.: Наука, 1966. — 688 с.
2. **Menart, J.** Radiative transport in a two-dimensional axisymmetric thermal plasma using the S–N discrete ordinates method on a line-by-line basis [Text] / J. Menart // JQSRT. — 2000. — Vol. 67. — P. 273 – 291.
3. **Bouaoun, M.** Discrete ordinates method in the analysis of the radiative transfer in high intensity discharge lamps [Text] / M. Bouaoun, H. Elloumi, K. Charrada [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2005. — Vol. 38 — P. 4053 – 4065.
4. **Liebermann, R.W.** Radiation emission coefficients for sulfur hexafluoride arc plasmas [Text] / R.W. Liebermann, J.J. Lowke // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. — 1975. — Vol. 16. — P. 253 – 264.
5. **Aubrecht, V.** Calculations of radiation transfer in SF₆ plasmas using the method of partial characteristics [Text] / V. Aubrecht, J.J. Lowke // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2000. — Vol. 27. — No. 10 — P. 2066 – 2073.
6. **Nordborg, H.** Self-consistent radiation based modeling of electric arcs: I. Efficient radiation approximations [Text] / H. Nordborg, A.A. Iordanidis // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2008. — Vol. 41. — P. 135205 (10 p).
7. **Бакшт, Ф.Г.** Плазма импульсно-периодического разряда в цезии как эффективный источник света [Текст] / Ф.Г. Бакшт, В.Ф. Лапшин // ЖТФ. — 2002. — Т. 72. — Вып. 7. — С. 100–105.
8. **Baksht, F.G.** Two-temperature modeling of pulsed high pressure caesium radiative discharge with recombination mechanism of light emission [Text] / F.G. Baksht, V.F. Lapshin // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2008. — Vol. 41. — No. 20. — P. 205201(9 p).
9. **Бакшт, Ф.Г.** Особенности формирования непрерывного спектра излучения в видимой области в условиях импульсно-периодического разряда в цезии [Текст] / Ф.Г. Бакшт, В.Б. Каплан, В.Ф. Лапшин, А.М. Марциновский // Письма в ЖТФ. — 2009. — Т. 35 — Вып. 23 — С. 17–22.
10. **Грим, Г.** Уширение линий в плазме [Текст] / Г. Грим. — М.: Мир, 1978. — 425 с.
11. **Биберман, Л.М.** Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы [Текст] / Л.М. Биберман, В.С. Воробьев, И.Т. Якубов. — М.: Наука, 1982. — 376 с.

БАКШТ Фёдор Григорьевич — доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
baksht@mail.ioffe.ru

ЛАПШИН Владимир Фёдорович — кандидат физико-математических наук, доцент Петербургского государственного университета путей сообщения, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.
190031, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 9
lapshinvf@mail.ru

ПЕЛЛИ Александр Витальевич — студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
pelli.alexandr@gmail.com



УДК 539.1

*В.В. Дубов, В.В. Кораблев***РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА ФЛУКТУАЦИОННОМ ПОТЕНЦИАЛЕ ПОЛУПРОВОДНИКА***V.V. Dubov, V.V. Korablev*St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia**SLOW ELECTRONS SCATTERING BY FLUCTUATION POTENTIAL OF SEMICONDUCTOR**

В работе рассмотрено рассеяние электронов малых энергий на флуктуационных потенциалах вблизи поверхности полупроводника. Полученные результаты позволяют использовать электронную спектроскопию высокого энергетического разрешения для извлечения информации о строении поверхности полупроводника и особенностях приповерхностного взаимодействия в области малых энергий. Особое внимание уделено случаю высоких температур, при которых возникает асимметрия пика отраженных электронов.

ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ. КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ. ПОВЕРХНОСТЬ. ПОЛУПРОВОДНИК.

The scattering of low-energy electrons by fluctuation potential near the semiconductor surface is considered. The results obtained can be applied the use of electronic high energy resolution spectroscopy to extract information about the structure of the semiconductor surface and near surface interactions by low energies. Special attention is paid to the case of high temperatures when there is asymmetry of the peak of the reflected electrons.

HIGH RESOLUTION ELECTRON LOSS SPECTROSCOPY. QUASIELASTIC SCATTERING. SURFACE. SEMICONDUCTOR.

В последние годы получила интенсивное развитие электронная спектроскопия малых потерь энергии (или так называемая электронная спектроскопия высокого энергетического разрешения) как один из самых чувствительных корпускулярных методов исследования поверхности и поверхностной области твердых тел. Такие возможности метода определило экспериментально достигнутое исследователями энергетическое разрешение менее 1 мэВ для электронных спектрометров. В первую очередь этот метод используется для исследования поверхностей кристаллов, процессов адсорбции [1 – 4], фононных спектров [4 – 5]. Предлагаемое в настоящей статье развитие этого метода

позволяет его использовать для детального исследования свойств и электронного строения приповерхностной области полупроводников.

При взаимодействии с веществом достаточно медленных (с энергией не более десятков электронвольт) электронов существенны процессы неупругого рассеяния, в которых энергия частиц меняется на величину от значения менее 1 мэВ до 100 мэВ. Такие малые потери энергии определяются спектром низкоэнергетических элементарных возбуждений в веществе, они чувствительны к температуре и обычно являются результатом кратного рассеяния. Эти малые потери энергии происходят, например, при взаимодействии с адсорбированными молеку-

лами, тонкими металлическими пленками, поверхностными атомами и со многими иными поверхностными либо приповерхностными образованиями, а также с полупроводниками. При движении электронов внутри объема твердого тела малые потери энергии могут происходить при рассеянии частиц на отдельных атомах. В случае полупроводников малые потери энергии обусловлены существованием низкоэнергетичных (от величин менее 0,1 мэВ) колебаний в веществе, в частности плазменных колебаний. Определяющую роль в таких взаимодействиях со стороны кристалла играют поверхностные электроны. Мы будем рассматривать отражение внешних электронов от полубесконечных кристаллов. Внешние электроны могут рассеяться неупруго внутри кристалла в приповерхностном слое толщины l_p , равной глубине проникновения первичной частицы в вещество, а могут испытывать акт неупругого рассеяния, находясь вне твердого тела. В рассматриваемом диапазоне энергий электронов внутри кристалла они двигаются в области значений толщины порядка 10 \AA и при этом могут испытывать, наряду с упругими, всевозможные неупругие соударения. Внешний электрон будет взаимодействовать с другими частицами и полями при его движении внутри твердого тела, но он будет также испытывать взаимодействие с плазменными возбуждениями и вне кристалла: при подлете к твердому телу, а также при движении после отражения от кристалла. Величина такого взаимодействия будет малой — не более нескольких миллиэлектронвольт. Однако это поле распространяется на большие расстояния от поверхности кристалла [6]. Будет реализовываться ситуация, когда внешние электроны в течение довольно длительного времени пролета области внешнего протяженного потенциала взаимодействуют со слабым кулоновским полем, двигаясь вне среды. Это приводит к кратным потерям энергии рассматриваемых частиц. Область такого взаимодействия вне твердого тела существенно больше величины l_p . Протяженное поле определяется флуктуациями плотности электрического заряда в кристалле — отклонениями плотности заряда от равновесного значения.

Вследствие общей электронейтральности системы это поле имеет дипольный характер. Эффекты запаздывания поля электромагнитных флуктуаций можно не учитывать; это происходит вследствие выполнения условия $cq_{\parallel} \gg \omega$, где c — скорость света, q_{\parallel} — тангенциальная компонента волнового вектора, переданного кристаллу электроном, потерявшим энергию $\hbar\omega$. Существенный вклад в вероятность неупругого рассеяния такой потенциал вносит при малых значениях q_{\parallel} . При этом рассеяние на нем происходит в большой области пространства протяженности q_{\parallel}^{-1} вдоль оси z , нормальной к поверхности твердого тела. И для описания такого рассеяния необходимо учитывать процессы на расстояниях q_{\parallel}^{-1} от поверхности кристалла. Отметим, что обычно исследователи интересовались либо непосредственно поверхностью, либо очень тонкой областью вблизи нее [7].

Целью представленной работы является установление общих закономерностей рассеяния медленных электронов на протяженном флуктуационном потенциале. Это позволяет использовать методы электронной спектроскопии высокого энергетического разрешения в качестве инструмента для исследования как свойств и характеристик твердого тела, так и особенностей движения медленных электронов вблизи поверхности полупроводникового кристалла.

Рассеяние электронов вблизи поверхности

Взаимодействие электронов с кристаллом описывается временным уравнением Шредингера с потенциалом $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$. Интересующая нас часть $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$ содержит протяженный потенциал $e\phi(\mathbf{r}, t)$ и потенциал $U_{bs}(\mathbf{r})$, на котором в основном идет упругое рассеяние на большие углы. Дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов вблизи поверхности твердого тела можно выразить через средний квадрат флуктуационной части функции Грина [8]:

$$\frac{d\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \frac{m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{k_f}{k_i} \lim_{t' \rightarrow t} \frac{\partial}{\partial t'} \left\langle \left| \hat{G}(t', \mathbf{k}_f; t, \mathbf{k}_i) \right|^2 \right\rangle,$$



где E_i, \mathbf{k}_i и E_f, \mathbf{k}_f – энергии и волновые векторы электрона соответственно до и после рассеяния его твердым телом.

Усреднение проводится по ансамблю Гиббса, соответствующему температуре, при которой находится кристалл. Входящий в приведенную формулу квадрат модуля выражается через двухчастичную функцию Грина [9]:

$$G_{12}(t_1, \mathbf{k}_1; t_2, \mathbf{k}_2; t_1, \mathbf{k}'_1; t_2, \mathbf{k}'_2) = \langle \hat{G}_1(t_1, \mathbf{k}_1; t_1, \mathbf{k}'_1) \hat{G}_2^*(t_2, \mathbf{k}_2; t_2, \mathbf{k}'_2) \rangle.$$

Из всех групп вторичных электронов нас будут интересовать только группы электронов, потерявших малую энергию при взаимодействии с протяженным потенциалом $\phi(\mathbf{r}, t)$. Такие изменения в одном элементарном акте рассеяния составляют величину от 0,1 мэВ. Упругое отражение медленных электронов происходит в основном на потенциале U_{bs} [6]. Это связано с тем, что упругое рассеяние электронов рассматриваемых энергий на большие углы за счет одного только дифракционного рассеяния весьма маловероятно. Фактически процесс упругого рассеяния электронов назад, обуславливающий проявление как ориентационных эффектов на угловых зависимостях интенсивностей, так и особенностей энергетических спектров отраженных частиц, может быть рассмотрен двухступенчато. Вначале проникающие в твердое тело электроны испытывают дифракционное рассеяние вперед на плоскостях, составляющих малый угол с направлением распространения падающих на кристалл электронов (так называемая дифракция Лауэ). Обычно считается, что эти плоскости расположены нормально к поверхности кристалла (при углах падения, не слишком отличающихся от нормального). Затем внешние электроны испытывают акт упругого некогерентного рассеяния на большой угол.

Вероятность этого некогерентного рассеяния обусловлена характером пространственного распределения дифрагирующих электронов. Это распределение зависит, конечно, от угла падения первичных электронов на поверхность кристалла и от их энергий. При некоторых значениях этих параметров квадрат модуля волновой функции дифрагирующих электронов

может оказаться максимален в плоскости расположения атомных ядер. По существующим представлениям это должно приводить к увеличению некогерентного рассеяния электронов на большие углы и, следовательно, к увеличению коэффициента отражения.

Преимущественная локализация электронов (при других значениях углов и энергий) в межплоскостном пространстве должна, следовательно, сопровождаться уменьшением коэффициента упругого отражения. При этом может уменьшаться и вероятность выхода из кристалла неупругорассеянных электронов, что в совокупности приводит к явлению аномального прохождения электронов.

В то же время, имеется возможность учесть влияние неупругих каналов рассеяния, не связанных с рассеянием на протяженном потенциале, в приближении оптического потенциала [10]. Рассеяние на протяженном потенциале с малыми потерями энергии в одном элементарном акте рассеяния можно рассматривать в первом (борновском) приближении, а рассеяние на U_{bs} удастся учесть точно. Последнее следует делать, в частности, вследствие некорректности описания такого рассеяния в борновском приближении. При этом можно использовать модель последовательных столкновений [11].

Упругое рассеяние на атомах кристаллической решетки происходит на потенциале, который можно представить в модельной форме в виде двух слагаемых: одно из них определяет формирование дифракционного волнового поля электрона, проникающего в кристалл, а другое отвечает за рассеяние электронов на большие углы. При рассматриваемых энергиях электронов дифракционное поле формируется, в основном, потенциалом, зависящим от тангенциальной (по отношению к поверхности твердого тела) координаты. Вся зависимость полного потенциала, отвечающего за упругое рассеяние частицы, будет сосредотачиваться во втором слагаемом потенциала – U_{bs} , что и определяет его исключительную роль в рассеянии электронов на большие углы.

Поскольку рассеяние электронов на большие углы в исследуемом диапазоне энергий нельзя рассматривать в борновском приближении, функция Грина этого процесса должна

зависеть от U_{bs} . В нулевом по U_{bs} приближении в координатном представлении эта функция Грина имеет обычный вид:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Поправка первого приближения к функции Грина, написанной в импульсном представлении, имеет вид

$$G_0(\mathbf{p})U_{bs}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')G_0(\mathbf{p}') = G_0(\mathbf{p})G_0(\mathbf{p}')u(\mathbf{p}-\mathbf{p}')S(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),$$

где функция

$$S(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = \sum_l \exp[-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{R}_l] = \prod_\alpha \frac{1 - \exp[-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{a}_\alpha N_\alpha]}{1 - \exp[-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{a}_\alpha]}.$$

Здесь α пробегает три значения, \mathbf{a}_α – вектор трансляции атомов решетки в α -направлении, N_α – число атомов решетки твердого тела в направлении вектора трансляции \mathbf{a}_α , $u(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ – Фурье-образ потенциала одного отдельного атома.

Следующее приближение дает

$$\int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} G_0(\mathbf{p}) G_0(\mathbf{p}') G_0(\mathbf{p}'') \times U_{bs}(\mathbf{p}''-\mathbf{p}') U_{bs}(\mathbf{p}-\mathbf{p}'') = G_0(\mathbf{p}) \times G_0(\mathbf{p}') \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} G_0(\mathbf{p}'') \times u(\mathbf{p}''-\mathbf{p}') \times u(\mathbf{p}-\mathbf{p}'') \times \left\{ S(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \sum_{l,l'} \exp\{-i[(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')\mathbf{R}_l + (\mathbf{p}''-\mathbf{p}')\mathbf{R}_{l'}]\} \right\}.$$

Первое слагаемое в фигурных скобках описывает двукратное рассеяние на одном о том же атоме, второе – рассеяние электронов на двух различных атомах.

Вклад последнего члена меньше, чем вклад слагаемого, содержащего функцию S . Это связано с тем, что $S(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ не налагает никаких огра-

ничений на область интегрирования по \mathbf{p}'' . Поэтому при переходе к координатному представлению функции Грина $G_0(\mathbf{p}'')$ будет соответствовать функция Грина от малой разности координат. Физически это связано с тем, что между двумя рассеяниями на одном атоме электрон проходит совсем небольшой путь, фактически не выходя за пределы рассеивающего атома.

В слагаемое с суммой вида $\sum_{l,l'}$ импульс \mathbf{p}'' входит таким образом, что интеграл по \mathbf{p}'' значителен, если только $|\mathbf{p}''|$ мало (при произвольных углах между \mathbf{p}'' и \mathbf{a}_α) или мала область возможных углов при большом интервале значений модуля $|\mathbf{p}''|$. Поэтому после перехода к координатному представлению соответствующая длина будет большой. Это соответствует тому, что электрон должен пройти значительное расстояние от одного атома до другого.

Поскольку в G_0 -функции фактически содержится затухание, обусловленное неупругими, например, процессами, внутренняя функция G_0 вносит в этом случае в функцию $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ добавочную малость. Далее вкладом таких слагаемых будем пренебрегать.

В итоге получаем следующее уравнения для функции Грина рассматриваемого процесса:

$$G(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = G_0(\mathbf{p})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} \times G_0(\mathbf{p})u(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')S(\mathbf{p}-\mathbf{p}')G_u(\mathbf{p}'', \mathbf{p}').$$

Эта функция G , таким образом, точно описывает взаимодействие электрона с каждым отдельным атомом, но не учитывает кратные столкновения, связанные с рассеянием на большие углы, на различных атомах. Здесь G_u – функция Грина электрона, точно описывающая взаимодействие с одним единственным атомом, находящимся в начале координат. Такая функция удовлетворяет обычному уравнению Дайсона:

$$G_u(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = G_0(\mathbf{p})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} G_0(\mathbf{p})u(\mathbf{p}-\mathbf{p}'')G_u(\mathbf{p}'', \mathbf{p}').$$

Два последних уравнения для функций Грина могут быть решены в случае упругого рассе-



яния электронов рассматриваемого диапазона энергий на атомах кристаллической решетки.

Решение этих уравнений позволяет записывать конкретный вид волновой функции электронов, испытавших упругое рассеяние назад на большой угол в рассматриваемом диапазоне энергий, в аналитическом, удобном для детального анализа, виде:

$$\begin{aligned} \psi_{bs}(\mathbf{r}) = & \frac{2m}{\hbar^2} \sum_l \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \times \\ & \times G_0(\mathbf{p}) \int d^3 r' \psi_i(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l) \times \\ & \times \left\{ e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'} + \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} u(\mathbf{p} - \mathbf{p}'') \times \right. \\ & \left. \times S(\mathbf{p} - \mathbf{p}') G_u(\mathbf{p}'', \mathbf{p}') e^{-i\mathbf{p}''\mathbf{r}'} \right\}. \end{aligned}$$

Эта функция имеет вид суммы двух членов, первый из которых описывает рассеяние дифрагирующих электронов на большие углы в борновском приближении, второй дополняет борновское решение до точного решения. Зависимость первого слагаемого от радиус-вектора совершенно ясна и соответствует координатной зависимости функции Грина, взятой в нулевом приближении.

Второе слагаемое имеет более сложную координатную зависимость, но асимптотическое поведение этого слагаемого при больших значениях радиус-вектора может быть установлено при достаточно общих предположениях о виде атомного потенциала. А именно это асимптотическое поведение волновой функции отраженного от кристалла электрона и определяет интенсивности регистрируемых при экспериментальных наблюдениях электронов.

Знание конкретного вида приведенной волновой функции наряду с записью полученных ниже результатов для интенсивностей отраженных от кристаллических твердых тел электронов после рассеяния на протяженном флуктуационном потенциале позволяет более четко идентифицировать и выделять различные группы частиц при анализе экспериментальных спектров отраженных электронов.

Приведенное выражение для волновой функции описывает отраженные от твердого тела электроны в упомянутой выше модели последовательных соударений. Далее мы более

точно запишем интенсивности отраженных от кристаллических сред электронов рассматриваемого диапазона энергий в случае малых потерь энергии частиц.

Квазиупругое отражение электронов

Квазиупругое рассеяние электронов удобно рассматривать в рамках предложенной ранее диаграммной техники [11], которая использует подход, аналогичный рассматриваемому в работах Дьюка и Лармора [12, 13], и является развитием метода Бома и Пайнса [14] для случая полубесконечного кристалла. При этом внутренней электронной линии ставим в соответствие энергию E , волновой вектор \mathbf{k} , функцию Грина

$$G_R = G_R(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\perp}, E) =$$

$$= \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}_{\parallel})^2 - \Sigma(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\perp}, E) \right]^{-1}.$$

Здесь массовый оператор Σ можно вычислять в приближении оптического потенциала [15]. Точному (неборновскому) учету рассеяния на большой угол ставится в соответствие величина $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_a} t(\mathbf{q}, E)$, где $\mathbf{q} = \mathbf{k}_{in} - \mathbf{k}_{out}$ — разность входящего и выходящего волновых векторов, t — точная неборновская амплитуда упругого рассеяния на атомном остове на большой угол.

Бозонной линии ставится в соответствие величина

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} e^{-iq_z z + iq'_z z'} \times \\ & \times \left\langle \delta \bar{U}^+(\mathbf{q}_{\parallel}, z', t + \tau) \delta \bar{U}(\mathbf{q}_{\parallel}, z, t) \right\rangle_T. \end{aligned}$$

В этом случае получаем следующее выражение для сечения рассматриваемого процесса:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE_f d\Omega_f} = & \alpha |t(E)|^2 \frac{k_f}{k_i} \times \\ & \times \frac{q_{\parallel}^2}{(q_{\parallel}^2 + q_{\perp}^2)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} e^{q_{\parallel}(z+z')} \times \\ & \times \left\langle \delta \bar{U}^+(\mathbf{k}_{f\parallel} - \mathbf{k}_{i\parallel}, z', t + \tau) \times \right. \\ & \left. \times \delta \bar{U}(\mathbf{k}_{i\parallel} - \mathbf{k}_{f\parallel}, z, t) \right\rangle_T \end{aligned}$$

(подынтегральное выражение в силу пространственной зависимости протяженного потенциала не зависит от Z). Здесь \mathbf{q} есть волновой вектор, переданный электроном при неупругом рассеянии на потенциале $\delta\bar{U} = e\varphi(\mathbf{r}, t)$, α – постоянная.

Интеграл в записанном для сечения выражении определяется величиной корреляторов электрических полей в среде:

$$\langle E_i(\mathbf{r}, t) E_k(\mathbf{r}', t') \rangle_T,$$

которые связаны с функцией Грина электромагнитного поля [15].

Точное вычисление сечения в общем виде сложно. Возможны два пути дальнейшего рассмотрения интересующей нас проблемы вычисления искомого сечения. Во-первых, современные компьютерные средства позволяют численно вычислять зависимости сечения, а следовательно, и спектры отраженных электронов. Во-вторых, в некоторых случаях это выражение можно записать в аналитическом виде для простых, но достаточно общих моделей.

Мы рассматриваем взаимодействие электрона с полубесконечным кристаллом. В случае кристалла полупроводника вблизи поверхности обычно образуется слой, обедненный свободными носителями заряда с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_s(\omega)$, отличной от объемной $\varepsilon_b(\omega)$.

Диэлектрическая проницаемость таких систем известна, и в интересующем нас случае она достаточно корректно может быть записана в следующем виде:

$$\varepsilon(q_{\parallel}, \omega) = \varepsilon_s(\omega) \times \frac{\varepsilon_b(\omega) \operatorname{ch} q_{\parallel} d + \varepsilon_s(\omega) \operatorname{sh} q_{\parallel} d}{\varepsilon_b(\omega) \operatorname{sh} q_{\parallel} d + \varepsilon_s(\omega) \operatorname{ch} q_{\parallel} d},$$

где d – толщина обедненного слоя.

Тогда сечение рассматриваемого процесса можно вычислить аналитически и записать выражение для интенсивности отражения электронов от кристалла в телесный угол $d\Omega$ с потерей энергии $\hbar\omega$. Следует помнить, что мы получили формулы, учитывающие однократное рассеяние на протяженном флуктуационном потенциале. Если тепловые множители в этих зависимостях достаточно велики, то будут су-

щественны потери многократные. Вероятность многократного неупругого рассеяния $W(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ связана [11] с вероятностью однократного рассеяния $W_s(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ следующим образом:

$$W(\omega) = \int dt e^{i\omega t} \exp \left\{ \int_0^{\infty} d\omega' W_s(\omega') \times \right. \\ \left. \times \left[[n(\omega') + 1] [e^{i\omega' t} - 1] + n(\omega') [e^{-i\omega' t} - 1] \right] \right\}.$$

Величина $W_s(\omega)$ получается из $W_s(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)$ интегрированием по величине телесного угла $d\Omega_f$. При этом необходимо учитывать геометрию процесса рассеяния. Полученные формулы для сечений и интенсивностей описывают энергетический спектр электронов, отраженных от твердых тел с малыми изменениями энергии.

Когда изменения энергии составляют величины (от десятых долей до десятков миллиэлектронвольт) меньшие или порядка тепловой энергии kT , то рассматриваемое неупругое рассеяние проявляется обычно в виде уширения пика упругоотраженных электронов. Исходное, близкое к гауссовскому, энергетическое распределение электронов в результате неупругого рассеяния трансформируется в распределение, описываемое зависимостью $W(\omega)$. Вследствие малости изменений энергии такое рассеяние принято называть квазиупругим. Важной характеристикой спектра квазиупруго отраженных электронов является полуширина кривой зависимости $W(\omega)$. Ее значение соответствует энергетической полуширине пика электронов, отраженных от кристалла в направлении вблизи зеркального.

Особые картины наблюдаются, когда в качестве кристалла, от которого отражаются электроны, мы будем использовать легированные полупроводники. Было детально рассмотрено взаимодействие электронов энергии порядка 10 эВ с полубесконечными полупроводниковыми кристаллами, легированным донорами различной концентрации. В зависимости от значений параметров, в том числе от степени легирования, изменяются характеристики рассеяния электронов протяженным потенциалом, что отражается на виде спектров. Формулы, полученные нами в результате квантовомеха-



нического рассмотрения и приведенные выше в представленной работе, позволяют анализировать и сравнивать спектры с различными параметрами и характеристиками, записанные как в аналитических приближениях различной степени точности, так и полученные численно с помощью компьютерных расчетов. Наиболее информативными оказываются спектры при малой кратности потерь энергии электроном в результате рассеяния на протяженном флуктуационном потенциале. В частности, по форме энергетического спектра отраженных электронов, особенно по его асимметрии, можно извлекать информацию о характеристиках электронов приповерхностных зон исследуемых полупроводниковых кристаллов. Можно не только определять вид электронной поверхностной зоны, ответственной за формирование

протяженного потенциала, но и извлекать информацию о конкретных законах дисперсии электронов поверхностных зон исследуемого кристалла. Асимметричное уширение пика квазиупруго отраженных электронов при обычных параметрах полупроводниковых кристаллов и степенях легирования порядка $N_d \propto 10^{16} \text{ см}^{-3}$ начинает проявляться уже при температурах образцов около 500 К, что существенно упрощает доступность проведения экспериментов.

Проведенное теоретическое рассмотрение позволяет использовать электронную спектроскопию высокого энергетического разрешения как инструмент для детального изучения процессов и характеристик поверхности и приповерхностной области полупроводниковых кристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Оура, К.** Введение в физику поверхности [Текст] / К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин [и др]; Под ред. В.И. Сергиенко. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
2. **Stietz, F.** High-resolution study of dipole-active vibrations at the Ag(110)(n \times 1)O surface [Text] / F. Stietz, A. Pantfoerder, J. Schaefer [et al.] // Surf. Sci. – 1994. – Vol. 318. – P. L1201 – L1205.
3. **Mills, D.L.** The scattering of low energy electrons by electric field fluctuations near crystal surfaces [Text] / D.L. Mills // Surf. Sci. – 1975. – Vol.48. – P. 59 – 79.
4. **Andersson, S.** Inelastic electron scattering by a collective vibrational mode of adsorbed CO [Text] / S. Andersson, B.N. Persson // Phys. Rev. Lett. – 1980. – Vol. 45. – P. 1421–1424.
5. **Kelly, M.K.** Direct picture local electronic structure during the Si(111)7 \times 7 – Al Schottky barrier formation process [Text] / M.K. Kelly, G. Magaritondo, L. Papagno, G.J. Lapeyre // Phys. Rev. – 1986. – Vol. B34. – P. 6011–6013.
6. **Wallis, R.F.** Progress in surface science [Text] / R.F. Wallis // N.Y.: Pergamon Press, 1974. – Vol. 4. – 233 p.
7. **Dubois, L.H.** Inelastic scattering of electrons from ionic crystals with a highly conducting overlayer [Text] / L.H. Dubois, G.P. Schwartz, R.E. Camley, D.L. Mills // Phys. Rev. – 1984. – Vol. B29. – P. 3208 – 3216.
8. **Кухаренко, Ю.А.** К теории рассеяния медленных электронов в твердых телах [Текст] / Ю.А. Кухаренко // ДАН СССР. – 1978. – Vol. 243. – P. 321–322.
9. **Румянцев, В.В.** Влияние кристаллической структуры твердого тела на упругое отражение электронов промежуточных энергий [Текст] / В.В. Румянцев, В.В. Кораблев, В.В. Дубов, Ю.А. Морозов // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1982. – Vol. 46. – P. 1336–1341.
10. **Slater, J.C.** Damped electron waves in crystals [Text] / J.C. Slater // Phys. Rev. – 1937. – Vol. 51. – P. 840 – 846.
11. **Дубов, В.В.** Взаимодействие электронов промежуточных энергий с приповерхностной областью твердых тел [Текст] / В.В. Дубов. – СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2002. – 157 с.
12. **Duke, C.B.** Effect of lattice vibration in a multiple-scattering description of low-energy electron diffraction. I. Formal perturbation theory [Text] / C.B. Duke, G.E. Laramore // Phys. Rev. – 1970. – Vol. B2. – P. 4765 – 4795.
13. **Duke, C.B.** Quantum field theory of inelastic diffraction. I. Low-order perturbation theory [Text] / C.B. Duke, G.E. Laramore // Phys. Rev. – 1971. – Vol. B3. – P. 3183 – 3197.
14. **Bohm, D.** A collective description of electron interactions. I. Magnetic interactions [Text] / D. Bohm, D.A. Pines // Phys. Rev. – 1951. – Vol. 82. – P. 625–634.
15. **Абрикосов, А.А.** Методы квантовой теории поля в статистической физике [Текст] / А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. – М.: ГИФМЛ, 1962. – 444 с.

ДУБОВ Виктор Викторович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vicvicdub@mail.ru

КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29



УДК 539.1

*В.В. Дубов, В.В. Кораблев, М.Ш. Сугаипов***РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПОВЕРХНОСТЬЮ
ПОЛУПРОВОДНИКА С ЕСТЕСТВЕННЫМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ***V.V. Dubov¹, V.V. Korablev², M.S. Sugaipov³*^{1, 2} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia³ Chechen State University,
32 A. Sheripov St., Grozny, Chechen Republic, 364907, Russia**RESONANCE ELECTRON SCATTERING BY THE SURFACE
OF SEMICONDUCTOR WITH THE NATURAL NONUNIFORMITIES**

Рассмотрено влияние естественных неоднородностей поверхности полупроводника на характеристики поверхностного резонансного рассеяния электронов промежуточных энергий. Анализ проводился как для случая неполяризованных налетающих на твердое тело частиц, так и для поляризованных электронов. Показано, что процессы резонансного поверхностного рассеяния являются чувствительными к неоднородностям поверхностного потенциала. Поэтому при исследовании поверхностных резонансов в общем случае необходимо также учитывать влияния естественных неоднородностей на наблюдаемые зависимости и эффекты.

ПОВЕРХНОСТНЫЕ РЕЗОНАНСЫ. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ. ПОЛУПРОВОДНИК. ЕСТЕСТВЕННЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ.

The effect of different types of natural nonuniformities of the semiconductor surface on the characteristics of the surface resonance scattering of electrons at intermediate energies has been considered. Analysis was conducted both for the case of the nonpolarized particles and for the polarized electrons. It was shown that the processes of resonance surface scattering were sensitive to nonuniformities of surface potential. Therefore with a study of surface resonances in the general case it is also necessary to consider the effects of natural nonuniformities on the observed dependences and results.

SURFACE RESONANCE. ELECTRON SCATTERING. SEMICONDUCTOR. NATURAL NONUNIFORMITIES.

Физические процессы вблизи поверхности играют важную роль в многочисленных задачах физики, полупроводниковых технологиях, в том числе наноэлектронике. На исследованиях таких взаимодействий базируются современные методы контроля поверхности. Электронные пучки являются одним из самых эффективных инструментов детального изучения поверхности и приповерхностной области твердого тела на атомарном уровне. Чувствительность метода может значительно повышаться в случае резонансного рассеяния частиц. Естественные неоднородности, существующие вблизи поверхности полупроводников, оказывают важное

влияние на процессы рассеяния электронов вблизи этой поверхности. Мы рассмотрим это влияние как для случая неполяризованных частиц, налетающих на твердое тело, так и для поляризованных электронов.

Резонансные поверхностные состояния

Рассмотрим взаимодействие с кристаллическими твердыми телами внешних электронов, обладающих энергией E , не превышающей, как правило, 100 эВ. В экспериментальных исследованиях по мере развития техники, при достижении разрешения аппаратуры по энергии порядка 10 мэВ, а по углу -1° , на энергетиче-

ских спектрах электронов, упруго отраженных от кристаллов, стали наблюдаться новые тонкие структуры.

Часть особенностей этой тонкой структуры коррелирует с энергией возникновения поверхностных дифракционных пучков, проявляясь вблизи энергетических порогов при энергиях, чуть меньше пороговых. Такие структуры оказались чувствительными к адсорбции газов на поверхности, быстро уменьшаясь при неупорядоченной адсорбции. Как выяснилось, эти структуры возникают в результате резонансного взаимодействия электронов с поверхностью твердого тела. Поверхностные резонансы обусловлены квазистационарными электронными поверхностными состояниями. Последние могут быть связаны с обрывом периодического потенциала твердого тела вблизи его поверхности (в случае поверхностных таммовских состояний), либо, в большинстве случаев, определяются приповерхностным потенциалом сил изображения электрона.

Поверхностные резонансные состояния второго типа не связаны прямо с внутрикристаллической структурой твердого тела. Они, например, могут существовать также и на поверхностях жидких фаз. В использовавшихся моделях рассматривался электрон, движущийся вдоль поверхности, а его нормальное по отношению к плоскости поверхности движение ограничивалось, с одной стороны, потенциалом сил изображения, а с другой – внутренним потенциалом твердого тела. В работах авторов данной статьи [1, 2] показано, что, вообще говоря, последнее разделение потенциала на две части – вблизи поверхности со стороны вакуума и в приповерхностной области твердого тела – не полностью отражает реальную ситуацию. Следует рассматривать единый потенциал, имеющий асимптотиками при нормальном удалении в обе стороны от поверхности две упомянутые части потенциала: потенциал изображения и внутрикристаллический потенциал.

Качественное отличие рассматриваемых резонансов от общеизвестных атомных или ядерных резонансов заключается в том, что в атомном случае рассеяние происходит на трехмерном центральном потенциале. В нашем же случае рассеяние идет на одномерном несимметричном приповерхностном потенциале. Важ-

но также, что при этом энергия первичного электрона определенным образом перераспределяется между двумя составляющими: энергией движения, нормального к поверхности, и энергией движения вдоль поверхности.

Описываемый эффект впервые заметил Макрей [3] и подробно исследовал его в работе [4]. При рассматриваемом резонансном рассеянии электрон длительное время находится вблизи поверхности твердого тела. Рассеяние происходит при определенных значениях параметров, характеризующих движущийся электрон. Такие поверхностные состояния возникают в ограниченном интервале значений энергии E и тангенциальной составляющей k_{\parallel} волнового вектора электрона. Наглядно это можно пояснить следующим образом. При достаточно малых энергиях первичных электронов, падающих на твердое тело, в экспериментах будет наблюдаться только $(0, 0)$ -пучок, отраженный от поверхности. С увеличением энергии электронов радиус сферы Эвальда увеличивается и приближается к стержню (или стержням) обратной двумерной решетки кристалла. Вблизи значений энергии, когда стержни обратной решетки касаются сферы Эвальда, имеет место наблюдаемый в экспериментах порог возникновения дифракционного пучка (или пучков) более высокого порядка. Безусловно, что такое кинематическое приближение, используемое в качестве иллюстрации, не дает корректного описания физической картины изучаемого явления. Теоретическое описание следует проводить, и оно проводится, в динамическом приближении.

Особый интерес представляет ситуация, когда стержни обратной решетки, не касаясь сферы Эвальда, проходят вблизи нее. Запишем полную энергию внешней частицы в виде:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}, \quad (1)$$

где E_n – энергия поперечного движения электрона, k_{\parallel} – тангенциальная компонента волнового вектора электрона.

Если вблизи поверхности кристалла величина энергии поперечного движения электрона будет отрицательной, то промежуточное рассеянное состояние может реализовываться



в рассматриваемой ситуации, когда стержни обратной решетки проходят вблизи, но вне сферы Эвальда. При этом в рассеянном резонансном состоянии волновые векторы \mathbf{k}_{0g} и \mathbf{k}_{0g}' могут либо полностью совпадать, либо быть почти коллинеарными.

Именно такая ситуация, которая может возникать при движении частицы вблизи поверхности твердого тела в его приповерхностном потенциале, и реализуется при поверхностном резонансном рассеянии. В полном потенциале могут существовать связанные состояния частицы. Это связано с тем, что энергетические уровни поперечного движения частицы в приповерхностном потенциале лежат ниже уровня вакуума. При захвате в связанные состояния происходит перераспределение энергии электрона между энергией поперечного и тангенциального движения так, что энергия тангенциального движения возрастает. Захватываясь на такой уровень, электрон увеличивает величину модуля тангенциальной компоненты своего волнового вектора. Это связано с существованием механизма, действующего в следующем направлении. Падающий на кристалл электрон воспринимает вектор обратной поверхностной решетки, который при поверхностной дифракции лежит в плоскости этой решетки, и нормальная составляющая кинетической энергии уменьшается. Это уменьшение нормальной составляющей приводит, при неизменной полной энергии, к захвату электрона, испытавшего поверхностную дифракцию, в связанное состояние, которое отвечает одному из энергетических уровней, существующему в приповерхностном потенциале вещества.

Таким образом, внешняя частица может захватиться в приповерхностное состояние даже в том случае, если ее энергия E меньше порогового значения E_{th} возникновения нового дифракционного пучка. Вероятность такого захвата определяется конкретным видом приповерхностного потенциала. С этим связана особая роль определения приповерхностного потенциала твердого тела в теории поверхностного резонансного рассеяния. В то же время вышеизложенное позволяет использовать такое рассеяние как уникальный инструмент для детального исследования формы приповерхност-

ного потенциального барьера, в том числе с помощью решения обратной задачи теории рассеяния. Как и любой иной резонанс, поверхностное резонансное рассеяние оказывается особо чувствительным к точности выполнения резонансных условий и, тем самым, к наличию и характеристикам естественных неоднородностей приповерхностной потенциальной энергии.

На форме приповерхностного потенциала, в том числе потенциала сил изображения, непосредственно вблизи поверхности твердого тела сказываются дисперсия поляризуемости среды, квантовый обмен и корреляционные эффекты. В работах авторов данной статьи [5–8] было показано, что в случае полупроводниковых материалов поляризуемости собственных электронов полупроводника, находящихся на самой поверхности вещества, достаточно для создания приповерхностного потенциала сил изображения непосредственно вблизи поверхности, с помощью которого можно корректно описать процесс рассматриваемого резонансного рассеяния.

При экспериментальных наблюдениях описанный эффект приводит к тому, что на результирующих интенсивностях отраженных электронов появляются осцилляции, соответствующие ридберговской серии энергий, сходящейся к значению энергии порога возникновения нового дифракционного пучка.

Величины ширин энергетических уровней таких ридберговских серий будут соответствовать не очень большим временам жизни этих состояний. Волновые функции поверхностных резонансных состояний часто «перекрываются» с волновыми функциями блоховских состояний, выступающими за границу твердого тела. Это приводит к сильному затуханию состояний, связанных с потенциалом сил изображения. В то же время для поверхностных состояний время жизни относительно неупругих соударений будет больше, чем в случае объемных состояний с такой же энергией. Время жизни поверхностного резонансного состояния будет увеличиваться, если энергия поверхностного резонанса лежит в области энергий, соответствующей запрещенной энергетической зоне Бриллюэна. Также более резкими будут резонансы для поверхностных состояний, локали-

зованных на некотором расстоянии от поверхности в вакуум. Это, например, имеет место для достаточно высокоэнергетических уровней ридберговской серии. Обычно значение энергетической ширины особенностей на спектрах упруго отраженных электронов, связанных с рассеянием на поверхностных резонансах, составляет величину порядка 30 – 100 мэВ.

Детальное рассмотрение движения электрона, захваченного в приповерхностное резонансное состояние, можно проводить, используя диаграммную технику, предложенную ранее одним из авторов данной статьи [2]. Для описания движения можно использовать общепринятые обозначения для коэффициентов: прохождения поверхностного барьера – T , отражения от поверхностного барьера – R , прохождения в подложку-среду – D и отражения от нее – M . Индексами 0, g и т. д. будем отмечать соответствующие коэффициентам T , R , D и M элементы матриц. Вклад от различных типов слагаемых рассчитывался следующим образом. В случае обычного нерезонансного отражения частиц основную долю вносят слагаемые, обусловленные интерференционными процессами с участием волн, соответствующих прямому рассеянию, а движение вдоль поверхности отсутствует. Результат суммирования таких простых диаграмм для полного коэффициента отражения дает выражение, которое схематически можно записать в виде:

$$R + T M T. \quad (2)$$

Если учесть диаграммы, описывающие резонансное рассеяние частицы, то для получения суммарного выражения для коэффициента отражения следует вычислять суммы следующего вида:

$$\sum_n T_{00} M_{0g} (R_{gg} M_{gg})^n M_{g0} T_{00}. \quad (3)$$

При записи результатов такого суммирования выделяем в общей матрице коэффициента M две части: диагональную M_d и недиагональную, или интерференционную, – M_i . Результат суммирования запишется в следующем виде:

$$R + T(1 - \Delta \cdot M_i \cdot R)^{-1} \cdot \Delta \cdot (M_d + M_i) \cdot T, \quad (4)$$

где введено обозначение

$$\Delta = (1 - M_d R)^{-1}.$$

Интересующие на эффекты описываются недиагональной, то есть интерференционной, частью M_i матрицы отражения M . Поэтому обычно выражение для полного коэффициента отражения \mathfrak{R} разлагают в ряд по степеням M_i . Слагаемое нулевого приближения для такого разложения имеет вид:

$$\mathfrak{R}_0 = R + T \cdot \Delta \cdot M_d \cdot T. \quad (5)$$

Для слагаемого n -го порядка разложения полного коэффициента отражения записываем:

$$\mathfrak{R}_n = T \cdot (\Delta \cdot M_i \cdot R)^{n-1} \cdot \Delta \cdot M_i \cdot \Delta \cdot T. \quad (6)$$

Получаемые абсолютные значения полного коэффициента отражения \mathfrak{R} оказываются достаточно близкими к реальным абсолютным значениям. Следует отметить, что сам ход энергетической зависимости коэффициента \mathfrak{R} , вычисленного в нулевом приближении, не отражает деталей поведения энергетических спектров отражения вблизи порогового значения энергии электронного пучка, регистрируемых экспериментально, поэтому необходимо использовать приближение для коэффициента \mathfrak{R} , учитывающее не прямые процессы. Следует отметить, что в общем случае формулы для полного коэффициента содержат суммы по всем возможным векторам обратной поверхностной решетки. Приведенные формулы позволяют не только численно описывать изучаемые процессы, но и проводить аналитические оценки.

Естественные неоднородности приповерхностного потенциала

Важную роль при описании рассеяния электронов в рассматриваемом диапазоне энергий частиц играет зависимость поверхностного потенциала в направлении, нормальном к поверхности. Довольно часто в расчетных и теоретических работах поверхности считаются двумерными упорядоченными структурами. В нормальном к поверхности направлении электрическое поле (или потенциал) будет, очевидно, неоднородным. Причины формирования



неоднородностей потенциала по всем направлениям многочисленны. К наиболее значимым из них следует отнести, например, наличие непосредственных дефектов приповерхностных атомных слоев либо объемные незранированные заряды атомов примесей в обедненных приповерхностных слоях, частицы, адсорбированные поверхностью твердого тела, и прочие.

В настоящей главе работы проведен детальный учет влияния естественных (неустраняемых) неоднородностей, имеющих вблизи поверхностей кристаллических твердых тел, на рассеяние электронов в приповерхностной области и эффекты, в том числе ориентационные, возникающие при поверхностном резонансном рассеянии электронов малых и промежуточных энергий.

В тангенциальном (по отношению к поверхности твердого тела) направлении потенциал (и электрическое поле) также не является однородным. Помимо рассмотренной выше дискретности зарядов примеси в приповерхностной области пространственного заряда, это связано и с тем фактом, что поверхность кристалла не является идеальной. Существуют естественные (неустраняемые) неоднородности потенциала вдоль поверхности кристалла. Это подтвердили проведенные ранее прямые экспериментальные измерения. Причинами таких неоднородностей могут быть непосредственные дефекты приповерхностных слоев атомов, адсорбированные на поверхности атомы примесей и иные. Очевидно, что неоднородность анализируемого поля вдоль поверхности кристаллического образца может оказаться существенной. Как будет показано далее, флуктуации полей в тангенциальном и нормальном к поверхности направлениях довольно велики и при этом амплитуды таких полей могут сильно отличаться от средних значений.

В представленной работе были проведены расчеты потенциалов в приповерхностной области полупроводниковых твердых тел с учетом естественных неоднородностей. Подробнее рассмотрим случай, когда на поверхности твердого тела имеются электронные поверхностные зоны. Также уделим внимание случаю наличия на поверхности полупроводника примесных поверхностных уровней. Потенциальную энергию взаимодействия электрона с поверхностью

полупроводникового твердого тела будем определять с помощью решения обычного уравнения Пуассона с учетом поверхностной плотности зарядов и функции распределения.

Неоднородность приповерхностного потенциала обычно анализируют с помощью функции dS/dU , зависящей от величины потенциала и определяющей часть поверхности твердого тела dS , потенциал на которой равен величине от U до $U + dU$. Тем самым мы определяем, какая доля поверхности имеет потенциал, значение которого совпадает с рассчитанным в одномерной модели приповерхностной области. В последнем случае зависимость искомой функции dS/dU от потенциала имеет вид дельта-функции. Анализ показал, что наличие на поверхности твердого тела неоднородностей как в тангенциальных по отношению к границе раздела направлениях, так и в направлении, нормальном к поверхности, приводит к уширению функции $(dS/dU)(U)$. Величина уширения определяется флуктуацией поверхностного потенциала. Проведенный расчет распределений неоднородностей поверхностного потенциала полупроводниковых кристаллов позволяет сделать однозначный вывод о том, что в среднем величина этих неоднородностей может быть порядка изменений потенциала в приповерхностной области твердого тела. В отдельных областях вблизи поверхности твердого тела амплитуда потенциала и величина электрического поля могут значительно (в несколько раз) превосходить свои усредненные значения. При этом размеры таких отдельных областей оказываются достаточными, чтобы через них осуществлялась, например, аномальная эмиссия электронов или, как в рассматриваемом случае, существенно изменялись условия резонансного рассеяния электронов поверхностью твердого тела.

Относительная доля площади поверхности, где существенны отклонения поверхностного потенциала от значений, рассчитанных без учета наличия естественных неоднородностей поверхности, может достигать 30 % от общей площади поверхности твердого тела. Особо следует отметить, что приведенные относительные значения площадей с существенными отклонениями потенциала от своих средних значений имеют место в случае обычных, классических

значений параметров полупроводниковых кристаллов.

В процессе поверхностного резонансного рассеяния, равно как и в процессе поверхностного дифракционного, внешняя частица длительное время движется в тангенциальном по отношению к поверхности направлении и при этом находится в состоянии когерентного взаимодействия с поверхностным потенциалом твердого тела. Поэтому наличие неоднородностей на поверхности будет приводить к выходу электронов из когерентного поверхностного состояния. Следовательно, первый вопрос, который подлежит изучению в рассматриваемом разделе, заключается в следующем: будут ли вообще наблюдаться поверхностные резонансы при рассеянии на поверхностях твердых тел с естественными неоднородностями?

Флуктуации неоднородного поля довольно велики, и амплитуды полей могут в несколько раз отличаться от своих средних значений. Площади поверхности, где потенциал имеет значение, близкое к среднему, составляют только часть от общей площади поверхности. На основании теоретического анализа проведен компьютерный расчет, позволяющий оценить относительную долю площади поверхности, где потенциал имеет значение, близкое к среднему значению потенциала вдоль поверхности при определенном значении нормальной координаты. Численный анализ показывает, что относительная доля площади поверхности, где потенциал имеет величину, близкую к своему среднему значению, может быть довольно малой, и составлять лишь примерно 20 % от общей площади поверхности кристалла. Таким образом, рассчитываемые в усредненной теории условия поверхностного резонансного рассеяния выполняются только на части траектории частицы, а в существенной области условия квазиодномерного движения электрона вдоль поверхности кристалла нарушаются. Таким образом, для исследуемых поверхностей необходимо проводить расчет вероятностей резонансного рассеяния с учетом неоднородностей поверхности.

Последовательное рассмотрение поверхностного резонансного рассеяния при наличии естественных неоднородностей приповерхностного потенциала твердого тела проводится

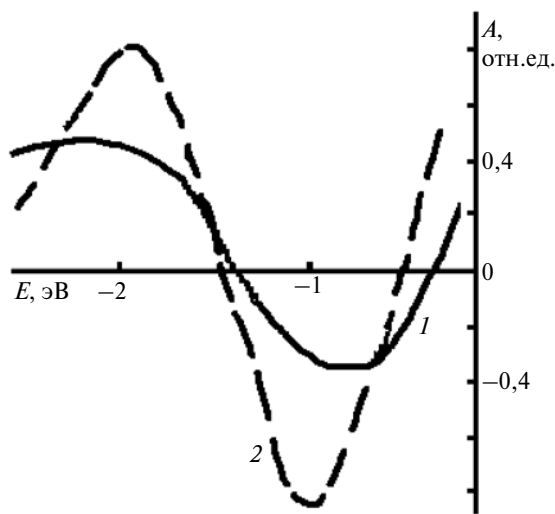
на основании методик и формул предыдущего раздела. Это рассмотрение в заданной нами области параметров твердого тела и внешних частиц показывает, что даже при существенных флуктуациях полей вдоль поверхности и сопровождающих такие флуктуации возможных существенных изменениях (уменьшение) амплитуд интенсивностей упругого резонансного поверхностного рассеяния, естественные неоднородности не приводят к полному разрушению поверхностного резонансного рассеяния. Однако они могут существенно изменять характеристики спектров рассеяния частиц.

Рассмотрим подробно случай резонансного рассеяния поляризованных частиц, более чувствительного к состоянию (степени неоднородности) поверхности. Наиболее содержательной характеристикой поверхностного резонансного рассеяния в случае поляризованных частиц является величина A асимметрии рассеяния, определяемая формулой

$$A = \frac{1}{P_0} \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-}, \quad (7)$$

где P_0 – начальная поляризация первичного пучка поляризованных частиц, направленная вдоль нормали к плоскости рассеяния; I^+ , I^- – интенсивности пучков рассеянных электронов с различной поляризацией.

Анализ проводился следующим образом. На первом этапе рассчитывались интенсивности упругого поверхностного резонансного рассеяния электронов для двух противоположных значений поляризации внешних частиц. Затем учитывалось влияние естественных поверхностных неоднородностей на эти энергетические зависимости интенсивностей путем их усреднений по поверхности твердого тела с неоднородным в тангенциальных к поверхности направлениях потенциалом, и вычислялась величина асимметрии рассеяния. Результаты анализа приведены на рисунке (кривая 1). Для сравнения там же приведена энергетическая зависимость асимметрии рассеяния при тех же рассматриваемых нами параметрах задачи, но без учета естественных неоднородностей поверхностного потенциала (кривая 2).



Энергетическая зависимость асимметрии поверхностного резонансного рассеяния A поляризованных электронов без учета (2) и при наличии (1) естественных неоднородностей. Энергия отсчитывается от порога возникновения поверхностного дифракционного пучка

Видно, что поверхностное резонансное рассеяние оказывается существенно ослабленным за счет естественных неоднородностей поверхностного потенциала. Это связано с достаточно сильным подавлением неоднородностями интерференционных процессов для волновых функций частиц в поверхностном резонансе.

По величине этого ослабления можно однозначно судить о величине флуктуаций потенциала и полей вдоль поверхности.

Описанный эффект позволяет исследовать параметры полупроводниковых кристаллов (например, параметры легирования), а также изучать свойства кристаллических дефектов. По изменению характеристик спектров рассеяния поляризованных частиц можно исследовать особенности элементарных актов взаимодействия частиц с учетом спина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Korablev, V.V.** The effect of the surface and bulk electrons on the surface potential formation [Text] / V.V. Korablev, V.V. Dubov // Proceedings of SPIE, 2002. — Vol. 4627. — No. 2. — P. 34 — 37.
2. **Дубов, В.В.** Взаимодействие электронов промежуточных энергий с приповерхностной областью твердых тел [Текст] / В.В. Дубов. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2002. — 157 с.
3. **McRae, E.G.J.** Multiple scattering treatment on low-energy-electron-diffraction intensities [Text] / E.G.J. McRae // Chem. Phys. — 1966. — Vol. 45. — №. 9. — P. 3258 — 3276.
4. **McRae, E.G.J.** Surface-state resonances in low-energy electron diffraction [Text] / E.G.J. McRae // Surf. Sci. — 1971. — Vol. 25. — № 3 — P. 491 — 512.
5. **Дубов, В.В.** Рассеяние медленных электронов поверхностью полупроводникового кристалла [Текст] / Дубов В.В., Кораблев В.В. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. — 40 с.
6. **Дубов, В.В.** Поверхностные резонансы [Текст] / В.В. Дубов, С.К. Подойницын. — Ростов: Изд-во РГУ, 1998. — 13 с.
7. **Матисов, Б.Г.** Рассеяние медленных электронов поверхностью полупроводникового кристалла [Текст] / Б.Г. Матисов, Дубов В.В. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2002. — 40 с.
8. **Бондаренко, В.Б.** Естественно неупорядоченный потенциал на поверхности сильно легированного полупроводника [Текст] / В.Б. Бондаренко, В.В. Кораблев, Ю.И. Равич // ФТП. — 2004. — Т. 38. — Вып. 3. — С. 331 — 336.

ДУБОВ Виктор Викторович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vicvicdub@mail.ru

КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

СУГАЙПОВ Молды Шадидович — кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой физической электроники Чеченского государственного университета.

364907, г. Грозный, ул. А. Шерипова, 32

УДК 53.083.91: 535.3

Н.В. Ильин , Д.В. Кизеветтер

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ
СВЕТА ВБЛИЗИ ВЫХОДНОГО ТОРЦА ВОЛОКОННОГО СВЕТОВОДА ПРИ
НАЛИЧИИ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ**

N.V. Ilin, D.V. Kiesewetter

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

**THE NUMERICAL SIMULATION OF THE LIGHT INTENSITY DISTRIBUTION
IN PROXIMITY TO THE OUTPUT END OF OPTICAL FIBER GIVEN THE
OPTICAL VORTICES**

Методом численного моделирования получены распределения интенсивности светового пучка вблизи выходного торца волоконного световода для случая интерференции плоской волны и оптического вихря световода. Определены основные свойства указанных интерференционных картин: спиралеобразный вид и их вращение при перемещении плоскости наблюдения.

ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ. ВОЛОКОННЫЙ СВЕТОВОД. ЭФФЕКТ МАГНУСА. ОПТИЧЕСКИЕ ВИХРИ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ.

By the use of numerical simulation light intensity distributions have been obtained in proximity to the output end of optical fiber for the interference between the plane wave and the optical vortex of fiber. The main properties of those interference patterns such as helical type and their rotation during displacement of the observation plane were determined.

INTERFERENCE. OPTICAL FIBER. MAGNUS EFFECT. OPTICAL VORTICES. INTENSITY DISTRIBUTION.

Известный в механике эффект Магнуса [1] имеет аналог в оптике и называется оптическим эффектом Магнуса. Исследование указанного эффекта представлено в большом количестве научных публикаций, в частности, теоретические вопросы рассмотрены в работах [2, 3], оптический эффект Магнуса в волоконных световодах (ВС) — в работах [5, 6]. Подробному изучению эффекта вращения спекл-структуры в волоконных свето-

водах под действием различных внешних факторов посвящены как диссертации, так и статьи; например, при изменении поляризации входящего излучения — статья [3], при скручивании волокна — диссертация [7], в магнитном поле — статья [8].

Основные свойства интерференционных картин, формируемых оптическими вихрями и волноводными модами, можно выявить, если рассматривать интерференцию одиноч-



ных волн, имеющих плоский волновой фронт, и одиночных вихрей. Известно, что интерференционная картина расходящегося пучка со спиралеобразным волновым фронтом и опорной плоской волной представляет собой спираль в плоскости наблюдения. Интерференционная картина в сердцевине волоконного световода обычной волноводной моды и оптического вихря обладают сходным свойством, причем фаза спирали изменяется вдоль оси волокна. Другими словами, имеет место вращение интерференционной картины при перемещении плоскости наблюдения вдоль волокна. Аналогичными свойствами обладают и спекл-структуры (СПС), сформированные в результате интерференции оптических вихрей и волноводных мод волоконного световода.

В большинстве теоретических и экспериментальных работ исследуются распределения интенсивности либо в ближней, либо в дальней зонах дифракции. Экспериментально исследовать интерференционную картину волн в сердцевине ВС вдоль оси волокна не представляется возможным. В дальней зоне дифракции (ДЗД) в любом направлении относительно оси световода фазы интерферирующих волн, обусловленные выходящим излучением как обычных волноводных мод, так и оптических вихрей, изменяются одинаково в зависимости от расстояния до выходного торца. Поэтому при изменении расстояния от выходного торца до плоскости изображения вращения СПС не наблюдается, а линейные размеры интерференционной картины увеличиваются пропорционально расстоянию до торца, т. е. в ДЗД угловое распределение интенсивности остается неизменным.

В настоящее время остаются малоизученными характеристики спекл-структур и интерференционных картин, возникающих при участии оптических вихрей, при трансформации из ближней в дальнюю зону дифракции.

Исследованию распределений интенсивности при интерференции излучения оптических вихрей и волны с плоским волновым фронтом вблизи поверхности выходного торца световода и посвящена данная работа.

Методика расчета

Для расчетов использовались выражения для напряженности электромагнитного поля в

приближении слабонаправляемых мод [10,11], образующих линейно-поляризованные модовые группы [10] в ВС со ступенчатым профилем показателя преломления (ППП):

$$\begin{aligned} EH_x(r, \varphi) &= i \cdot \frac{\beta \cdot a}{u} \cdot J_{m+1} \left(\frac{u \cdot r}{a} \right) \cdot \cos((m+1) \cdot \varphi); \\ EH_y(r, \varphi) &= i \cdot \frac{\beta \cdot a}{u} \cdot J_{m+1} \left(\frac{u \cdot r}{a} \right) \cdot \sin((m+1) \cdot \varphi); \\ HE_x(r, \varphi) &= -i \cdot \frac{\beta \cdot a}{u} \cdot J_{m-1} \left(\frac{u \cdot r}{a} \right) \cdot \cos((m-1) \cdot \varphi); \\ HE_y(r, \varphi) &= i \cdot \frac{\beta \cdot a}{u} \cdot J_{m-1} \left(\frac{u \cdot r}{a} \right) \cdot \sin((m-1) \cdot \varphi); \end{aligned} \quad (1)$$

где r, φ – координаты цилиндрической системы, β – постоянная распространения, a – радиус сердцевины, m – азимутальный индекс моды, J_n – функции Бесселя n -го порядка, u – собственное число, зависящее от m и радиального индекса моды s .

Решения (1) соответствуют обычным волноводным модам, азимутальную зависимость которых (в виде синуса или косинуса) следует рассматривать как стоячую волну по координате φ . Функция вида $\exp(-i\ell\varphi)$ также является решением волнового уравнения в ВС [11], но описывает волну, которую следует считать бегущей по координате φ . Если принять во внимание движение волнового фронта вдоль оси световода с фазовой скоростью ω/β , то с учетом движения по φ результирующее движение волнового фронта является спиралеобразным. Решение, соответствующее волне, бегущей по координате φ , может быть получено линейной комбинацией двух решений (1) т. е. двух мод с фазовым смещением по азимутальному углу на $\pi/2$:

$$R \cdot \exp(i\ell\varphi) = R \cos(\ell\varphi) + iR \sin(\ell\varphi), \quad (2)$$

где R – радиальная зависимость.

Аналогично случаю образования линейно-поляризованных групп, оптические вихри с зависимостью (2) формируются парой HE - и EH -мод, имеющих азимутальные зависимости с одинаковыми тригонометрическими функциями поперечных составляющих напряженности электромагнитного поля.

Расчет дифракции производился численным методом с использованием формулы

$$E(x', y') = \frac{ik}{4\pi} (1 + \cos \theta) \times \int_{(S)} E(x, y) \frac{\exp(-ik|r-r'|)}{|r-r'|} dx dy. \quad (3)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ (λ – длина волны излучения, θ – угол между осью Oz и прямой, проходящей через точки $(0, 0)$ в плоскости Oz (x', y') в плоскости наблюдения $X'O'Y'$. Плоскость торца – XOY , координаты точек в этой плоскости – (x, y) , радиус-вектор – r ; распределение электрической напряженности – $E(x, y)$. Расстояние отсчитывается по оси Oz . Точка $0'$ также лежит на оси Oz . Плоскость наблюдения – $X'O'Y'$, точки в этой плоскости имеют координаты (x', y') . Расстояние от плоскости XOY до плоскости $X'O'Y'$, т. е. расстояние до плоскости наблюдения, обозначим как L_p .

Для увеличения скорости расчетов использовались матричные операторы в среде MATLAB. Расчетные распределения интенсивности визуализировались. Были выполнены расчеты для случая интерференции оптического вихря различного порядка и плоской электромагнитной волны в световоде со ступенчатым ППП на выходном торце ВС при различных расстояниях от выходного торца. Использование при расчетах плоской волны с равномерным распределением напряженности по сердцевине позволило не задавать конкретного типа моды (например, HE_{11}) и в то же время выявить основные свойства интерференционных картин. Примеры распределений интенсивности для ВС с радиусом сердцевины $a = 100$ мкм, числовой апертурой $NA = 0,22$ при длине волны $0,6328$ мкм приведены на рис. 1. Выбранные расстояния от выходного торца (20 и 400 мкм) позволяют определить изменения распределений интенсивности при переходе от ближней к дальней зоне дифракции: при расстоянии 20 мкм распределение приблизительно соответствует распределению в ближней, а при 400 мкм – проявляются свойства, характерные для дальней зоны дифракции, но область локализации излучения изменяется незначительно. Рассчитывались также функции взаимной корреляции (ФВК) распределений интенсивности как зависимости от $\Delta\varphi$ при различных расстояниях от выходного торца по формуле

$$F_{SC}(\Delta\varphi) = \frac{1}{2\pi(r_1 - r_2)} \int_{r_1}^{r_2} \int_0^{2\pi} (I_1(r, \varphi) - \bar{I}_1)(I_2(k_p r, \varphi - \Delta\varphi) - \bar{I}_2) r dr d\varphi, \quad (4)$$

где I_1, I_2 – распределения интенсивности на двух различных расстояниях от выходного торца, k_p – коэффициент пропорциональности, учитывающий расходимость излучения.

Пример визуализированных ФВК для указанных случаев приведен на рис. 2. Значение ФВК зависит как от азимутального угла, так и от расстояния до оси; темные области изображения (рис. 2) соответствуют минимальным значениям ФВК, светлые – максимальным. Изменение углового положения максимумов и минимумов интенсивности при изменении расстояния L_p до выходного торца ВС можно рассматривать как вращение интерференционной картины с некоторой ее трансформацией.

Выявленные закономерности

Выполненные расчеты позволяют описать основные закономерности трансформации распределений интенсивности интерференционных картин, формируемых оптическим вихрем и плоской волной на выходном торце ВС. Из рис. 1 следует, что интерференционные картины, имеющие в ближней зоне дифракции радиальное распределение интенсивности, при трансформации в дальней зоне приобретают спиралеобразный вид. Можно предположить, что данное свойство сохранится и при большом количестве интерферирующих оптических вихрей и плоской волны. Таким образом, спиралеобразный вид зерен спеклов при определенных углах выхода излучения, описанный в работе [12], можно объяснить результатом интерференции оптических вихрей и волноводных мод, имеющих плоский волновой фронт. Полученные результаты расчетов объясняет также экспериментально выявленный эффект вращения спеклов, представленный в работе [13].

При увеличении расстояния от выходного торца световода до плоскости наблюдения происходит вращение интерференционной картины, т. е. вращение продолжается в свободном пространстве. При увеличении расстояния L_p угловая скорость вращения ($\Delta\varphi/\Delta L_p$) умень-

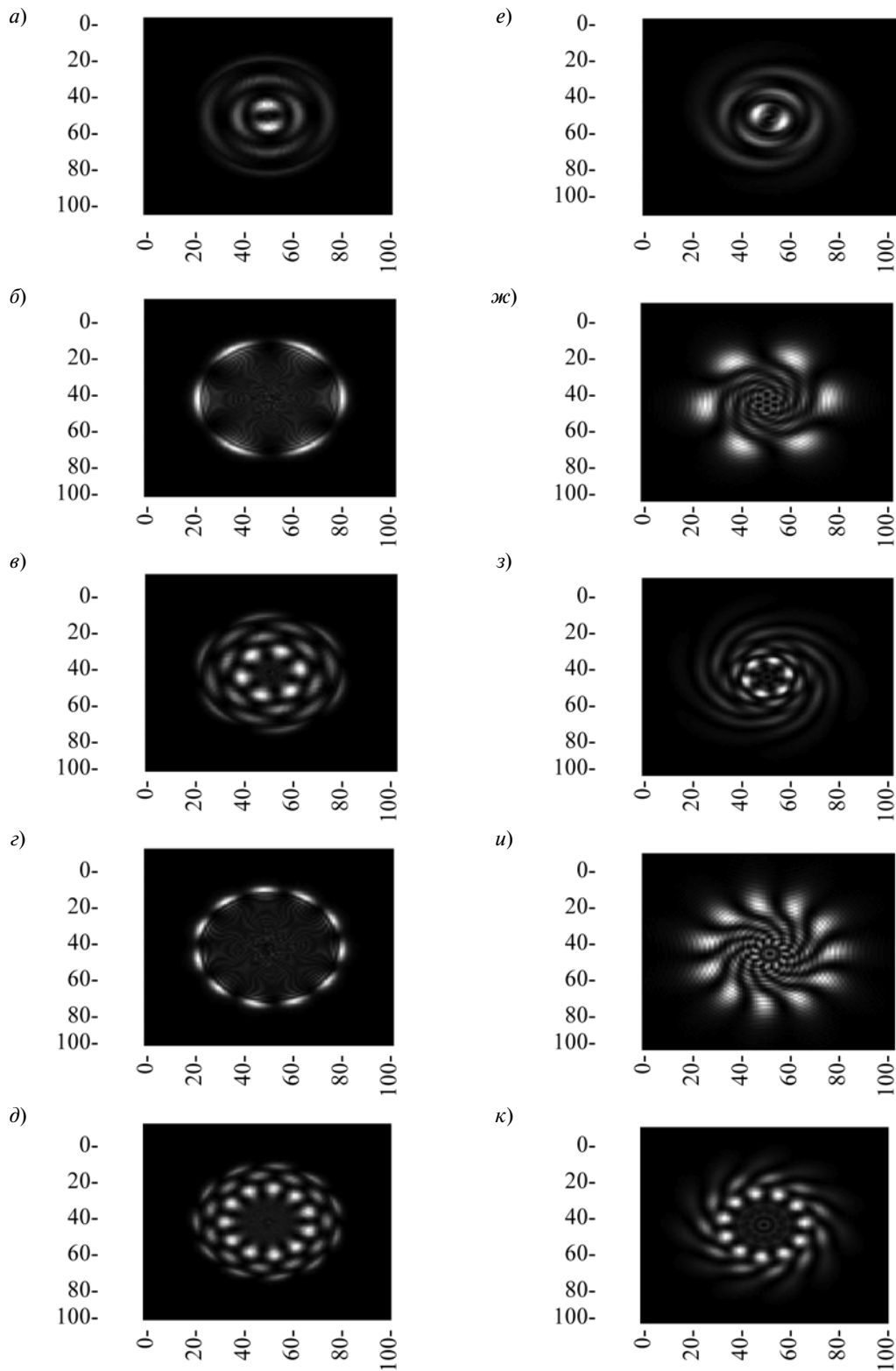


Рис. 1. Визуализированные распределения интенсивности светового пучка на расстояниях 20 мкм (*a – д*) и 400 мкм (*e – к*) от выходного торца для случаев: $m = 1, s = 10$ (*a, e*); $m = 5, s = 1$ (*б, ж*); $m = 5, s = 10$ (*в, з*); $m = 10, s = 1$ (*г, и*); $m = 10, s = 10$ (*д, к*).

По осям Ox и Oy отложены расстояния в микрометрах

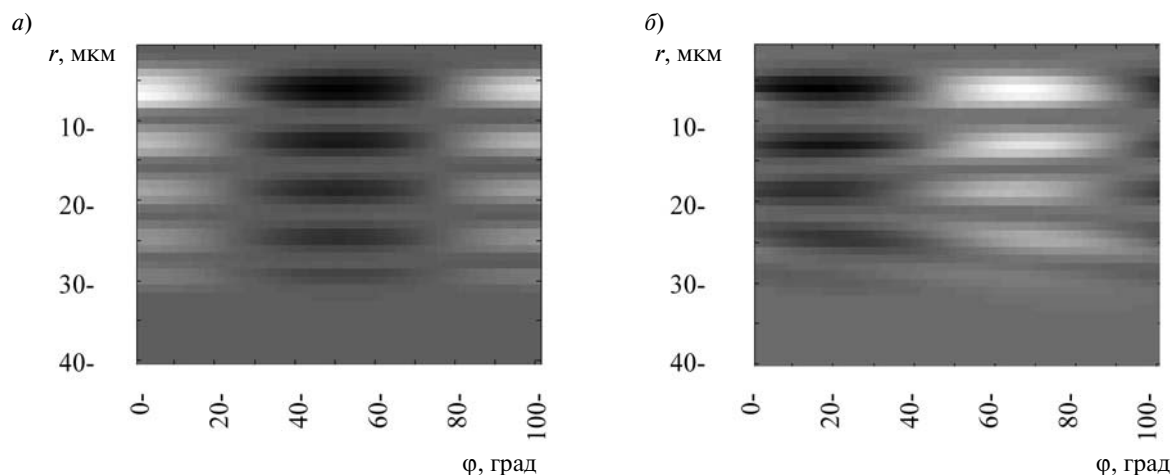


Рис. 2. Визуализированные функции взаимной корреляции распределений интенсивности на расстоянии 20 мкм (а) и 400 мкм (б) от выходного торца для случая $m = 1, s = 10$

шается и постепенно снижается до нуля в ДЗД. Угловая скорость вращения интерференционной картины зависит от индексов моды.

Использование численного моделирования позволило выявить основные свойства интер-

ференционных картин, формируемых плоской электромагнитной волной и оптическим вихрем при трансформации из ближней зоны дифракции в дальнюю и объяснить ранее полученные экспериментальные данные.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Прондталь, Л.** Эффект Магнуса и ветряной ко- рабль [Текст] / Л. Прондталь // Успехи физических наук. – 1925. – Т. 5. – Вып. 1-2. – С. 1–27.
2. **Болотовский, Б.М.** Оптический аналог эффекта Магнуса [Текст] / Б.М. Болотовский, С.Н. Столяров // Письма в ЖЭТФ. – 1977. – Т. 25. – Вып. 3. – С. 148 – 150.
3. **Блиох, К.Ю.** Оптический эффект Магнуса как следствие анизотропии фазы Берри [Текст] / К.Ю. Блиох, Ю.П. Блиох // Письма в ЖЭТФ. – 2004. – Т. 79. – Вып. 11. – С. 647–650.
4. **Садыков, Н.Р.** Поляризационные эффекты, обусловленные взаимным влиянием траектории и поляризации [Текст] / Н.Р. Садыков // Известия РАН. Серия физическая. – 2006. – Т. 70. – Вып. 4. – С. 532 – 533.
5. **Воляр, А.В.** Изменение знака топологического заряда оптических вихрей поля многомодового волокна [Текст] / А.В. Воляр, С.Н. Лаптева, Т.А. Фадеева // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – Т. 20. – Вып. 5. – С. 27 – 31.
6. **Даршт, М.Я.** Поворот изображения в много- модовом оптическом волокне при смене знака циркулярной поляризации [Текст] / М.Я. Даршт, Б.Я. Зельдович, Р. Коваршик, Н.Д. Кундикова [Текст] // Известия Челябинского научного центра. – 2003. – Вып. 2 (19). – С. 10 – 14.
7. **Катаевская, И.В.** Взаимовлияние поляриза- ции и траектории света при его распространении в оптическом волокне [Текст]: Дис. ... канд. физ.- мат. наук: 01.04.05 / Катаевская Ирина Витальевна. [Место защиты: Ин-т электрофизики УрО РАН] – Челябинск, 1999. – 105 с. – Библиогр. : С. 92 – 104, ГРБ ОД 61 00-1/683-1.
8. **Даршт, М.Я.** Наблюдение «магнитного» пово- рота спекл-картины света, прошедшего через опти- ческое волокно [Текст] / М.Я. Даршт, И.В. Жирга- лова, Б.Я. Зельдович, Н.Д. Кундикова // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – Т. 59. – Вып. 11. – С. 734 – 735.
9. **Большаков, М.В.** Особенности распростра- нения когерентного поляризованного света в опти- ческих волокнах [Текст] / Дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.05 / Большаков Максим Вячеславович. [Место защиты: Ин-т электрофизики УрО РАН] – Челябинск, 2007. – 148 с. – Библиогр. С. 139 – 148, ГРБ ОД 61 07-1/1241.
10. **Унгер, Х.Г.** Планарные и волоконные опти- ческие волноводы [Текст]: Пер. с англ. / Х.Г. Унгер. – М.: Изд-во «Мир», 1980. – 656 с.
11. **Содха, М.С.** Неоднородные оптические вол- новоды [Текст]: Пер. с англ. / М.С. Содха, А.К. Гха- так. – М.: Изд-во «Связь», 1980. – 216 с.
12. **Кизеветтер, Д.В.** Многомодовые свето- воды. Поляризационные и интерференционные



эффекты в многомодовых волоконных световодах [Текст] / Д.В. Кизеветтер. – Лейпциг: LAP Lambert Academic Publishing, 2011. – 232 с. – ISBN 978-3-8433-0441-2.

13. **Ильин, Н.В.** Метод возбуждения оптических вихрей в градиентных волоконных световодах [Текст] / Н.В. Ильин, Д.В. Кизеветтер // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. – № 2 (98). – С. 96 – 102.

ИЛЬИН Никита Владимирович – аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nv.ilyn@gmail.com

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
dmitrykiesewetter@gmail.com

УДК 539.24 + (539.211 + 539.217.3) : 678.743.22

А.С. Кочеткова, Н.Ю. Ефимов, Е.А. Соснов

**ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ
ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ
МИКРОСКОПИИ**

A.S. Kochetkova, N.Yu. Efimov, E.A. Sosnov

St. Petersburg State Institute of Technology (Technical University),
26 Moskovsky Pr., St. Petersburg, 190013, Russia

**THE INVESTIGATION OF PVC-BASED NANOCOMPOSITES BY ATOMIC
FORCE MICROSCOPY**

Методами атомно-силовой микроскопии изучена морфология поверхности пленочных композиционных материалов на основе поливинилхлорида (ПВХ) с введенным в них нанодисперсным оксидом алюминия Al_2O_3 (исходный и модифицированный фосфороксидными и кремний-органическими структурами). Полученные результаты сопоставлены с паропроницаемостью исследуемых материалов. Высказано предположение о влиянии химической природы поверхности наполнителя на паропроницаемость композита.

НАНОКОМПОЗИТ. ПОЛИВИНИЛХЛОРИД. АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ. НАНОДИСПЕРСНЫЙ ОКСИД АЛЮМИНИЯ.

The morphology of surface of film composite materials based on PVC with injected nanodispersed Al_2O_3 (original and modified by phosphorus-oxide and silicon-organic structures) were investigated by Atomic Force Microscopy. The results were compared with the water vapor permeability of tested materials. It was suggested about the influence of the chemical nature of the filler surface on the water vapor permeability of the composite.

NANOCOMPOSITE. POLYVINYL CHLORIDE. ATOMIC FORCE MICROSCOPY. NANO-DISPERSED ALUMINA.

Полимерные пленки активно используются во всех отраслях техники, строительстве, сельском хозяйстве, в быту и т. п. Столь широкое применение полимерных материалов связано как с доступностью сырья для их производства [1], так и с возможностью комбинирования полимеров с веществами другой природы и структурами, позволяющей получать композиционные

материалы с комплексом заранее заданных необходимых функциональных свойств [2].

В зависимости от сферы применения к функциональным характеристикам пленок предъявляются различные требования по термостабильности, оптическим, физико-механическим, электрофизическим, барьерным свойствам, стойкости к различным



видам излучения и т.п. Повлиять на указанные параметры можно как воздействием на полимеры (физическими методами [3–5], химическим модифицированием исходного сырья [1] или поверхности готового полимера [6, 7]), так и введением в состав полимерной матрицы наполнителей, способных направленно изменять свойства получаемого композита [2].

Целью работы являлось исследование методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) морфологии поверхности композиционных материалов на основе поливинилхлорида, содержащего наноразмерные частицы оксида алюминия, и определение влияния наполнителя на паропроницаемость полученных композитов.

Композиционный материал получали гомогенизацией в смесителе Vorwerk Thermomix TM31 наполнителя (1 % масс.) в расплаве ПВХ марки ПВХ-С-5868-ПЖ [8] с последующей экструзией и каландрованием в пленку толщиной 230 мкм. В качестве наполнителя использовали нанодispersный порошок оксида алюминия марки Aeroxide® Alu C (Sigma-Aldrich # 718475; диаметр частиц 13 нм) как исходный, так и химически модифицированный.

Для регулирования функциональных свойств наполнителя (придания поверхности Al_2O_3 гидрофильных или гидрофобных свойств) на поверхности нанодispersного оксида алюминия, термообработанного при $350^\circ C$ в течение пяти часов для удаления физически сорбированной воды, по методу молекулярного наслаивания [9, 10] были синтезированы фосфороксидные и кремний-органические структуры. Синтез осуществляли путем однократной газофазной обработки Al_2O_3 при $200^\circ C$ парами оксохлорида фосфора $POCl_3$ и диметилдихлорсилана $Si(CH_3)_2Cl_2$ с последующим парофазным гидролизом непрореагировавших атомов хлора.

Морфологию поверхности композитов исследовали с использованием сканирующего зондового микроскопа Solver P47 Pro (НТ-МДТ, Россия). Измерения проводили в конструктиве АСМ в полуконтактном режиме (tapping mode), с использованием кремниевых кантилеверов марки NSG-01. Сканирование поверхности образцов проводили в двух режимах:

измерения топографии;

фазового контраста (ФК), позволяющего из анализа изменений фазового сдвига амплитудно-частотной характеристики кантилевера выявить различия в составе участков поверхности образца, вызываемые адгезионными взаимодействиями между зондом и поверхностью [11]. Данный режим сканирования позволяет получать дополнительную информацию о составе поверхностного слоя, отображая неочевидные контрасты свойств материалов.

Оценку паропроницаемости пленочных образцов осуществляли в соответствии с ОСТ 6-10-407-76.

Морфология поверхности пленки ПВХ и композиционных материалов на его основе, содержащих 1 масс.% нанодispersного оксида алюминия, представлена на рис. 1. Сопоставляя результаты сканирования композитов с морфологией ПВХ, необходимо отметить, что топография поверхности материалов практически идентична (шероховатость поверхности всех образцов, определяемая на участке размером 10×10 мкм, в соответствии с ГОСТ Р 8.700-2010, колеблется в интервале $8-12$ нм). Различия между полимерной пленкой и композитами на ее основе проявляются только в режиме ФК. Так, фазовый контраст, наблюдаемый при сканировании ПВХ, составляет $\sim 8^\circ$ и обусловлен рельефом поверхности полимера. Введение наполнителя приводит к увеличению сигнала ФК до $25-40^\circ$ в зависимости от типа наполнителя, что может быть вызвано появлением второй фазы, существенно отличающейся по адгезионным свойствам от ПВХ. При этом наибольший контраст наблюдается на расположенных на поверхности композита наноразмерных выступах, – по-видимому, вытесненных из полимерной матрицы на поверхность частиц Al_2O_3 . При детальном исследовании поверхности композитов в режиме ФК установлено, что нанодispersный Al_2O_3 коалесцирует с образованием округлых частиц диаметром от 20 до 100 нм, которые могут образовывать агломераты с латеральными размерами до 250 нм, выступающие над поверхностью полимера на высоту от 8 до 40 нм, в то время как наночастицы модифицированного (как фосфороксидными, так и кремний-органическими структурами) наполнителя не агломерируют.

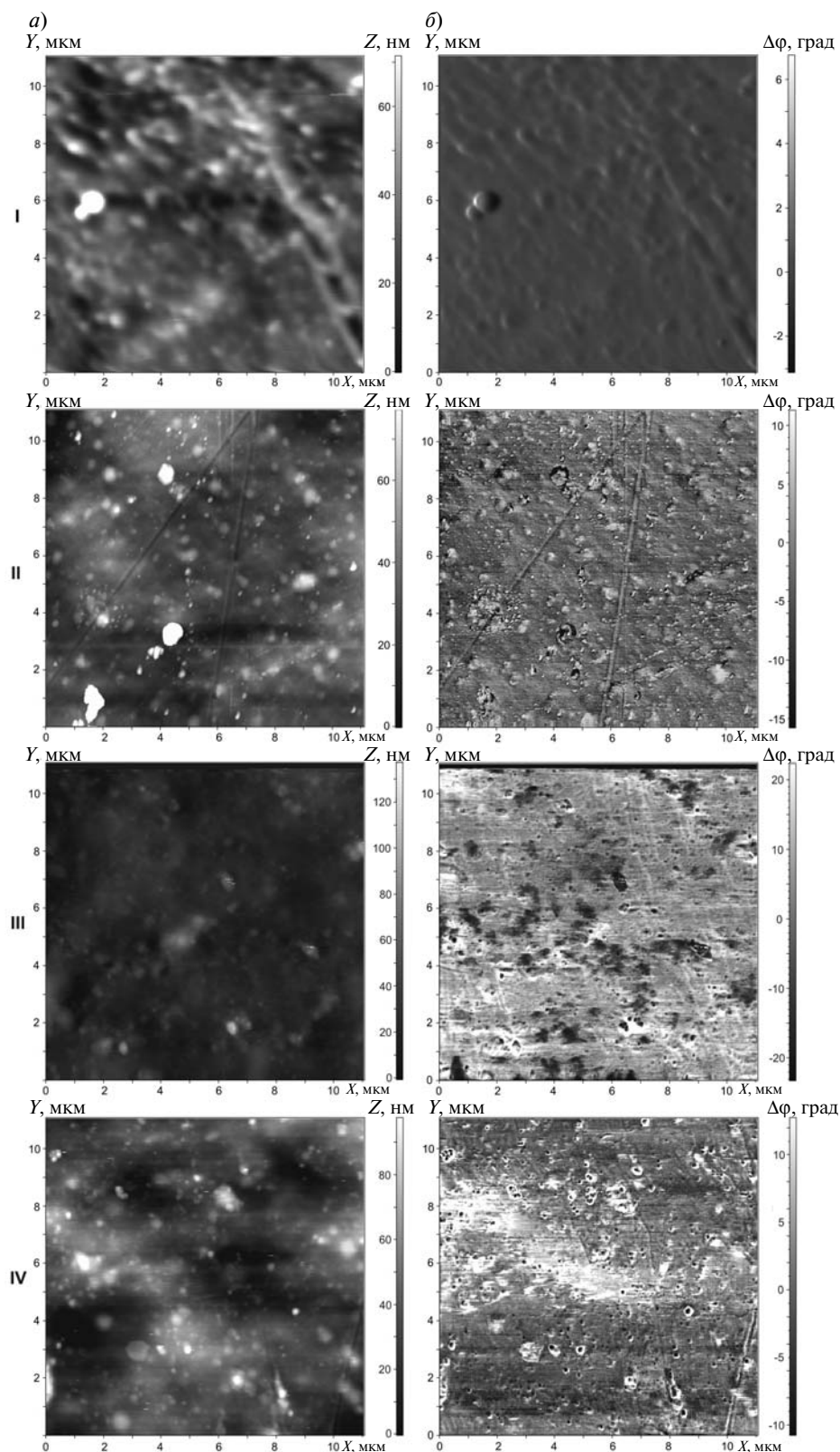


Рис. 1. АСМ-реконструкция поверхности пленки ПВХ (I) и композитов, содержащих 1 масс.% Al_2O_3 : исходного (II) и модифицированного фосфороксидными (III) и кремний-органическими структурами (IV); а – топография поверхности, б – сканирование в режиме фазового контраста

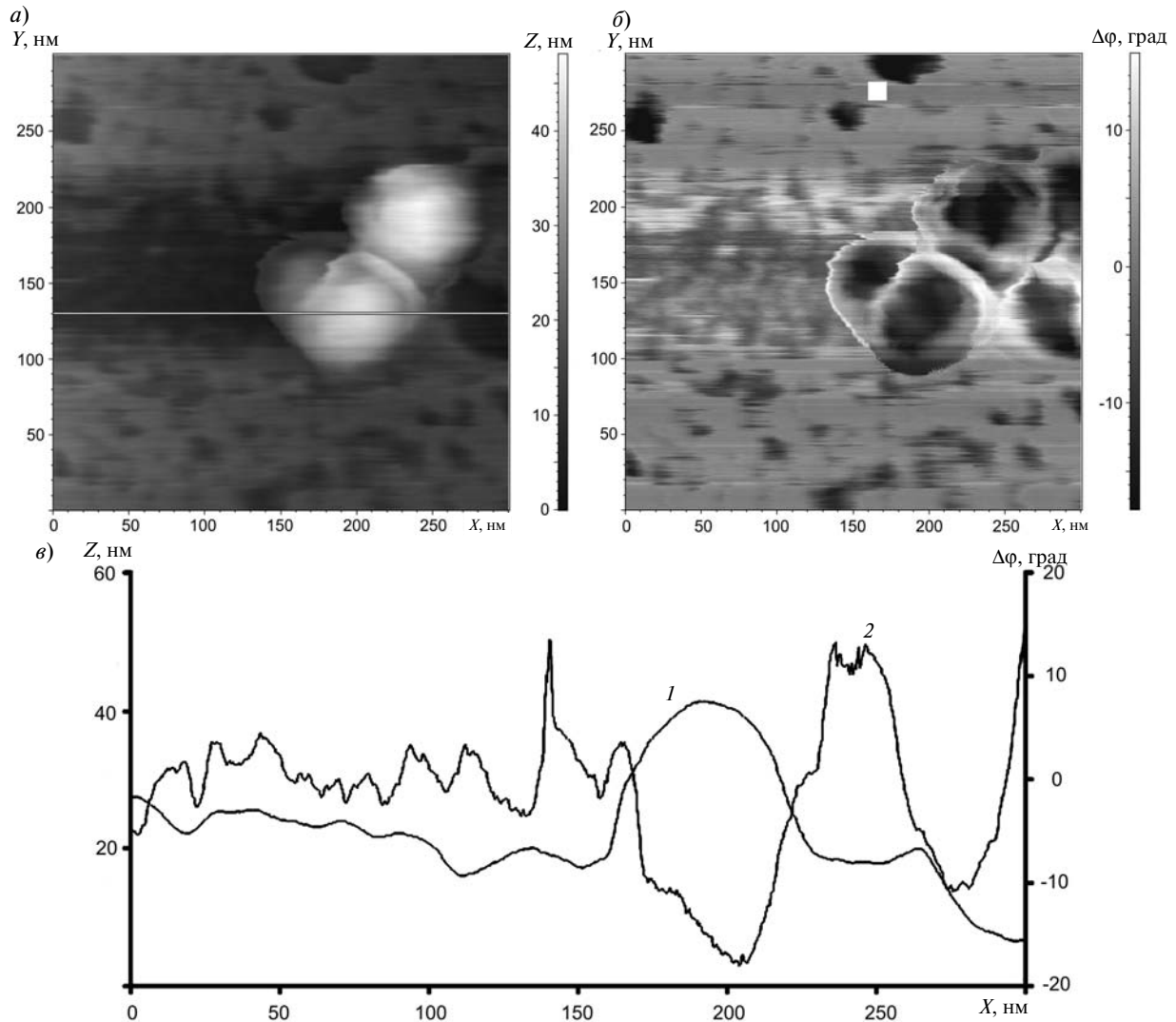


Рис. 2. АСМ-реконструкция поверхности композита, содержащего 1 масс.% наноразмерного Al_2O_3 : а – топография поверхности; б – сканирование в режиме фазового контраста; в – сечение поверхности в области, указанной на рис. а; 1 – топография, 2 – фазовый контраст

Необходимо отметить, что частицы наполнителя, вытесненные на поверхность композита, не имеют прочной связи с полимерной основой материала и способны удаляться с поверхности с частичным разрушением приповерхностных слоев наночастиц. На рис. 2 представлено АСМ-изображение участка поверхности композита, где топографическое изображение выявляет наличие двух частиц наполнителя, тогда как сканирование в режиме ФК указывает на наличие еще одного участка, адгезионные свойства которого аналогичны свойствам частиц оксида алюминия (рис. 2, б). Сечение поверхности композита (рис. 2, в) позволило установить, что

третий участок, обладающий отличными от полимера адгезионными свойствами, располагается на внутренней части округлого углубления в полимерной матрице, размеры которого соответствуют размерам частиц Al_2O_3 .

Паропроницаемость (VP) композитов на основе ПВХ

Наполнитель	Модификатор	VP, мг/(м ² ·сут)
Al ₂ O ₃	—	50
	—	28
	POCl ₃	100
	Si(CH ₃) ₂ Cl ₂	49

Сопоставление морфологии поверхности композитных пленок с их паропроницаемостью, результаты измерения которой представлены в таблице, показало, что введение в состав ПВХ даже малого (1 масс.%) количества нанодисперсного наполнителя позволяет направленно изменять функциональные свойства полимерной матрицы.

Известно, что проницаемость полимерных пленок может быть описана с помощью диффузионно-сорбционной теории [12], согласно которой процесс проникновения паров или газов через материал происходит в три стадии: сорбция паров или газов на поверхности пленки, диффузия через полимер и десорбция.

В свою очередь, влияние наполнителей на проницаемость полимерных пленок определяется следующими параметрами [12, 13]:

концентрация наполнителя;

геометрические факторы (форма, размер, распределение наполнителя по сечению композита); путь газов или паров, диффундирующих через пленку, увеличивается за счет вынужденного огибания частиц наполнителя (рис. 3);

свойства поверхности наполнителя; морфология и состав поверхности вводимых частиц (наличие на поверхности гидрофильных или гидрофобных группировок) влияют на наличие и интенсивность связей между полимером и наполнителем, агломерацию, полноту смачивания полимером частиц, адсорбционные свойства наполнителя по отношению к диффундирующему газу или пару [12].

На основе вышеизложенного, с учетом данных атомно-силовой микроскопии можно предположить, что в случае введения в ПВХ не-

модифицированного Al_2O_3 паропроницаемость композита снижается как за счет сорбционной активности наполнителя, так и за счет изменения геометрии материала. При диффузии сквозь композиционный материал на основе ПВХ молекулы воды вынуждены огибать распределенные во внутренних слоях композита агломераты частиц Al_2O_3 (размер которых, по данным АСМ, в 10–20 раз больше размера исходных наночастиц), вследствие чего значительно увеличивается диффузионный путь и, соответственно, снижается скорость диффузии воды.

Введение наполнителя с кремний-органическими группировками, придающими поверхности Al_2O_3 гидрофобные свойства, не оказывает влияния на паропроницаемость композита благодаря инертности модифицированного наполнителя по отношению к парам воды [14] и хорошим совмещением с полимерной матрицей вследствие неполярности модификатора. Отсутствие агломератов большого размера (геометрический размер частиц здесь в среднем около 100 нм) также имеет значение, поскольку между частицами меньшего размера молекулам воды гораздо проще проникать в глубь композитной пленки.

При введении же наночастиц с фосфороксидными группировками на поверхности проницаемость композита возрастает в два раза по сравнению с исходным ПВХ. Указанное явление может быть вызвано двумя причинами.

Во-первых, формирующиеся в ходе химического модифицирования наполнителя фосфороксидные структуры обладают высокой гидролитической активностью [15]. Это приводит к образованию гидратной оболочки вокруг привитых группировок за счет адсорбции паров воды из воздуха, вследствие чего количество сорбата на поверхности композита существенно выше, чем у чистого полимера.

Во-вторых, большая разница в полярности поверхностей вводимых частиц и полимерной матрицы приводит к изменению механизма диффузии (вместо объемной диффузии через полимерную сетку возможна поверхностная: «проскальзывание» молекул сорбата вдоль поверхности контактирующих частиц наполнителя [12]).

Таким образом, проведенные исследования показали, что вводимый в расплав поливи-

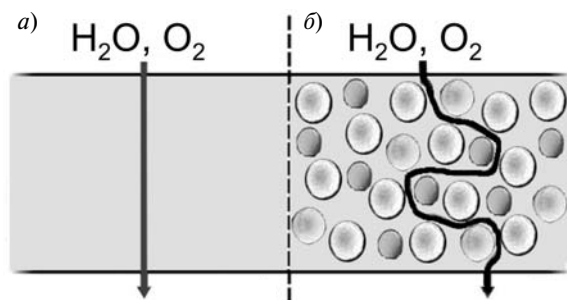


Рис. 3. Схема пути диффузии газов или паров воды через полимерную пленку:
а – чистый полимер; б – композитная пленка, содержащая наночастицы наполнителя



нилхлорида нанодисперсный оксид алюминия слабо взаимодействует с полимерной матрицей. Однако, несмотря на это, химическая природа поверхности наполнителя оказывает суще-

ственное влияние на функциональные свойства композита. Изменяя состав поверхности наполнителя, можно изменять свойства полимерной композиции в целом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кочнев, А.М.** Модификация полимеров [Текст] / А.М. Кочнев, С.С. Галибеков. — Казань: Казанский гос. техн. ун-т., 2008. — 533 с.
2. **Шевченко, В.Г.** Основы физики полимерных композиционных материалов [Текст] / В. Г. Шевченко. — М.: Изд-во МГУ, 2010. — 98 с.
3. **Рыбкин, В.В.** Низкотемпературная плазма как инструмент модификации поверхности полимерных материалов [Текст] / В.В. Рыбкин // Соросовский образовательный журнал. — 2000. — Т. 6. — № 3. — С. 58 — 63.
4. **Пономарев, А.Н.** Плазмохимическое модифицирование полимеров [Текст] / А.Н. Пономарев, В.Н. Василец, Р.В. Тальрозе // Химическая физика. — 2002. — Т. 21. — № 44. — С. 96 — 102.
5. **Кравец, Л.И.** Модификация свойств полимерных мембран под воздействием низкотемпературной плазмы [Текст] / Л.И. Кравец, С.Н. Дмитриев, А.Б. Гильман // Химия высоких энергий. — 2009. — Т. 43. — № 3. — С. 227 — 234.
6. **Трифонов, С.А.** Влияние химического модифицирования поверхности полиэтилена галогенидами фосфора, бора, титана, ванадия и кремния на его паропроницаемость [Текст] / С.А. Трифонов, Е.А. Соснов, Ю.С. Белова [и др.] // Журнал прикладной химии. — 2007. — Т. 80. — № 8. — С. 1374 — 1379.
7. **Дьякова, А.К.** Влияние химического модифицирования на структурно-энергетические характеристики поверхности пленок полиэтилена и поливинилхлорида [Текст] / А.К. Дьякова, С.А. Трифонов, Е.А. Соснов, А.А. Малыгин // Журнал прикладной химии. — 2009. — Т. 82. — № 4. — С. 628 — 634.
8. **ГОСТ 14332-78.** Поливинилхлорид суспензионный. Технические условия [Текст]. — М.: ИПК Изд-во стандартов, 1998. — 19 с.
9. **Алесковский, В.Б.** Химия надмолекулярных соединений [Текст] / В.Б. Алесковский. — СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 1996. — 256 с.
10. **Малыгин, А.А.** Технология молекулярного наслаивания и некоторые области ее применения [Текст] / А.А. Малыгин // Журнал прикладной химии. — 1996. — Т. 69. — № 10. — С. 1585 — 1593.
11. **Magonov, S.N.** Phase imaging and stiffness in tapping-mode atomic force microscopy [Текст] / S.N. Magonov, V. Elings, M.-H. Whangbo // Surf. Sci. — 1997. — Vol. 375. — No. 2-3. — P. L385 — L391.
12. **Рейтлингер, С.А.** Проницаемость полимерных материалов [Текст] / С.А. Рейтлингер. — М.: Химия, 1974. — 272 с.
13. **Duncan, T.V.** Applications of nanotechnology in food packaging and food safety. Barrier materials, antimicrobials and sensors [Текст] / T.V. Duncan // J. Colloid Interface Sci. — 2011. — Vol. 363. — No. 1. — P. 1 — 24.
14. Химия привитых поверхностных соединений [Текст] / Под ред. Г.В. Лисичкина. — М.: Физматлит, 2003. — 592 с.
15. **Ван Везер.** Фосфор и его соединения [Текст] / Ван Везер. — М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1962. — 642 с.

КОЧЕТКОВА Анна Сергеевна — студентка кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).
190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26
annywka_08@list.ru

ЕФИМОВ Никита Юрьевич — аспирант кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).
190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26
boom1988@inbox.ru

СОСНОВ Евгений Алексеевич — кандидат химических наук, доцент кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).
190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26
sosnov@liti-gti.ru

УДК 578.5

*М.В. Якунина, Д.Н.Воронцова,
Л.С. Минахин*

НЕКАНОНИЧЕСКИЕ РНК-ПОЛИМЕРАЗЫ ГИГАНТСКИХ БАКТЕРИОФАГОВ ТИПА ϕ KZ

*M.V. Yakunina¹, D.N. Vorontsova²,
L.S. Minakhin³*

^{1, 2} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

³ Waksman Institute of Microbiology, Rutgers, The State University of NJ,
190 Frelinghuysen Rd, Piscataway, NJ 08854, USA

NON-CANONICAL RNA-POLYMERASES OF ϕ KZ-LIKE PHAGES

В базе данных полных геномов было выявлено девять бактериофагов типа ϕ KZ, которые кодируют свои собственные РНК полимеразы (РНКП), принадлежащие к классу мультисубъединичных РНКП. Анализ последовательностей белков фаговых РНКП и генетического окружения соответствующих генов позволили предположить наличие у этих фагов двух независимых функциональных РНКП, вирионной и невирионной.

РЕГУЛЯЦИЯ ТРАНСКРИПЦИИ. НЕКАНОНИЧЕСКИЕ РНК-ПОЛИМЕРАЗЫ. РАЗВИТИЕ БАКТЕРИОФАГОВ ТИПА ϕ KZ. ВРЕМЕННЫЕ КЛАССЫ ГЕНОВ.

Nine ϕ KZ-like bacteriophages, encoding their own RNA polymerase (RNAP), belonging to the class multi-subunit RNAP, were found in a database of complete genomes. Analysis of protein sequences and genetic environment of RNAP genes have suggested the presence of two independent functional phage RNAP, "virion" and "non-virion".

TRANSCRIPTION REGULATION. NON-CANONICAL RNA-POLYMERASES. DEVELOPMENT OF ϕ KZ-LIKE PHAGES. TEMPORAL GENES CLASSES

Транскрипция является первым этапом экспрессии генов и основной мишенью ее регуляции. Этот этап осуществляется с помощью фермента ДНК-зависимой РНК-полимеразы (РНКП). Существует два класса РНКП, которые имеют разное эволюционное происхождение и различаются по набору субъединиц и их аминокислотным последовательностям [1, 2]. Односубъединичные РНКП (осРНКП), состоящие из одного полипептида, найдены в митохондриях, хлоропластах и некоторых фагах. Типичный представитель

осРНКП – это РНКП из бактериофага T7. Канонические мультисубъединичные РНКП (мсРНКП) транскрибируют гены бактерий, архей и эукариот. МсРНКП представляют собой комплексные ферменты и состоят из нескольких (от 5 до 15) субъединиц, четыре из которых являются абсолютно консервативными. Бактериальная РНКП состоит из минимального набора субъединиц: β' , β , α -димера, ω , а также σ -субъединицы, определяющей промоторную специфичность РНКП. Каталитическая активность в обоих классах РНКП осущест-



вляется по общему механизму, но с помощью совершенно разных консервативных доменов и аминокислот. Все канонические мсРНКП содержат в своих основных субъединицах (β' и β у бактерий) так называемые «double-psi beta-barrel» (DPBB)-домены, которые совместно формируют активный центр [1, 2]. Один из DPBB-доменов содержит абсолютно универсальный мотив DxDGD с тремя аспартатами, связывающими ионы Mg^{2+} , необходимые для катализа. В последнее время в геномах некоторых клеточных организмов и вирусов биоинформатически были предсказаны атипичные (неканонические) мсРНКП, обнаруживающие только отдаленную гомологию с каноническими РНКП, и только в районе активного центра [2, 3]. Данные РНКП представляют особый интерес для изучения, так как их транскрипционные механизмы могут сильно отличаться от уже известных. В частности, возможные неканонические РНКП были предсказаны у группы бактериофагов типа фКЗ. Эта группа фагов заражает ряд патогенных бактерий, имеющих существенное значение для медицины, включая представителей родов *Pseudomonas*, *Yersinia* и

Salmonella, часто являющихся антибиотикоустойчивыми. Поэтому фКЗ и родственные ему фаги рассматриваются как участники фаговых коктейлей для лечения инфекций, вызванных этими бактериями. Несмотря на то, что группа фКЗ-подобных фагов представляет собой в силу вышеизложенного большой практический интерес, об их циклах развития, регуляции экспрессии генов и транскрипционных программах сведений практически нет.

Анализ предполагаемых РНКП-бактериофагов типа фКЗ методами биоинформатики

Бактериофаг фКЗ был впервые описан еще в 1978 г. [4]; в 2002 г. тот же состав ученых определил последовательность генома данного бактериофага [5]. Позже была выделена отдельная группа фКЗ-подобных гигантских бактериофагов, относящихся к семейству *Myoviridae* и отличающаяся чрезвычайно большими размерами своих геномов (более 200 тыс. пар оснований) [5 – 9]. В геномах фагов фКЗ, EL, 201ф2-1 и ОВР из данной группы, заражающих разные виды *Pseudomonas*, были обнаружены гены, кодиру-

Группы белков, гомологичных субъединицам бактериальной РНКП

Бактериофаг	β -субъединица		β' -субъединица			
	1	2	3	4	5	6
фКЗ <i>P. aeruginosa</i>	Gp178	Gp71 Gp73	Gp55	Gp74	Gp80	Gp180
EL <i>P. aeruginosa</i>	Gp186 Gp187	Gp38	Gp24	Gp39	Gp44	Gp184
фРА3 <i>P. aeruginosa</i>	Gp211 Gp209	Gp65 Gp66	Gp54	Gp67	Gp77	Gp212
201ф2-1 <i>P. chlororaphis</i>	Gp273/274	Gp129	Gp107	Gp130	Gp139	Gp275
ОВР <i>P. fluorescens</i>	Gp278	Gp073	Gp058	Gp074	Gp090	Gp277
фЕаН2 (GR-2012) <i>Erwinia amylovora</i>	(1388)	(746)	(533)	(630)	(435)	(537)
SPN3US <i>Salmonella sp.</i>	Gp0241	Gp0034	Gp0023	Gp0035	Gp0042	Gp0240
JM-2012 <i>Halocynthia roretzia</i>	Gp0076	Gp0157	Gp0119	Gp0158	Gp0031	Gp0136
фR1-37 <i>Yersinia enterocolitica</i>	Gp099	Gp261	Gp274	Gp102	Gp231	Gp178

ющие гомологи основных, наиболее консервативных, субъединиц мсРНКП, β' и β или их фрагментов. В связи с отсутствием достаточной информации о регуляции транскрипции генов фагов этого типа нами был проведен биоинформатический анализ базы данных полных геномов (GenBank) с целью выявления максимально полного числа фаговых геномов, кодирующих белки РНКП, подобные найденным в фКЗ, и родственных ему фагам. Анализ был проведен с помощью программы BLAST; для белков был использован алгоритм DELTA-BLAST и выбрана матрица BLOSUM62. В результате анализа, помимо четырех уже известных, было обнаружено еще пять геномов бактериофагов, у которых среди предполагаемых генов имеются подобные открытые рамки считывания (ОРС) (см. таблицу). В этой таблице приведены обозначения белков в соответствии с нумерацией ОРС в аннотации геномов фагов (например, Gp178), и при отсутствии таких обозначений приведен размер белков (например, 1388 аминокислот).

В геноме каждого фага были обнаружены шесть генов, кодирующих субъединицы РНКП бактериального типа или их фрагменты. На рис. 1 показано приблизительное сопоставление β - и β' -бактериальных субъединиц и найденных ОРС фагов, заражающих *Pseudomonas*.

В каждом геноме есть один полный гомолог β и ее С-концевой фрагмент, а также по два фрагмента, соответствующих N- и С-концам β' -субъединицы (см. рис. 1). На первый взгляд, такие «фрагментированные» субъединицы с большой вероятностью могли бы быть неактивны либо выполнять какие-то другие функции в ходе развития фага. Однако более детальный анализ этих ОРС методами биоинформатики показал, что N-конец неполного гомолога β приблизительно совпадает с разрывом, характерным для РНКП из архебактерий, а место «пересечения» N- и С-концов фрагментированных гомологов β' соответствует месту разрыва β' у цианобактерий [10]. Как уже отмечалось, все канонические мсРНКП имеют абсолютно универсальный Mg-связывающий мотив

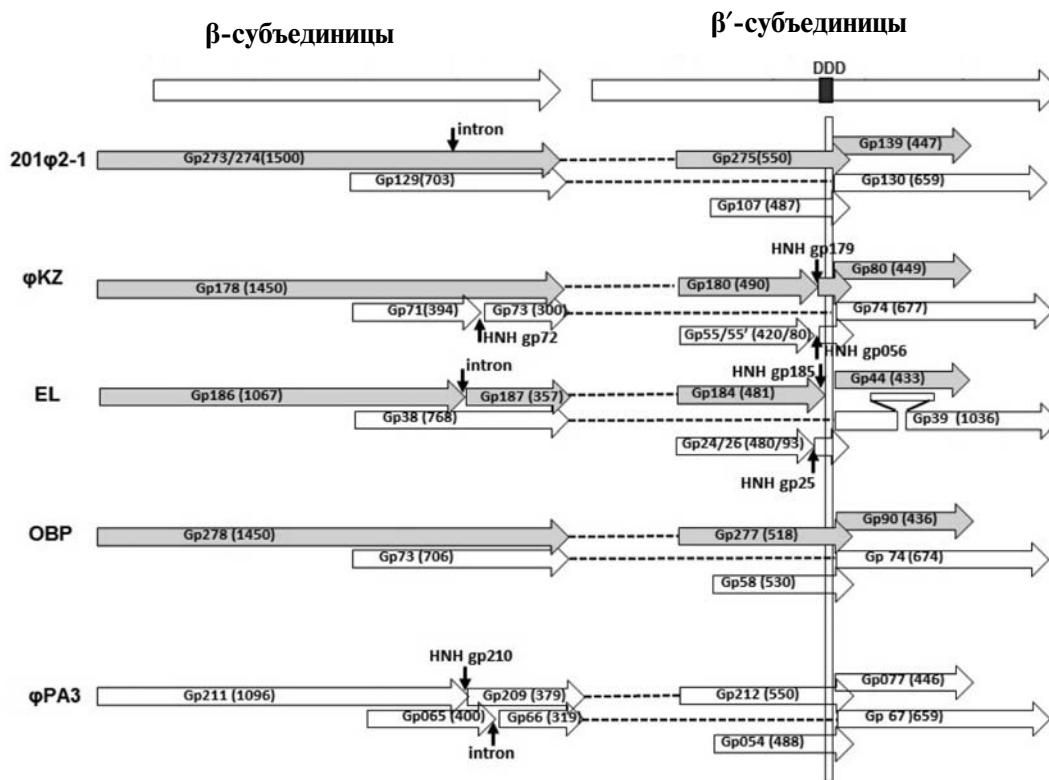


Рис. 1. Схема соответствия субъединиц РНКП и белков из фагов, заражающих разные виды *Pseudomonas*. Показаны: фаговые белки, найденные в составе вириона фага (серый тон); интроны (вертикальные стрелки); каталитический мотив DxDGD (прямоугольник); в белке Gp39 фага EL отмечено положение интрона. Если интрон кодирует HNH-эндонуклеазу, то это отмечено над стрелкой



NADFDGD, где три аспартата координируют два иона Mg^{2+} , необходимых для катализа. Отсутствие такого мотива в предполагаемых белках говорило бы о том, что они не функционируют как типичные РНКП. Анализ предполагаемых ОРС, соответствующих N-концевым фрагментам β' , показал, что они содержат данный каталитический мотив. Однако не во всех найденных фаговых гомологах β' этот мотив обнаруживается. Кодирующие последовательности этих белков у фагов ϕKZ , EL и $\phi R1-37$ обрываются прямо в каталитическом мотиве.

В отличие от существующей аннотации, в рамках которой было обозначено, что следующие за предполагаемыми последовательностями белков ДНК-эндонуклеазы HNH-семейства являются отдельными генами фагового генома, мы предположили, что эти нуклеазы кодируются мобильными интронами (см. рис. 1). Известно, что многие интроны бактерий и фагов мобильны за счет кодируемых ими ДНК-эндонуклеаз и могут встраиваться внутри клетки в гомологичные последовательности генома [11]. Выбор мишеней такими мобильными интронами далеко не случаен, и в данном случае мы впервые показали, что мишенью является субъединица РНКП. С помощью программы BLAST были выявлены недостающие аминокислотные последовательности прерванных интронами субъединиц фаговых РНКП, восстанавливающие каталитический мотив. Интересно, что хотя каталитический мотив абсолютно консервативен для канонических мсРНКП (NADFDGD), в фаговых субъединицах некоторые аминокислоты в нем могут заменяться, сохраняя инвариантной только часть DnDGD. В позиции *n* может находиться одна из трех ароматических аминокислот (F, Y, H), а вместо первых двух аминокислот NA (NADFDGD) могут быть N, A и G в разных сочетаниях. Это свидетельствует о том, что механистически фаговые неканонические РНКП могут отличаться от канонических РНКП. Было отмечено, что некоторые представители других групп гомологии тоже имеют разрывы в своих нуклеотидных и аминокислотных последовательностях, соответствующие предполагаемым HNH-содержащим интронам и интеину (см. рис. 1).

Изучение генетического окружения ОРС фаговых РНКП показало, что, по-видимому,

во всех геномах есть четкое разделение на два набора субъединиц: вирионные (белки, найденные экспериментально [7 – 9, 12] в составе фаговых частиц; они обозначены серым тоном на рис. 1) и невирионные. Стоит отметить преимущественно оперонную кластеризацию генов, соответствующих разным наборам. Также обращают на себя внимание существенные эволюционные отличия между ОРС разных наборов внутри отдельного фагового генома и существенное эволюционное сходство аналогичных ОРС между разными геномами.

Все вышеизложенные факты и соображения позволяют заключить, что, во-первых, фаги типа ϕKZ кодируют две независимые неканонические РНКП, и во-вторых, фаговые РНКП произошли от бактериальных посредством двух независимых эволюционных событий. Так как ни в одном из известных геномов ϕKZ -подобных бактериофагов не выявлено генов, соответствующих другим субъединицам мсРНКП, можно предположить, что либо фаги используют субъединицы хозяйской РНКП, формируя гибридные ферменты, либо фаги используют только «свои» субъединицы, и тогда фаговые РНКП могут механистически отличаться от уже известных канонических мсРНКП.

Анализ предполагаемых промоторов фага ϕKZ методами биоинформатики

Развитие фага требует скоординированной во времени транскрипции генов разных классов. Ранние гены, как правило, кодируют фаговые белки, функция которых заключается в перепрограммировании систем экспрессии генов хозяина на экспрессию генов фага. Белки, необходимые для репликации фагового генома, кодируются средними генами. К поздним относят гены, кодирующие белки оболочки, упаковки ДНК и лизиса клеток. Для каждого временного класса генов используются свои регуляторные последовательности – промоторы. Промоторы, относящиеся к разным временным классам, узнаются на разных стадиях развития фага. Существует две основные стратегии экспрессии фаговых генов [13]. Большинство фагов не кодирует свою собственную РНКП и использует РНКП клетки-хозяина в ходе всего цикла развития, модифицируя ее своими бел-

ками на разных стадиях цикла для узнавания разных классов промоторов (например, фаг Т4). Некоторые фаги кодируют собственные РНКП, участвующие в транскрипции фаговых генов на разных стадиях (например, фаги Т7 и N4), но даже в этих случаях фаги должны дополнительно использовать хозяйскую РНКП для транскрипции ряда своих генов. В бактериях сигналом начала транскрипции служат промоторные последовательности, состоящие из двух консервативных участков, обозначаемых как «-10»-регион и «-35»-регион и находящихся на соответствующих расстояниях друг относительно друга, а также от старта транскрипции. Данные промоторы узнаются бактериальной РНКП, содержащей σ^{70} -субъединицу.

Для дальнейшего изучения транскрипции фКЗ-подобных бактериофагов было необходимо определить промоторы, соответствующие всем трем временным классам генов, с помощью методов биоинформатики. В качестве модельного объекта был выбран бактериофаг фКЗ. С целью проверки возможности использования фагом фКЗ бактериальной РНКП, в геноме фага был проведен поиск мотивов, соответствующих бактериальным σ^{70} -зависимым промоторам. Поиск осуществлялся с помощью программы GenomExplorer. В качестве образца для сравнения был использован профайл, содержащий консенсусную последовательность σ^{70} -промоторов *Escherichia coli* (сокр. *E. coli*). Использование профайла, созданного на основе σ^{70} -промоторов *E. coli*, в исследовании фага, заражающего *Pseudomonas*, оправдано, так как последовательность и структура промоторов у них практически одинакова. В используемом профайле учитывался вклад каждой буквы консенсусов в определении степени подобия (score) отдельно, длина промежутка между «-10» и «-35»-регионами была задана в границах 16 – 19 нуклеотидных пар (нп), последовательность промежутков не учитывалась; возможные значения score находились в пределах от 2,18 до 11,64 у.е. Поиск производился в пределах от -200 до +100 нп относительно старт-кодонов трансляции предсказанных ОРС фага, варианты мотивов со значением степени подобия менее 4,5 не учитывались. Было выявлено 11 участков ДНК, удовлетворяющих данным параметрам, максимальное значение степени подо-

бия составило 5,06 ед. При визуальном анализе расположения каждого из найденных участков относительно предсказанных генов фага не было выявлено закономерностей, характерных для промоторных последовательностей.

На основе вышеизложенного можно предположить, что фаг не имеет промоторов, узнаваемых бактериальной РНКП, и на всех стадиях развития, вероятнее всего, использует свои собственные промоторы, которые узнаются собственными РНКП и/или гибридами на основе фаговых и хозяйских РНКП-субъединиц. На такую возможность указывали также два идентифицированных независимых набора фаговых РНКП-субъединиц. Вирионный набор мог бы составлять РНКП, появляющуюся в клетке сразу после начала инфекции и узнающую ранние фаговые промоторы. Второй набор может являться РНКП, которая появляется на более поздних стадиях инфекции и узнает, соответственно, средние и поздние фаговые промоторы. Подтверждение выдвинутой гипотезы стало бы уникальным открытием, так как в настоящее время неизвестны фаги, полностью независимые от РНКП клетки-хозяина.

Следующим шагом проведенного исследования был поиск фаговых промоторных элементов *ab initio*. Для этого была создана база данных межгенных участков генома фКЗ с помощью программы Artemis [14]. С помощью программы MEME/MAST [15] в этой базе данных был осуществлен поиск консервативных повторяющихся элементов размерами от 6 до 50 нуклеотидов.

Один из найденных мотивов имел (А-Т)-богатую последовательность и встречался в семнадцати межгенных участках ДНК-фага. Изображение данного мотива приведено на рис. 2,а. Далее база данных межгенных участков была проанализирована с помощью программы RHIRE [16], предназначенной для поиска регуляторных элементов в геномах бактериофагов. При анализе были использованы следующие параметры: длина L искомого мотива не превышала 25 символов, количество несовпадений D с предполагаемым консенсусом равнялось 5, минимальное количество повторов, представляющих уникальный консенсус (DominantNum), равнялось 4. С помощью данной программы было обнаружено еще 6 дополни-

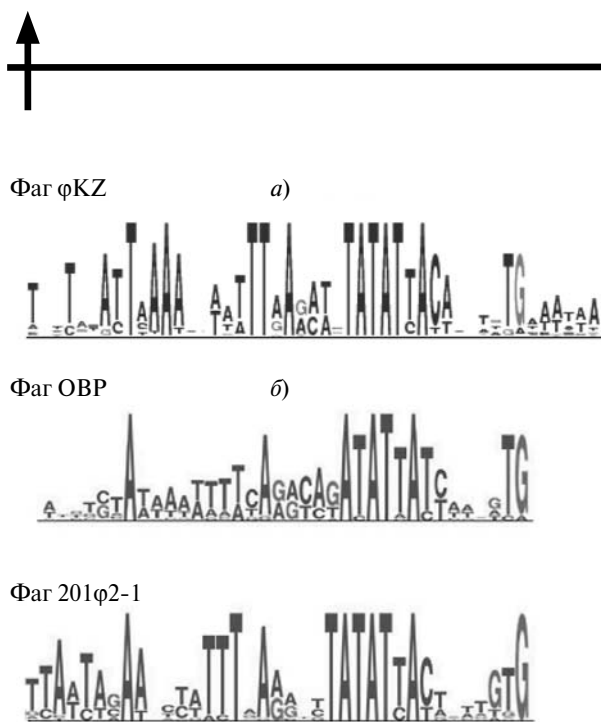


Рис. 2. Изображение нуклеотидных последовательностей, включающих консенсус предполагаемых ранних промоторов φKZ (*a*) в сравнении с мотивами, найденными в фагах OBP и 201φ2-1 [9] (*б*). Консервативные нуклеотиды отмечены буквами большего размера

тельных участков, содержащих мотив, подобный обнаруженному ранее. Во всех найденных положениях в геноме фага этот мотив находится в той же ориентации, что и следующий за ним ген; расстояние до старт-кодона ОРС составляло около 30 нуклеотидов. Поскольку данный мотив не встречается перед генами, кодирующими белки вириона или нуклеотидного обмена, можно предположить, что данный мотив выполняет роль промотора ранних генов фага φKZ. Для близкородственных бактериофагов 201φ2-1 и OBP ранее также был выявлен мотив, вероятно выполняющий роль специфического фагового промотора ранних генов [9]. При сравнении последовательности консенсусных районов фагов (см. рис. 2) можно заметить, что мотивы, найденные во всех трех фагах, чрезвычайно похожи. По-видимому, данный мотив может узнаваться вирионной фаговой РНКП непосредственно после начала инфекции. Тем не менее, для полной идентификации необходимо дальнейшее экспериментальное подтверждение.

На следующем этапе работы была предпринята попытка определения промоторов средних и поздних генов фага φKZ, предположительно узнаваемых невирионной фаговой РНКП.

Для этого были проанализированы межгенные участки генома, находящиеся перед генами структурных белков, которые были до этого идентифицированы в вирионе и заведомо не были ранними [12]; использовались комплекс программ MEME/MAST и программы PHIRE с параметрами $L = 16$, $D = 4$, $\text{DominantNum} = 4$. Был найден большой набор возможных мотивов, но совпадений между результатами, полученными при использовании разных программ, не наблюдалось. Также стоит отметить, что детальный анализ положения участков ДНК в геноме фага, содержащих предложенные мотивы, не позволяет с уверенностью говорить, что какой-либо из данных мотивов выполняет роль промотора средних или поздних генов. Это может быть связано с вырождением или сложностью структуры этих промоторов.

Таким образом, определение средних и поздних промоторов фага φKZ методами биоинформатики на текущий момент не представляется возможным и требует экспериментального определения хотя бы некоторых стартовых точек транскрипции генов этих классов для построения предварительного профайла.

В результате проведенных исследований в базе данных полных геномов было выявлено девять бактериофагов, в геномах которых кодируются белки, гомологичные каталитическим субъединицам β и β' бактериальных канонических мсРНКП. Все найденные фаги принадлежат к группе гигантских фагов типа φKZ из семейства *Myoviridae*.

Показано, что все обнаруженные фаговые β - и β' -подобные белки можно подразделить на два набора, обозначенные нами как «вирионный» и «невирионный».

Анализ последовательностей предполагаемых белков и генетического окружения соответствующих генов, а также присутствие в каждом из наборов голомога β' , содержащего консервативный каталитический мотив DxDGD, абсолютно необходимый для активности мсРНКП, позволили предположить наличие у этих фагов двух независимых функциональных РНКП.

В геномах некоторых фагов нуклеотидные последовательности, кодирующие белки, гомологичные субъединицам РНКП, прерва-

ны мобильными интронами. По-видимому, в транскрипции генома фага хозяйская РНКП не принимает участия. Вероятно, на всех стадиях транскрипция фаговых генов осуществляется со специфических фаговых промоторов собственными фаговыми РНКП или функциональными гибридами фаговых и бактериальных субъединиц РНКП.

Поиск фаговых промоторов с использованием методов биоинформатики при-

вел к идентификации вероятных ранних промоторов, отличающихся от типичных бактериальных промоторов последовательностями консервативных элементов. Предположительно он должен узнаваться вирионной РНКП.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения № 14.В37.21.0846 и с использованием оборудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ» на базе ФГБОУ ВПО «СПбГПУ».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lane, W.J. Molecular evolution of multisubunit RNA polymerases: sequence analysis [Text] / W.J. Lane, S.A. Darst // J. Mol. Biol. – 2009. – Vol. 395. – P. 671 – 685.
2. Iyer, L.M. Evolutionary connection between the catalytic subunits of DNA-dependent RNA polymerases and Eukaryotic RNA-dependent RNA polymerases and the origin of RNA polymerases [Text] / L.M. Iyer, E.V. Koonin, L. Aravind // BMC Structural Biology. – 2003. – Vol. 3. – P. 1 – 23.
3. Ruprich-Robert, G. Non-canonical DNA transcription enzymes and the conservation of two-barrel RNA polymerases [Text] / G. Ruprich-Robert, P. Thuriaux // Nucleic Acids Res. – 2010. – Vol. 38. – № 14. – P. 4559 – 4569.
4. Крылов, В.Н. Бактериофаг ϕ KZ *Pseudomonas* – возможная модель для изучения генетического контроля морфогенеза [Текст] / В.Н. Крылов, И.Ж. Жазыков // Генетика. – 1978. – Т. 8. – № 4. – С. 678 – 685.
5. Mesyanzhinov, V.V. The genome of bacteriophage ϕ KZ of *Pseudomonas aeruginosa* [Text] / V.V. Mesyanzhinov, J. Robben, B. Grymonprez, [et al.] // J. Mol. Biol. – 2002. – Vol. 317. – P. 1 – 19.
6. Hertveldt, K. Genome comparison of *Pseudomonas aeruginosa* large phages [Text] / K. Hertveldt, R. Lavigne, E. Pletneva, [et al.] // J. Mol. Biol. – 2005. – Vol. 354. – № 3. – P. 536 – 545.
7. Thomas, J.A. Characterization of *Pseudomonas chlororaphis* myovirus 201 ϕ 2-1 via genomic sequencing, mass spectrometry, and electron microscopy [Text] / J.A. Thomas, M.R. Rolando, C.A. Carroll, [et al.] // Virology. – 2008. – Vol. 376. – № 2. – P. 330 – 338.
8. Monson, R. The *Pseudomonas aeruginosa* transducing phage ϕ PA3 is a new member of the ϕ KZ-like group of ‘jumbo’ phages, and infects model laboratory strains and clinical isolates from cystic fibrosis patients [Text] / R. Monson, I. Foulds, J. Foweraker, [et al.] // Microbiology. – 2011. – Vol. 157. – P. 859 – 867.
9. Cornelissen, A. Complete genome sequence of the giant virus OBP and comparative genome analysis of the diverse ϕ KZ-related phages [Text] / A. Cornelissen, S.C. Hardies, O.V. Shaburova, [et al.] // J. Virol. – 2012. – Vol. 86. – № 3. – P. 1844 – 1852.
10. Severinov, K. RNA polymerase structure-function: insights into points of transcriptional regulation [Text] / K. Severinov // Curr. Opin. Microbiol. – 2000. – Vol. 3. – P. 118 – 125.
11. Haugen, P. The natural history of group I introns [Text] / P. Haugen, D.M. Simon, D. Bhattacharya // Trends Genet. – 2005. – Vol. 21. – № 2. – P. 111 – 119.
12. Lecoutere, E. Identification and comparative analysis of the structural proteomes of ϕ KZ and EL, two giant *Pseudomonas aeruginosa* bacteriophages [Text] / E. Lecoutere, P.J. Ceysens, K.A. Miroshnikov, [et al.] // Proteomics. – 2009. – Vol. 9. – № 11. – P. 3215 – 3219.
13. Nechaev, S. Bacteriophage-induced modifications of host RNA polymerase [Text] / S. Nechaev, K. Severinov // Annu. Rev. Microbiol. – 2003. – Vol. 57. – P. 301 – 322.
14. Artemis: Genome Browser and Annotation Tool (release 14.0.0) [Электронный ресурс]. URL: <http://www.sanger.ac.uk/resources/software/artemis/> Дата обращения: 12.10.2012 г.
15. MEME Suite [Электронный ресурс]. URL: <http://meme.nbcr.net/meme/> Дата обращения: 15.10.2012.
16. PHIRE (PHage *In silico* Regulatory Elements) [Электронный ресурс]. URL: <http://www.agr.kuleuven.ac.be/logt/PHIRE.htm> Дата обращения: 15.10.2012.



ЯКУНИНА Мария Вячеславовна – аспирантка кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, инженер НИИ «НаноБио» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yakuninam@gmail.com

ВОРОНЦОВА Дарья Николаевна – студентка физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
davorontsova@gmail.com

МИНАХИН Леонид Станиславович – доцент Института Ваксмана, Ратгерс, Университет штата Нью-Джерси, США.

190 Frelinghuysen Rd, Piscataway, NJ 08854, USA
minakhin@waksman.rutgers.edu

УДК 621.384.663

Н.А. Иванов, Ж.С. Лебедева

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ПУЧКА ПРОТОНОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОФТАЛЬМОЛОГИИ

N.A. Ivanov¹, Zh.S. Lebedeva²

¹ St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

² В.Р. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute,
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Russia

PROTON BEAM CHARACTERISTICS ESTIMATION FOR USING IN OPHTHALMOLOGY

В рамках разработки проекта изохронного циклотрона Ц-80 в ФГБУ «ПИЯФ» рассмотрена схема доставки пучка протонов с энергиями ~ 60 МэВ до пациента с целью лечения офтальмологических заболеваний. Анализируются критерии оценки характеристик пучка на выходе из циклотрона и на выходе системы формирования. Анализ системы доставки и качества пучков проводился на основе компьютерного моделирования методом Монте-Карло в программном комплексе Geant4. В работе подобраны максимально точные модели описания физических процессов, на их основе рассчитано несколько вариантов системы формирования.

ПРОТОННАЯ ТЕРАПИЯ. МЕТОД ПАССИВНОГО РАССЕЯНИЯ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. GEANT4.

The accelerator C-80 for proton therapy of eye is under construction in В.Р. Konstantinov PNPI. As a part of this project the protons beam delivery system with energies near 60 MeV was designed. The requirements to the beam characteristics were defined. We analyzed the beam delivery system and beam characteristics in Monte Carlo based system Geant4. The most accurate model of the description of physical processes was defined. Several variants of the system based on these models were calculated.

PROTON THERAPY. PASSIVE SCATTERING SYSTEM. MONTE CARLO METHOD. GEANT4.

Согласно данным ВОЗ (Всемирной организации здравоохранения) смертность от рака в мире непрерывно возрастает и в 2030 г. превысит 11 млн. человек [1]. В настоящее время для лечения онкологических заболеваний широко применяется радиационная терапия (облучение опухоли пучками различных типов частиц) и ее комбинация с другими методами. В ряде развитых стран радиационная терапия применяется в 70% случаев онкологических заболеваний.

Методы терапии, использующие облучение опухоли фотонами и электронами, имеют ряд серьезных ограничений, обусловленных тем, что в большом числе случаев с помощью этих частиц невозможно достаточно локально соз-

дать требуемую поглощенную дозу в очаге заболевания. Это связано с тем, что электроны и фотоны сильно рассеиваются в веществе, в результате чего максимум поглощенной дозы сосредоточен на малых глубинах в здоровых тканях пациента (рис. 1, а).

В отличие от случая облучения электронами и фотонами при облучении тяжелыми заряженными частицами (ТЗЧ) поглощенная доза возрастает вдоль пробега частицы и имеет резкий максимум в конце пробега (кривая Брэгга), что делает возможным облучение интересующих областей дозой, в несколько раз превышающей дозу на входе в ткань. Регулируя энергию протонов, можно подобрать ее так, чтобы пик

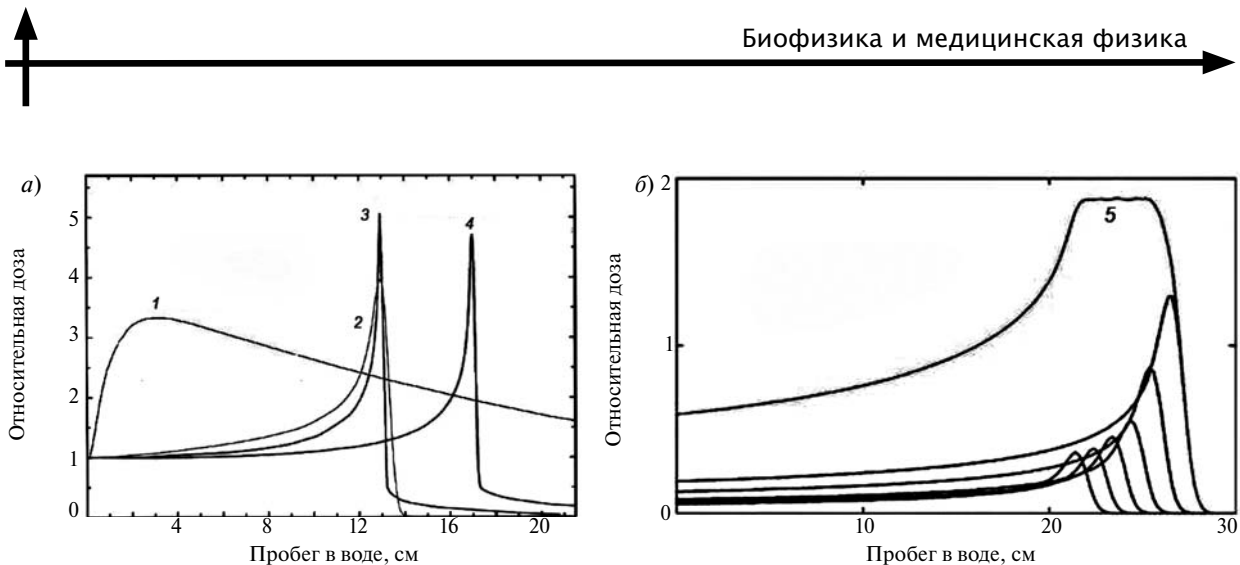


Рис. 1. Распределение поглощенной дозы по глубине для различных видов излучения в оригинальном (а) и модифицированном (б) видах.

Виды излучения: 1 – тормозное от линейного ускорителя электронов (энергия 18 МэВ); 2 – протоны (энергия 135 МэВ); 3, 4 – ионы углерода (энергия 250 и 300 МэВ/нуклон); 5 – протоны с максимальной энергией 250 МэВ (модифицированная кривая Брэгга)

Брэгга пришлось как раз на объем, который необходимо облучить (рис. 1, б).

В связи с этим на протяжении вот уже нескольких десятилетий в клинической практике все шире применяются пучки ТЗЧ – протонов и более тяжелых ионов. К настоящему времени курс протонной терапии прошли в мире около 80 тыс. пациентов [2].

Относительно необходимости применения протонной терапии для различных локализаций в медицинском мире ведется активная дискуссия. Однако в офтальмоонкологии данный вид излучения при лечении агрессивной опухоли глаза – меланомы – часто является единственной альтернативой энуклеации (удалению глаза). При этом в большом ряде случаев удается сохранить пациенту не только жизнь, но и зрение, обойдя чувствительный к облучению зрительный нерв. Исследования показывают, что после проведения лучевой терапии в течение первых пяти лет рост опухоли продолжается лишь у 3 % пациентов, случаи повторного роста опухоли после 10 и 15 лет составляют, соответственно, 4 и 5 % [3].

В настоящее время в ПИЯФ им. Б.П. Константинова планируется создание центра протонной офтальмологии (первого в России) на базе строящегося циклотрона Ц-80.

Цели данного исследования – разработка виртуальной модели системы для расчета прохождения пучка протонов с энергией 60 – 70 МэВ через водный фантом и выработка требований к параметрам пучка протонов (интенсив-

ности, поперечного сечения и угловой расходимости) на входе в зал облучения.

Методы протонной терапии

На практике пучок протонов должен быть сформирован таким образом, чтобы он максимально равномерно покрывал опухоль, имеющую линейные размеры порядка нескольких сантиметров. Для этого создается так называемая модифицированная кривая Брэгга (МКБ), которая является суммой пиков Брэгга от протонов различных энергий. Результат такого сложения качественно представлен на рис. 1, б.

Для формирования лечебного протонного пучка в офтальмологии известны два метода: пассивного рассеяния и активного сканирования. В настоящее время оба метода имеются в распоряжении ряда известных мировых центров протонной терапии: Paul Scherer Institute (PSI, Швейцария), MD Anderson Cancer Center (США), Rinecker Proton Therapy Center (RPTC, Мюнхен, Германия). В Гейдельберге, в центре Heidelberg Ion-Beam Therapy Center, применяются оба метода [2].

Метод активного сканирования предполагает применение так называемого «карандашного пучка» диаметром в несколько миллиметров. Отклоняющие магниты позволяют смещать пучок в двух направлениях, сканируя мишень. Для достижения различных глубин мишени применяется динамическое изменение энергии пучка.

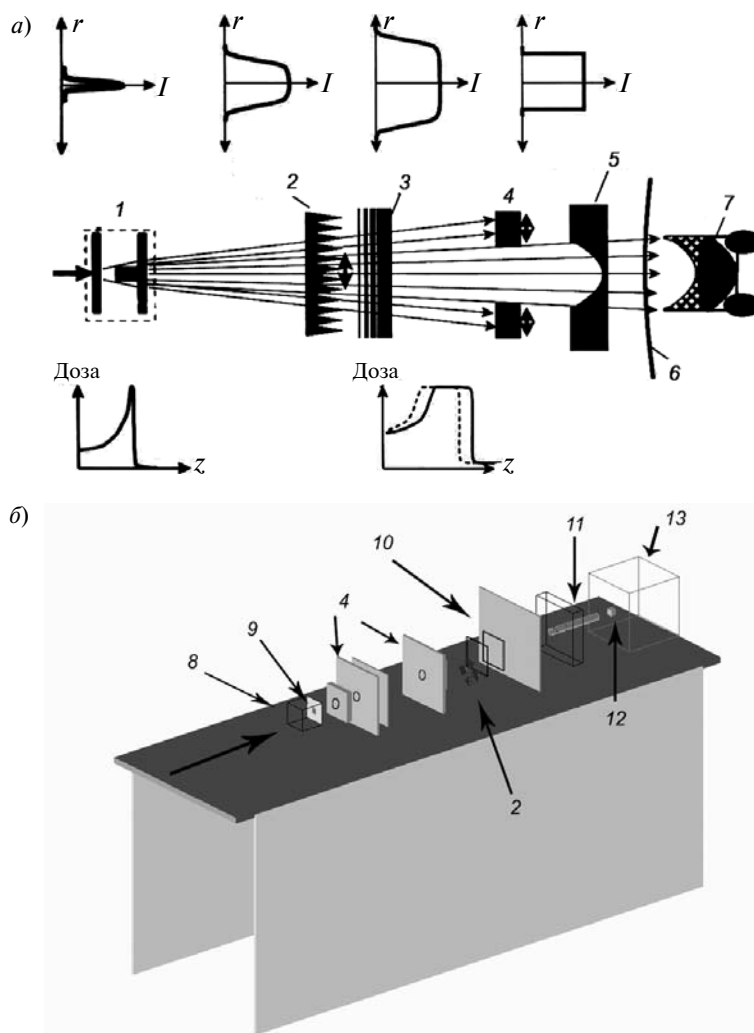


Рис. 2. Схематические представления системы рассеяния и коллимации: а – типичная схема [4]; б – виртуальная экспериментальная установка;

1 – рассеивающая система, 2 – гребенчатый фильтр, 3 – деградер, 4 – коллиматор, 5 – компенсатор, 6 – кожа, 7 – опухоль; 8 – вакуумированный объем, 9 – выходное окно и поглотитель, 10 – система детекторов, 11 – латунная трубка, 12 – чувствительный объем, 13 – фантом (толстой стрелкой указано направление облучения).

На верхней системе графиков представлены радиальные распределения интенсивностей облучения на разных стадиях прохождения облучения, на нижних – распределения поглощенной дозы по глубине

В методе пассивного рассеяния для обеспечения соответствия формы пучка форме облучаемого объекта применяется система рассеяния и коллимации, которая расширяет пучок до заданных размеров и создает профиль поглощенной дозы с равномерным плато (рис. 2, а). Для получения МКБ применяются различные приспособления, и наиболее распространенным из них является гребенчатый фильтр, представляющий собой набор пластин различной толщины; при прохождении через

эти пластины протоны теряют различную энергию, что влияет на их конечный пробег.

Быстрое включение и выключение пучка при активном сканировании технически трудно обеспечить, что приводит к сложностям при проведении процедур гарантии качества. В связи с этим метод пассивного рассеяния, обладая тем недостатком, что при его использовании на элементах системы формирования рождается поток вторичных частиц (нейтронов), является более простым и дешевым. Благодаря этому



он наиболее часто применяется в офтальмоонкологии. Данный метод принят за основу формирования пучка и для циклотрона ПИЯФ.

Описание виртуальной модели формирования протонного пучка

Основными критериями при выборе параметров входного пучка и оптимальной схемы формирования поля в фантоме является обеспечение следующих характеристик:

неравномерности поглощенной дозы в облучаемом фантоме не более 5 %;

больших значений градиентов поглощенной дозы в радиальном и продольном направлениях (это необходимо для минимизации облучения здоровых тканей);

максимальной доли числа протонов, попадающих в фантом, от числа протонов на входе в зал облучения; это обуславливает минимальную активацию оборудования зала облучения и минимальное число образующихся в зале нейтронов.

Моделирование проводится в программном комплексе Geant4 v. 9.5 [5], который позволяет рассчитывать методом Монте-Карло различные процессы, имеющие место при прохождении элементарных частиц через вещество. Geant4 является открытым ресурсом и содержит большую библиотеку примеров, помогающих решать широкий спектр физических задач, включая медицинское применение. Данная система библиотек написана на языке программирования C++. Комплекс позволяет достаточно гибко выбирать параметры геометрической конфигурации, генерации частиц и физических процессов.

Для выработки критериев к параметрам входного пучка рассматривается известный в мире [6, 7] метод формирования за счет рассеяния узкого пучка (2 – 5 мм) на двух фольгах. Основные компоненты системы формирования приведены на рис. 2,б. Система рассеяния представлена двумя танталовыми фольгами с толщинами от 20 до 40 мкм (в зависимости от необходимых выходных параметров) и латунным поглотителем центральной части пучка.

Для создания МКБ пучок, сформированный в плоскости, перпендикулярной направлению его движения, попадает в модуляторный

бокс, на входе и выходе которого расположены сменные коллиматоры из полиметилметакрилата (ПММА). Перед первым коллиматором при необходимости может быть установлен поглотитель 3 (деградер), предназначенный для снижения энергии пучка. В работе [8] показано, что при возможности необходимо избегать применения данного элемента и добиваться точной подстройки энергии на самом циклотроне. После модуляторного бокса и очередного коллиматора пучок протонов проходит через профилометры и мониторные камеры, предназначенные для контроля параметров пучка.

Внутри модуляторного бокса, выполненного из алюминия, расположен гребенчатый фильтр 2 из пластин ПММА различной толщины. Создание модулятора – одна из самых сложных задач при моделировании системы доставки пучка до пациента. Общий подход к описанию геометрии модулятора в Geant4 был выработан группой исследователей из CATANA (Centro di AdroTerapia ed Applicazioni Nucleari Avanzate, Catania, Italy) [7] и вошел в базу библиотечных примеров. Изменение размеров, взаимного расположения и количества пластин, а также положения самого модулятора в пространстве позволяет подобрать его параметры для соответствующих характеристик пучка и требующейся МКБ. В рамках данной работы создан вариант модулятора, оптимальный для конкретного набора параметров одного из пучков. Отдельной задачей стоит разработка метода, позволяющего задать геометрию модулятора не эмпирическим путем, а при помощи аналитических закономерностей. Более подробно данный вопрос описан в работе [9].

Непосредственно перед фантомом размещается финальная трубка 11 (коллиматор) из латуни, защитная ширма и персональный конечный коллиматор из латуни с поперечным сечением отверстия, соответствующим поперечному профилю опухоли.

В качестве фантома 13 выбран куб с размерами 40 × 40 × 40 см, заполненный водой, который служит стандартной дозиметрической средой. Внутри него вплотную к передней стенке размещается чувствительный объем 12 с размерами 4 × 4 × 4 см, который может быть разделен на слои или элементарные объемы малых размеров – воксели. Характерная толщина слоя

составляет 200 мкм. Линейный размер элементарного кубика (вокселя) — 500 мкм.

Применяемые модели физических взаимодействий и тестирование программы

Наиболее критической с точки зрения появления ошибок частью моделирования в Geant4 является задание физических процессов. В версии Geant4.9.5 эта проблема решается созданием наборов библиотек физических взаимодействий, подходящих для различных областей физики. В данной работе применялся QGSP_BIC (Quark-Gluon String Precompound Binary Cascade). Электромагнитные процессы описаны моделью LowEnergy, более детально рассчитывающей электроны низких энергий, которая, как было показано в работе [7], дает лучшее согласие с экспериментом. Данная модель более чувствительна к определению порога рождения вторичных электронов. Так, для порога 14,087 кэВ (пробег в воде 0,01 мм) вклад от первичных протонов и дельта-электронов — соответственно 88,545 и 9,495 % от общего энерговыделения, а для порога 84,66 кэВ (пробег в воде 0,1 мм) — 97,422 и 0,584 %. При дальнейшей сверке результатов расчета с экспериментальными данными стоит принимать во внимание возможности учета дельта-электронов в используемых детекторах.

Для тестирования разработанной программы прохождения протонов было произведено сравнение положения пика Брэгга от моноэнергетического пучка протонов с энергией 60 МэВ, рассчитанного в Geant4, с результатами по программе SRIM: отличие в положении пика составило 0,23 %. Положение пика Брэгга для протонов с энергией 60 МэВ с энергетическим разбросом 300 кэВ по программе MNCPIX отличается от полученного в Geant4 на 0,16 %.

Основной вклад в дозу при взаимодействии протонов с веществом дают процессы ионизации, однако роль неупругих ядерных процессов также существенна. Для проверки корректности подбора библиотек физических взаимодействий было проведено сравнение расчетных результатов, учитывающих и не учитывающих неупругие процессы, с данными расчетов других авторов. В работе [10] было рассчитано распределение поглощенной дозы в водном фантоме для «карандашного» моноэнергети-

ческого пучка протонов с энергией 60 МэВ и полушириной на полувысоте 2 мм. Сравнение результатов, полученных в нашей работе и в работе [10], приведено в табл. 1. Наблюдаемые различия могут быть связаны с использованием в [10] более старой версии Geant4.5.2, в то время как в настоящей работе применялась версия Geant4.9.5, основанная на более точной базе данных. С учетом вышеизложенного, полученные результаты неплохо согласуются друг с другом.

Помимо тестирования программы, данный расчет позволяет сделать практический вывод. Ряд применяемых в настоящее время планирующих систем, в особенности это касается планирования протонной терапии для офтальмологии, основаны на аналитическом расчете, не учитывающем вклада от рождающихся вторичных частиц. Между тем такой подход может вносить недопустимо большую погрешность в расчет поглощенной дозы. Таким образом, созданная программа может быть использована при тестировании планирующей системы в ходе ее приема в клиническую эксплуатацию.

Т а б л и ц а 1

Результаты расчетов энерговыделения протонов с энергией 60 МэВ в воде

Параметр	Значение	
	Данная работа	[10]
Позиция пика Брэгга, мм	30,50	30,45
E_{BP} / E_{pl} без учета неупругих процессов	6,39	7,017
То же с учетом неупругих процессов	6,03	6,654
Уменьшение E_{BP} / E_{pl} , % с учетом неупругих процессов	5,97	4,82

Обозначения: E_{BP} , E_{pl} — поглощенные энергии в пике Брэгга и на входе в фантом, соответственно

Особое внимание при создании программы было уделено описанию пучка. К стандартному классу, описывающему вылет частиц в Geant4, относится класс G4PrimaryGeneratorAction; в том числе его используют в библиотечных при-



мерах, посвященных медицинским применениям. Однако его возможности весьма ограничены. Более гибким и удобным в работе является класс G4GeneralParticleSorce; при его помощи можно описать точечный источник, источник в виде любой плоской или объемной фигуры, а также пучок ускорителя. Пучок описывается следующими параметрами: геометрической формой и размерами источника, коэффициентами, определяющими радиальное и угловое распределения вылета частиц, энергией частиц и их разбросом по энергии.

Конструкция строящегося ускорителя Ц-80 предполагает наличие конечного коллиматора на выходе из ускорительного тракта. В связи с этим наиболее приемлемой оказывается модель круглого пучка с угловым отклонением не более $0,5^\circ$.

Основные результаты

Для описания дозного распределения вдоль оси пучка в протонной лучевой терапии принято использовать следующие параметры [6]: максимальный пробег, определяемый как расстояние от поверхности фантома до точки, где доза на задней границе составляет 90 % от предписанной (d_{90}); длина МКБ, определяемая как расстояние между точками, где значение дозы составляет не менее 90 %; градиент дозы на задней границе, определяемый как расстояние между точками, в которых значение дозы составляет соответственно 80 и 20 %, и доза на входе. Значение дозы в 90 % (ранее в 80 %) для определения длины МКБ сложилось исторически. В настоящий момент ряд авторов предлагает переопределить данное понятие. В частности, в работе [6] для определения длины МКБ предлагается использовать значение дозы в 98 % (на рис. 3,а – Mod98). Разумным кажется также использование значения в 95 %, поскольку это позволяет делать результаты более удобными для сравнения с фотонной терапией.

Для определения профиля пучка применяется понятие ширины поля, определяемое, как и в фотонной терапии, расстоянием между точками, доза в которых составляет 50 %, и градиентом дозы на боковых поверхностях (полутень). Для определения полутени используются два подхода: со значениями дозы 20 – 80 % и 50 – 95% (рис. 3,б).

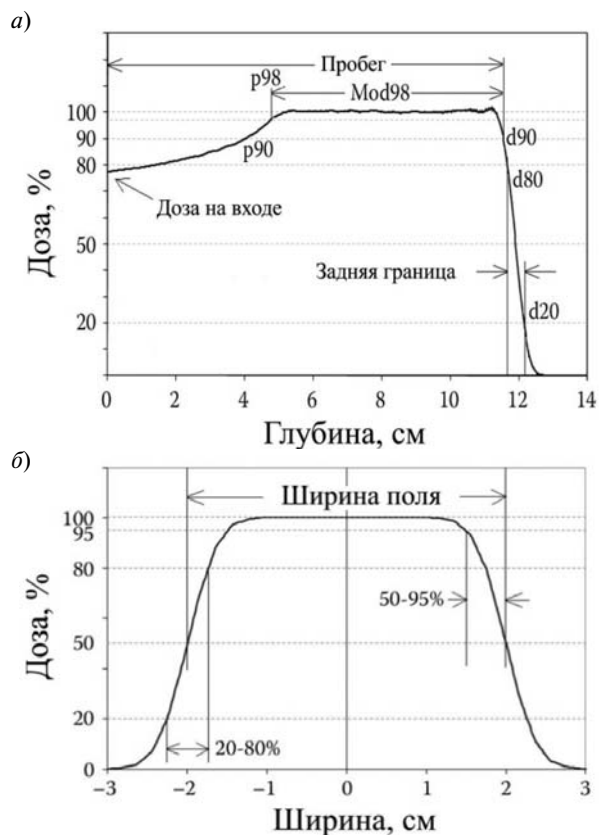


Рис. 3 [6]. Характеристики дозного распределения пучка: а – вдоль оси пучка; б – в плоскости, перпендикулярной направлению пучка

Нам представляется полезным дополнительно применить значение эффективности пучка, определяемое как отношение числа протонов, дошедших до фантома, к числу протонов, пришедших в зал облучения (в расчете это число протонов, выпущенных из источника), а также вклад нейтронов в общую дозу.

На рис. 4 и в табл. 2 представлены параметры дозного распределения от двух пучков, прошедших через одну и ту же систему рассеяния и модуляции. Пучок 1 радиусом 2 мм имел угловое отклонение $0,05^\circ$, пучок 2 – мононаправленный, радиусом 6,5 мм. Изменение параметров пучка влияет не только на профиль, но и на МКБ, что представлено на рис. 4. В частности, для второго пучка на МКБ появляется провал, который разбивает плато в области 95%-й дозы на две части. Данное обстоятельство усложняет процесс создания модулятора, так как необходимо либо создавать персональный модулятор на каждый конкретный случай, либо увели-

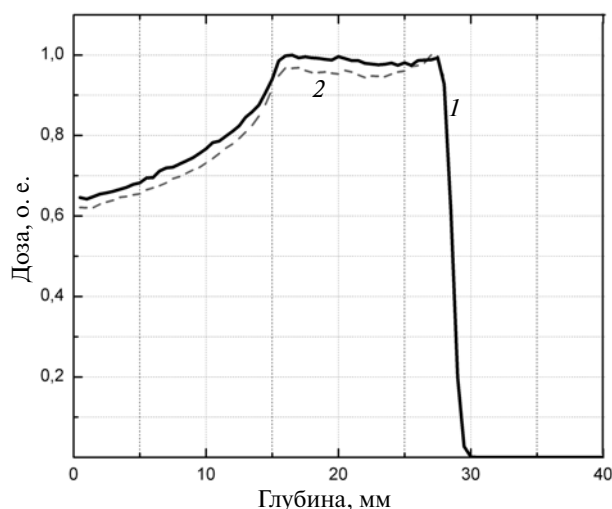


Рис. 4. Модифицированная кривая Брэгга для двух пучков:
1, 2 — пучки 1 и 2 соответственно

чивать библиотеку модуляторов, учитывая не только длину желаемого МКБ, но и параметры профиля пучка, либо варьировать интенсивность пучка. Каждый из этих вариантов обладает своими преимуществами и недостатками, и каждый из них требует детального расчета.

Т а б л и ц а 2

Параметры распределения поглощенной дозы в водном фантоме

Параметр	Значение	
	Пучок 1	Пучок 2
Максимальный пробег, мм	27	27
МКБ _{90%} , мм	13,7	13,3
МКБ _{95%} , мм	12,7	—
Ширина пучка, мм	17,1	16,9
Полутень 20 – 80%, мм	3,7	4,1
То же 50 – 95%, мм	5,3	5,9
Эффективность пучка, %	4,5	6,9
Вклад в дозу от нейтронов, %	1,0	1,1

Итак, на основе программного комплекса Geant4 разработана модель виртуальной экс-

периментальной установки для формирования пучка протонов при лучевой терапии онкологических заболеваний глаза и проведены расчеты энерговыделения при прохождении протонов с энергиями 60 МэВ через эту установку и водный фантом.

Программа протестирована на предмет корректности описания применяемых в Geant4 моделей физических взаимодействий и характеристик пучка. Проведенные расчеты показали, что вклад ядерных реакций в полное энерговыделение составляет примерно 5 % для протонов с энергией 60 МэВ.

Стоит отметить, что неупругие ядерные взаимодействия протонов с ядрами атомов облучаемых материалов увеличивают поглощенную дозу в области до пика Брэгга. Высокая относительная биологическая эффективность продуктов ядерных реакций (нейтронов, альфа-частиц, остаточных ядер) может приводить к существенному увеличению биологической дозы в области до пика, то есть в области здоровых тканей пациента.

В работе описаны основные методы оценки дозного распределения, которые позволяют выработать критерии качества пучка на входе в систему формирования. В предложенной конфигурации системы удалось подобрать характерные параметры элементов формирования, которые позволяют достичь равномерного плато МКБ при использовании общепринятой модели узкого пучка.

Однако для узкого пучка эффективность использования частиц невелика, что приводит к увеличению наведенной радиоактивности в зале облучения. В связи с этим представляет интерес рассмотрение варианта широкого пучка, диаметр которого соответствует диаметру опухоли. Следует отметить, что в этом варианте не требуется система рассеяния, вследствие чего тракт формирования офтальмологического пучка может быть существенно более простым, надежным и универсальным. Важной задачей также является создание алгоритма расчета оптимальных параметров модулятора для различных входных пучков.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **World Health Organization** [Электронный ресурс] / World Health Statistic 2012 – Электрон. Дан. – Ж.: Швейцария, 2012. – Режим доступа: www.who.int, свободный. – Загл. с экрана.
2. **Particle Therapy Cooperation Group (PTCOG)** [Электронный ресурс] / Particle therapy facilities in operation – Электрон. Дан. – Ж.: Швейцария, 2012. – Режим доступа: <http://ptcog.web.psi.ch/>, свободный. – Загл. с экрана.
3. **Gragoudas, E.S.** Long-term risk of local failure after proton therapy for choroidal/ciliary body melanoma [Text] / E.S. Gragoudas // Trans. Am. Ophthalmol. Soc. – 2002. – Vol. 100. – P. 43–50.
4. **Schardt, D.** Heavy-ion tumor therapy: Physical and radiobiological benefits [Text] / D. Schardt, T. Elsässer, D. Schulz-Ertner // Rev. Mod. Phys. – 2010. – Vol. 82(1). – P. 383–425.
5. **Geant4** [Электронный ресурс] / Geant4 User's Guide for Application Developers, Version: geant 4.9.5 – Электрон. Дан. – Ж.: Швейцария, 2011. – Режим доступа: <http://geant4.cern.ch/>, свободный. – Загл. с экрана.
6. **Paganetti, H.** Proton therapy physics [Text] / H. Paganetti. – Boca Raton: CRC Press, 2012. – 651 p.
7. **Cirrone, G.A.P.** Monte Carlo based implementation of an energy modulation system for proton therapy [Text] / G.A.P. Cirrone, G. Cuttone, F. Di Rosa, [et al.] // IEEE. – 2004. – Vol. 4. – P. 2133–2137.
8. **Иванов, Н.А.** Моделирование системы доставки пучка протонов с энергиями 60–70 МэВ и его прохождения через тканеэквивалентные материалы методом Монте-Карло [Текст] / Н.А. Иванов, Ж.С. Лебедева, М.Г. Тверской. – Гатчина: ФГБУ «ПИЯФ», 2012. – 35 с.
9. **Лебедева, Ж.С.** Разработка равномерно вращающегося модулятора для получения плато модифицированной кривой Брэгга [Текст] / Ж.С. Лебедева // Сб. аннотаций работ X Курчатовской молодежной научной школы. – 2011. – С. 81.
10. **Wroe, A.J.** The role of nonelastic reactions in absorbed dose distributions from therapeutic proton beams in different medium [Text] / A.J. Wroe, I.M. Cornelius, A.B. Rosenfeld // Med. Phys. – 2005. – Vol. 32(1). – P. 37–41.

ИВАНОВ Николай Арсеньевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanovna46@yandex.ru

ЛЕБЕДЕВА Жанна Сергеевна – младший научный сотрудник лаборатории радиационной физики Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская область, г. Гатчина, Орлова Роша
LebedevaZh@npi.spb.ru

УДК 57.086.2

*Г.Е. Побегалов, А.Н. Арсениев, А.Д. Ведяйкин,
М.Л. Соколова, Я.В. Федорова, А.В. Сабанцев*

ИЗМЕНЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ ДНК ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ИНТЕРКАЛИРУЮЩИМ КРАСИТЕЛЕМ YOYO-1

*G.E. Pobegalov, A.N. Arseniev, A.D. Vedyaykin,
M.L. Sokolova, Ya.V. Fedorova, A.V. Sabantsev*

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

CHANGING OF DNA MOLECULE MECHANICAL PROPERTIES DURING INTERACTION WITH YOYO-1 INTERCALATING DYE

Предложена методика регистрации динамики изменения длины одиночной молекулы ДНК в ходе взаимодействия с лигандом. Данная методика опробована для случая взаимодействия молекулы ДНК с интеркалирующим красителем YOYO-1. Получены экспериментальные данные, свидетельствующие об изменении длины и механических свойств молекулы ДНК при взаимодействии с красителем.

Предложенная методика может быть рекомендована для исследования взаимодействия одиночной молекулы ДНК с различными лигандами, такими как красители и ДНК-связывающие белки, а также для исследования других биополимеров, в том числе амилоидных фибрилл.

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ МИКРОСКОПИЯ. ОПТИЧЕСКИЙ ЗАХВАТ. УСТАНОВКА «ЛАЗЕРНЫЙ ПИНЦЕТ». ДНК. YOYO-1. ИНТЕРКАЛЯЦИЯ.

The method for registration of a single DNA molecule length change during interaction with a ligand is proposed. The method is tested in the case of DNA molecule interaction with intercalating YOYO-1 dye. The experimental data obtained signifies both DNA elongation and mechanical properties alteration upon YOYO-1 binding.

The proposed method can be used to study single DNA molecule interaction with different ligands, including dyes and DNA-binding proteins. Also this method can be used to study other biopolymers, including amyloid fibrils.

FLUORESCENCE MICROSCOPY. OPTICAL TRAPPING. LASER TWEEZERS SET-UP. DNA. YOYO-1. INTERCALATION.

Интеркалирующий краситель YOYO-1 применяется в различных методах, требующих визуализации ДНК; таких например, как гель-электрофорез, проточная цитометрия, создание геномных карт [1]. Тот же краситель широко используется при исследовании структурных изменений ДНК в ходе различных клеточных про-

цессов [2] и для построения изображений ДНК субдифракционного разрешения [3]. YOYO-1 представляет собой гомодимер оксазола желтого (YO) – красителя нуклеиновых кислот, имеющий химическую формулу 1,1'-(4,4,7,7-тетраметил-4,7-диазаундекаметилден)-бис-4-[3-метил-2,3-дигидро-(бензо-1,3-оксазол)-2-метиленден]-

хинолиний тетраидид) [4]. YOYO-1 обладает высокой афинностью к нуклеиновым кислотам с константой связывания порядка $10^{10} - 10^{12}$ л/моль [2]. Квантовый выход флуоресценции YOYO-1 возрастает более, чем в 1000 раз при взаимодействии с ДНК за счет снижения вероятности безызлучательной релаксации возбужденных молекул [4] и, как следствие, увеличения соотношения сигнал/шум при наблюдении флуоресценции.

При помощи одномолекулярных методов оптического пинцета [5 – 9], магнитного пинцета [10] и атомно-силовой микроскопии [11] было показано, что при связывании ДНК с YOYO-1 контурная длина ДНК увеличивается в среднем на 30 %. Особый интерес представляет кинетика связывания YOYO-1 с ДНК при различных условиях. В работе [12] была предпринята попытка исследовать динамику этого процесса при помощи флуоресцентной микроскопии посредством регистрации изображений молекул ДНК, закрепленных одним концом за поверхность покровного стекла и выпрямляемых потоком жидкости в ходе окрашивания красителем YOYO-1. Однако качество результатов, получаемых таким методом, оставляет желать лучшего в связи с тем, что невелика точность определения длины молекулы ДНК по ее флуоресцентному изображению. Кроме того, в таком эксперименте невозможно определить длину молекулы до окрашивания, а фотообесцвечивание красителя и фотоиндуцированные разрывы ДНК накладывают на процесс наблюдения существенные ограничения.

В данной работе предлагается метод регистрации изменения длины одиночной молекулы ДНК при взаимодействии с различными лигандами, лишенный указанных недостатков.

Предлагаемый метод сочетает оптический захват, флуоресцентную микроскопию и систему микрофлюидных ламинарных потоков. Эксперимент проводится в четырехканальной проточной камере, внутри которой путем перемещения оптических ловушек между различными потоками осуществляется захват микросфер, покрытых стрептавидином, закрепление на них единичной молекулы ДНК посредством взаимодействия биотин-стрептавидин, а также осуществляется быстрая смена внешних условий инкубации ДНК.

Такая конфигурация позволяет измерять зависимость длины ДНК от приложенной силы в различных условиях, а также регистрировать динамику изменения этой длины в ходе взаимодействия с лигандом при постоянной приложенной силе. Для этого одна из микросфер удерживается в ловушке, а вторая отпускается, после чего вся конструкция (молекула ДНК, растянутая между двумя микросферами) перемещается в канал, содержащий лиганд. Анализ серии изображений такой конструкции, растягиваемой потоком жидкости с постоянной силой, позволяет зарегистрировать изменение длины молекулы ДНК в ходе взаимодействия с лигандом. Работоспособность предлагаемой методики продемонстрирована на примере взаимодействия молекулы ДНК бактериофага λ с красителем YOYO-1.

Материалы и методы

Экспериментальная установка с двойной оптической ловушкой. Схема экспериментальной установки, частично описанная ранее [3], представлена на рис. 1. Установка с двойной

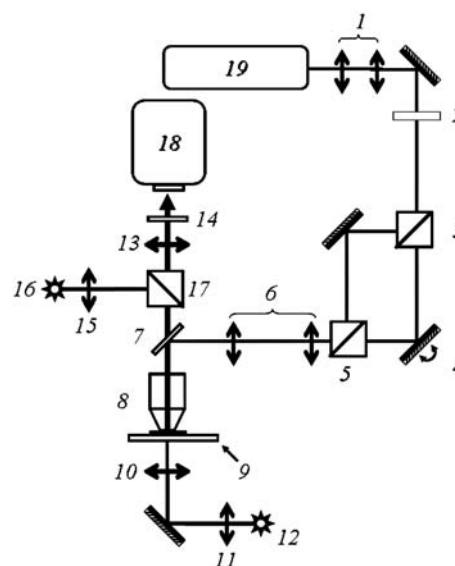


Рис. 1. Оптическая схема установки с двойной оптической ловушкой:

1, 6 – двухлинзовые телескопы; 2 – полуволновая пластинка; 3, 5 – поляризационные светоделительные кубы; 4 – пьезо-зеркало; 7 – дихроическое зеркало; 8 – объектив микроскопа; 9 – пьезостол; 10 – конденсор; 11, 15 – линзы; 12 – галогенная лампа; 13 – тубусная линза; 14 – инфракрасный фильтр; 16 – ксеноновая лампа; 17 – набор фильтров для регистрации флуоресценции; 18 – ПЗС-камера; 19 – лазер

оптической ловушкой создана на базе инфракрасного лазера 19 (Spectra-Physics BL-106С, рабочая длина волны — 1064 нм, максимальная мощность — 5 Вт, работа в непрерывном режиме). Диаметр лазерного луча увеличивается при помощи расширителя пучка 1 (Melles Griot CWBX-7.0-2X). Луч, падая на поляризационный светоделительный куб 3, разделяется на две ортогональные составляющие, одна из которых модулируется при помощи пьезозеркала 4 (Physik Instrumente S-334 FSM). При помощи второго поляризационного куба 5 лучи сводятся вместе и, отражаясь от дихроического зеркала 7, заводятся в объектив микроскопа 8. При создании оптической ловушки диаметр лазерного пучка на входе в объектив должен быть слегка меньше входного зрачка объектива для оптимального использования мощности лазерного излучения [13]. В экспериментах с оптическими ловушками используется масляный иммерсионный объектив с числовой апертурой 1,46 («Plan-Apochromat» 100x/1.46 Oil DIC) производства фирмы Carl Zeiss. Проходя через объектив, оба луча фокусируются, образуя две оптические ловушки. Задняя фокальная плоскость объектива сопряжена с поверхностью пьезозеркала за счет установки телескопа 6, составленного из двух линз в 4f-конфигурации. Это позволяет изменять положение одной ловушки в фокальной плоскости объектива при повороте пьезозеркала. Поворотом полувольновой пластины 2 осуществляется настройка распределения оптической мощности между двумя ловушками.

Для регистрации изображений используется охлаждаемая ПЗС-камера 18 (Photometrics Cascade II 1024). С целью предотвращения попадания в камеру отраженных лучей лазера на входе камеры установлен ИК фильтр 14. Для возбуждения молекул флуоресцентного красителя YOYO-1 образец облучается ксеноновой лампой 16. Для регистрации флуоресценции используется стандартный набор фильтров 17 (Filter Set 10) фирмы Carl Zeiss.

Система ламинарных потоков в четырехканальной проточной камере. Четырехканальная проточная камера представляет собой микрофлюидное устройство с четырьмя входными каналами шириной 1 мм, сходящимися в общий канал шириной 4 мм. Каналы формиру-

ются в слое двухстороннего скотча (толщина 110 мкм), заключенном между предметным и покровным стеклами микроскопа. К входным каналам при помощи прозрачного эпоксидного клея (POXIPOL) герметично крепятся полиэтиленовые трубки Warner Instruments PE-10 (внутренний диаметр 280 мкм). К общему каналу крепится трубка Warner Instruments PE-10 (внутренний диаметр 500 мкм), через которую отводится жидкость.

К входным трубкам подсоединяются пластиковые шприцы BD MicroFine U-100 объемом 300 мкл, поршни которых предварительно смазываются глицерином для обеспечения плавности хода. Равномерная подача жидкостей в каналы камеры и регулировка скорости потока осуществляются при помощи шприцевого насоса Harvard Apparatus Pump 11 Pico Plus, модернизированного для крепления четырех шприцев.

Подготовка микросфер. В эксперименте с молекулами ДНК используются микросферы из полистирола диаметром 3 мкм, покрытые стрептавидином (CP01N, Bangs Laboratories). Перед использованием микросферы разводятся до концентрации 0,1 мг/л в буфере Tris-HCl (pH = 8,2) 50 ммоль/л и дважды промываются посредством центрифугирования (11400g, 5 мин) и ресуспендирования осадка в том же буфере.

Приготовление ДНК-субстрата. Двунитевая ДНК бактериофага λ (New England Biolabs) модифицируется биотином с обоих концов путем лигации с двумя биотинилированными олигонуклеотидами, комплиментарными «липким» концам ДНК бактериофага λ , согласно следующему протоколу:

1. 81 мкл Tris-HCl 10 mM (pH = 7,5) смешивается с 6,75 мкл раствора ДНК бактериофага λ (0,3 мг/мл) и с 0,45 мкл 150 мкМ раствора 3'-биотинилированных олигонуклеотидов

(5'-AGGTCGCCGCC-Biotin),

фосфорилированных с 5'-конца, и 1,8 мкл 5М раствора NaCl.

2. Раствор инкубируется в термошейкере при 75 °С в течение 20 мин для расплавления замкнутых «липких» концов ДНК бактериофага λ .

3. В течение 2 ч температура постепенно снижается до комнатной для отжига олигонуклеотидов.



4. Олигонуклеотиды лигируются с ДНК бактериофага λ путем добавления 10 мкл 10x T4 ДНК лигазного буфера (10 mM АТФ, 100 mM DTT, 100 mM $MgCl_2$, 500 mM Tris-HCl (pH = 7,5) и 0,4 мкл T4 ДНК-лигазы (Fermentas Life Science).

5. Реакционная смесь инкубируется при комнатной температуре в течение одного часа.

6. Реакционная смесь инкубируется при 65 °C в течение 10 мин для инактивации T4 ДНК-лигазы.

7. Избыточные олигонуклеотиды и АТФ выводятся из раствора путем фильтрации через спин-колонку MicroSpin S-400 HR, GE Healthcare (центрифугирование 850g, 5 мин).

8. К раствору добавляется 0,5 мкл 100 мкМ раствора 3'-биотинилированных олигонуклеотидов

(5'-GGGCGGCGACCT-Biotin),

фосфорилированных с 5'-конца, 0,4 мкл T4 лигазы (1000 ед.) и 10 мкл 10x T4 ДНК лигазного буфера.

9. Реакционная смесь инкубируется при комнатной температуре в течение одного часа.

10. Реакционная смесь инкубируется при 65 °C в течение 10 мин для инактивации T4 ДНК-лигазы.

11. Избыточные олигонуклеотиды и АТФ выводятся из раствора путем фильтрации через спин-колонку MicroSpin S-400 HR, GE Healthcare (центрифугирование 850g, 5 мин).

Протокол эксперимента. Непосредственно перед проведением эксперимента внутренняя поверхность камеры и трубок подвергается очистке путем последовательного вмывания в каждый канал 100 мкл этанола, 300 мкл дистиллированной воды и 200 мкл 15%-го раствора сахарозы в Tris-HCl 50 mM (pH = 8,2).

В ходе эксперимента в каждом канале формируется ламинарный поток, скорость которого поддерживается на уровне порядка 100 мкм/с. В данных условиях объединение потоков в общем канале приводит к их незначительному смещению [14]. Путем сдвига пьезостолика может осуществляться быстрое перемещение между потоками объектов, удерживаемых в оптических ловушках.

Во всех каналах присутствует SM-буфер (Tris-HCl 50 mM, pH = 8,2, $MgCl_2$ 1 mM, 2-меркаптоэтиламин 100 mM). Помимо него в первом

канале содержатся микросферы (0,01%), во втором – 25 пМ биотинилированных молекул ДНК и 200 нМ YOYO-1, в третьем – 10 mM $MgCl_2$, в четвертом – 50 нМ YOYO-1.

Схема проведения эксперимента в четырехканальной проточной камере представлена на рис. 2. Эксперимент состоит из следующих этапов:

в первом канале происходит оптический захват двух микросфер;

сдвигом пьезостолика микросферы переносятся во второй канал для прикрепления к одной из микросфер молекулы ДНК, окрашенной YOYO-1 за счет биотин-стрептавидинового взаимодействия. Прикрепление молекулы ДНК фиксируется посредством наблюдения ее изображения во флуоресцентном режиме;

микросферы переносятся в третий канал, где путем перемещения подвижной ловушки свободный конец ДНК прикрепляется ко второй микросфере;

в течение 2 – 3 мин осуществляется обезцвечивание ДНК (вымывание YOYO-1) в силу наличия в третьем канале 10 mM $MgCl_2$;

ДНК растягивается путем увеличения расстояния между микросферами с шагом 10 нм и средней скоростью 50 нм/с. На каждом шаге с помощью ПЗС-камеры фиксируется изображение микросфер в режиме дифференциального интерференционного контраста;

стационарная ловушка выключается путем перекрытия соответствующего пучка света, в результате чего одна микросфера удерживается подвижной ловушкой, а вторая растягивает ДНК за счет гидродинамической силы, действующей на микросферу со стороны потока;

микросферы с закрепленной ДНК переносятся в четвертый канал, содержащий 50 нМ YOYO-1. За счет постоянства скорости потока обеспечивается постоянство силы растяжения ДНК. Удлинение ДНК приводит к увеличению расстояния между микросферами. Динамика удлинения регистрируется с помощью ПЗС-камеры;

после завершения процесса удлинения ДНК стационарная ловушка снова включается и осуществляется растягивание ДНК между ловушками с шагом 10 нм и средней скоростью 50 нм/с.

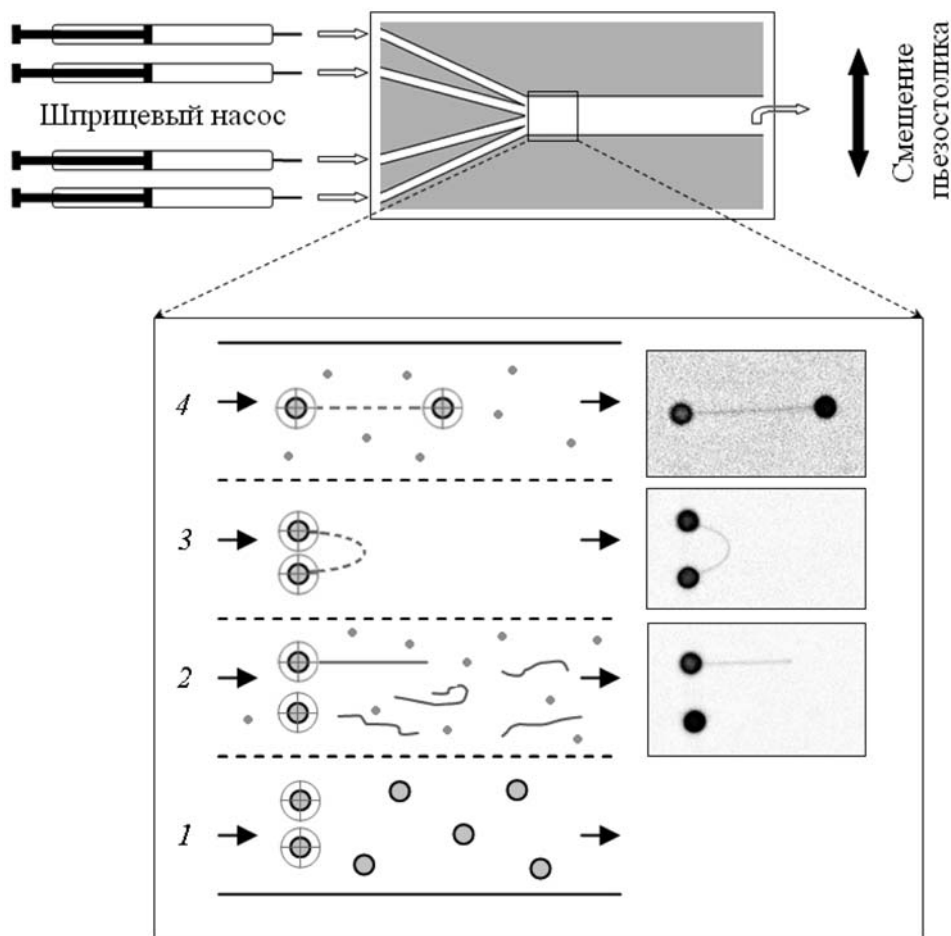


Рис. 2. Схема проведения эксперимента в четырехканальной проточной камере: 1 – захват двух микросфер; 2 – закрепление ДНК на одной из микросфер; 3 – прикрепление свободного конца ДНК ко второй микросфере, обесцвечивание ДНК; 4 – инкубация в 50 нМ растворе YOYO-1

Обработка экспериментальных данных.

Указанные данные обрабатывались при помощи программного пакета с открытым кодом ImageJ [15] (сборка Fiji [16]). Для определения положения микросфер по их изображениям в режиме дифференциального интерференционного контраста использовался специально созданный плагин для ImageJ, осуществляющий определение максимума нормированной кросс-корреляции изображения с шаблоном. В качестве шаблона при исследовании динамики встраивания YOYO-1 в молекулу ДНК выбирались изображения микросфер в первый момент времени. При построении зависимости силы растяжения от длины ДНК в качестве шаблона использовалась предварительно полученная

серия изображений микросферы, закрепленной на поверхности стекла, при различном ее положении относительно фокуса микроскопа. Такой подход позволяет определять положение объекта с точностью до 1 пикселя (в данном случае до 135 нм). Для дальнейшего уточнения положения микросферы использовалась нелинейная регрессия нормированной кросс-корреляции при помощи двумерной функции Гаусса.

Результаты и их обсуждение

Длина молекулы ДНК бактериофага λ составляет 16,4 мкм (48500 пар оснований) [7]. Длина ДНК увеличилась на 37 % и составила 22,6 мкм при инкубации в 50 нМ растворе YOYO-1. При этом стандартное отклонение ин-

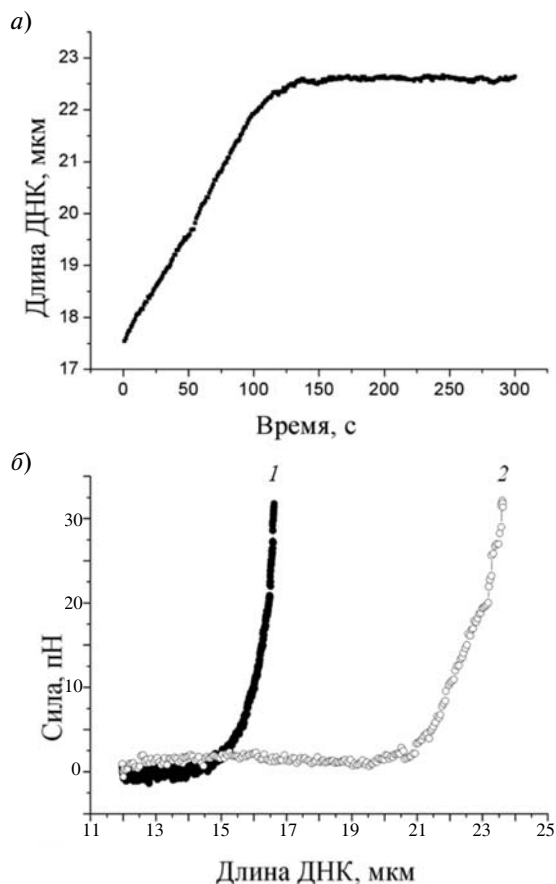


Рис. 3. Результаты применения предлагаемого метода: *а* – динамика удлинения молекулы ДНК в присутствии 50 нМ красителя YOYO-1; *б* – зависимости силы растяжения ДНК от ее длины до (1) и после (2) встраивания молекул красителя

дидуальных измерений длины ДНК составило 27 нм. На рис. 3, *а* приведена зависимость длины молекулы ДНК от времени в присутствии YOYO-1. В начальный момент регистрации молекула ДНК уже является удлиненной. Данный факт указывает на то, что встраивание YOYO-1 начинается мгновенно при внесении ДНК в четвертый канал. Перемещение молекулы ДНК в середину канала, где осуществляется наблюдение, занимает примерно 20 с. За это время длина молекулы ДНК успевает увеличиться на 1,1 мкм (6,7 %). В течение 150 с длина ДНК линейно возрастает, после чего процесс интеркаляции YOYO-1 в ДНК выходит на насыщение и длина ДНК остается постоянной. Линейная регрессия первого участка зависимости позволила определить скорость удлинения молекулы ДНК за счет интеркаляции; она составила 44 ± 4 нм/с. На рис. 3, *б* приведена зависимость силы рас-

тяжения молекулы ДНК от ее длины до и после встраивания YOYO-1. В присутствии 50 нМ YOYO-1 данная зависимость существенно отличается от случая неокрашенной молекулы ДНК. Помимо очевидного удлинения ДНК следует отметить увеличение наклона кривой, что свидетельствует об изменении механических свойств ДНК при связывании с YOYO-1.

Предложен новый метод регистрации динамики изменения длины одиночной молекулы ДНК, основанный на использовании системы микрофлюидных ламинарных потоков в комбинации с методами оптической ловушки и флуоресцентной микроскопии. Этот метод позволил успешно охарактеризовать процесс связывания красителя YOYO-1 с молекулой ДНК бактериофага λ . Было зарегистрировано увеличение длины молекулы ДНК в присутствии YOYO-1 на 37 %, так что измеренная длина комплекса ДНК–YOYO-1 составила 22,6 мкм. Кроме того, была измерена зависимость длины молекулы ДНК от времени в присутствии 50 нМ красителя YOYO-1. При этом погрешность индивидуальных измерений длины молекулы ДНК составила менее 30 нм. Установлено, что присутствие в растворе красителя YOYO-1 в концентрации 50 нМ приводит к линейному росту длины молекулы ДНК со скоростью 44 ± 4 нм/с, при этом равновесное состояние комплекса ДНК–YOYO-1 достигается за 150 с.

Проведенные эксперименты продемонстрировали работоспособность предложенного метода. Есть все основания полагать, что данный метод может найти широкое применение при исследовании процессов взаимодействия молекул ДНК с различными лигандами, в том числе красителями, ДНК-связывающими белками и другими веществами. Кроме того, представляется возможным использование этого метода для исследования других биологических полимеров, в том числе представляющих большой практический интерес амилоидных фибрилл. Данные о влиянии различных агентов на механические свойства амилоидных фибрилл могут оказаться чрезвычайно ценными для терапии нейродегенеративных заболеваний.

Работа проведена с использованием уникальной установки «Лазерный пинцет» при финансовой поддержке Минобрнауки России (ГК № 16.518.11.7045), РФФИ (гранты №12-04-31536 и №12-04-32060) и Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере «УМНИК».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Nyberg, L.K.** A single-step competitive binding assay for mapping of single DNA molecules [Text] / L.K. Nyberg, F. Persson, J. Berg [et al.] // *Biochem. Biophys. Res. Commun.*– 2012.– Vol. 417.– Iss. 1.– P. 404 – 408.
2. **Wong, M.** Oxazole yellow homodimer YOYO-1-labeled DNA: a fluorescent complex that can be used to assess structural changes in DNA following formation and cellular delivery of cationic lipid DNA complexes [Text] / M. Wong, S. Kong, W.H. Dragowska, M.B. Bally // *Biochim. Biophys. Acta.*– 2001.– Vol. 1527.– Iss. 1-2.– P. 61 – 72.
3. **Сабанцев, А.В.** Модернизация флуоресцентного микроскопа для исследования биологических структур с субдифракционным разрешением [Текст] / А.В. Сабанцев, Г.Е. Побегалов, С.В. Мурашов, А.С. Мельников, М.А. Ходорковский // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.*– 2012.– № 2 (146).– С. 94 – 99.
4. **Rye, H.S.** Stable fluorescent complexes of double-stranded DNA with bis-intercalating asymmetric cyanine dyes: Properties and applications / H.S. Rye, S. Yue, D.E. Wemmer [et al.] // *Nucleic Acids Res.*– 1992.– Vol. 20.– Iss. 11.– P. 2803 – 2812.
5. **Ashkin, A.** Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles [Text] / A. Ashkin, J.M. Dziedzic, J.E. Bjorkholm, S. Chu // *Opt. Lett.*– 1986.– Vol. 11.– Iss. 5.– P. 288.
6. **Bennink, M.** Single-molecule manipulation of double-stranded DNA using optical tweezers: interaction studies of DNA with RecA and YOYO-1 [Text] / M.L. Bennink, O.D. Scharer, R. Kanaar, [et al.] // *Cytometry.*– 1999.– Vol. 36.– Iss. 3.– P. 200 – 208.
7. **Murade, C.U.** Interaction of oxazole yellow dyes with DNA studied with hybrid optical tweezers and fluorescence microscopy [Text] / C.U. Murade, V. Subramaniam, C. Otto, M.L. Bennink // *Biophys. J.*– 2009.– Vol. 97.– Iss. 3.– P. 835 – 843.
8. **Paik, D.H.** Dynamics and multiple stable binding modes of DNA intercalators revealed by single-molecule force spectroscopy [Text] / D.H. Paik, T.T. Perkins // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*– 2012.– Vol. 51.– Iss. 8.– P. 1811 – 1815.
9. **Sischka, A.** Molecular mechanisms and kinetics between DNA and DNA binding ligands [Text] / A. Sischka, K. Toensing, R. Eckel [et al.] // *Biophys. J.*– 2005.– Vol. 88.– Iss. 1.– P. 404 – 411.
10. **Gunther, K.** Mechanical and structural properties of YOYO-1 complexed DNA [Text] / K. Gunther, M. Mertig, R. Seidel // *Nucleic Acids Res.*– 2010.– Vol. 38.– Iss. 19.– P. 6526 – 6532.
11. **Eckel, R.** Identification of binding mechanisms in single molecule-DNA complexes [Text] / R. Eckel, R. Ros, A. Ros [et al.] // *Biophys. J.*– 2003.– Vol. 85.– Iss. 3.– P. 1968 – 1973.
12. **Reuter, M.** The kinetics of YOYO-1 intercalation into single molecules of double-stranded DNA [Text] / M. Reuter, D.T. Dryden // *Biochem. Biophys. Res. Commun.*– 2010.– Vol. 403.– Iss. 2.– P. 225 – 229.
13. **Mahamdeh, M.** Under-filling trapping objectives optimizes the use of the available laser power in optical tweezers [Text] / M. Mahamdeh, C.P. Campos, E. Schaffer. // *Opt. Express.*– 2011.– Vol. 19.– Iss. 12.– P. 11759 – 11768.
14. **Brewer, L.R.** Laminar flow cells for single-molecule studies of DNA-protein interactions [Text] / L.R. Brewer, P.R. Bianco // *Nat. Methods.*– 2008.– Vol. 5.– Iss. 6.– P. 517 – 525.
15. **Schneider, C.A.** NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis [Text] / C.A. Schneider, W.S. Rasband, K.W. Eliceiri // *Nat. Methods.*– 2012.– Vol. 9.– Iss. 7.– P. 671 – 675.
16. **Schindelin, J.** Fiji: an open-source platform for biological-image analysis [Text] / J. Schindelin, I. Arganda-Carreras, E. Frise [et al.] // *Nat. Methods.*– 2012.– Vol. 9. – Iss. 7.– P. 676 – 682.

ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич – аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

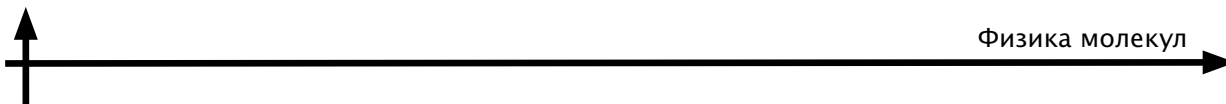
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lwdrums@gmail.com

АРСЕНИЕВ Анатолий Николаевич – инженер НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
arsenievanatoly@gmail.com

ВЕДЯЙКИН Алексей Дмитриевич – студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
god-fish@mail.ru



СОКОЛОВА Мария Леонидовна — студентка физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
arimiora@gmail.com

ФЕДОРОВА Яна Витальевна — студентка физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kedrovka126@rambler.ru

САБАНЦЕВ Антон Владимирович — аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sabantsev.a.v@gmail.com

УДК 539.171.016, 539.128.2, 539.171.11

Ф.Ф. Павлов

**МЕТОДИКА ВЫЧИСЛЕНИЯ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ
ПОЛЯРИЗОВАННОГО НУКЛОНА НА ПОЛЯРИЗОВАННОМ ДЕЙТРОНЕ
В ПЕРЕМЕННЫХ СВЕТОВОГО КОНУСА**

F.F. Pavlov

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

**THE CALCULATION PROCEDURE OF ELASTIC SCATTERING
OF A POLARIZED NUCLEON ON A POLARIZED DEUTERON**

Рассматривается релятивистский дейтрон как система двух нуклонов (двухнуклонное приближение) в формализме светового конуса. Дейтрон рассматривается как суперпозиция двухнуклонных фоковских состояний с инвариантной массой, зависящей от относительного импульса протон-нейтронной пары. Показана процедура последовательного вычисления упругого рассеяния поляризованного нуклона на поляризованном дейтроне в переменных светового конуса.

ПОЛЯРИЗОВАННЫЙ ДЕЙТРОН. ПОЛЯРИЗОВАННЫЙ НУКЛОН. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ. СВЕТОВОЙ КОНУС. НУКЛОН-НУКЛОННЫЕ АМПЛИТУДЫ. ИНВАРИАНТНЫЕ АМПЛИТУДЫ.

The paper views a relativistic deuteron as a system of two nucleons (a two-nucleon approach) in a formal light cone description. The deuteron is considered as a superposition of two-nucleon Fock states with the invariant mass depending on the relative momentum in a proton-neutron pair. A procedure for consistent calculation of elastic scattering of a polarized nucleon on a polarized deuteron is shown.

POLARIZED DEUTERON. POLARIZED NUCLEON. ELASTIC SCATTERING. LIGHT CONE. NUCLEON-NUCLEON AMPLITUDES. INVARIANT AMPLITUDES.

Прецизионные измерения нуклон-нуклонного рассеяния (NN -рассеяния) являются одной из главных задач на всех протонных ускорителях мира. Исследования поляризационных эффектов в NN -взаимодействиях проводятся на встречных пучках и ускорителях высокой энергии в крупнейших международных центрах физики высоких энергий. При извлечении спиновых амплитуд протон-нейтронного рассеяния (pn -рассеяния) из прецизионных данных

по протон-дейтронному и дейтрон-дейтронному рассеянию (pD - и DD -рассеянию) при релятивистских энергиях требуется адекватное описание дейтрона и амплитуд NN -рассеяния. Создание все новых методов по получению пучков поляризованных протонов и дейтронов дает возможность изучения спиновых наблюдаемых в pn -рассеянии, что существенно расширит имеющуюся базу данных. Например, эффект спиновой фильтрации [1] предполагает



создание поляризованных пучков протонов и антипротонов путем удаления из пучка компоненты с заданной проекцией спина. Хотя и принято считать, что поляризационные эффекты исчезают с ростом энергии, известные опыты по поляризационному протон-протонному (pp -рассеянию) в Аргонской национальной лаборатории, продолженные впоследствии в Брукхэйвенской национальной лаборатории, показали, что при энергиях до 10 ГэВ в лабораторной системе существуют нетривиальные и сильные спиновые эффекты [2].

Многообещающим представляется подход к спиновым эффектам, основанный на методах релятивистской теории поля на световом конусе, успешно примененный ранее в квантовой хромодинамике (КХД) для описания спиновых эффектов в дифракционном глубоконеупругом рассеянии [3].

Цель данной работы состоит в развитии технического аппарата для описания релятивистского рассеяния поляризованного нуклона на поляризованном дейтроне в формализме светового конуса.

В настоящую работу включены вычисления набора спиральных амплитуд NN -рассеяния в базисе светового конуса и методика вычисления релятивистской амплитуды упругого нуклон-дейтронного рассеяния (ND -рассеяния) с применением этого формализма. Дейтрон рассматривается как релятивистская двухчастичная система со спиновыми конститuentами, и строится базис спиральных состояний, а также вершинные функции дейтрона на световом конусе.

Дейтрон как объект исследования

Дейтрон является слабосвязной нейтрон-протонной системой, и взаимодействие частиц высокой энергии с дейтроном традиционно описывается теорией многократного рассеяния Глаубера – Грибова [4, 5]. В релятивистской области энергий для интерпретации прецизионных данных по спиновым наблюдаемым дейтрон требует адекватного теоретического описания с выходом за привычное нерелятивистское приближение. В работе используются развитые ранее методы релятивистской теории поля на световом конусе, с последовательным релятивистским описанием спиновых степеней сво-

боды в дейтроне. В данной работе на дейтрон обобщается техника, развитая ранее в работе [3], для квантово-хромодинамического описания спиновых явлений в эксклюзивном рождении векторных мезонов в глубоконеупругом рассеянии лептонов на протонах. Здесь техника светового конуса позволила последовательно учесть вклады релятивистских, так называемых «нижних», компонент спиновой волновой функции кварков; именно они определяют амплитуды с переверотом спина. В КХД теории рождения векторных мезонов, при малых значениях бьеркеновской переменной x , ситуация заметно упрощается точным сохранением s -канальной спиральности кварков в фундаментальном КХД взаимодействии кварков с глюонами. Однако такие упрощения нельзя ожидать в NN -рассеянии при умеренных энергиях. Поэтому строится разложение амплитуды рассеяния по фермиевским вариантам и для каждого варианта взаимодействия (скалярного $S = I \otimes I$, псевдоскалярного $P = \gamma_5 \otimes \gamma_5$, векторного $V = \gamma_\mu \otimes \gamma_\mu$, аксиально-векторного $A = \gamma_5 \gamma_\mu \otimes \gamma_5 \gamma_\mu$ и тензорного $T = \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma_{\mu\nu}$) вычисляется полная система спиральных амплитуд в базисе светового конуса. Такое представление спиральных амплитуд в указанном базисе ранее не использовалось. С точки зрения опыта вычисления спиновых эффектов в рождении векторных мезонов оно представляется удобным для последующего описания рассеяния на дейтроне как частицы со спином 1. Если в физике высоких энергий техника светового конуса обычно используется для выделения ведущего вклада в разложение амплитуды по обратным степеням энергий, то в данной работе все расчеты проводятся точно с удержанием всех членов в спиральных амплитудах.

Инвариантное разложение амплитуды NN -рассеяния

Как обсуждалось во введении, слабосвязанный дейтрон аппроксимируется протон-нейтронным фоковским состоянием и в формализме на световом конусе описывается как суперпозиция протон-нейтронных состояний. Рассмотрим амплитуду ND -рассеяния в импульсном приближении. Соответствующая диаграмма Фейнмана приводится на рис. 1. Она

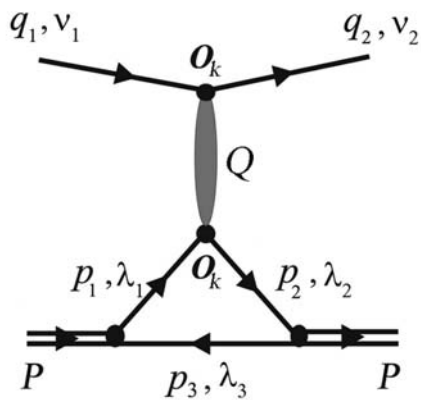


Рис. 1. Фейнмановская диаграмма рассеяния нуклона на дейтроне

включает в себя амплитуду NN -рассеяния, а также вершину перехода дейтрона в протон и нейтрон и имеет вид привычной фермионной петли.

Вычисление релятивистской амплитуды NN -рассеяния требует представления в виде релятивистски-инвариантного разложения по фермиевским вариантам [6 – 8]:

$$\varphi = \sum_k F_k [\bar{u}(q_2, v_2) O_k u(q_1, v_1)] \times [\bar{u}(p_2, \lambda_2) O_k u(p_1, \lambda_1)], \quad (1)$$

где $O_1 = I$, $O_2 = \gamma_5$, $O_3 = \gamma_\mu$, $O_4 = \gamma_5 \gamma_\mu$, $O_5 = \sigma_{\mu\nu}$; I – единичная 4-матрица; γ_μ – 4-матрицы Дирака; $\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_x\gamma_y\gamma_z$; $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)$; $u(p_1, \lambda_1)$ – спинор протона в дейтроне с импульсом p_1 и спиральностью $s = \lambda_1 / 2$, $\lambda_1 = \pm 1$; $\bar{u}(p_2, \lambda_2)$ – спинор рассеянного протона в дейтроне с импульсом p_2 и спиральностью $s = \lambda_2 / 2$, $\lambda_2 = \pm 1$; $u(q_1, v_1)$ – спинор налетающего нуклона с импульсом q_1 и спиральностью $s = v_1 / 2$, $v_1 = \pm 1$; $\bar{u}(q_2, v_2)$ – спинор рассеянного нуклона с импульсом q_2 и спиральностью $s = v_2 / 2$, $v_2 = \pm 1$. Коэффициенты F_k ($k = 1 - 5$) называются инвариантными амплитудами.

В работе [8] на основе базы данных по NN -рассеянию SAID (Scattering Analysis Interactive Dial) изучалось поведение инвариантных амплитуд F_k в зависимости от кинетической энергии одного из нуклонов в лабораторной системе отсчета T_{lab} в диапазоне от 800 до 2500 МэВ и от переданного импульса Q при $Q = 0, 100, 200, 500$ МэВ/с.

Амплитуда нуклон-дейтронного рассеяния в формализме светового конуса

При использовании принципов написания дисперсионных интегралов и стандартных правил Фейнмана амплитуда однократного ND -рассеяния представляется в виде

$$A_{ND}^1 = (-1) \int \frac{d^4 p_3}{(2\pi)^4} i \times \sum_k F_k [\bar{u}(q_2, v_2) O_k u(q_1, v_1)] \times \text{Sp} \left\{ i \left(\Gamma_\beta V_\beta^{(\rho)} \right) \times \frac{1}{(p_3^2 - m^2 + i\varepsilon)} \times i \left(-\hat{p}_3 + m \right) \cdot i \left(\tilde{\Gamma}_\alpha^* \tilde{V}_\alpha^{(\rho)*} \right) \times \frac{1}{(p_2^2 - m^2 + i\varepsilon)} \times i \left(\hat{p}_2 + m \right) \cdot i O_k \cdot i \left(\hat{p}_1 + m \right) \right\} \times \frac{1}{(p_1^2 - m^2 + i\varepsilon)}, \quad (2)$$

где p_1, p_2 – 4-векторы импульсов протонов; интегрирование ведется по 4-вектору импульса нейтрона p_3 , причем контур интегрирования замкнут вокруг полюса нейтронного пропагатора (массы всех нуклонов равны m); под импульсом со «шляпкой» подразумевается выражение $\hat{p} = p_\mu \gamma_\mu$; Γ_β – полная вершинная функция распада дейтрона на протон-нейтронную пару в начальном состоянии, а $\tilde{\Gamma}_\alpha^*$ – полная вершинная функция дейтрона в конечном состоянии [9–13]; $V_\beta^{(\rho)}$, $\tilde{V}_\alpha^{(\rho)}$ – 4-векторы поляризации дейтрона в начальном и конечном состояниях [9 – 13]; $\rho = \pm 1, 0$ – спиральность дейтрона; под дважды повторяющимся индексом α и β всегда подразумевается суммирование. «Волна» над буквой обозначает конечное состояние. В дальнейшем будем опускать 4-тензорный индекс μ над 4-вектором.

Вычисление шпура в амплитуде (2) подробно рассматривается в работах [3, 9]. Тем не менее, напомним основные этапы расчета амплитуды однократного ND -рассеяния. При высоких энергиях удобно использовать параметризацию для 4-импульсов в переменных светового конуса [3, 9, 10, 12]. Рассмотрим рассеяние в системе Брейта, в которой плюсовые компоненты 4-импульса дейтрона не меняются



до и после рассеяния, а поперечные импульсы равны по значению и противоположны по направлению:

$$P = \left(P_+, P_-, -\frac{Q}{2} \right); \quad (3)$$

$$\tilde{P} = \left(P_+, \tilde{P}_-, \frac{Q}{2} \right); \quad (4)$$

$$P^2 = \tilde{P}^2 = 2P_+P_- - \frac{Q^2}{4} = M_D^2, \quad (5)$$

где $M_D = 1875,6 \text{ МэВ}/c^2$ – масса дейтрона, Q – поперечный переданный импульс.

Для 4-импульсов нуклонов p_1, p_2, p_3 в дейтроне используем параметризацию:

$$p_1 = \left(zP_+, yP_-, \mathbf{k} - z\frac{Q}{2} \right); \quad (6)$$

$$p_2 = \left(zP_+yP_-, \mathbf{\kappa} + z\frac{Q}{2} \right); \quad (7)$$

$$p_3 = \left((1-z)P_+, (1-y)P_-, -\mathbf{k} - (1-z)\frac{Q}{2} \right), \quad (8)$$

где \mathbf{k} – относительный поперечный импульс частиц 1 и 3, $\mathbf{\kappa}$ – относительный поперечный импульс частиц 2 и 3, причем $\mathbf{\kappa} = \mathbf{k} + (1-z)Q$.

Перейдем к интегрированию по переменным светового конуса:

$$\begin{aligned} d^4 p_3 &= dE_3 dp_{3z} d\mathbf{p}_{3\perp} = \\ &= \frac{1}{2} \left(M_D^2 + \frac{Q^2}{4} \right) dy dz d^2 \mathbf{k}; \end{aligned}$$

тогда

$$\begin{aligned} p_1^2 - m^2 &= zy \left(M_D^2 + Q^2/4 \right) - \\ &- (\mathbf{k} - zQ/2)^2 - m^2; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} p_2^2 - m^2 &= zy \left(M_D^2 + Q^2/4 \right) - \\ &- (\mathbf{\kappa} + zQ/2)^2 - m^2; \end{aligned} \quad (10)$$

$$p_3^2 - m^2 = (1-z)(1-y) \left(M_D^2 + Q^2/4 \right) -$$

$$-(\mathbf{k} - (1-z)Q/2)^2 - m^2. \quad (11)$$

Удобно провести интегрирование по y , замыкая контур интегрирования вокруг полюса нейтронного пропагатора $p_3^2 = m^2$.

Это приводит к выражению

$$y = y_3 = 1 - \frac{m^2 + (\mathbf{k} - (1-z)Q/2)^2}{(1-z)(M_D^2 + Q^2/4)}; \quad (12)$$

$$p_3^2 - m^2 = -(1-z) \left(M_D^2 + Q^2/4 \right) (y - y_3).$$

Используя это значение y , получаем после простых преобразований:

$$p_1^2 - m^2 = z(M_D^2 - M^2); \quad (13)$$

$$p_2^2 - m^2 = z(M_D^2 - \tilde{M}^2), \quad (14)$$

где

$$M^2 = \frac{\mathbf{k}^2 + m^2}{z(1-z)}; \quad (15)$$

$$\tilde{M}^2 = \frac{\mathbf{\kappa}^2 + m^2}{z(1-z)}. \quad (16)$$

Далее для нейтрона на массовой поверхности $p_3^2 = m^2$ можно воспользоваться условием полноты:

$$\hat{p}_3 - m = \sum_{\lambda=\pm 1} v(p_3, \lambda_3) \bar{v}(p_3, \lambda_3), \quad (17)$$

где $v(p_3, \lambda_3)$ – спинор нейтрона с импульсом $-p_3$ и спиральностью $-s = \lambda_3/2$ (выходящий антифермион с точки зрения фейнмановской диаграммы), и сделать в фейнмановском следе (2) замену.

Промежуточные протоны с импульсами p_i ($i = 1, 2$) будут вне массовой поверхности и $p_i^2 \neq m^2$, что дает правильные энергетические знаменатели.

Введем вместо 4-векторов p_i ($i = 1, 2$) для немассовых протонов 4-векторы

$$k_i = \left(k_{i+} = p_{i+}, k_{i-} = \frac{m_i^2 + \mathbf{p}_{i\perp}^2}{2p_{i+}}, \mathbf{p}_{i\perp} \right),$$

такие, что $k_i^2 = m^2$.

Запишем $\hat{p}_i + m$ в виде

$$\begin{aligned} \hat{p}_i + m &= p_{i+}\gamma_- + p_{i-}\gamma_+ - \gamma_\perp \cdot p_{i\perp} + m = \\ &= k_{i+}\gamma_- + k_{i-}\gamma_+ - \gamma_\perp \cdot p_{i\perp} + m + \\ &\quad + p_{i-}\gamma_+ - k_{i-}\gamma_+ = \\ &= \hat{k}_i + m + \frac{p_i^2 - m^2}{2p_{i+}}\gamma_+, \end{aligned} \quad (18)$$

где $\gamma_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_0 \pm \gamma_z)$, $\gamma_\perp = (\gamma_x, \gamma_y)$.

Поскольку $k_i^2 = m^2$, то в равенстве (18) можно снова воспользоваться условием полноты:

$$\begin{aligned} \hat{p}_i + m &= \sum_{v=\pm 1} u(k_i, \lambda_i) \bar{u}(k_i, \lambda_i) + \\ &\quad + \frac{p_i^2 - m^2}{2p_{i+}}\gamma_+. \end{aligned} \quad (19)$$

Второй член в формуле (19) отвечает, очевидно, распространению протона вне массовой поверхности. В дифракционном глубоко-неупругом рассеянии при малых x его вклад исчезающе мал. Априори можно думать, что из-за очень малой энергии связи дейтрона этот немассовый вклад будет мал и в ND -рассеянии. Опуская немассовые вклады в выражении $\hat{p}_i + m$, получим для амплитуды (2) выражение вида

$$\begin{aligned} A_{ND}^1 &= -\frac{1}{2(2\pi)^3} \int \frac{dz d^2\mathbf{k}}{z^2(1-z)} \times \\ &\times \sum_k F_k [\bar{u}(q_2, v_2) O_k u(q_1, v_1)] \times \\ &\times \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \frac{\bar{v}(p_3, \lambda_3) \tilde{\Gamma}_\alpha^* \tilde{V}_\alpha^{(\rho')*} u(k_2, \lambda_2)}{\tilde{M}^2 - M_D^2} \times \\ &\times [\bar{u}(k_2, \lambda_2) O_k u(k_1, \lambda_1)] \times \\ &\times \frac{\bar{u}(k_1, \lambda_1) \Gamma_\beta V_\beta^{(\rho)} v(p_3, \lambda_3)}{M^2 - M_D^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Амплитуду (20) также можно представить в более компактном виде:

$$\begin{aligned} A_{ND}^1 &= -\frac{1}{2(2\pi)^3} \int \frac{dz d^2\mathbf{k}}{z^2(1-z)} \times \\ &\times \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \Phi_{\lambda_2, v_2, \lambda_1, v_1} \tilde{\Phi}_{\lambda_3 \lambda_2}^* \Phi_{\lambda_1 \lambda_3}, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\Phi_{\lambda_1 \lambda_3}$, $\tilde{\Phi}_{\lambda_2 \lambda_3}^*$ — полные вершинные функции дейтрона в начальном и конечном состояниях, соответственно [9 – 13]:

$$\Phi_{\lambda_1 \lambda_3} = \frac{\bar{u}(k_1, \lambda_1) \Gamma_\beta V_\beta^{(\rho)} v(p_3, \lambda_3)}{M^2 - M_D^2}; \quad (22)$$

$$\tilde{\Phi}_{\lambda_3 \lambda_2}^* = \frac{\bar{v}(p_3, \lambda_3) \tilde{\Gamma}_\alpha^* \tilde{V}_\alpha^{(\rho')*} u(k_2, \lambda_2)}{\tilde{M}^2 - M_D^2}; \quad (23)$$

$\Phi_{\lambda_2, v_2, \lambda_1, v_1}$ — амплитуды NN -рассеяния (1):

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda_2, v_2, \lambda_1, v_1} &= \sum_k F_k [\bar{u}(q_2, v_2) O_k u(q_1, v_1)] \times \\ &\times [\bar{u}(k_2, \lambda_2) O_k u(k_1, \lambda_1)]. \end{aligned} \quad (24)$$

Сразу же заметим, что возникающие выражения $\frac{\Gamma_\beta}{M^2 - M_D^2}$ и $\frac{\tilde{\Gamma}_\alpha^*}{\tilde{M}^2 - M_D^2}$ сводятся к вол-

новой функции дейтрона [3, 9 – 13]. Здесь M^2 есть не что иное, как квадрат инвариантной массы протон-нейтронной пары с импульсами k_1 и k_3 на массовой поверхности в начальном состоянии (15), а \tilde{M}^2 — квадрат инвариантной массы протон-нейтронной пары с импульсами k_2 и k_3 на массовой поверхности в конечном состоянии (16).

Таким образом, дейтрон со спиральностью ρ представляется как система протон-нейтрон со спиральностями λ_1 и λ_3 ; рассеяние происходит с изменением спиральности λ_1 нуклона-мишени (протон) на спиральность λ_2 ; после рассеяния система протон-нейтрон со спиральностями λ_2, λ_3 проецируется на дейтрон в спиновом состоянии со спиральностью ρ' ; по всем промежуточным спиральностям $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ идет суммирование, и это суммирование заменяет вычисление фейнмановских следов.

Практическое применение этой техники требует знания матричных элементов всех операторов O_k между спиральными состояниями в базе светового конуса. Требуется также расчет матричных элементов для вершинных функций, то есть знание спиральной структуры волновой функции дейтрона на световом конусе. Часть этих матричных элементов содержится, например, в работе [3], часть рассчитана и приведена в следующем разделе данной статьи.



**Спиноры для частицы со спином 1/2
в формализме светового конуса**

В формализме светового конуса для описания частицы со спином 1/2 и 4-импульсом $p = (p_+, p_-, \mathbf{p}_\perp)$ используются следующие спиноры [3, 10]:

$$u(p, \lambda) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}p_+}} (\sqrt{2}p_+ + \beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_\perp) \chi_\lambda, \quad (25)$$

где $\beta = \gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$; $\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$; спиноры χ_λ при $\lambda = \pm 1$ имеют вид

$$\chi_{\lambda=1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 0, 1, 0)^T; \quad (26)$$

$$\chi_{\lambda=-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, 1, 0, -1)^T. \quad (27)$$

Спиноры $v(p, \lambda)$ для античастицы выглядят как

$$v(p, \lambda) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}p_+}} (\sqrt{2}p_+ - \beta m + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_\perp) \chi_{-\lambda}. \quad (28)$$

В вычислениях матричных элементов будут встречаться спиноры, характеризующие движение налетающей частицы против оси столкновений z . Поэтому ниже приводится инвертированный спинор для движения частицы против оси z :

$$u(q, \nu) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2}q_-}} (\sqrt{2}q_- + \beta m - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{q}_\perp) \tilde{\chi}_\nu, \quad (29)$$

где спиноры $\tilde{\chi}_\nu$ при $\nu = \pm 1$ имеют вид

$$\tilde{\chi}_{\nu=1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, -1, 0, -1)^T, \quad (30)$$

$$\tilde{\chi}_{\nu=-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-1, 0, 1, 0)^T. \quad (31)$$

Матричные элементы для рассеяния частиц со спином 1/2 с использованием данных спиноров приведены в табл. 1 – 4.

Таблица 1

Матричные элементы для рассеяния частицы со спином $s = 1/2$ и спиральностью $\lambda = \pm 1$

Вершина Γ	$\bar{u}(k, \lambda) \Gamma u(p, \lambda)$	$\bar{u}(k, -\lambda) \Gamma u(p, \lambda)$
γ_+	2	0
γ_-	$\frac{1}{k_+ p_+} (m^2 - k(-\lambda)p(\lambda))$	$\frac{m}{k_+ p_+} (k(\lambda) - p(\lambda))$
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})$	$-\left(\frac{a(\lambda)k(-\lambda)}{k_+} + \frac{a(-\lambda)p(\lambda)}{p_+} \right)$	$-ma(\lambda) \left(\frac{1}{k_+} - \frac{1}{p_+} \right)$
I	$m \left(\frac{1}{k_+} + \frac{1}{p_+} \right)$	$\frac{k(\lambda)}{k_+} - \frac{p(\lambda)}{p_+}$
γ_5	$\lambda m \left(\frac{1}{k_+} - \frac{1}{p_+} \right)$	$\lambda \left(\frac{k(\lambda)}{k_+} - \frac{p(\lambda)}{p_+} \right)$
$\gamma_+ \gamma_5$	2λ	0
$\gamma_- \gamma_5$	$-\frac{\lambda}{k_+ p_+} (m^2 + k(-\lambda)p(\lambda))$	$-\frac{\lambda m}{k_+ p_+} (k(\lambda) + p(\lambda))$

Окончание таблицы 1

Вершина Γ	$\bar{u}(k, \lambda) \Gamma u(p, \lambda)$	$\bar{u}(k, -\lambda) \Gamma u(p, \lambda)$
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \gamma_5$	$-\lambda \left(\frac{a(\lambda) k(-\lambda)}{k_+} + \frac{a(-\lambda) p(\lambda)}{p_+} \right)$	$-\lambda m a(\lambda) \left(\frac{1}{k_+} + \frac{1}{p_+} \right)$
σ_{a+}	0	$2ia(\lambda)$
σ_{a-}	$\frac{im}{k_+ p_+} \left(-\frac{a(\lambda) k(-\lambda)}{k_+} + \frac{a(-\lambda) p(\lambda)}{p_+} \right)$	$\frac{i}{k_+ p_+} \left(-m^2 a(\lambda) + a(-\lambda) k(\lambda) p(\lambda) \right)$
σ_{ab}	$\lambda m [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \left(\frac{1}{k_+} + \frac{1}{p_+} \right)$	$\lambda [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \left(\frac{k(\lambda)}{k_+} + \frac{p(\lambda)}{p_+} \right)$

Примечание: каждый элемент таблицы необходимо умножить на фактор $\sqrt{p_{1+} p_{2+}}$.

Т а б л и ц а 2

Матричные элементы рассеяния частицы со спином $s = 1/2$ и спиральностью $\nu = \pm 1$ для инвертированных спиноров (для рассеяния против оси z)

Вершина Γ	$\bar{u}(q_2, \nu) \Gamma u(q_1, \nu)$	$\bar{u}(q_2, -\nu) \Gamma u(q_1, \nu)$
γ_+	$\frac{1}{q_{1-} q_{2-}} \left(m^2 - q_2(\nu) q_1(-\nu) \right)$	$\frac{m}{q_{1-} q_{2-}} \left(q_2(-\nu) - q_1(-\nu) \right)$
γ_-	2	0
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})$	$\frac{a(-\nu) q_2(\nu)}{q_{2-}} + \frac{a(\nu) q_1(-\nu)}{q_{1-}}$	$ma(-\nu) \left(\frac{1}{q_{2-}} - \frac{1}{q_{1-}} \right)$
I	$m \left(\frac{1}{q_{2-}} + \frac{1}{q_{1-}} \right)$	$\frac{q_2(-\nu)}{q_{2-}} - \frac{q_1(-\nu)}{q_{1-}}$
γ_5	$\nu m \left(\frac{1}{q_{2-}} - \frac{1}{q_{1-}} \right)$	$\nu \left(\frac{q_2(-\nu)}{q_{2-}} - \frac{q_1(-\nu)}{q_{1-}} \right)$
$\gamma_+ \gamma_5$	$-\frac{\nu}{q_{1-} q_{2-}} \left(m^2 + q_2(\nu) q_1(-\nu) \right)$	$-\frac{\nu m}{q_{1-} q_{2-}} \left(q_2(-\nu) + q_1(-\nu) \right)$
$\gamma_- \gamma_5$	2ν	0
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \gamma_5$	$\nu \left(\frac{a(-\nu) q_2(\nu)}{q_{2-}} + \frac{a(\nu) q_1(-\nu)}{q_{1-}} \right)$	$\nu m a(-\nu) \left(\frac{1}{q_{2-}} + \frac{1}{q_{1-}} \right)$
σ_{+-}	$im \left(\frac{1}{q_{2-}} - \frac{1}{q_{1-}} \right)$	$i \left(\frac{q_2(-\nu)}{q_{2-}} + \frac{q_1(-\nu)}{q_{1-}} \right)$

Окончание таблицы 2

Вершина Γ	$\bar{u}(q_2, \nu)\Gamma u(q_1, \nu)$	$\bar{u}(q_2, -\nu)\Gamma u(q_1, \nu)$
σ_{a+}	$\frac{im}{q_{1-}q_{2-}} \left(\frac{a(-\nu)q_2(\nu)}{q_{2-}} - \frac{a(\nu)q_1(-\nu)}{q_{1-}} \right)$	$\frac{i}{q_{1-}q_{2-}} (m^2 a(-\nu) - a(\nu)q_1(-\nu)q_2(-\nu))$
σ_{a-}	0	$-2ia(-\nu)$
σ_{ab}	$-\nu m[\mathbf{a}, \mathbf{b}] \left(\frac{1}{q_{2-}} + \frac{1}{q_{1-}} \right)$	$-\nu[\mathbf{a}, \mathbf{b}] \left(\frac{q_2(-\nu)}{q_{2-}} + \frac{q_1(-\nu)}{q_{1-}} \right)$

П р и м е ч а н и е: каждый элемент таблицы необходимо умножить на фактор $\sqrt{q_{1-}q_{2-}}$.

Т а б л и ц а 3

Матричные элементы дейтронной вершины в начальном состоянии

Вершина Γ	$\bar{u}(p_1, \lambda)\Gamma v(p_3, \lambda)$	$\bar{u}(p_1, \lambda)\Gamma v(p_3, -\lambda)$
γ_+	0	2
γ_-	$-\frac{m}{p_{1+}p_{3+}} (p_1(-\lambda) + p_3(-\lambda))$	$-\frac{1}{p_{1+}p_{3+}} (m^2 + p_1(-\lambda)p_3(\lambda))$
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})$	$-ma(-\lambda) \left(\frac{1}{p_{1+}} + \frac{1}{p_{3+}} \right)$	$-\left(\frac{a(\lambda)p_1(-\lambda)}{p_{1+}} + \frac{a(-\lambda)p_3(\lambda)}{p_{3+}} \right)$
I	$\frac{p_1(-\lambda)}{p_{1+}} - \frac{p_3(-\lambda)}{p_{3+}}$	$m \left(\frac{1}{p_{1+}} - \frac{1}{p_{3+}} \right)$

П р и м е ч а н и е: каждый элемент таблицы необходимо умножить на фактор $\sqrt{p_{1+}p_{3+}}$.

Спиральные амплитуды нуклон-нуклонного рассеяния в формализме светового конуса

Мы будем использовать спиноры в формализме светового конуса, когда две сталкивающиеся частицы движутся вдоль двух граней светового конуса, так что если для первой частицы большей компонентой является $p_{1+} = p_+$, то для второй — $q_{1-} = q_-$ (рис. 2) и

$$p_{1-} = \frac{m^2 + \mathbf{p}_{1\perp}^2}{2p_{1+}} \ll p_{1+};$$

$$q_{1+} = \frac{m^2 + \mathbf{q}_{1\perp}^2}{2q_{1-}} \ll q_{1-}.$$

Считается, что частица с импульсом p_1 движется вдоль оси z с положительной компонентой 3-импульса, а частица с импульсом q_1 — против оси z :



Рис. 2. Столкновение двух частиц в переменных светового конуса

Матричные элементы дейтронной вершины в конечном состоянии

Вершина Γ	$\bar{v}(p_3, \lambda) \Gamma u(p_2, \lambda)$	$\bar{v}(p_3, -\lambda) \Gamma u(p_2, \lambda)$
γ_+	0	2
γ_-	$\frac{m}{p_{2+} p_{3+}} (p_3(\lambda) + p_2(\lambda))$	$-\frac{1}{p_{2+} p_{3+}} (m^2 + p_3(-\lambda) p_2(\lambda))$
$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})$	$ma(\lambda) \left(\frac{1}{p_{3+}} + \frac{1}{p_{2+}} \right)$	$-\left(\frac{a(\lambda) p_3(-\lambda)}{p_{3+}} + \frac{a(-\lambda) p_2(\lambda)}{p_{2+}} \right)$
I	$\frac{p_3(\lambda)}{p_{3+}} - \frac{p_2(\lambda)}{p_{2+}}$	$m \left(-\frac{1}{p_{3+}} + \frac{1}{p_{2+}} \right)$

Примечание: каждый элемент таблицы необходимо умножить на фактор $\sqrt{p_{3+} p_{2+}}$.
Обозначения к табл. 1 – 4:

$$a(\lambda) = -\lambda a_x - i a_y; (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma}) = a_x \gamma_x + a_y \gamma_y; [\mathbf{a}, \mathbf{b}] = a_x b_y - a_y b_x; \mathbf{a} = (a_x, a_y); \mathbf{b} = (b_x, b_y);$$

$$\sigma_{ab} = \frac{i}{2} [(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\gamma}) - (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\gamma})(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})]; \sigma_{a+} = \frac{i}{2} [(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma}) \gamma_+ - \gamma_+ (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\gamma})] = a_x \sigma_{x+} + a_y \sigma_{y+}.$$

Например, чтобы получить γ_x , необходимо приравнять $a_x = 1, a_y = 0$; чтобы получить γ_y , необходимо приравнять $a_x = 0, a_y = 1$; чтобы получить σ_{xy} , необходимо приравнять $a_x = 1, a_y = 0, b_x = 0, b_y = 1$.

$$p_1 = \left(p_+, p_{1-} = \frac{m^2 + \mathbf{p}_{1\perp}^2}{2p_+}, \mathbf{p}_{1\perp} \right); \quad (32)$$

$$q_1 = \left(q_{1+} = \frac{m^2 + \mathbf{q}_{1\perp}^2}{2q_-}, q_-, \mathbf{q}_{1\perp} \right), \quad (33)$$

то есть большими компонентами являются $p_{1+} \equiv p_+$ и $q_{1-} \equiv q_-$ соответственно. Для рассеянных частиц

$$p_2 = \left(p_+, p_{2-} = \frac{m^2 + \mathbf{p}_{2\perp}^2}{2p_+}, \mathbf{p}_{2\perp} \right); \quad (34)$$

$$q_2 = \left(q_{2+} = \frac{m^2 + \mathbf{q}_{2\perp}^2}{2q_-}, q_-, \mathbf{q}_{2\perp} \right), \quad (35)$$

то есть p_+ и q_- сохраняются при рассеянии.

В конусной технике удобно ввести переменную

$$s = 2p_+ q_- \quad (36)$$

вместо часто используемой переменной квадрата суммы 4-векторов импульсов p и q . Если m, μ – массы сталкивающихся частиц, то квадрат полной энергии сталкивающихся частиц в системе центра инерции равен:

$$W^2 = (p + q)^2 = m^2 + \mu^2 + 2pq = s + \frac{m_{\perp}^2 \mu_{\perp}^2}{s} + m_{\perp}^2 + \mu_{\perp}^2,$$

где комбинации

$$m_{\perp}^2 = m^2 + \mathbf{p}_{\perp}^2, \quad \mu_{\perp}^2 = \mu^2 + \mathbf{q}_{\perp}^2$$

называют квадратами поперечной массы. Видно, что при высоких энергиях $W^2 \approx s$.

В табл. 5 – 9 приведены пять фермиевских вариантов, по которым разлагаются амплитуды NN -рассеяния.



Т а б л и ц а 5

Скалярный вариант $S = [\bar{u}(p_2, \lambda_2) I u(p_1, \lambda_1)] [\bar{u}(q_2, \nu_2) I u(q_1, \nu_1)]$

	++	--	+-	-+
++	$4m^2$	$[p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$2m [q_2(1) - q_1(1)]$	$2m [p_2(-1) - p_1(-1)]$
--	$[p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$	$4m^2$	$2m [p_2(1) - p_1(1)]$	$2m [q_2(-1) - q_1(-1)]$
+-	$2m [q_2(-1) - q_1(-1)]$	$2m [p_2(-1) - p_1(-1)]$	$4m^2$	$[p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$
-+	$2m [p_2(1) - p_1(1)]$	$2m [q_2(1) - q_1(1)]$	$[p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$4m^2$

В табл. 5 – 9 в боковиках дано чередование знаков величин λ_2 и ν_2 , в головках – знаков λ_1 и ν_1 .

Т а б л и ц а 6

Псевдоскалярный вариант $P = [\bar{u}(p_2, \lambda_2) \gamma_5 u(p_1, \lambda_1)] [\bar{u}(q_2, \nu_2) \gamma_5 u(q_1, \nu_1)]$

	++	--	+-	-+
++	0	$[p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	0	0
--	$[p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$	0	0	0
+-	0	0	0	$-[p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$
-+	0	0	$-[p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	0

Т а б л и ц а 7

Векторный вариант $V = [\bar{u}(p_2, \lambda_2) \gamma_\mu u(p_1, \lambda_1)] [\bar{u}(q_2, \nu_2) \gamma_\mu u(q_1, \nu_1)]$

	++	--	+-	-+
++	$2s + \frac{2}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [m^2 - q_1(-1)q_2(1)] -$ $-2 [p_2(-1)q_2(1) + p_1(1)q_1(-1)]$	$\frac{2m^2}{s} [p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - q_1(-1)q_2(1)] \times$ $\times [p_2(-1) - p_1(-1)]$
--	$\frac{2m^2}{s} [p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$	$2s + \frac{2}{s} [m^2 - p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [m^2 - q_1(1)q_2(-1)] -$ $-2 [p_2(1)q_2(-1) +$ $+ p_1(-1)q_1(1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - q_1(1)q_2(-1)] \times$ $\times [p_2(1) - p_1(1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$
+-	$\frac{2m}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - q_1(1)q_2(-1)] \times$ $\times [p_2(-1) - p_1(-1)]$	$2s + \frac{2}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [m^2 - q_1(1)q_2(-1)] -$ $-2 [p_2(-1)q_1(1) + p_1(1)q_2(-1)]$	$\frac{2m^2}{s} [p_2(-1) - p_1(-1)] \times$ $\times [q_2(-1) - q_1(-1)]$
-+	$\frac{2m}{s} [m^2 - q_1(-1)q_2(1)] \times$ $\times [p_2(1) - p_1(1)]$	$\frac{2m}{s} [m^2 - p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$\frac{2m^2}{s} [p_2(1) - p_1(1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)]$	$2s + \frac{2}{s} [m^2 - p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [m^2 - q_1(-1)q_2(1)] -$ $-2 [p_2(1)q_1(-1) + p_1(-1)q_2(1)]$

Аксиально-векторный вариант $A = [\bar{u}(p_2, \lambda_2) \gamma_5 \gamma_\mu u(p_1, \lambda_1)] [\bar{u}(q_2, \nu_2) \gamma_5 \gamma_\mu u(q_1, \nu_1)]$

	++	--	+-	-+
++	$2s + \frac{2}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [m^2 + q_1(-1)q_2(1)] -$ $-2 [p_2(-1)q_2(1) +$ $+ p_1(1)q_1(-1)]$	$\frac{2m^2}{s} [p_1(-1) + p_2(-1)] \times$ $\times [q_2(1) - q_1(1)] - 8m^2$	$-\frac{2m}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [q_1(1) + q_2(1)] + 4mp_1(1)$	$-\frac{2m}{s} [m^2 + q_1(-1)q_2(1)] \times$ $\times [p_1(-1) + p_2(-1)] + 4mq_1(-1)$
--	$\frac{2m^2}{s} [p_1(1) + p_2(1)] \times$ $\times [q_1(-1) + q_2(-1)] - 8m^2$	$2s + \frac{2}{s} [m^2 + p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [m^2 + q_1(1)q_2(-1)] -$ $-2 [p_2(1)q_2(-1) +$ $+ p_1(-1)q_1(1)]$	$-\frac{2m}{s} [m^2 + q_1(1)q_2(-1)] \times$ $\times [p_1(1) + p_2(1)] + 4mq_1(1)$	$-\frac{2m}{s} [m^2 + p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [q_1(-1) + q_2(-1)] +$ $+ 4mp_1(-1)$
+-	$\frac{2m}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [q_1(-1) + q_2(-1)] - 4mp_2(-1)$	$\frac{2m}{s} [m^2 + q_1(1)q_2(-1)] \times$ $\times [p_1(-1) + p_2(-1)] - 4mq_2(-1)$	$-2s - \frac{2}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times$ $\times [m^2 + q_1(1)q_2(-1)] +$ $+ 2 [p_2(-1)q_1(1) + q_2(-1)p_1(1)]$	$-\frac{2m^2}{s} [p_1(-1) + p_2(-1)] \times$ $\times [q_1(-1) + q_2(-1)]$
-+	$\frac{2m}{s} [m^2 + q_1(-1)q_2(1)] \times$ $\times [p_1(1) + p_2(1)] - 4mq_2(1)$	$\frac{2m}{s} [m^2 + p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [q_1(1) + q_2(1)] - 4mp_2(1)$	$-\frac{2m^2}{s} [p_1(1) + p_2(1)] \times$ $\times [q_1(1) + q_2(1)]$	$-2s - \frac{2}{s} [m^2 + p_1(-1)p_2(1)] \times$ $\times [m^2 + q_1(-1)q_2(1)] +$ $+ 2 [p_2(1)q_1(-1) + q_2(1)p_1(-1)]$

Тензорный вариант $T = [\bar{u}(p_2, \lambda_2) \sigma_{\mu\nu} u(p_1, \lambda_1)] [\bar{u}(q_2, \nu_2) \sigma_{\mu\nu} u(q_1, \nu_1)]$

	++	--	+-	-+
++	$\frac{8m^2}{s} [p_2(-1)q_2(1) + p_1(1)q_1(-1)] - 8m^2$	$8s + \frac{8}{s} [m^4 + p_1(-1)p_2(-1)q_1(1)q_2(1)] - 4[p_1(-1) + p_2(-1)][q_1(1) + q_2(1)]$	$-\frac{8m}{s} [m^2 p_1(1) + p_2(-1)q_1(1)q_2(1)] + 4m[q_1(1) + q_2(1)]$	$-\frac{8m}{s} [m^2 q_1(-1) - p_1(-1)p_2(-1)q_2(1)] + 4m[p_1(-1) + p_2(-1)]$
--	$8s + \frac{8}{s} [m^4 + p_1(1)p_2(1)q_1(-1)q_2(-1)] - 4[p_1(1) + p_2(1)][q_1(-1) + q_2(-1)]$	$\frac{8m^2}{s} [p_2(1)q_2(-1) + p_1(-1)q_1(1)] - 8m^2$	$-\frac{8m}{s} [m^2 q_1(1) + p_1(1)p_2(1)q_2(-1)] + 4m[p_1(1) + p_2(1)]$	$-\frac{8m}{s} [m^2 p_1(-1) + p_2(1)q_1(-1)q_2(-1)] + 4m[q_1(-1) + q_2(-1)]$
+-	$\frac{8m}{s} [m^2 p_2(-1) + p_1(1)q_1(-1)q_2(-1)] - 4m[q_1(-1) + q_2(-1)]$	$\frac{8m}{s} [m^2 q_2(-1) + p_1(-1)p_2(-1)q_1(1)] - 4m[p_1(-1) + p_2(-1)]$	$-\frac{8m^2}{s} [p_2(-1)q_1(1) + p_1(1)q_2(-1)] + 8m^2$	$-\frac{8m^2}{s} [p_1(-1)p_2(-1) + q_1(-1)q_2(-1)]$
-+	$\frac{8m}{s} [m^2 q_2(1) + p_1(1)p_2(1)q_1(-1)] - 4m[p_1(1) + p_2(1)]$	$\frac{8m}{s} [m^2 p_2(1) + p_1(-1)q_1(1)q_2(1)] - 4m[q_1(1) + q_2(1)]$	$-\frac{8m^2}{s} [p_1(1)p_2(1) + q_1(1)q_2(1)]$	$-\frac{8m^2}{s} [p_2(1)q_1(-1) + p_1(-1)q_2(1)] + 8m^2$

В табл. 5 – 9 в боковиках дано чередование знаков величин λ_2 и ν_2 , в головках – знаков λ_1 и ν_1 .



Используя табл. 5–9, нетрудно выписать явно вклады разных вариантов в конусные спиральные амплитуды NN -рассеяния. Так например,

$$\begin{aligned}
 1. \quad \varphi_{++++} = & 4m^2 F_1 + \left\{ 2s + \frac{2}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times \right. \\
 & \times [m^2 - q_1(-1)q_2(1)] - \\
 & \left. -2[p_2(-1)q_2(1) + p_1(1)q_1(-1)] \right\} F_3 + \\
 & + \left\{ 2s + \frac{2}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times \right. \\
 & \times [m^2 + q_1(-1)q_2(1)] - \\
 & \left. -2[p_2(-1)q_2(1) + p_1(1)q_1(-1)] \right\} F_4 + \\
 & + \left\{ \frac{8m^2}{s} [p_2(-1)q_2(1) + \right. \\
 & \left. + p_1(1)q_1(-1)] - 8m^2 \right\} F_5; \quad (37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2. \quad \varphi_{+--+} = & 2m [q_2(-1) - q_1(-1)] F_1 + \\
 & + \frac{2m}{s} [m^2 - p_1(1)p_2(-1)] \times \\
 & \times [q_2(-1) - q_1(-1)] F_3 + \\
 & + \left\{ \frac{2m}{s} [m^2 + p_1(1)p_2(-1)] \times \right. \\
 & \times [q_1(-1) + q_2(-1)] - 4mp_2(-1) \left. \right\} F_4 + \\
 & + \left\{ \frac{8m}{s} [m^2 p_2(-1) + \right. \\
 & \left. + p_1(1)q_1(-1)q_2(-1)] - \right. \\
 & \left. -4m [q_1(-1) + q_2(-1)] \right\} F_5; \quad (38)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 3. \quad \varphi_{-+-+} = & [p_2(1) - p_1(1)] \times \\
 & \times [q_2(1) - q_1(1)] F_1 - \\
 & - [p_2(1) - p_1(1)] [q_2(1) - q_1(1)] F_2 + \\
 & + \frac{2m^2}{s} [p_2(1) - p_1(1)] \times \\
 & \times [q_2(1) - q_1(1)] F_3 - \\
 & - \frac{2m^2}{s} [p_1(1) + p_2(1)] \times \\
 & \times [q_1(1) + q_2(1)] F_4 - \\
 & - \frac{8m^2}{s} [p_1(1)p_2(1) + q_1(1)q_2(1)] F_5. \quad (39)
 \end{aligned}$$

Результаты и их обсуждение

Итак, при очень высоких энергиях, когда $s = 2p_+q_- \gg m^2$, результаты показывают, что имеется определенная иерархия спиральных компонент в фермиевском разложении как функции от s . Так, для скалярного и псевдоскалярного вариантов все конусные спиральные амплитуды имеют одинаковую зависимость от s . Для векторного и псевдовекторного вариантов главными являются амплитуды без переворота спина: φ_{++++} , φ_{----} , φ_{+--+} , $\varphi_{-+-+} \sim s \cdot F$, а амплитуды с переворотом спина асимптотически убывают, например $\varphi_{+--+} \sim \frac{m}{s} \Delta \cdot F$. Характер энергетической и угловой зависимостей инвариантных функций приводится в работе [8].

Данная работа вносит многообещающий вклад в программу полного релятивистского описания спиновых явлений в ND -рассеянии при промежуточных и высоких энергиях. Предлагаемый нами формализм необходим для теоретической интерпретации экспериментальных данных по рассеянию поляризованных протонов и дейтронов на поляризованных дейтронах. Основным аппаратом при этом будет техника вычисления амплитуды в базе светового конуса. Техника светового конуса привлекательна своей приближенностью к привычной нерелятивистской квантовой механике и активно используется в литературе. Последовательной формулировки ND -рассеяния на световом конусе, однако, не имелось, и такая формулировка, раскрытая во введении, была основной задачей настоящей работы. В отличие от применения динамики на световом конусе к ультрарелятивистскому случаю, где обычно вычисляются асимптотические по энергии вклады, мы не делаем высокоэнергетических приближений и вычисляем все вклады в амплитуду. Приводится полный набор всех спиральных амплитуд, рассматриваются глобальные свойства спиральных амплитуд. В последующем полученные результаты могут быть применены к релятивистскому вычислению амплитуд многократного рассеяния в ND - и DD -рассеянии и анализу роли релятивистских эффектов при извлечении спиновой структуры pn -рассеяния из экспериментальных данных по pD - и DD -рассеянию, а также описанию других реакций с участием дейтронов.

В заключение автор выражает глубокую благодарность доктору физико-математических наук, профессору Н.Н. Николаеву, сотруднику Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, — за генерацию нетради-

ционных и плодотворных идей в теоретической физике; С.И. Манаенкову, сотруднику Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН, — за критические замечания и тщательную проверку вычислений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Nikolaev, N.** Spin filtering of stored (anti)protons: from FILTEX to COSY to AD to FAIR [Text] / N. Nikolaev, F. Pavlov // In: AIP Conference Proceedings Polarized Antiproton Beams — How. Ser. 'Polarized Antiproton Beams — How — An International Workshop' sponsors: Cockcroft Institute. Warrington, 2008. — P. 34–43.
2. **Gordon, L.E.** Spin structure of the proton and large p_T processes in polarized pp collisions [Text] / L.E. Gordon, G.P. Ramsey // Phys. Rev. D. — 1999. — Vol. 59. — P. 074018-1–074018-12.
3. **Ivanov, I.P.** Diffractive production of S and D wave vector mesons in deep inelastic scattering [Электронный ресурс] / I.P. Ivanov // arXiv: hep-ph/9909394.
4. **Glauber, R.J.** High-energy scattering of protons by nuclei [Text] / R.J. Glauber, G. Matthiae // Nuclear Physics B. — 1970. — Vol. 21. — P. 135–157.
5. **Грибов, В.Н.** Глауберовские поправки и взаимодействие адронов с ядрами при высоких энергиях [Текст] / В.Н. Грибов // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 56. — С. 892–901.
6. **Берестецкий, В.Б.** Квантовая электродинамика [Текст] / В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. — М.: Наука, 1989. — С. 313.
7. **Волков, Д.В.** Полюса Редже в амплитудах нуклон-нуклонного и нуклон-антинуклонного рассеяния [Текст] / Д.В. Волков, В.Н. Грибов // ЖЭТФ. — 1963. — Т. 44. — С. 1068–1077.
8. **Павлов, Ф.Ф.** Поведение инвариантных амплитуд нуклон-нуклонного рассеяния [Текст] / Ф.Ф. Павлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 4 (134). — С. 176–185.
9. **Павлов, Ф.Ф.** Оценка релятивистской поправки к средней спиральности протона в дейтроне [Текст] / Ф.Ф. Павлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 3 (129). — С. 143–152.
10. **Павлов, Ф.Ф.** Расчет спин-зависимой структурной функции дейтрона в переменных светового конуса [Текст] / Ф.Ф. Павлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — № 1 (141). — С. 118–128.
11. **Pavlov, F.F.** Relativistic nuclear corrections to the spin structure function of the deuteron in the light-cone variables [Text] / F.F. Pavlov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2012. — Vol. 114. — P. 946–954.
12. **Павлов, Ф.Ф.** Вычисление матричных элементов электромагнитного тока дейтрона в переменных светового конуса [Текст] / Ф.Ф. Павлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — № 3 (153). — С. 99–110.
13. **Павлов, Ф.Ф.** Угловое условие для матричных элементов электромагнитного тока дейтрона [Текст] / Ф.Ф. Павлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — № 3 (153). — С. 111–118.

ПАВЛОВ Федор Федорович — ассистент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
f.pavlov@tuexph.stu.neva.ru



УДК 539.125.17; 539.126.17

*А.Я. Бердников, А.В. Головин, Д.А. Иванищев,
Д.О. Котов, В.Г. Рябов, Ю.Г. Рябов*

ВЫХОД ЭЛЕКТРОНОВ ОТ ПОЛУЛЕПТОННЫХ РАСПАДОВ ЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩИХ ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ, В ПРОТОН-ПРОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ

*A.Ya. Berdnikov¹, A.V. Golovin², D.A. Ivanishchev³,
D.O. Kotov⁴, V.G. Riabov⁵, Yu.G. Riabov⁶*

^{1, 2, 4} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
^{3, 5, 6} B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute,
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Russia

YIELD OF ELECTRONS FROM SEMILEPTONIC DECAYS OF CHARM AND BOTTOM HADRONS IN PROTON-PROTON COLLISIONS AT 200 GeV

В статье представлен результат измерения инвариантного спектра по поперечному импульсу электронов от распадов мезонов, содержащих тяжелые кварки, в протон-протонных столкновениях при энергии 200 ГэВ. Произведено сравнение полученного спектра с теоретическими предсказаниями.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. ЛЕПТОНЫ. РОЖДЕНИЕ. ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ. АНАЛИЗ.

The invariant transverse momentum spectrum of electrons from charm and bottom mesons decays in proton-proton collisions at 200 GeV is presented. The spectrum is compared with theoretical predictions.

QUARK-GLUON PLASMA. LEPTONS. PRODUCTION. HEAVY QUARKS. ANALYSIS.

Столкновение тяжелых ядер при больших энергиях взаимодействия обеспечивает уникальные возможности для создания и изучения кварк-глюонной плазмы (КГП) в лабораторных условиях. При экстремально больших значениях плотности энергии и температуры ($\epsilon \approx 1$ ГэВ/фм³, $T \approx 170$ МэВ) расчеты квантовой хромодинамики (КХД) на решетке предсказывают фазовый переход бесцветной адронной материи в состояние КГП. Экспериментальное наблюдение КГП имеет большое значение для развития КХД и космологии. Считается, что в первые микросекунды после Большого взрыва Вселенная находилась в состоянии КГП.

Уже первые эксперименты на коллайдере RHIC [1] показали, что плотность энергии, достигаемая в столкновениях тяжелых ядер при

максимальной энергии коллайдера RHIC и равная 200 ГэВ, превышает величину, необходимую для фазового перехода. 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 (Au + Au)-столкновениях при энергии 130 ГэВ [2]. Выходы π^0 -мезонов, состоящих из легких u - и d -кварков, в области больших поперечных импульсов ($p_T > 5$ ГэВ/с) оказались пятикратно подавленными по сравнению с элементарными протон-протонными ($p + p$)-столкновениями.

Большой интерес представляет изучение эффекта подавления выхода для тяжелых (c - и b -) кварков. В силу ряда обстоятельств (кон-

струкции спектрометров, недостаточные объемы накопленных данных и т. п.) эксперименты на коллайдере RHIC не позволяют выполнять прямые измерения рождения тяжелых кварков. Поэтому был предложен вариант косвенных измерений – через выходы электронов от полуплептонных распадов частиц, содержащих тяжелые кварки.

Данная работа посвящена изучению рождения подобных электронов в $(p + p)$ -столкновениях при энергии взаимодействия 200 ГэВ. Все результаты, представленные в настоящей статье, получены в эксперименте ФЕНИКС [3] на коллайдере RHIC.

Измерение инвариантных спектров рождения по поперечному импульсу электронов от полуплептонных распадов частиц, содержащих тяжелые кварки

Установка ФЕНИКС детально описана в статье [3]. На первом этапе работ был получен инклюзивный спектр рождения электронов в столкновениях протонов при энергии 200 ГэВ. На втором этапе необходимо выделить из инклюзивного спектра электронов так называемые «нефотонные» электроны, т. е. электроны от полуплептонных распадов частиц, содержащих тяжелые кварки. Для этого необходимо оценить фоновый вклад фотонных электронов, образующихся в результате Далиц-распадов и конверсий, а также фонового вклада от полуплептонных распадов K -мезонов ($K \rightarrow e\nu$) и диэлектронных распадов легких мезонов ($\omega, \phi, \rho \rightarrow e^+e^-$). Решение данной задачи предполагает проведение расчета «коктейля» – спектра электронов от диэлектронных распадов легких мезонов и полуплептонных распадов K -мезонов. Также необходимо оценить эффективность регистрации электронов в экспериментальной установке и систематические неопределенности, возникающие при использовании детекторных подсистем.

Инвариантные выходы частиц определяются следующей формулой:

$$\frac{1}{2\pi p_T} \frac{d^2 N}{dp_T dy} = \frac{N_{\text{перв}}(p_T) \cdot CF(p_T) \cdot \varepsilon_{\text{триг}}(p_T)}{2\pi p_T \cdot N_{\text{соб}} \cdot \Delta p_T},$$

где p_T – поперечный импульс; y – быстрота; $N_{\text{перв}}$ – первичный выход электронов; CF –

функция коррекции, связанная с геометрией и разрешением спектрометра; $N_{\text{соб}}$ – число анализируемых событий; Δp_T – ширина промежутка по поперечному импульсу, в котором подсчитывается предварительный выход частиц; $\varepsilon_{\text{триг}}(p_T)$ – эффективность гамма-триггера (в случае анализа данных, накопленных без использования гамма-триггера, $\varepsilon_{\text{триг}} = 1$).

Для измерения выходов электронов был проведен целый комплекс исследований: анализ качества экспериментальных данных, определение характеристик детекторных подсистем, исключение неактивных или нестабильных областей и оптимизация критериев отбора частиц, зарегистрированных в детекторе.

Средняя продолжительность одного цикла работы коллайдера RHIC составляет около полугода. На протяжении данного промежутка времени практически невозможно обеспечить абсолютную стабильность характеристик всех детекторных подсистем установки ФЕНИКС. Основная цель анализа качества экспериментальных данных заключается в отборе той их порции, в которой детекторы, участвующие в анализе, обладают стабильными характеристиками.

Основными детекторами, участвующими в физическом анализе, являются дрейфовая камера (DC) [4, 5], первый и третий слои падовых камер (PC1, PC3) [4], электромагнитный калориметр (EMC) [6] и детектор черенковского света RICH [7]. По результатам контроля качества удалось отобрать данные, обладающие однородным (по времени) поведением детекторов, участвующих в анализе.

Для измерения выходов электронов необходимо рассчитать функции коррекции (CF) и величину эффективности гамма-триггера для фотонов или электронов $\varepsilon_{\text{триг}}(p_T)$. Основным инструментом для вычисления данных параметров является программный продукт PISA (PHENIX Integrated Simulation Application) [8], созданный на базе GEANT3 [9]. В задачи PISA входит моделирование прохождения частиц и всех продуктов их распада и/или взаимодействий через экспериментальную установку, генерирование откликов детекторов на уровне отдельных каналов электроники и создание файлов данных, имеющих такую же структуру, как и в реальных событиях. Это позволяет использовать при анализе смоделированных



данных те же алгоритмы, что использовались при анализе реальных данных.

Система сбора данных эксперимента ФЕНИКС способна работать с частотой 5 – 6 кГц [10, 11]. Но даже такая высокая продуктивность системы не позволяет записывать все происходящие столкновения, частота которых может достигать 10^5 c^{-1} в $(p + p)$ -столкновениях. Поэтому в случае $(p + p)$ -столкновений в эксперименте ФЕНИКС использовался дополнительный гамма-триггер, работающий в режиме реального времени и отбирающий редкие события, содержащие хотя бы один гамма-квант (или электрон) с большой энергией. Использование данного триггера позволяет значительно повысить статистическую значимость измерений в области больших поперечных импульсов.

Эффективность триггера измерялась отдельно для каждого сектора калориметра и определялась как отношение энергетических спектров γ -квантов (электронов), измеренных как с использованием гамма-триггера (гамма), так и без его использования. На рис. 1,а показаны два энергетических спектра γ -квантов (электронов), измеренные в одном из секторов калориметра в $(p + p)$ -взаимодействиях. Серая полоса (рис. 1,б) соответствует ошибке измерения эффективности триггера, обусловленной статистической обеспеченностью измерений и степенью стабильности работы триггера во времени.

Функции коррекции для электронов, рассчитанные с использованием различных параметров по отбору частиц, представлены на рис. 2,а. Для трех различных промежутков по поперечному импульсу используются различные условия отбора, поэтому приведены три кривые, соответствующие трем анализам для трех промежутков по поперечному импульсу электрон-позитронных пар.

Инклюзивный спектр рождения электронов состоит из трех компонентов: 1) электроны от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки (искомый спектр); 2) фотонные электроны (электроны, образующиеся в результате Далиц-распадов и конверсий, в основном на материале пучковой трубы); 3) электроны от полулептонных распадов K -мезонов ($K \rightarrow e\bar{\nu}$) и диэлектронных распадов легких мезонов ($\omega, \phi, \rho \rightarrow e^+e^-$).

Вклад каждого из компонентов фона оценивался с помощью полного Монте-Карло-

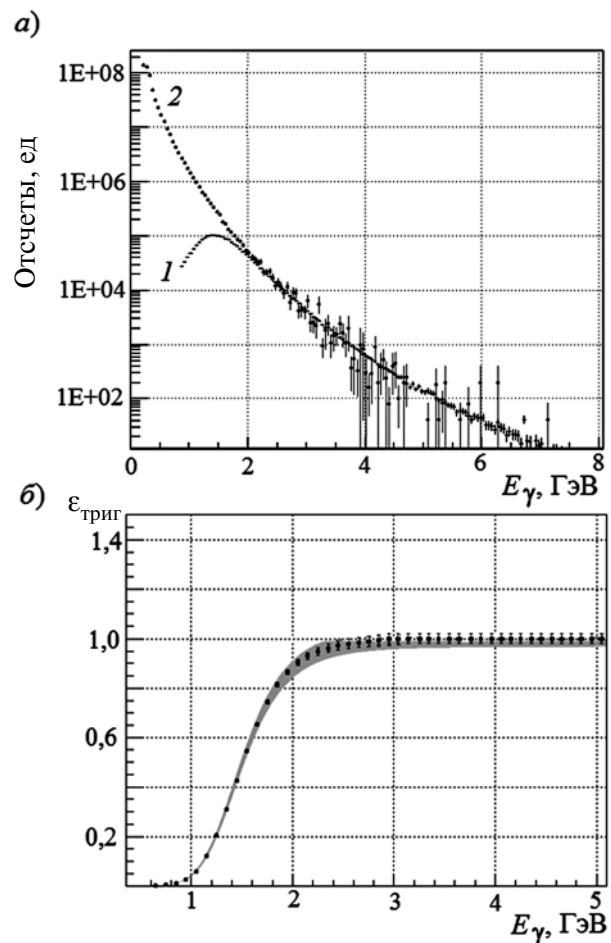


Рис. 1. Энергетические спектры γ -квантов (а), измеренные в одном из секторов калориметра в $(p + p)$ -взаимодействиях с использованием (1) и без использования (2) гамма-триггера, а также эффективность гамма-триггера (б) как функция энергии γ -квантов или электронов E_γ

моделирования прохождения и регистрации распадных частиц экспериментальной установкой. Электроны, возникающие в результате Далиц-распадов нейтральных пионов, вносят основной вклад в спектр в области малых масс. Эксперимент ФЕНИКС позволил измерить спектры рождения заряженных и нейтральных пионов в столкновениях протонов при энергии 200 ГэВ [12]. Функция, полученная в результате аппроксимации данных измерений, использовалась в качестве входного спектра пионов по поперечному импульсу при проведении моделирования. На рис. 2,б представлены результаты вычисления вклада фона в инклюзивный спектр.

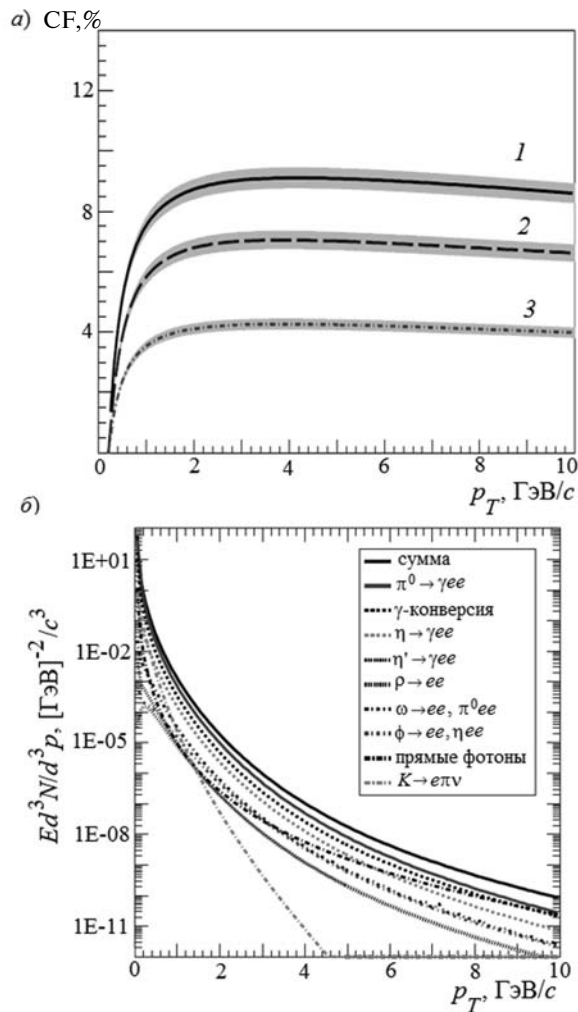


Рис. 2. Функции коррекции для электронов (а), рассчитанные с использованием различных критериев отбора электронов для промежутков по поперечному импульсу $0,3 < p_T < 5$ ГэВ/с (1), $5 < p_T < 7$ ГэВ/с (2), $7 < p_T < 9$ ГэВ/с (3), и результаты расчета фоновых вкладов (б) от частиц различного типа

Результаты

На рис. 3 представлены результирующий спектр электронов после вычитания рассчитанных фонов и сравнение измеренных точек с теоретическими предсказаниями (FNOLL) [13]. Экспериментальные точки находятся в

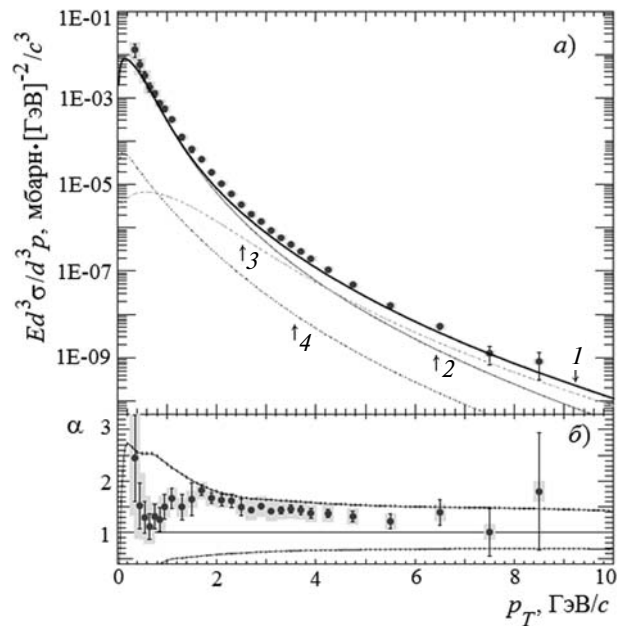


Рис. 3. Инвариантные спектры по поперечному импульсу электронов от распадов мезонов, содержащих тяжелые кварки, в $(p + p)$ -столкновениях при энергии 200 ГэВ, измеренные в настоящей работе (\bullet) и рассчитанные в рамках модели FNOLL (1) для мезонов, содержащих только c - (2) или b - (3) кварки и одновременно c - и b -кварки (4) (а). Отношение измеренного спектра к рассчитанному α (б)

согласии с теоретическими предсказаниями в пределах ошибок.

Результаты, представленные в настоящей статье, послужат базой для изучения подавления выхода тяжелых кварков в центральных столкновениях тяжелых ядер при энергии 200 ГэВ и позволят продолжить изучение фундаментальных свойств ядерной материи в условиях экстремально высоких плотностей энергии, превышающих критическую плотность перехода в кварк-глюонную плазму.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации; соглашение 14.В37.21.1300.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Baym, G.** RHIC: From dreams to beams in two decades [Text] / G. Baym // Nucl. Phys. A. – 2002. – Vol. 698. – P. 23 – 32.
 2. **Adcox, K.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC [Text] /

K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov, [et al.] // Nucl. Phys. A. – 2005. – Vol. 757. – P. 184 – 283.
 3. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov, [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. – 2003. – Vol. 499. – P. 469 – 479.



4. **Adcox, K.** PHENIX central arm tracking detectors [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 489 — 507.
5. **Riabov, V.** Drift chambers for the PHENIX central tracking system [Text] / V. Riabov // Nucl. Instrum. Meth. — 1998. — Vol. 419. — P. 363 — 369.
6. **Aphcetché, L.** PHENIX calorimeter [Text] / L. Aphcetché, T. C. Awes [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. — 2003. — Vol. 499. — P. 521 — 536.
7. **Akiba, Y.** PHENIX central arm particle ID detectors [Text] / Y. Akiba, M. Aizawa [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. — 2003. — Vol. 499. — P. 508 — 520.
8. **Adcox, K.** A Primer Manual for the PHENIX Simulation Code [Электронный ресурс] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // http://www.phenix.bnl.gov/phenix/WWW/simulation/primer4/seq_primer.html
9. **Brun, R.** Geant: simulation program for particle physics experiments [Text] / R. Brun, R. Hagelberg [et al.] // Preprint CERN. — 1978. — Vol. CERN-DD-78-2-REV. — P. 1 — 220.
10. **Adler, S.** PHENIX on-line systems [Text] / S.S. Adler, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. — 2003. — Vol. 499. — P. 560 — 592.
11. **Adler, S.** PHENIX on-line and off-line computing [Text] / S.S. Adler, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. — 2003. — Vol. 499. — P. 593 — 602.
12. **Adare A.** Measurement of neutral mesons in $p + p$ collisions at $\sqrt{s} = 200$ GeV and scaling properties of hadron production PHENIX [Text] / A. Adare, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Phys. Rev. D. — 2011. — Vol. 83. — P. 052004 — 052030.
13. **Cacciari, M.** QCD predictions for charm and bottom production at RHIC [Text] / M. Cacciari, P. Nason, R. Vogt // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 95. — P. 122001 — 122023.

БЕРДНИКОВ Александр Ярославич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
berdnikov@spbstu.ru

ГОЛОВИН Алексей Владиславович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роша
ivanishchev@gmail.com

КОТОВ Дмитрий Олегович — кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dm_kotov@phmf.spbstu.ru

РЯБОВ Виктор Германович — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роша
riabovvg@gmail.com

РЯБОВ Юрий Германович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роша
yuriy.riabov@gmail.com

УДК 519.87:62

В.Н. Козлов

**ОПЕРАТОРЫ МИНИМИЗАЦИИ ЛИНЕЙНЫХ И НЕГЛАДКИХ
ФУНКЦИОНАЛОВ НА КОМПАКТНЫХ МНОЖЕСТВАХ**

V.N. Kozlov

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

**OPERATORS FOR MINIMIZATION OF LINEAR AND NONSMOOTH
FUNCTIONALS ON COMPACT SETS**

Рассмотрены операторы решения задач минимизации линейного функционала на компактных множествах конечномерного пространства, задающие решения задач в аналитической форме. На примере компактного множества двумерного пространства вещественных векторов, заданного пересечением линейного многообразия и шара, приведена геометрическая интерпретация полученных результатов. Сформулированы задачи кусочно-линейной оптимизации и доказано, что они могут иметь решения, представленные операторами минимизации. Задачи негладкой оптимизации преобразованы к задачам выпуклого программирования.

ОПЕРАТОРЫ МИНИМИЗАЦИИ. КОМПАКТНЫЕ МНОЖЕСТВА. ЛИНЕЙНЫЙ ФУНКЦИОНАЛ. КУСОЧНО-ЛИНЕЙНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ.

The paper discusses the operators for the analytical solutions of problems of linear functional minimization over compact sets in a finite-dimensional space. The geometric interpretation of the results is provided through the example of a compact set in a two-dimensional real vector space defined as an intersection of a linear variety and a sphere. The piecewise-linear optimization problems are formulated and proved to possess solutions taking a form of minimization operators. Non-smooth optimization problems have been transformed into convex programming problems.

MINIMIZATION OPERATORS. COMPACT SETS. LINEAR FUNCTIONAL. PIECEWISE-LINEAR OPTIMIZATION.

Операторы минимизации преобразуют параметры задачи в минимизирующие элементы конечномерных пространств. Операторы данного класса используются для качественного анализа асимптотической устойчивости замкнутых управляемых систем для аналитической аппроксимации решений сложных задач ко-

нечномерной оптимизации, возникающих при управлении крупномасштабными объектами.

В данной статье рассматриваются операторы решения задач минимизации линейного функционала на компактных множествах конечномерного пространства, задающие решения задач в аналитической форме.



Постановка задачи и операторы условной минимизации линейных функционалов

Пусть задача вычисления вектора, минимизирующего линейный функционал при ограничениях, имеет вид

$$\begin{aligned} Z_* &= \arg \min \{ \varphi(Z) = c_0^T Z \mid A_0 Z = b_0, \\ A_0 &\in \mathbb{R}^{m \times n}, m \leq n, \text{rang } A_0 = m; \\ (Z-d)^T Q(Z-d) &\leq r^2, Q = Q^T, \\ \text{rang } Q = n \} &\in \mathbb{R}_Z^n. \end{aligned} \quad (1)$$

Интервальные ограничения на переменные $x^- \leq x \leq x^+$ аппроксимируются эллипсоидом. Замена переменных вида

$$Z = Q^{-1/2} X + d, \quad X = Q^{1/2} (Z - d)$$

преобразует эллипсоид в шар так, что

$$\begin{aligned} (Z-d)^T Q(Z-d) &= \\ = (Q^{-1/2} X + d - d)^T (Q^{-1/2} X + d - d) &= \\ = X^T Q^{-1/2} Q Q^{-1/2} X = X^T X \leq r^2, \end{aligned}$$

и преобразует исходную задачу (1) к следующей задаче: сформулировать оператор оптимизации для вычисления векторов

$$\begin{aligned} X_* &= \arg \min \{ \varphi = c_0^T Q^{-1/2} X + c_0^T d \mid \\ A_0 Q^{-1/2} X &= b_0 - A_0 d, X^T X \leq r^2 \}; \\ X^* &= \arg \max \{ \varphi = c_0^T Q^{-1/2} X + c_0^T d \mid \\ A_0 Q^{-1/2} X &= b_0 - A_0 d, X^T X \leq r^2 \}. \end{aligned}$$

В новых переменных ограничения задачи принимают вид

$$\begin{aligned} \{ AX = b, A = A_0 Q^{-1/2}, b = b_0 - A_0 d, \\ \text{rang } F = m, X^T X \leq r^2 \} \in \mathbb{R}_X^n. \end{aligned}$$

В компактном виде последняя задача сводится к вычислению минимума (максимума) линейного функционала

$$J = c^T X + f$$

при ограничениях

$$AX = b, X^T X \leq r^2.$$

При этом для решения можно использовать необходимые условия вспомогательных задач,

в которых ограничения типа квадратичного неравенства заменено ограничениями типа равенства.

Операторы условной минимизации и максимизации линейных функционалов

Вспомогательные задачи решены на основе обобщенного проекционного подхода в два этапа. На первом этапе применяется «классическое проецирование», следующее из факторизации конечномерного пространства на линейное многообразие и его ортогональное дополнение. На втором этапе компактное множество представлено пересечением линейного многообразия и параллелепипеда, который аппроксимирован эллипсоидом или шаром. Для этого пересечения множеств формируется обобщенный проектор. Используется условие принадлежности оптимальных решений границе допустимой области для линейных функционалов, а также обобщения решений, заданных в предикатной форме.

Описанная декомпозиция представлений операторов следует из классического метода Лагранжа для задач условной минимизации и специальных форм соотношений теории двойственности математического программирования. В результате формируется оператор, представляющий решение задачи оптимизации на основе ее параметров: функционала и ограничений. Свойства операторов проектирования на линейное многообразие (подпространство) конечномерного пространства определяются далее.

Лемма 1. Пусть задача оптимизации сводится к вычислению вектора

$$\begin{aligned} Z_* &= \arg \min \{ \varphi = \| Z - Z_0 \|^2 \mid AZ = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \\ \text{rang } A = m \} &\in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Тогда решение задачи минимизации, представленное оператором проецирования на линейное многообразие конечномерного пространства, имеет следующий вид [2, 3]:

$$\begin{aligned} Z_* &= P^0(Z_0) = \tilde{P}^0 Z_0 + P_A b, \\ \tilde{P}^0 &= E_{n \times n} - P_A A, P_A = A^T (A A^T)^{-1}. \end{aligned}$$

Лемма 2. Операторы проецирования на линейное многообразие и линейное подпространство,

определенные в лемме 1, обладают следующими свойствами:

1. $P^0(P^0(Z_0)Z_0) = P^0(Z_0)$,
- $\tilde{P}^0 \tilde{P}^0 Z_0 = \tilde{P}^0 Z_0$, $\tilde{P}^0 = (\tilde{P}^0)^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$;
2. $\tilde{P}^0 \tilde{P}^0 = \tilde{P}^0 \geq 0$, $P_A^T \tilde{P}^0 = 0_{m \times n} \in \mathbb{R}^{m \times n}$;
3. $P_A^T \tilde{P}^0 = 0_{m \times n} \in \mathbb{R}^{m \times n}$;
4. $\tilde{P}^0 P_A = 0_{n \times m} \in \mathbb{R}^{n \times m}$;
5. $P_A^T P_A = (AA^T)^{-1} \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

Доказательство свойств 1 – 5 приведено в указанных выше литературных источниках, а также следует из соотношений:

$$\tilde{P}^0 \tilde{P}^0 = (E_{n \times n} - P_A A)(E_{n \times n} - P_A A) = E_{n \times n} - P_A A = \tilde{P}^0;$$

$$(\tilde{P}^0)^T (\tilde{P}^0) = \tilde{P}^0 \tilde{P}^0 = \tilde{P}^0 \geq 0;$$

$$P_A^T \in \mathbb{R}^{m \times n}, \tilde{P}^0 \in \mathbb{R}^{n \times n} \Rightarrow P_A^T \tilde{P}^0 = P_A^T [E_{n \times n} - A^T P_A^T] = P_A^T - P_A^T A^T P_A^T = 0_{m \times n} \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

$$\tilde{P}^0 \in \mathbb{R}^{n \times n}, P_A \in \mathbb{R}^{n \times m} \Rightarrow \tilde{P}^0 P_A = [E_{n \times n} - P_A A] \cdot P_A = P_A - P_A A P_A = 0_{n \times m} \in \mathbb{R}^{n \times m};$$

$$P_A^T P_A = (AA^T)^{-1} AA^T (AA^T) = (AA^T)^{-1}.$$

При умножении матриц $P_A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ и $\tilde{P}^0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ необходимо учитывать их размеры и порядок умножения.

Лемма 2 доказана.

Решения задач конечномерной оптимизации можно представить следующим образом.

Утверждение 1. Пусть заданы две задачи условной оптимизации: вычислить

$$X_* = \arg \min \{ \varphi = cX \mid AX = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rang } A = m, X^T X \leq r^2 \} \in \mathbb{R}^n;$$

$$X^* = \arg \max \{ \varphi = cX \mid AX = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rang } A = m, X^T X \leq r^2 \} \in \mathbb{R}^n.$$

Тогда справедливы следующие утверждения: условие совместности ограничений задач оптимизации определяется неравенством

$$r^2 - b^T (AA^T)^{-1} b > 0;$$

векторы X_* , $X^* \in \mathbb{R}^n$, определяющие минимум и максимум линейного функционала на компактном множестве, представленном пересечением линейного многообразия и шара, имеют вид

$$X_* = X(\lambda_*) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda_*);$$

$$X^* = X(\lambda^*) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda^*), \quad (2a)$$

где

$$\tilde{P}^0 = E - P_A A, \quad P_A = A^T (AA^T)^{-1},$$

скалярные вещественные параметры λ_* , $\lambda^* \in \mathbb{R}^1$ – решения квадратного уравнения

$$\alpha \lambda^2 + \gamma = 0, \quad \alpha = 4[b^T (AA^T)^{-1} b - r^2],$$

$$\gamma = c^T \tilde{P}^0 c, \quad (2б)$$

а операторы $X_* = X(\lambda_*)$ и $X^* = X(\lambda^*)$, доставляющие минимум и максимум функционалу, определяются параметром λ так, что

$$\lambda_* = +|\gamma / \alpha|^{1/2}, \quad \lambda^* = -|\gamma / \alpha|^{1/2}. \quad (2в)$$

Доказательство. На первом этапе решения определяется структура оператора конечномерной оптимизации, а на втором – значения его параметров, соответствующие минимуму и максимуму линейного функционала.

На первом этапе формируется структура оператора, следующая из необходимых условий. Эти условия вспомогательной задачи формулируются на основе функции Лагранжа

$$L = c^T X + \lambda_0^T (AX - b) + \lambda (X^T X - r^2)$$

и представляются системой линейных и нелинейных уравнений

$$\partial L / \partial X = c + A^T \lambda_0 + 2\lambda X = 0_n;$$

$$\partial L / \partial \lambda_0 = AX - b = 0_m;$$

$$\partial L / \partial \lambda = X^T X - r^2 = 0. \quad (3)$$

Решение системы (3) выполняется методом исключения, что позволяет вычислить множитель Лагранжа

$$\lambda_0 = (AA^T)^{-1} [-2\lambda b - Ac] \in \mathbb{R}^m.$$



Подстановка $\lambda_0 \in \mathbb{R}^m$ в первое уравнение системы (3) определяет равенство

$$c - 2\lambda A^T (AA^T)^{-1} b - A^T (AA^T)^{-1} A c + 2\lambda X = 0_n,$$

из которого вычисляется оператор, задающий однопараметрическое семейство векторов [5, 6] так, что

$$\begin{aligned} X(\lambda) &= [-\tilde{P}^0 c + 2\lambda P_A b] / (2\lambda) = \\ &= P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda) \in \mathbb{R}^n. \end{aligned} \quad (4)$$

Равенство (4) определяет параметризованный оператор, который при определенном вычислении параметров задает обобщенный оператор проектирования на пересечение линейного многообразия и шара.

На втором этапе определяются значения параметра оператора (4). Множители $\lambda \in \mathbb{R}^1$ вычисляются из уравнения, получаемого подстановкой $X(\lambda)$ в третье уравнение необходимых условий (3). Подстановка параметризованного решения

$$X(\lambda) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda)$$

в третье уравнение системы (3) приводит к соотношениям, преобразование которых с учетом свойств операторов, рассмотренных в лемме 1, позволяет получить условие системы (3) в виде

$$\begin{aligned} X^T(\lambda) X(\lambda) &= \\ &= [P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda)]^T [P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda)] = \\ &= [b^T P_A^T - c^T \tilde{P}^0 / (2\lambda)] [P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda)] = \\ &= b^T P_A^T P_A b - [c^T \tilde{P}^0 / (2\lambda)] P_A b - b^T P_A^T \tilde{P}^0 c / (2\lambda) + \\ &\quad + c^T \tilde{P}^0 \tilde{P}^0 c / (4\lambda^2) = r^2. \end{aligned}$$

Дальнейшие преобразования позволяют получить квадратное уравнение

$$4\lambda^2 [r^2 - b^T (AA^T)^{-1} b] = c^T \tilde{P}^0 c,$$

из которого следует [3], что

$$\alpha \lambda^2 = \gamma, \quad \gamma = c^T \tilde{P}^0 c, \quad \alpha = 4[r^2 - b^T (AA^T)^{-1} b] > 0.$$

Это уравнение имеет два решения:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \pm |\lambda|, \quad \lambda_1 = \lambda_* = +|\lambda|, \\ \lambda_2 &= \lambda^* = -|\lambda|, \quad |\lambda| = |\gamma / \alpha|^{1/2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Первое соответствует минимуму, а второе – максимуму функционала, что доказывается сравнением значения линейного функционала на векторах типа (4) с параметрами (5):

$$\lambda_{1,2} = \pm |\gamma / \alpha|^{1/2}.$$

В результате такого сравнения для значений линейного функционала имеет место неравенство

$$\begin{aligned} \varphi(X_*) &= \varphi [X_*(\lambda_1)] = \varphi [X_*(+|\lambda|^{1/2})] = \\ &= c^T P_A b - c^T \tilde{P}^0 c / (2|\lambda|^{1/2}) \leq \\ &\leq \varphi [X^*(\lambda_2)] = \varphi [X^*(-|\lambda|^{1/2})] = \\ &= c^T P_A b + c^T \tilde{P}^0 c / (2|\lambda|^{1/2}), \end{aligned}$$

определяющее условие – результат:

$$\varphi [X_*(+|\lambda|^{1/2})] \leq \varphi [X^*(-|\lambda|^{1/2})], \quad (6)$$

где значение $\lambda^- = +|\gamma / \alpha|^{1/2}$ соответствует минимуму, а $\lambda^+ = -|\gamma / \alpha|^{1/2}$ – максимуму линейного функционала.

Оператор проектирования на линейное подпространство является симметричным и положительно-определенным, т. е. $\tilde{P}^0 = \tilde{P}^{0T} \geq 0$, поэтому имеет место неравенство

$$c^T \tilde{P}^0 c \geq 0.$$

Следовательно, из последнего неравенства получаем, что значение

$$\lambda_2 = -|\gamma / \alpha|^{1/2} \leq 0$$

определяет условный максимум, а

$$\lambda_1 = |\gamma / \alpha|^{1/2} \geq 0 -$$

условный минимум линейных функционалов.

Вещественность корней имеет место в силу условия

$$\alpha = 4[r^2 - b^T (AA^T)^{-1} b] \geq 0$$

(см. неравенство утверждения 1), что обеспечивается совместностью ограничений задачи с учетом свойства положительной определенности квадратичного функционала $\gamma = c^T \tilde{P}^0 c \geq 0$.

Из теории линейного программирования известно, что минимум и максимум линейного функционала достигаются на границе компактного множества, поэтому полученные результаты доказывают утверждение 1. В результате с

учетом условия (6) формулируются операторы условной минимизации и условной максимизации линейных функционалов, определенные равенствами (2а) – (2в) утверждения 1.

Утверждение 1 доказано.

Следствие утверждения 1 (об эквивалентных формах оператора оптимизации). Полученные результаты определяют операторы оптимизации как функцию параметра λ в двух эквивалентных формах:

$$X_1 = X_1(\lambda) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda);$$

$$X_2 = X_2(\lambda) = P^0(c) - \tilde{P}^0 c [1 - 1/(2\lambda)],$$

где

$$P^0(c) = \tilde{P}^0 c + P_A b,$$

$$\tilde{P}^0 = E - P_A A, \quad P_A = A^T (A A^T)^{-1}.$$

Полученные результаты имеют геометрическую интерпретацию. Вектор $X_1(\lambda)$ содержит первое слагаемое, соответствующее проекции начала координат на линейное многообразие, а второе слагаемое пропорционально проекции вектора $c \in \mathbb{R}^n$ на линейное подпространство:

$$X_1 = X_1(\lambda) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda).$$

При этом параметр $-1/(2\lambda)$ формируется из условия проецирования вектора $\tilde{P}^0 c \in \mathbb{R}^n$ на шар, принадлежащий линейному подпространству. Аналогичные интерпретации можно дать вектору $X_2(\lambda)$.

Утверждение 2. Приближенное решение задачи (1) имеет следующий вид:

$$z_* = Q^{1/2} x_* + d. \quad (7)$$

Без доказательства.

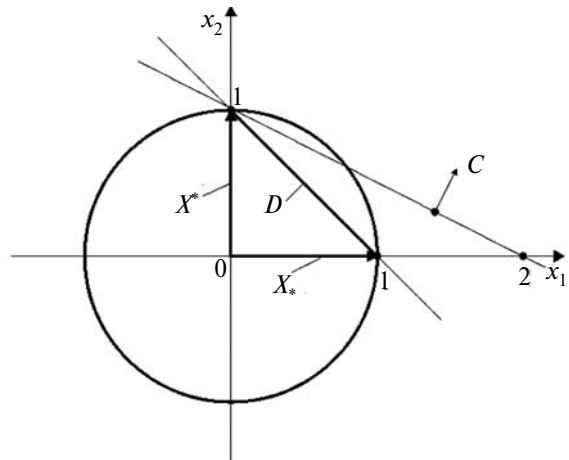
Таким образом, полученные операторы оптимизации задают векторы, определяющие минимум и максимум линейного функционала на компактном множестве.

Пример. Рассмотрим решение задачи минимизации (максимизации) линейного функционала

$$\varphi(x) = c^T X = x_1 + 2x_2,$$

$$c^T = (1, 2), \quad X^T = (x_1, x_2)$$

на компактном множестве, заданном пересечением линейного многообразия:



Графическое представление допустимой области компактного множества, включающего линейное многообразие и шар

$$AX = x_1 + x_2 = 1 = b, \quad A = (1 \mid 1), \quad b = 1,$$

и шара

$$\|x\|^2 \leq r^2 = 1, \quad c = 0,$$

двумерного пространства вещественных векторов.

Геометрическая иллюстрация линейного многообразия, шара и допустимой области как их пересечения приведены на рисунке.

Алгоритм решения задачи. Как было показано выше, оператор для вычисления векторов, которые обеспечивают минимум или максимум линейного функционала, имеют вид

$$X(\lambda) = P_A b - \tilde{P}^0 c / (2\lambda), \quad \alpha \lambda^2 + \gamma = 0,$$

$$\alpha = 4[r^2 - b^T (A A^T)^{-1} b], \quad \gamma = c^T \tilde{P}^0 c.$$

Решение задачи формируется с помощью следующего алгоритма.

Шаг 1. Вычисление матриц проектора на линейное многообразие и вспомогательных симметричных квадратичных форм:

$$\begin{aligned} \tilde{P}^0 &= E - A^T (A A^T)^{-1} A = \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot 0,5 \cdot (1 \mid 1) = \begin{bmatrix} 0,5 & -0,5 \\ -0,5 & 0,5 \end{bmatrix}; \\ c^T \tilde{P}^0 c &= [1 \mid 2] \begin{bmatrix} 0,5 & -0,5 \\ -0,5 & 0,5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 0,5; \\ b^T (A A^T)^{-1} b &= 1 \cdot 0,5 \cdot 1 = 0,5. \end{aligned}$$



Шаг 2. Вычисление параметров квадратного уравнения

$$\alpha\lambda^2 + \gamma = 0,$$

которые равны

$$\alpha = 4[r^2 - b^T (AA^T)^{-1} b] = 4 - 4 \cdot 1 \cdot 0,5 \cdot 1 = 2;$$

$$\gamma = c^T \tilde{P}^0 c = 0,5.$$

Шаг 3. Вычисление корней квадратного уравнения

$$2\lambda^2 = 0,5 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 0,5.$$

Шаг 4. Вычисление по конечным формулам векторов $X_* \in \mathbb{R}^2$ и $X^* \in \mathbb{R}^2$, обеспечивающих минимум и максимум линейного функционала:

$$X_*(\lambda_*) = X(0,5) = P_A b - \frac{\tilde{P}^0 c}{2 \cdot 0,5} =$$

$$= - \begin{bmatrix} -0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot 0,5 \cdot 1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$X^*(\lambda^*) = X(-0,5) = P_A b - \frac{\tilde{P}^0 c}{2 \cdot (-0,5)} = \begin{bmatrix} -0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot 0,5 \cdot 1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

поскольку

$$P_A = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot 0,5 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 0,5 \end{bmatrix},$$

$$\tilde{P}^0 c = \begin{bmatrix} 0,5 & -0,5 \\ -0,5 & 0,5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,5 \\ +0,5 \end{bmatrix}.$$

Вектор $X_* = X(\lambda_*)$ определяет минимум, а вектор $X^* = X(\lambda^*)$ – максимум функционала, что подтверждают значения линейных форм на каждом из этих векторов, которые определяются равенствами

$$\varphi(X_*) = x_1 + 2x_2 = 1, \quad \varphi(X^*) = x_1 + 2x_2 = 2.$$

Рисунок иллюстрирует решение данной задачи.

Операторы минимизации кусочно-линейных и негладких функционалов

Данные классы задач для синтеза управлений могут быть решены различными методами, включая методы субдифференциального исчисления.

Далее рассматриваются проекционные операторы оптимизации для задачи кусочно-линейного программирования на основе преобразования исходной задачи к уже преобразованной задаче с линейными функционалами. Операторы для минимизации негладких функционалов формируются на базе линеаризации методом разности переменных. Минимизация негладких функционалов на компактных множествах ниже представлена на примере кусочно-линейных функционалов.

Пусть рассматривается задача негладкой оптимизации: вычислить

$$Z_* = \arg \min \{ \varphi = C^T | Z | \mid AZ = b,$$

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rang}(A) = m, Z^- \leq Z \leq Z^+,$$

$$Z^+ > 0_n, Z^- < 0_n \} \in \mathbb{R}^n.$$

Эту задачу можно преобразовать к задаче минимизации линейного функционала. В соответствии с методом разности переменных вводятся новые переменные: $Z_1 \geq 0_n, Z_2 \geq 0_n$, представляющие вектор Z в виде разности векторов: $Z = Z_1 - Z_2$. При этом должны выполняться интервальные ограничения $Z^- \leq Z \leq Z^+$ задачи оптимизации. Для этого новые переменные должны удовлетворять условиям

$$0_n \leq Z_1 \leq Z^+, \quad 0_n \leq Z_2 \leq -Z^-.$$

Тогда ограничения задачи оптимизации преобразуются к виду

$$A(Z_1 - Z_2) = b, \quad 0_n \leq Z_1 \leq Z^+, \quad 0_n \leq Z_2 \leq -Z^-.$$

Далее на основе метода разности переменных в варианте, изложенном в работе [2], функционал необходимо преобразовать к виду

$$\varphi(X) = C_1^T X, \quad X = (Z_1, Z_2)^T, \quad C_1 = (C, C)^T.$$

В результате преобразованная задача оптимизации формулируется как вычисление вектора

$$X_* = \arg \min \{ \varphi = C_1^T X, \quad X = (X_1, X_2)^T,$$

$$C_1 = (C, C)^T \mid AX = b, \quad A = [A \mid -A] \in \mathbb{R}^{m \times 2n}, \quad (9)$$

$$\text{rang}(A) = m; \quad X^- \leq X \leq X^+,$$

$$X^- = (0_n, 0_n)^T,$$

$$X^+ = (Z^+, -Z^-)^T \geq 0_n \} \in \mathbb{R}^{2n}.$$

Таким образом, оптимальное решение задачи кусочно-линейного программирования можно представить оператором оптимизации типа (2) с параметрами, определяемыми решениями квадратного уравнения.

Полученные результаты можно обобщить для задач негладкой оптимизации, представленных суперпозицией выпуклых функционалов, аргументами которых являются модули вещественных скалярных или векторных аргументов. Пусть задача минимизации имеет формулировку: вычислить

$$Z_* = \arg \min \{ \varphi(|Z|) \mid AZ = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \\ \text{rang}(A) = m, Z^- \leq Z \leq Z^+, \\ Z^+ > 0_n, Z^- < 0_n \} \in \mathbb{R}^n,$$

где $\varphi(Z)$ – выпуклый функционал.

Тогда преобразованная задача минимизации функционала с гладкими аргументами примет вид

$$X_* = \arg \min \{ \varphi(X) \}, \\ X = (X_1, X_2)^T \mid AX = b, A = [A \mid -A] \in \mathbb{R}^{m \times 2n}, \\ \text{rang}(A) = m, X^- \leq X \leq X^+, X^- = (0_n, 0_n)^T, \\ X^+ = (X^+, -X^-)^T, X^+ > 0_n, X^- < 0_n \} \in \mathbb{R}^{2n}.$$

Таким образом, сформулированные задачи кусочно-линейной оптимизации могут иметь решения, представленные операторами минимизации, а задачи негладкой оптимизации преобразованы к задачам выпуклого программирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Козлов, В.Н.** К аналитическому решению систем линейных алгебраических неравенств [Текст] / В.Н. Козлов // Автоматика и телемеханика. – 1989. – № 4. – С. 101– 104.
2. **Козлов, В.Н.** Метод нелинейных операторов в автоматизированном проектировании динамических систем [Текст] / В.Н. Козлов. – Л.: Изд-во ЛГУ им. А.А. Жданова, 1986. – 166 с.
3. **Козлов, В.Н.** Негладкие системы, операторы оптимизации и устойчивость [Текст] / В.Н. Козлов. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. – 147 с.

КОЗЛОВ Владимир Николаевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой системного анализа и управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
umo@citadel.stu.neva.ru



УДК 517.929

*Л.Д. Блистанова, Л.Г. Каляда, А.И. Нечаев,
М.В. Стрекопытова, Н.Г. Ужегов*

УСТОЙЧИВОСТЬ КОНСЕРВАТИВНЫХ СИСТЕМ С ЦИКЛИЧЕСКИМИ КООРДИНАТАМИ

*L.D. Blistanova, L.G. Kalyada, A.I. Nechaev,
M.V. Strecopitova, N.G. Uzhegov*

St. Petersburg State University,
35 Universitetsky Pr., St. Petersburg, 195251, Russia

THE STABILITY OF CONSERVATIVE SYSTEMS WITH CYCLIC COORDINATES

В данной статье производится исследование консервативных систем с циклическими координатами на устойчивость. Показано, что задача о построении управлений, обеспечивающих существование заданного многообразия, сводится к построению управлений, обеспечивающих движение с заданным импульсом.

СООТНОШЕНИЕ. СИСТЕМА. ВЕЛИЧИНА. ФОРМА. СКОРОСТЬ. СВЯЗЬ. ИМПУЛЬС.

The given article focuses on the investigation for stability of conservative systems with cyclic coordinates. The problem on construction of controls maintaining the existence of diversity predetermined has been demonstrated to reduce to that construction maintaining the motion with the momentum predetermined.

RELATIONSHIP. SYSTEM. VALUE. FORM. SPEED. CONTACT. MOMENTUM.

Рассмотрим консервативную систему, состояние которой задается при помощи m позиционных координат q_j ($j=1, \dots, m$) и $n-m$ циклических q_α ($\alpha=m+1, \dots, n$). Движение такой системы описывается уравнениями Гамильтона

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad (1)$$

где $H = H(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_m)$. Пусть H – положительно определенная функция переменных $p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_m$ равномерно по p_{m+1}, \dots, p_n .

Пусть также функции $\frac{\partial H}{\partial p_j}$ и $\frac{\partial H}{\partial q_j}$ обращаются

в нуль при $p_1 = \dots = p_m = q_1 = \dots = q_m = 0$. Тогда у системы (1) есть семейство стационарных движений

$$p_1 = p_2 = \dots = p_m = q_1 = q_2 = \dots = q_m = 0; \quad (2)$$

$$p_\alpha = p_\alpha^0, q_\alpha = \frac{\partial H_0}{\partial p_\alpha}(t-t_0) + q_\alpha^0, \alpha = m+1, \dots, n,$$

представляющее собой $2(n-m)$ -мерную плоскость в фазовом пространстве системы (1).

Будем считать, что семейство (2) устойчиво, если по любому $\varepsilon > 0$ можно указать $\delta > 0$ та-

кое, что при $\sum_{j=1}^m |p_j^0| + |q_j^0| < \delta$ будет выполняться при $t \geq 0$ следующее неравенство:

$$\sum_{j=1}^m |p_j(t, p^0, q^0)| + |q_j(t, p^0, q^0)| < \varepsilon.$$

Если же $\delta > 0$ можно выбрать так, чтобы последняя сумма стремилась к нулю при $t \rightarrow \infty$, то

семейство (2) будем называть асимптотически устойчивым. При сделанных выше предположениях относительно функции H можно показать, что семейство (2) устойчиво [1].

Рассмотрим систему следующего вида:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \mu Q_i; \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (\mu \geq 0), \quad (3)$$

которая совпадает с системой (1) при $\mu = 0$.

Пусть $Q_i = Q_i(p_1, \dots, p_m, q_1, \dots, q_m)$ обращается в нуль при

$$p_1 = \dots = p_m = q_1 = \dots = q_m = 0.$$

Тогда система (3) имеет семейство стационарных движений (2). Наша задача будет состоять в исследовании этого семейства на устойчивость.

Теорема 1. Если функция

$$U = \sum_{i=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_i} Q_i$$

является неположительной, то семейство (2) системы (3) устойчиво. Если же U – отрицательно определенная относительно переменных p_j, q_j ($j = 1, \dots, m$), то семейство (2) системы (3) асимптотически устойчиво.

Доказательство. Продифференцировав функцию H , в силу системы (3) убеждаемся, что она удовлетворяет условиям теоремы Ляпунова об устойчивости в первом случае и об асимптотической устойчивости – во втором [2].

По теореме о канонической структуре векторного силового поля функции Q_i могут быть представлены в следующем виде [3]:

$$Q_i = \frac{\partial Q}{\partial \dot{q}_i} + R_i,$$

где R_i – гироскопические силы, т. е. $\sum_{i=1}^n R_i \dot{q}_i = 0$.

Будем считать, что функции Q_i могут быть разложены в ряды по степеням величин $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$ так, что

$$Q = \sum V^{(k)}(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m).$$

Здесь $V^{(k)}$ представляют собой однородные формы степени k относительно величин $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$.

Теорема 1 доказана.

Теорема 2. Если при сделанных выше предположениях относительно функции H функция $V^{(2)}$ является отрицательно определенной относительно величин $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$ равномерно относительно $p_1, \dots, p_n, \dot{q}_{m+1}, \dots, \dot{q}_n$, то семейство (2) системы (3) асимптотически устойчиво.

Доказательство. Покажем, что

$$\Sigma_t = \sum_{j=1}^m |p_j(t, p^0, q^0)| + |q_j(t, p^0, q^0)| \rightarrow 0$$

при $t \rightarrow \infty$. Другими словами, по любому $\varepsilon > 0$ можно указать $T(\varepsilon) > 0$ такое, что $\Sigma_t < \varepsilon$ при $t > T(\varepsilon)$. Отметим, что, зафиксировав ε , мы можем найти $\lambda = \inf_{\Sigma_t = \varepsilon} M$. Тогда по непрерывности H существует $\delta(\varepsilon)$ такое, что $H < \lambda$ при $\Sigma_{t_0} < \delta$.

Возможны два случая.

1. Существует T такое, что $\Sigma_r < \delta$ при $\Sigma_{t_0 r} < \delta$ и, следовательно, $\Sigma_t < \varepsilon \forall t > T$, поскольку H – невозрастающая.

2. Не существует такого T , т. е. $\forall t \geq t_0$ всегда будет $\Sigma_t > \delta$. В этом случае заметим, что по условию теоремы функция

$$\frac{dH}{dt} = \mu \sum_{i=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial Q}{\partial \dot{q}_i}$$

удовлетворяет в окрестности начала координат неравенству

$$\frac{\partial H}{\partial t} \leq -\alpha (\alpha > 0),$$

интегрируя которое, получаем:

$$H \leq -\alpha(t - t_0) + H_0. \quad (4)$$

Так как $\Sigma_t > \delta$ и H – положительно определенная, то $H(p(t), q(t)) \geq \beta > 0$. Правая же часть неравенства (4) при $t \rightarrow \infty$ стремится к $-\infty$. Это противоречие и показывает, что случай 2 невозможен, т. е. имеет место случай 1, соответствующий тому, что $\Sigma_t \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$.

Теорема 2 доказана.

Рассмотрим теперь более общий случай, когда семейство стационарных решений (4) системы (1), в которую переходит система (3) при $\mu = 0$, не является устойчивым.

Укажем условия, при которых силовая функция Q будет обеспечивать требуемое каче-



ство движения системы (3) в окрестности семейства (2). Параметр μ в этой постановке считаем равным единице.

Перепишем систему (3) в виде системы уравнений Лагранжа второго рода:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial T}{\partial q_i} = \tilde{Q}_i, \quad \tilde{Q}_i = -\frac{\partial \Pi}{\partial q_i} + Q_i; \quad (5)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0, \quad \alpha, \quad i = m+1, \dots, n,$$

где $L = T - \Pi$ – функция Лагранжа. Кинетическая энергия такой системы может быть представлена в виде

$$T = T^{(2)} + T^{(1)} + T^{(0)},$$

где

$$T^{(2)} = \frac{1}{2} (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)^* A (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$$

есть положительно определенная квадратичная форма значений $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n$; $T^{(1)}$ – линейная форма этих величин; $T^{(1)} = \sum_{i=1}^n a_i \dot{q}_i$, $T^{(0)} = T^{(0)}(q_1, \dots, q_n)$ – свободный член, не зависящий от обобщенных скоростей $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n$.

Предположим, что обобщенные силы $\tilde{Q}_1, \dots, \tilde{Q}_n$ определяются по формулам

$$\tilde{Q}_i = \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \dot{q}_i} + R_i,$$

где $\tilde{Q} = \sum_{k=1}^n V^{(k)}$, а $V^{(k)}$ – однородные формы степени k относительно $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$, причем

$$V^{(1)} = -\sum \left(\frac{\partial}{\partial q_j} (\Pi + T^{(0)}) \dot{q}_j \right),$$

$$V^{(2)} = V^{(1)} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} T^{(2)}.$$

Функция Π разлагается в ряд $\Pi = \sum_{m=1}^n \Pi^{(m)}$, сходящийся в окрестности множества $q_1 = \dots = q_m = 0$.

Отметим, что устойчивость многообразия (2) системы (1) эквивалентна устойчивости многообразия

$$q_1 = q_2 = \dots = q_m = \dot{q}_1 = \dot{q}_2 = \dots = \dot{q}_m = 0, \quad (6)$$

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H_0}{\partial p_\alpha}, \quad q_\alpha = \frac{\partial H_0}{\partial p_\alpha} (t - t_0) + q_\alpha^0, \quad \alpha = m+1, \dots, n,$$

системы

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial T}{\partial q_i} = -\frac{\partial \Pi}{\partial q_i}.$$

Теорема 3. Пусть выполнены следующие условия:

1) квадратичная форма $T^{(2)}$ значений $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$ имеет положительно определенную матрицу A , равномерно ограниченную в окрестности (6);

2) квадратичная форма $V^{(2)}$ отрицательно определена по отношению к $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$ равномерно по $\dot{q}_{m+1}, \dots, \dot{q}_n$;

3) квадратичная форма $\Pi^{(r)}$ положительно определена по отношению к величинам $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_m$.

Тогда многообразие (6) является устойчивым, причем для движений, начинающихся в некоторой окрестности (6), справедливо выражение

$$\sum_{i=1}^m |\dot{q}_i| \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0.$$

Доказательство. Подставим в систему (5) T и \tilde{Q} , умножим на \dot{q}_i и просуммируем по i от 1 до n . Получим

$$\sum_{i=1}^n \dot{q}_i \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(2)}}{\partial \dot{q}_i} + \frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial T^{(0)}}{\partial q_i} \right) = \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial \dot{q}_i}.$$

Отметим, что

$$\sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial T^{(2)}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T^{(2)}}{\partial t} + \frac{\partial T^{(2)}}{\partial t}.$$

Отсюда имеем равенство

$$\frac{dT^{(2)}}{dt} + \frac{\partial T^{(2)}}{\partial T} + \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \dot{q}_i - \sum \frac{\dot{q}_i \partial T^{(0)}}{\partial q_i} =$$

$$= \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} (\Pi + T^{(0)}) + \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \dot{q}_i + \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial V^{(2)}}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial T^{(2)}}{\partial t}. \quad (7)$$

Следовательно,

$$\frac{d}{dt}(T^{(2)} + \Pi) = \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial V^{(2)}}{\partial \dot{q}_i}. \quad (8)$$

Зафиксируем $\varepsilon > 0$ и найдем

$$\lambda = \inf_{\sum_{j=1}^m |\dot{q}_j| + |q_j| = 0} T^{(2)} + \Pi.$$

По свойствам функций $T^{(2)}$ и Π существует $\delta > 0$ такое, что в окрестности $\dot{q}_j = q_j = 0$ выполняется неравенство

$$T^{(2)} + \Pi < \lambda \text{ при } \sum_{j=1}^m |\dot{q}_j| + |q_j| < \delta.$$

Из устойчивости многообразия (6) следует, что $T^{(2)} + \Pi$ – невозрастающая функция. Тогда

$$T^{(2)} + \Pi \leq T_0^{(2)} + \Pi_0 < \lambda \text{ при } \sum_{j=1}^m |\dot{q}_j^0| + |q_j^0| < \delta,$$

и, следовательно, $\sum_{j=1}^m |\dot{q}_j| < \varepsilon \forall t \geq T$, т. е.

$$\sum_{j=1}^m |\dot{q}_j| \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Но не существует такого T , т. е. $\forall t \geq t_0$ справедливо $\sum_{j=1}^m |q_j| \geq \delta > 0$, следовательно, $V^{(2)} \leq -\alpha$ ($\alpha > 0$). Из выражения (8) имеем:

$$\frac{d}{dt}(T^{(2)} + \Pi) \leq -\alpha' \quad (\alpha' > 0).$$

Интегрируя, получаем

$$T^{(2)} + \Pi \leq -\alpha'(t - t_0) + T_0^{(2)} + \Pi_0.$$

Правая часть последнего неравенства стремится к $-\infty$ при $t \rightarrow \infty$. Левая же часть должна оставаться положительной по условиям теоремы. Полученное противоречие показывает, что возможен лишь случай 1 (см. теорему 2), т. е. $\sum |\dot{q}_j| \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$.

Теорема 3 доказана.

Замечание. Под устойчивостью многообразия (6) мы понимали его устойчивость по отношению лишь к фазовым переменным q_1, q_2, \dots, q_m , но если понимать устойчивость (6) несколько шире, т. е. и по отношению к $\dot{q}_{m+1}, \dots, \dot{q}_n$, то справедливо следующее утверждение [1].

Теорема 4. Если $T^{(2)}$ есть квадратичная форма значений q_1, \dots, q_m $\left(q_\alpha - \frac{\partial H_0}{\partial p_\alpha} \right)$ с положительно определенной, равномерно ограниченной в окрестности (6) матрицей A и если выполнены условия 2) и 3) предыдущей теоремы, то семейство (6) устойчиво по отношению к фазовым переменным $q_1, q_2, \dots, q_m, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n$.

Рассмотрим теперь управляемую механическую голономную систему, описываемую системой уравнений Лагранжа 1-го рода [2]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial T}{\partial q_j} &= \\ &= Q_j(q_1, \dots, q_k, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k, t) + \sum_{i=1}^k B_{ji} u_i, \end{aligned} \quad (9)$$

где $j = 1, \dots, k, q_1, \dots, q_k$ – обобщенные координаты системы; $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ – обобщенные скорости; T – кинетическая энергия; $(k \times k)$ -матрица $B = \{B_{ij}\}$ является неособенной; $U = (u_1, \dots, u_k)^*$ представляет собой вектор управлений [3].

Поставим задачу о построении управлений U таким образом, чтобы система (9) имела асимптотически устойчивое интегральное многообразие

$$\dot{q} = \eta(q, t). \quad (10)$$

Здесь и далее мы будем обозначать как q – вектор обобщенных координат $(q_1, \dots, q_k)^*$, а \dot{q} – вектор обобщенных скоростей $(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k)^*$. Вектор обобщенных сил $(Q_1, \dots, Q_k)^*$ обозначим Q .

Кинетическая энергия T системы (9) определяется соотношением

$$r = \sum_{i=1}^n \frac{m_i r_i^2}{2},$$

где n – число точек системы, m_i – масса i -й точки, r_i – радиус-вектор этой точки в правой декартовой системе координат O_{xyz} .

Мы будем считать, что в общем случае система подчинена реономным связям $r_i = r_i(q, t)$. Тогда кинетическая энергия системы представима в виде

$$r = r_2 + r_1 + r_0,$$



где $r_2 = \dot{q}^* A(q, t) \dot{q}$ – квадратичная форма обобщенных скоростей $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$, $r_1 = \sum_{i=1}^k a_i(q, t) \dot{q}_i$ – линейная форма обобщенных скоростей, а r_0 представляет собой члены, не зависящие от величин $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$. Заметим, что если связи являются стационарными, т. е. $r_i = r_i(q)$, то $T = T_2$.

Перепишем уравнение (9) в форме Гамильтона:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} + Q_j + \sum_{i=1}^k B_{ji} u_i, \quad j = 1, \dots, k, \quad (11)$$

где величины p_1, \dots, p_k называемые обобщенными импульсами, определяются соотношениями

$$p_j = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j}, \quad (12)$$

а функция H определяется соотношением [4]:

$$H = \sum_{i=1}^k p_i \dot{q}_i - T.$$

В соотношении (11) заменим обобщенные скорости $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$ на величины $f_j(p, q, t)$, получаемые из уравнений (12) при решении их относительно величин $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_k$. Таким образом, мы получим функцию H в виде $H = H(t, q, p)$. Заметим, что, задавая многообразие (10), мы тем самым задаем импульсы p_j для системы (12):

$$p_j = \pi_j(t, q). \quad (13)$$

Таким образом, задача сводится к построению управлений, обеспечивающих движение с заданным импульсом.

При условии существования многообразия (13) у системы (11) выполнено соотношение

$$\frac{\partial \pi_j}{\partial t} + \sum_{i=1}^k \frac{\partial \pi_j}{\partial q_i} \eta_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} + Q_j + \sum_{i=1}^k B_{ji} u_i.$$

Положим

$$U_0 = B^{-1} \left(\frac{\partial H(t, q, \pi)}{\partial q} - Q + \frac{\partial \pi}{\partial t} + \frac{\partial \pi}{\partial q} \eta \right); \quad (14)$$

$$U = U_0 - k(p - \pi). \quad (15)$$

Параметр k будем называть коэффициентом усиления. Подставим уравнение (15) в систему (11), получим следующие соотношения [5]:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = \dot{\pi} - k(p - \pi). \quad (16)$$

Система (13) имеет при $k > 0$ устойчивое интегральное многообразие (13), определяемое соотношениями (10). Для доказательства этого факта достаточно продифференцировать положительно определенную функцию Ляпунова $V = (p - \pi)^2$ в силу системы (16). Мы получим, что производная этой функции является отрицательной величиной при $k > 0$. Тем самым и доказывается асимптотическая устойчивость системы (16) по отношению к величине $p - \pi$.

В данной статье исследована устойчивость консервативных систем с циклическими координатами. Показано, что задача о построении управлений, обеспечивающих существование заданного многообразия, сводится к построению управлений, обеспечивающих движение с заданным импульсом. Рассмотрены режимы стабилизации системы за конечное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Зубов, А.В.** Динамическая безопасность управляемых систем [Текст] / А.В. Зубов, Н.В. Зубов. – СПб.: Изд-во НИИ Химии СПбГУ, 2009. – 172 с.

2. **Зубов, А.В.** Математические методы качественного анализа систем управления и устойчивость расчетных движений [Текст] / А.В. Зубов, С.В. Зубов. – СПб.: АОТ «Мобильность-плюс», 2012. – 357 с.

3. **Зубов, А.В.** Математические методы качествен-

ного анализа систем управления и устойчивость расчетных движений [Текст] / А.В. Зубов, С.В. Зубов. – СПб.: ВВМ, 2011. – 323 с.

4. **Зубов, С.В.** Анализ равновесных движений и расчетная устойчивость [Текст] / С.В. Зубов, М.В. Стрекопытова. – СПб.: СПбГУ, 2010. – 446 с.

5. **Зубов, И.В.** Анализ управляемых систем и равновесных движений [Текст] / И.В. Зубов, Н.В. Зубов, М.В. Стрекопытова. – СПб.: ВВМ, 2012. – 322 с.

БЛИСТАНОВА Лидия Дмитриевна — доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского государственного университета факультета Прикладной математики — Процессов управления.
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 35

КАЛЯДА Леонид Герасимович — аспирант Санкт-Петербургского государственного университета факультета Прикладной математики — Процессов управления.
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 35

НЕЧАЕВ Алексей Иванович — аспирант Санкт-Петербургского государственного университета факультета Прикладной математики — Процессов управления.
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 35

СТРЕКОПЫТОВА Мария Владимировна — кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского государственного университета факультета Прикладной математики — Процессов управления.
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 35.
ddemidova@mail.ru

УЖЕГОВ Николай Григорьевич — аспирант Санкт-Петербургского государственного университета факультета Прикладной математики — Процессов управления.
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 35.

УДК 539.213: 669.017

Р.А. Филиппьев, С.В. Коновалов, В.Е. Громов

ВЛИЯНИЕ КОНТАКТНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА МИКРОТВЕРДОСТЬ МЕТАЛЛОВ

R.A. Filipiev, S.V. Konovalov, V.E. Gromov

Siberian State Industrial University,
42 Kirova St., Novokznetsk, 654007, Russia

INFLUENCE OF CONTACT EFFECTS ON MICROHARDNESS OF METALS

Экспериментально исследовано влияние контактных воздействий на микротвердость технически чистых железа, вольфрама и титана. Сравнивается характер влияния присоединяемого циркония и меди на микротвердость исследуемых металлов. Установлена скачкообразная зависимость изменения микротвердости при влиянии присоединяемого металла.

МИКРОТВЕРДОСТЬ. КОНТАКТНЫЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ. ВОЛЬФРАМ. ТИТАН. ПОСТОЯННАЯ ХОЛЛА. РАБОТА ВЫХОДА.

The influence of contact effects on microhardness of technically pure iron, tungsten and titanium is experimentally investigated. Nature of influence of attached zirconium and copper on microhardness of studied metals is compared. Spasmodic dependence of change of microhardness is established at influence of attached metal.

MICROHARDNESS. CONTACT EFFECTS. TUNGSTEN. TITANIUM. HALL CONSTANT. EXIT WORK.

Известно явление облегчения деформации металлов за счет электрического заряжения поверхности при возникновении двойного электрического слоя, приводящего к снижению удельной поверхностной энергии [1]. С этим явлением часто связывают результат воздействия на процессы трения, изнашивания, металлообработки и т. п. Вместе с тем микроскопический механизм разупрочнения изучен слабо. Известно, что в его основе лежит облегчение выхода скользящих дислокаций на поверхность, обусловленное снижением поверхностного потенциального барьера. Возникновение двойного электриче-

ского слоя является результатом взаимодействия соприкасающихся фаз благодаря избыточной поверхностной энергии [1, 2].

Ранее в наших работах [3, 4] было показано, что изменение плотности поверхностной энергии, вызванное электрическим потенциалом (до 5 В), существенно сказывается на таких характеристиках металла, как микротвердость. Изменение микротвердости алюминия и меди при воздействии электрического потенциала приводит к изменению скорости ползучести и релаксации механических напряжений [3, 5, 6]. Отметим, что изучение электрических эффек-

тов, вызванных пластической деформацией, позволяет лучше понять природу упрочнения, усталости и ползучести металлов, позволяет оценить энергию возникновения и движения вакансий.

Цель настоящей работы, продолжающей исследования [3, 4], – установление влияния различных масс металлов, подключаемых к образцам, на микротвердость.

Материал для исследования и методики испытаний

Настоящие исследования выполнены на образцах технического чистого вольфрама, чистого железа марки 0,08ЖР и технического чистого титана марки ВТ-1. Для подключения к данным образцам использовали пластины циркония и меди, массы которых варьировались до 40 и 25 г, соответственно. Отметим, что выбор как самих металлов, так и их масс связан с наибольшей выраженностью эффекта от их подключений, как показали результаты наших прежних исследований [3 – 5].

Измерение микротвердости осуществлялось на микротвердомере HVS-1000. Величина нагрузки на индентор составляла 1,5 Н для титана и вольфрама и 1 Н для железа. Температура при проведении испытаний составляла 300 К. Как и в работах [3, 4], на исследуемые образцы при измерениях мы воздействовали электрическим потенциалом, возникающим вследствие контактной разности потенциалов при присоединении металла с работой выхода электронов, отличной от исследуемого (рис. 1).

Электрический контакт с образцом во всех экспериментах осуществлялся медным проводом диаметром 1 мм. Во время измерений исследуемый образец и подключаемый металл изолировались от микротвердомера и земли.

Подобная постановка задачи интересна для нахождения величины критической минимальной массы подсоединяемого металла, приводящей к существенному изменению микротвердости. Наблюдаемый эффект, состоящий в изменении микротвердости при указанном выше воздействии, оценивался безразмерным отношением

$$Q = \frac{\overline{HV}_E - \overline{HV}_0}{\overline{HV}_0},$$

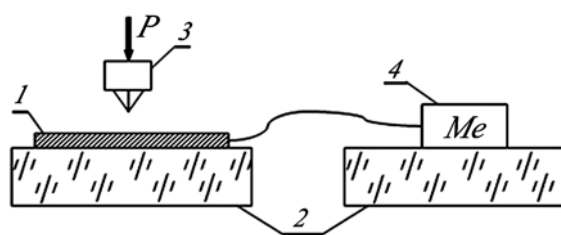


Рис. 1. Схема подключения разнородных металлов (Me) к образцу, исследуемому на микротвердость: 1 – образец, 2 – изоляционный слой, 3 – индентор, 4 – подключаемый металл (P – нагрузка на индентор)

где \overline{HV}_E , \overline{HV}_0 – средние значения микротвердости исследуемого металла при заданном электрическом воздействии на него и без этого воздействия, соответственно.

Микротвердость определялась как среднее значение по 30 измерениям. Для обработки данных использовались стандартные методы математической статистики [7].

Результаты экспериментов и их обсуждение

Результаты измерений микротвердости различных металлов в зависимости от массы циркония и меди приведены на рис. 2. Видно, что влияние массы подключаемого металла имеет сложный и неоднозначный характер, однако во всех случаях наблюдается тенденция к стабилизации значений микротвердости.

Как и в работе [4], максимальный эффект изменения микротвердости наблюдается при значениях масс подключаемых металлов, не превышающих 5 г. Это указывает на существенное влияние именно малых подключаемых масс. В таблице представлены результаты максимального относительного изменения значений микротвердости металлов в результате присоединения малых масс циркония и меди.

Обращают на себя внимание «двойные» максимумы при подключении циркония (см. кривые 1 на рис. 2, а, в) и меди (кривая 2 на рис. 2, б). Проведенное ранее микроиндентирование алюминия циркония, меди, кремнистого железа при подключении олова, меди, циркония, алюминия (в разных вариациях) [3, 4] показывало только один экстремум.

Из рис. 2, а, в видно, что подключение к железу циркониевых пластин, а к титану мед-

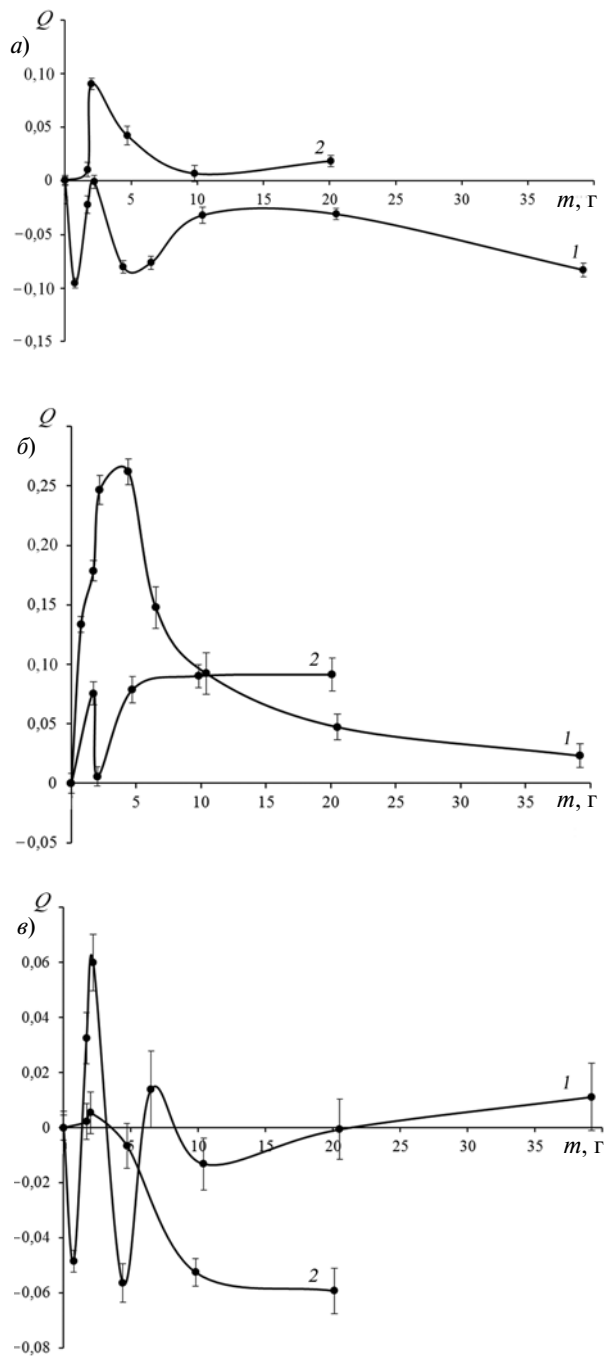


Рис. 2. Зависимости относительного изменения микротвердости железа (а), вольфрама (б), титана (в) от массы присоединенных циркония (1) и меди (2)

ных приводит к уменьшению микротвердости. Исследования, проведенные в данной работе и ранее в работах [3, 4] на других металлах, показывали только увеличение микротвердости. По-видимому, физическая природа данных воз-

действий существенно различна и зависит от выбора металла.

Изменение микротвердости образцов металлов при возникновении контактной разности потенциалов

Металл образца	Присоединяемый металл (масса пластины, мг)	Q при максимальном эффекте
W	Zr (4,4)	0,262
	Cu (20,1)	0,091
Fe	Cu (2)	0,090
Ti	Zr (2,2)	0,059
	Cu (2)	0,005

Объяснение полученных в работе зависимостей может основываться на фактах различия как знаков, так и значений постоянной Холла, а также значений работы выхода электронов для основного и присоединяемого металлов. Известно, что знак постоянной Холла (знак заряда носителей) свидетельствует о преобладании электронной ($R < 0$) или дырочной ($R > 0$) проводимости [8]. В свою очередь разность работ выхода, отнесенная к заряду электрона, указывает на контактную разность потенциалов, возникающую при контакте металлов.

Роль массы присоединяемого металла, по-видимому, связана с тем, что увеличение этой массы приводит к соответствующему увеличению площади поверхности этого металла и, соответственно, к изменению количества зарядов на его поверхности. Однако пока остается неясной немонотонность кривых, приведенных на рис. 2.

При контакте двух металлов с различными значениями работы выхода электроны от металла с меньшим значением переходят к металлу с большим, и при достижении равновесия первый металл заряжается более положительно по отношению ко второму. Поэтому, чем больше разница значений работы выхода между испытуемым образцом и воздействующим на него, тем сильнее должно быть влияние на микротвердость.

Возникающая при контакте разнородных металлов контактная разность потенциалов [8] вызывает перезарядку имеющихся на их поверхности двойных электрических слоев. Это, в свою очередь, приводит к изменению плотности поверхностной энергии исследуемого материала, что, естественно, вызывает соответствующее изменение механических свойств, в частности микротвердости.

Влияние заряженного поверхностного слоя на микротвердость включает, по-видимому, два эффекта. Первый обусловлен изменением размеров образца вследствие наличия заряда на поверхности (электрострикционный эффект), второй – перемещением дислокаций и других дефектов при изменении характера заряженного поверхностного слоя. Второй эффект, связанный с движением дефектов, предполагает присутствие на них определенного заряда [9].

Поскольку двойной слой не может создавать макроскопические поля вне металла, эти поля должны возникать благодаря наличию макроскопического распределения суммарного электрического заряда на поверхностях. Величина заряда, перераспределенного между поверхностями и ответственного за создание таких внешних полей, чрезвычайно мала по сравнению с величиной заряда, перераспределенного между соседними поверхностными ячейками и ответственного за создание двойного слоя. Соответственно электрическое поле внутри двойного слоя достигает огромных значений по сравнению с величиной внешнего электрического поля, создаваемого суммарным поверхностным зарядом. После установления равновесия электроны в каждом из металлов должны иметь общий химический потенциал. Это достигается путем мгновенного перетока заряда с поверхности одного металла на поверхность другого. Поверхностный заряд на каждом металле создает внутри каждого дополнительный потенциал, который равномерно «поднимает» или «понижает» все глубинные уровни вместе с химическим потенциалом (поэтому объемные свойства внутри металла не меняются).

Поскольку произошла передача заряда, два металла уже не будут иметь равные электростатические потенциалы. Разность потенциалов между любыми двумя гранями двух металлов

можно выразить через их работы выхода, воспользовавшись теми же соображениями, как и при нахождении разности потенциалов между двумя неэквивалентными гранями в образце из одного металла.

По-видимому, в нашем случае при контакте разнородных металлов происходят изменения в электронной подсистеме, оказывающие влияние на движение дислокаций. Возможно образование дефектов, блокирующих перемещение дислокаций. Как известно, поверхностная энергия влияет на механические свойства металлов, и в частности, на величину модуля сдвига [10], энергию взаимодействия дислокаций и энергию дефектов упаковки. В используемой схеме опыта должно происходить изменение поверхностной энергии контактирующих металлов, поскольку вследствие контакта и перетекания электронов по проводнику на поверхности металлов образуются электронные или дырочные дефекты. Теоретическое рассмотрение процесса адсорбции электронов при нарушении контакта металлов позволяет связать наблюдаемые явления с выделением энергии за счет релаксации электронов при установлении термодинамического равновесия [11]. Выделение энергии может приводить к изменению интенсивности перемещения дислокаций при микроиндентировании. Ранее в работе [12] была исследована перестройка дислокационных субструктур при изменении электрического состояния образца (подключение малых потенциалов) в процессе релаксации напряжений. Было показано, что происходит изменение объемных долей полосовой и фрагментированной субструктур при потенциалах 0,5 и 1,0 В.

Однако для более корректного ответа на вопрос о роли массы подключаемых металлов в изменении микротвердости необходимы дополнительные точные прецизионные исследования.

Авторы выражают благодарность докторам физико-математических наук, профессорам Л.Б. Зуеву и В.И. Данилову за плодотворное обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (Соглашения № 14.В37.21.1166 и 14.В37.21.0391).



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кунин, Л.Л.** Поверхностные явления в металлах [Текст] / Л.Л. Кунин. – М.: Металлургиздат, 1955. – 304 с.
2. **Баранов, Ю.В.** Эффект А.Ф. Иоффе на металлах [Текст] / Ю.В. Баранов. – М.: МГИУ, 2005. – 140 с.
3. **Зуев, Л.Б.** О вариациях механических характеристик металлов при действии электрического потенциала / Л.Б. Зуев, В.И. Данилов, Р.А. Филиппьев [и др.] // Металлы. – 2010. – № 4. – С. 39 – 45.
4. **Зуев, Л.Б.** О влиянии контактной разности потенциалов и электрического потенциала на микротвердость металлов / Л.Б. Зуев, В.И. Данилов, С.В. Коновалов [и др.] // ФТТ. – 2009. – Т. 51. – Вып. 6. – С. 1077 – 1080.
5. **Коновалов, С.В.** О влиянии электрического потенциала на скорость ползучести алюминия / С.В. Коновалов, В.И. Данилов, Л.Б. Зуев, Р.А. Филиппьев [и др.] // ФТТ. – 2007. – Т. 49. – Вып. 8. – С. 1389 – 1391.
6. **Невский, С.А.** Изменение параметров релаксации напряжений алюминия А85 под влиянием электрического потенциала при различных температурах [Текст] / С.А. Невский, С.В. Коновалов, В.Е. Громов // Вестник ЮУрГУ. Сер. Математика. Механика. Физика. – 2010. – Вып. 3. – № 30 (206). – С. 74 – 78.
7. **Митропольский, А.К.** Техника статистических вычислений [Текст] / А.К. Митропольский. – М.: Госизд-во физ.-мат. лит.-ры, 1961. – 479 с.
8. **Ашкрофт, Н.** Физика твердого тела [Текст]: В 2 тт. Т. 1. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. – 399 с.
9. **Клыпин, А.А.** О пластической деформации металлов при наличии электрического воздействия [Текст] / А.А. Клыпин // Проблемы прочности. – 1975. – № 7. – С. 20 – 25.
10. **Клыпин, А.А.** Влияние контакта разнородных металлов на ползучесть меди и алюминия [Текст] / А.А. Клыпин, А.А. Лучина // Известия АН СССР. – 1985. – № 2 (отдельный оттиск). – С. 138 – 146.
11. **Клыпин, А.А.** Исследование ползучести при нарушении контакта между металлами [Текст] / А.А. Клыпин, А.А. Лучина // Техническая физика. – 1985. – № 2. – С. 370 – 373.
12. **Иванов, Ю.Ф.** Влияние электрического потенциала на процесс перестройки дислокационных субструктур алюминия при релаксации напряжений [Текст] / Ю.Ф. Иванов, С.А. Невский, С.В. Коновалов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – № 1(116). – 2011. – С. 78 – 81.

ФИЛИППЬЕВ Роман Анатольевич – кандидат технических наук, доцент кафедры физики Сибирского государственного индустриального университета.

654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
Filipiev@ilve.ru

КОНОВАЛОВ Сергей Валерьевич – кандидат технических наук, доцент кафедры физики Сибирского государственного индустриального университета.

654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
konovalov@physics.sibsiu.ru

ГРОМОВ Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики Сибирского государственного индустриального университета.

654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
gromov@physics.sibsiu.ru

УДК 532.59:532.517

А.И. Храбрый, Е.М. Смирнов, Д.К. Зайцев

ВЛИЯНИЕ МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ОБТЕКАНИЯ ПРЕПЯТСТВИЯ ПОТОКОМ ВОДЫ ПОСЛЕ ОБРУШЕНИЯ ДАМБЫ

A.I. Khrabry, E.M. Smirnov, D.K. Zaytsev

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

INFLUENCE OF TURBULENCE MODEL ON THE RESULTS OF SIMULATION OF DAMBREAK FLOW ABOUT AN OBSTACLE

Представлены результаты численного моделирования обтекания препятствия в форме параллелепипеда потоком, возникшим в результате обрушения дамбы. Показано, что расчеты без использования модели турбулентности переоценивают интенсивность волнообразования. Модель турбулентности k - ϵ обеспечивает более высокий уровень турбулентной вязкости, чем модель SST, и позволяет получить относительно близкое к эксперименту решение.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. СВОБОДНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ. ОБРУШЕНИЕ ДАМБЫ. ОБТЕКАНИЕ ПРЕПЯТСТВИЯ. ТУРБУЛЕНТНОСТЬ.

The results of numerical simulation of a dambreak flow in the presence of a rectangular obstacle are presented. It is shown that computations without turbulence modeling overestimate the intensity of the wave formation. The k - ϵ turbulence model yields higher turbulent viscosity, than SST model, and provides reasonable agreement with experimental data.

NUMERICAL SIMULATION. FREE SURFACE. DAMBREAK FLOW. OBSTACLE. TURBULENCE

Течения несжимаемой жидкости со свободными поверхностями широко распространены в природе и технике. В последнее время они все более активно исследуются методами вычислительной гидродинамики. Большое внимание, в частности, уделяется изучению течения, возникающего в результате обрушения дамбы. В литературе представлен ряд работ, посвященных численному моделированию течений данного вида в различных условиях: распространение потока в канале постоянного [1] и переменного [2] сечений, натекание потока на вертикальную стенку [3], взаимодействие потока со стоящим на дне канала препятствием в форме клина [4], параллелепипеда [5 – 7] и др. Результаты проведенных расчетов сопоставляются, в той или иной мере, с экспериментальными данными, имеющимися в литературе для соответствующей конфигурации течения.

Вместе с тем, в большинстве публикаций сопоставление с экспериментом проводится без представления сведений, позволяющих оценить качество получаемого численного решения. Вопросам учета эффектов турбулентности в расчетах течений данного вида, равно как и применимости той или иной модели, также не уделяется должного внимания. В то же время есть основания полагать, что учет эффектов турбулентности может оказывать существенное влияние. На это указывает, в частности, обнаруженное в расчетах [8] значительное (свыше 10 %) изменение скорости движения фронта жидкости в зависимости от начальных параметров турбулентности. И это при том, что в статье [8] рассматривался относительно простой случай распространения потока без препятствий; в более сложных течениях степень влияния модели и параметров турбулентности на получаемое решение может оказаться еще



больше.

Настоящая работа посвящена численному моделированию обтекания препятствия в форме параллелепипеда потоком, возникшим в результате обрушения дамбы. Особое внимание уделяется получению решений с пренебрежимо малым влиянием схемных факторов. Результаты расчетов с использованием моделей турбулентности $k-\varepsilon$ [9] и SST [10], а также без учета эффектов турбулентности сравниваются друг с другом и с экспериментальными данными.

Вычислительная методика

Метод VOF. Среди методов, разработанных для решения задач о течении жидкости со свободной поверхностью, наибольшее распространение получил метод VOF (Volume-Of-Fluid) [11], хорошо зарекомендовавший себя как не требовательный к вычислительным ресурсам и способный работать в условиях течений с сильной деформацией свободной поверхности, включая случаи слияния и разделения объемов, занимаемых жидкой и газообразной фазами. Подобное поведение, в частности, имеет место при взаимодействии потока жидкости с плохо обтекаемым препятствием и при опрокидывании потока в результате взаимодействия с вертикальной стенкой.

В данном методе для определения положения межфазной границы, перемещающейся по расчетной сетке, используется распределение специальной «индикаторной» функции C , представляющей собой объемную долю жидкости в ячейках расчетной сетки: при $C = 1$ ячейка заполнена жидкостью, при $C = 0$ ячейка пуста. Положению межфазной границы соответствует изоповерхность $C = 0,5$. Динамика величины C описывается уравнением конвективного переноса:

$$\frac{dC}{dt} \equiv \frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

где u_j – компоненты скорости, x_j – пространственные координаты.

В так называемой одножидкостной формулировке метода VOF, используемой в настоящей работе, уравнения движения и переноса параметров турбулентности для системы жидкость-газ записываются как для единой

среды с переменными материальными свойствами, выражаемыми через объемную долю жидкости C :

$$\rho = C\rho_{\text{ж}} + (1-C)\rho_{\text{г}}; \quad (2)$$

$$\mu = C\mu_{\text{ж}} + (1-C)\mu_{\text{г}}, \quad (3)$$

где ρ – плотность среды, μ – динамическая вязкость среды, индексы «ж» и «г» относятся к жидкости и газу соответственно.

Численная схема. В настоящей работе аппроксимация уравнений проводилась по методу конечных объемов, что позволяет использовать неструктурированные расчетные сетки с ячейками различной геометрии. При таком подходе для определения потоков переносимых величин через грани ячейки необходима интерполяция их значений из центров ячеек. Использование стандартных противопоточных аппроксимаций первого или второго порядка для величины C в уравнении (1) приводит к сильному «размытию» межфазной границы из-за численной диффузии. Для уменьшения данного нежелательного эффекта в литературе предложен ряд специальных, так называемых «сжимающих» численных схем. В представленных ниже расчетах для вычисления величины C на грани ячеек использовалась сжимающая схема M-CICSAM [13]; для аппроксимации производной по времени использовалась схема Кранка – Николсона. Как показано в работе [12], такая комбинация обеспечивает наименее жесткие ограничения по качеству расчетной сетки и числу Куранта (до 0,75).

Ограничение на шаг по времени для уравнений гидродинамики мягче, чем для уравнения (1). С учетом этого обстоятельства при продвижении по физическому времени использовался алгоритм, предусматривающий несколько дробных шагов для решения уравнения (1) на каждом шаге решения уравнений гидродинамики. Число дробных шагов выбирается таким, чтобы число Куранта для уравнения (1) не превышало 0,55.

Для системы несжимаемых несмешиваемых жидкостей уравнение неразрывности может быть записано в форме условия соленидальности поля скорости:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (4)$$

Уравнения переноса импульса и параметров турбулентности можно записать в консервативной форме:

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_i}{\partial x_i} = RHS, \quad (5)$$

где φ – переносимая величина (компонента скорости u_i , или параметр турбулентности), RHS – правая часть уравнения, которая может включать диффузионные слагаемые и источники члены.

Данная форма может использоваться только в условиях согласованности аппроксимаций для плотности среды и объемной доли S на гранях ячеек. Поскольку на границе жидкость-газ плотность терпит разрыв, изменяясь на несколько порядков, малейшая несогласованность аппроксимаций приводит к возникновению больших погрешностей в уравнении (5), что, в частности, может приводить к искажению формы свободной поверхности. В связи с этим была предложена иная форма записи, оказавшаяся менее чувствительной к способу аппроксимации плотности на грань:

$$\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_i}{\partial x_i} - \varphi \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = RHS. \quad (6)$$

Для аппроксимации по времени использовалась схема Кранка – Николсона (7), приводящая к существенно меньшим искажениям свободной поверхности, чем неявная трехслойная схема:

$$\bar{\rho} \frac{\varphi_n - \varphi_{n-1}}{\Delta t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varphi} \tilde{u}_i}{\partial x_i} - \tilde{\varphi} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = RHS(\tilde{\varphi}). \quad (7)$$

Здесь индексы $n - 1$ и n относятся к старому и новому слоям во времени соответственно. Величины $\bar{\rho}$, $\tilde{\varphi}$, \tilde{u}_i относятся к промежуточному слою $t_{n-1/2}$. Значения плотности на этом слое вычисляются как полусумма значений на слоях $n - 1$ и n :

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_{n-1} + \rho_n}{2}.$$

В то же время для вычисления $\tilde{\varphi}$ и \tilde{u}_i подобный метод, как оказалось, не подходит, так как с ним схема становится неустойчивой во времени. Для преодоления неустойчивости в выражения для $\tilde{\varphi}$ и \tilde{u}_i вводились стабилизирующие поправки второго порядка малости:

$$\tilde{\varphi} = \frac{\varphi_n + \varphi_{n-1}}{2} + \Delta \varphi, \quad \Delta \varphi = (\varphi_{n-2} - 2\varphi_{n-1} + \varphi_n)/16$$

и аналогично для \tilde{u}_i .

Постановка задачи

Проводится численное моделирование обтекания препятствия в форме параллелепипеда потоком, возникшим в результате обрушения дамбы. Постановка задачи соответствует эксперименту, проведенному в Морском научно-исследовательском институте Нидерландов (MARIN); результаты измерений приводятся, в частности, в работе [7]. В эксперименте использовался бак в форме параллелепипеда с основанием $3,2 \times 1,0$ м (рис. 1). На дне резервуара, на расстоянии $0,68$ м от правой на рисунке торцевой стенки, располагалось препятствие размерами $0,16 \times 0,16 \times 0,40$ м, на равном расстоянии от боковых стенок. В начальный момент времени вода занимает объем $1,2 \times 0,55 \times 1,0$ м у левой торцевой стенки (в эксперименте воду удерживала перегородка, которая в начальный момент времени резко убиралась). Поток распространяется по баку, взаимодействуя с препятствием, отражается от торцевой стенки (в качестве иллюстрации на рис. 1 приведено расчетное положение свободной поверхности на момент времени $0,64$ с), затем вторично проходит по резервуару и отражается от левой торцевой стенки. Проводились измерения высоты уровня жидкости во времени в точке $H2$, находящейся в плоскости симметрии, на расстоянии 1 м от правой торцевой стенки.

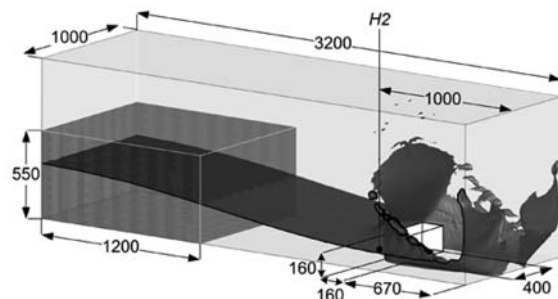


Рис. 1. Схема эксперимента MARIN и расчетное положение свободной поверхности на момент времени $0,64$ с;

$H2$ – точка мониторинга высоты жидкости. Все размеры даны в миллиметрах

Результаты расчетов

Выбор расчетной сетки. Для выбора расчетной сетки и шага по времени предварительно решалась двумерная задача, соответствующая плоскости симметрии исходной задачи (без учета эффектов турбулентности). Расчеты проводились на трех декартовых сетках размерностями 160×50 , 320×100 и 640×200 ячеек (далее по тексту употреблены названия грубая, средняя и мелкая сетки). Шаг по времени в каждом из расчетов был постоянным (0,004, 0,002 и 0,001 с соответственно). При таких шагах типичное число Куранта в каждом из расчетов составляло 0,8 (в отдельные моменты времени локальные значения числа Куранта достигали нескольких единиц). Также для средней сетки был проведен расчет с шагом по времени, уменьшенным в два раза (0,001 с).

Расчетная форма объема, занимаемого жидкостью вблизи препятствия по прошествии 1,2 с, для данных четырех расчетов приведена на рис. 2. Можно видеть, что решения, полученные на средней и мелкой сетках, достаточно близки, а решение на грубой сетке заметно от них отличается. Таким образом, решение, полученное на средней сетке, можно считать сеточно-сошедшимся. Также видно, что результаты очень близки при использовании стандартного и уменьшенного шага по времени. Таким образом, шаг по времени 0,002 с достаточен для проведения расчетов на средней сетке.

Влияние модели турбулентности. Двумерные расчеты. Для оценки характера и степени влияния

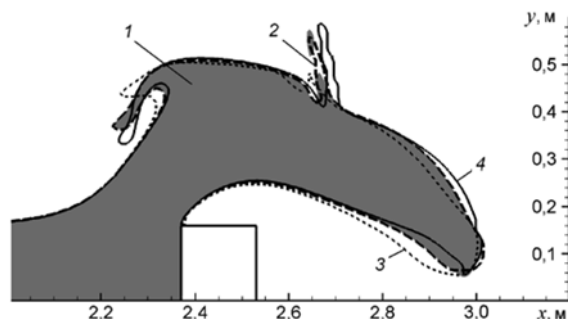


Рис. 2. Положение свободной поверхности на момент времени 1,2 с (2D-расчет): средняя (1, 2) расчетная сетка со стандартным (1) и уменьшенным (2) шагами по времени; грубая (3) и мелкая (4) сетки

модели турбулентности на исследуемое течение были проведены двумерные расчеты с использованием моделей турбулентности $k-\epsilon$ [9] и SST [10], а также без учета турбулентности. Результаты для момента времени 1,44 с приведены на рис. 3,а. Видно, что при расчете, не учитывающем эффектов турбулентности, имеет место интенсивное образование волновых структур на поверхности жидкости. При этом из-за опрокидывания волн высота жидкости в точке $H2$ может определяться неоднозначно: высотой можно считать как верхнее, так и нижнее положение свободной поверхности над точкой $H2$. На рис. 3,б приведены зависимости от времени для «верхней» и «нижней» высот в расчете без учета турбулентности.

Поскольку в действительности гребни опрокидывающихся волн, возникающих при ударе о препятствие или стенку, разлетаются на брызги, нижнее положение свободной поверхности представляется более правильным. В связи с этим на последующих графиках приведены высоты, замеренные по нижнему положению свободной поверхности.

На рис. 4 приведены зависимости высоты жидкости в точке $H2$ от времени в разных вариантах расчетов. Видно, что без учета турбулентности и с моделью SST течение за весь период времени получается значительно более хаотичным, чем при расчете с моделью $k-\epsilon$. Таким образом, модель турбулентности $k-\epsilon$ обеспечивает достаточно высокий уровень турбулентной вязкости для подавления и сглаживания волн, «гуляющих» по расчетной области. Модель SST дает значительно более низкий уровень турбулентной вязкости, чем модель $k-\epsilon$, и решение получается близким к расчету без учета турбулентности.

Влияние модели турбулентности. Трехмерные расчеты. С учетом симметрии задачи расчетная область представляла собой половину экспериментальной. Расчетная сетка имела 320×100 ячеек вдоль плоскости симметрии и 35 ячеек в поперечном направлении.

С учетом выводов из решения двумерных задач расчеты в полной трехмерной постановке, соответствующей эксперименту MARIN, проводились в двух «крайних» постановках: без учета эффектов турбулентности и с использованием модели $k-\epsilon$. Результаты представлены

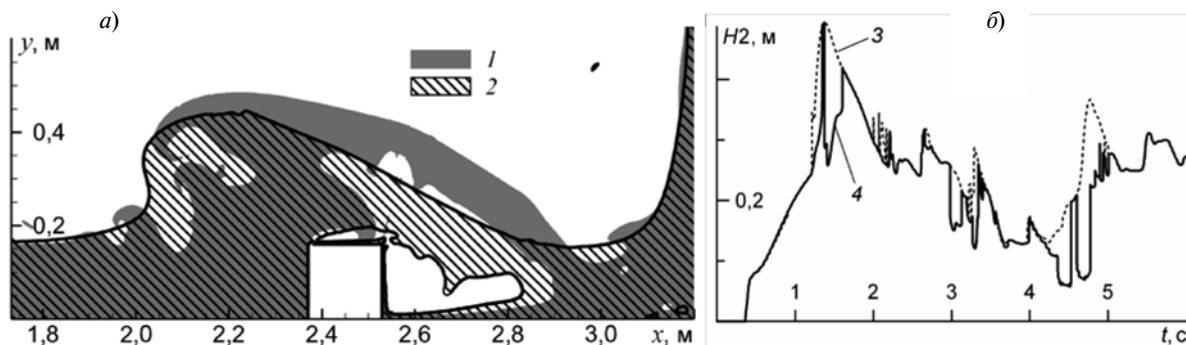


Рис. 3. Результаты двумерных расчетов: *a* – положение жидкости в момент времени 1,44 с без учета (1) и с учетом (2) турбулентности (модель $k-\varepsilon$); *б* – зависимость от времени высоты жидкости в точке $H2$ по верхнему (3) и нижнему (4) положениям свободной поверхности (без учета турбулентности)

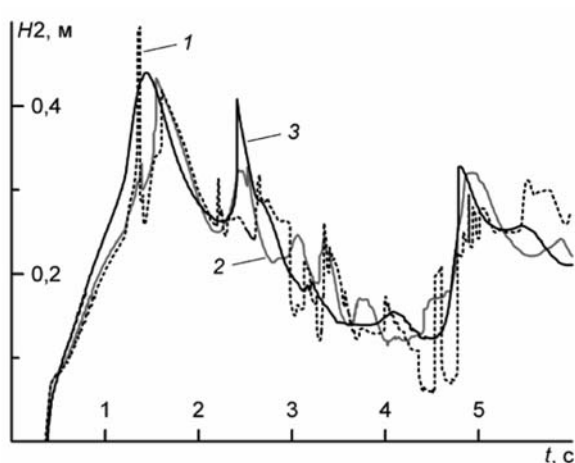


Рис. 4. Зависимости от времени высоты жидкости в точке $H2$, полученные без учета турбулентности (1) и с использованием моделей SST (2) и $k-\varepsilon$ (3)

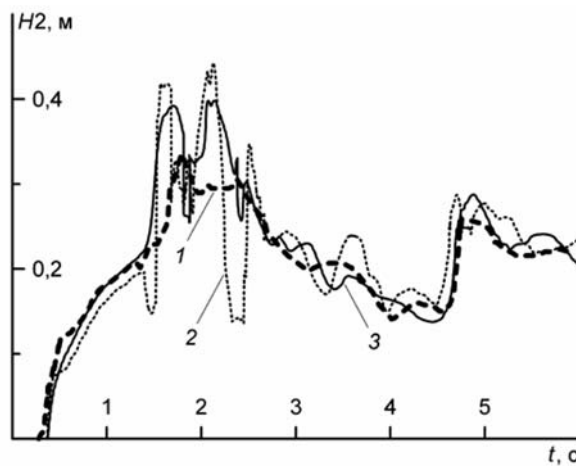


Рис. 5. Зависимости от времени высоты жидкости в точке $H2$, полученные по эксперименту MARIN (1), 3D-расчету без учета турбулентности (2) и с моделью $k-\varepsilon$ (3)

на рис. 5. Видно, что при использовании модели $k-\varepsilon$ достигается существенно лучшее согласование с экспериментальными данными [7]. Исключение из вычислительной модели эффектов турбулентности приводит к чрезмерно интенсивному волнообразованию. Примечательно также, что расчет с моделью $k-\varepsilon$ правильно предсказывает подъем уровня жидкости на начальной стадии взаимодействия потока с препятствием ($t < 1,5$ с) и время прихода волны, отразившейся от левой стенки бака ($t \approx 4,7$ с).

По результатам проведенного исследования можно заключить, что учет турбулентности может оказывать существенное влияние на получаемое решение в сложных течениях жидкости со свободной поверхностью. При этом модель турбулентности $k-\varepsilon$ обеспечивает более высокий уровень турбулентной вязкости, чем модель SST, и позволяет получить решение, относительно близкое к эксперименту. Расчеты без использования модели турбулентности переоценивают интенсивность волнообразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hogg, P.W. An implicit algorithm for capturing sharp fluid interfaces in the volume of fluid advection method [Текст] / P.W. Hogg, X.J. Gu, D.R.Emerson // Technical Report DL-TR-2006-001. – 2006. – 26 p.



2. **Kocaman, S.** The effect of lateral channel contraction on dam break flows: Laboratory experiment [Текст] / S. Kocaman, H. Ozmen-Cagatay // *Journal of Hydrology*. – 2012. – Vol. 432–433. – P. 145–153.
3. **Park, I.R.** A volume-of-fluid method for incompressible free surface flows [Текст] / I.R. Park, K.S. Kim, J. Kim, S.H. Van // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. – 2009. – Vol. 61. – P. 1331–1362.
4. **Biscarini, C.** CFD modelling approach for dam breakflow studies [Текст] / C. Biscarini, S. Di Francesco, P. Manciola // *Hydrology and Earth System Sciences*. – 2010. – Vol. 14. – P. 705–718.
5. **Минаков, А.В.** Численное моделирование течений вязкой несжимаемой жидкости с подвижными границами [Текст]: Дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. Защищена 19.12.08 / Минаков Андрей Викторович. – Красноярск, Сибирский федеральный университет, 2008. – 189 с. – Библиогр.: с. 175–189.
6. **Wemmenhove, R.** Numerical simulation of two-phase flow in offshore environments [Текст]: PhD thesis / Wemmenhove Rik. – University of Groningen, 2008. – 141 p. – Bibliogr.: P. 121–125.
7. **Kleefsman, K.M.T.** A Volume-of-Fluid based simulation method for wave impact problems [Текст] / K.M.T. Kleefsman, G. Fekken, A.E.P. Veldman // *Journal of Computational Physics*. – 2005. – Vol. 206. – P. 363–393.
8. **Park, I.R.** Numerical investigation of the effects of turbulence intensity on dam-break flows [Текст] / I.R. Park, K.S. Kim, J. Kim, S.H. Van // *Ocean Engineering*. – 2012. – Vol. 42. – P. 176–187.
9. **Lauder, B.E.** The numerical computation of turbulent flows [Текст] / B.E. Launder, D.B. Spalding // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 1974. – Vol. 3. – P. 269–289.
10. **Menter, F.R.** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model [Электронный ресурс] / F.R. Menter, R. Langtry, M. Kuntz // *Turbulence, Heat and Mass Transfer IV, Antalya, Turkey, October 12–17, 2003*. – CD-ROM proceedings. – Begell House, Inc., 2003. – 8 p.
11. **Hirt, C.W.** Volume of fluid (VOF). Method for the dynamics of free boundaries [Текст] / C.W. Hirt, B.D. Nichols // *Journal of Computational Physics*. – 1981. – Vol. 39. – P. 201–226.
12. **Khrabry, A.I.** Solving the convective transport equation with several high-resolution finite volume schemes: Test computations [Текст] / A.I. Khrabry, E.M. Smirnov, D.K. Zaytsev // *Computational Fluid Dynamics 2010*. – New-York: Springer, 2011. – P. 535–540.
13. **Wacławczyk, T.** Remarks on prediction of wave drag using VOF method with interface capturing approach [Текст] / T. Wacławczyk, T. Koronowicz // *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. – 2008. – Vol. 8. – P. 5–14.

ХРАБРЫЙ Александр Иосифович – ведущий программист кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
xbr@list.ru

СМИРНОВ Евгений Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета,

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
aero@phmf.spbstu.ru

ЗАЙЦЕВ Дмитрий Кириллович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

УДК 621.746.62

И.Л. Никулин, А.В. Перминов

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДУКЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ
В ПРОВОДЯЩЕМ ЦИЛИНДРЕ, ПОМЕЩЕННОМ
В НЕОДНОРОДНОЕ ПЕРЕМЕННОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ**

I.L. Nikulin, A.V. Perminov

Perm National Research Polytechnic University,
29 Komsomolsky Pr., Perm, 614990, Russia

**SIMULATION OF THE INDUCTION PROCESSES IN THE CONDUCTIVE
CYLINDER PLACED IN THE NON-UNIFORM VARIABLE MAGNETIC FIELD**

В статье предложена математическая модель, описывающая возникновение индукционного магнитного поля, токов и Джоулевой теплоты в проводящем цилиндре, находящемся в неоднородном переменном магнитном поле. Приведены и проанализированы результаты вычислительных экспериментов.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. МАГНИТНОЕ ПОЛЕ. УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ. МАГНИТНОЕ ЧИСЛО РЕЙНОЛЬДСА. ИНДУКЦИОННЫЕ ТОКИ.

In this paper the mathematical model of generating of induction magnetic field, electric currents and Joule heat in conductive cylinder placed in non-uniform variable magnetic field is suggested. The results of the computational experiments are given and analyzed.

MATHEMATICAL SIMULATION. MAGNETIC FIELD. MAGNETIC FIELD DIFFUSION EQUATION. REYNOLDS MAGNETIC NUMBER. INDUCTION CURRENTS.

Технологический прогресс в авиастроении в значительной мере определяется качеством применяемых конструкционных материалов. Так, при индукционной плавке никелевых жаропрочных сплавов возникают проблемы, связанные с распределением примесей в расплаве, которые могут быть решены управлением течениями металла в тигле на этапе подготовки металла к заливке в формы. Поскольку плавление жаропрочного сплава происходит при температурах около 1500 °С в закрытой цилиндрической вакуумной камере, наиболее

доступным средством для изучения основных закономерностей процесса является математическое моделирование.

При индукционной плавке металла в расплаве возникают значительные градиенты температуры, приводящие к интенсивным конвективным движениям. Необходимо учитывать взаимное влияние переменных и неоднородных магнитных полей и конвективных течений, что приводит к постановке сложной магнитно-гидродинамической задачи. Однако особенности технологического процесса таковы, что полная



задача может быть разбита на несколько подзадач, включающих следующие расчеты:

пространственного распределения магнитного поля без учета движения расплава;

индукционных токов и объемного распределения источников теплоты;

конвективных течений с известным распределением внутренних источников теплоты.

Работы в области взаимодействия металлического расплава и переменного электромагнитного поля ведутся весьма широко как в черной [1], так и цветной металлургии [2], и включают как экспериментальные [3], так и теоретические работы [4 – 6]. Известны положительные эффекты влияния магнитного поля на металлургическую продукцию, например сокращение технологического цикла по времени, измельчение зерна при затвердевании, гомогенизация химического состава, выравнивание температурного поля.

В научной литературе встречаются работы, посвященные влиянию переменных магнитных полей на движение расплава в цилиндрической полости, например [4, 5]. В работе [6] рассматривался расплав в цилиндрической жидкой зоне, находящейся во вращающемся магнитном поле. Показано, что для умеренных частот вращения магнитное поле практически однородно в каждый момент времени как вне, так и внутри жидкой зоны.

В большинстве случаев, описанных в литературе, исследуются слабые и однородные по пространству магнитные поля. Изучение влияния сильных и существенно неоднородных полей на состояние расплавленного металла представляет интерес как с теоретической точки зрения, так и со стороны его технологических приложений.

Целью настоящей работы является разработка математической модели, описывающей распределение магнитного поля в электропроводящем расплаве, генерацию индукционных токов и Джоулевой теплоты.

В качестве объекта для моделирования был выбран технологический процесс индукционной плавки, реализованный в цехе точного литья ОАО «Протон – Пермские моторы», г. Пермь.

Геометрические и физические параметры задачи

Принципиальная схема теплового узла печи представлена на рис. 1. Шихта жаропрочного

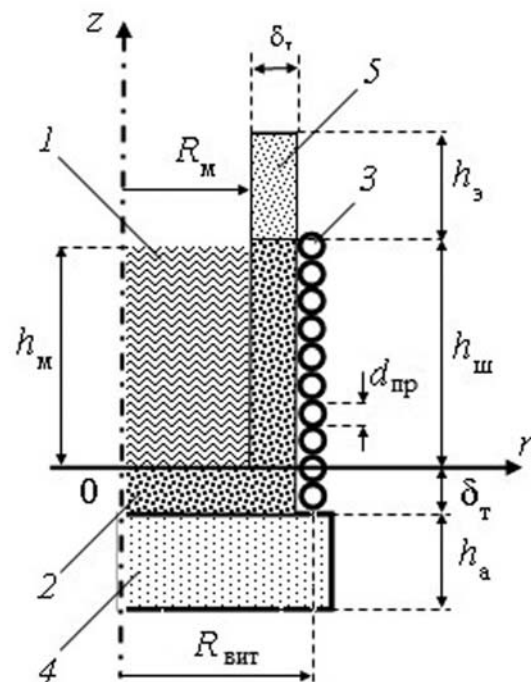


Рис. 1. Эскиз теплового узла индукторной печи (правая половина вертикального сечения): 1 – никелевый расплав, 2 – тигель из смеси электрокорунда и шамота, 3 – медный индуктор, 4 – асбестовое основание, 5 – электрокорундовый стакан

никелевого сплава 1 помещается в тигель 2, спекаемый из смеси шамота и электрокорунда, находящийся внутри водоохлаждаемого медного индуктора 3, установленного на асбестовом основании 4. Заливка металла происходит через носик электрокорундового стакана 5. Индукторная печь находится внутри вакуумной камеры, а процесс электромагнитного переплава происходит в условиях технического вакуума (10^{-3} Па). Верхняя граница расплава считается свободной. Параметры технологического процесса, в том числе физические свойства никелевого расплава [7], использованные для моделирования, приведены в таблице.

Основные уравнения и допущения

Рассматривается заполненная парамагнитным ($\mu \approx 1$) проводящим расплавом вертикальная цилиндрическая область (см. рис. 1), которая находится во внешнем неоднородном переменном магнитном поле

$$\mathbf{H}^{out} = \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) \sin \omega t.$$

Параметры, использованные для моделирования технологического процесса

Параметр	Обозначение	Значение
<i>Геометрические параметры теплового узла печи (см. рис. 1)</i>		
Толщина стенок тигля, мм	δ_T	10
Высота электрокорундового стакана, мм	$h_э$	50 – 100
Высота шамотного тигля, мм	$h_ш$	200 – 300
Высота асбестового основания, мм	h_a	50 – 60
Радиус витка, мм	$R_{\text{вит}}$	150
Диаметр медного проводника, мм	$d_{\text{пр}}$	35
Внутренний радиус тигля, мм	R_m	125
Высота столба расплава металла, мм	h_m	200 – 250
<i>Физические параметры индуктора</i>		
Рабочий ток, А	I	250
Частота переменного тока, кГц	$\omega/2\pi$	1 – 2
Число витков	N	8 – 12
<i>Физические параметры никелевого расплава</i>		
Теплопроводность, Вт/(м·К)	λ	100
Удельная теплоемкость, Дж/(кг·К)	c	655
Плотность, кг/м ³	ρ	7770
Удельная проводимость, МСм/м	σ	13,3
Динамическая вязкость, мПа·с	η	41,0
Коэффициент объемного расширения, К ⁻¹	β	$38,5 \cdot 10^{-6}$

Пространственное распределение внешнего поля будет определено ниже, но на данном этапе оно считается известным. В дальнейшем полагается, что диэлектрические стенки не влияют на магнитное поле, созданное индуктором. Характерные частоты и параметры катушки индуктора приведены в таблице.

Переменное магнитное поле генерирует в расплаве токи, которые являются объемными источниками тепла. За счет неравномерного распределения тепловых источников в жидкости возникает неравновесный (в общем случае) градиент температуры, который порождает конвективное течение в расплаве.

Система уравнений, описывающих состояние расплава, состоит из уравнений Максвелла, закона Ома и уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска, в которых учтена сила Лоренца и Джоулево тепло в уравнении теплопроводности:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = \operatorname{div} \mathbf{H} = 0; \\ \mathbf{J} &= \sigma (\mathbf{E} + \mu_0 [\mathbf{v} \times \mathbf{H}]); \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v} + \mathbf{g} \beta T + \frac{\mu_0}{\rho} \mathbf{J} \times \mathbf{H}; \quad (1) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla T &= a \nabla^2 T + \frac{\mathbf{J}^2}{\rho c \sigma}, \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \end{aligned}$$

где \mathbf{H} – напряженность магнитного поля, t – время, μ – магнитная проницаемость, μ_0 – магнитная постоянная, σ – удельная электрическая проводимость, \mathbf{v} – скорость, T – температура, a – коэффициент температуропроводности, \mathbf{J} – плотность электрического тока, ρ – плотность, c – удельная теплоемкость, p – давление, ν – кинематическая вязкость, \mathbf{g} – ускорение свободного падения, β – коэффициент объемного расширения.



Проанализируем взаимное влияние магнитного поля и конвективных течений в расплаве на основе оценок некоторых слагаемых в системе уравнений (1). Следуя [8], оценим глубину проникновения магнитного поля в расплав. Пусть имеется неподвижный расплав во внешнем поле. Комбинируя первые два уравнения системы (1), получим одно уравнение:

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \frac{1}{\mu \mu_0 \sigma} \nabla^2 \mathbf{H}. \quad (2)$$

Оценивая порядок левой и правой частей уравнения (2), для характерной глубины проникновения магнитного поля в расплав получаем значение $\delta \approx \sqrt{1/\sigma \mu_0 \omega} \approx 3 \cdot 10^{-3}$ м. Для оценки здесь и далее использованы данные, приведенные в таблице. Глубина проникновения магнитного поля в расплав значительно меньше размеров тигля. Это говорит о том, что влияние магнитного поля на движение в расплаве будет существенно только в пределах гартмановских пограничных слоев, примыкающих к границам полости [9].

Для оценки влияния конвекции на распределение магнитного поля и электрических токов возьмем ротор от обеих частей равенства, выражающего закон Ома, и используем теорему о циркуляции электрического поля (1):

$$\text{rot } \mathbf{J} = -\sigma \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \text{rot}(\mathbf{v} \times \mu_0 \mathbf{H}).$$

При выполнении неравенства $\omega \gg \nu R^{-1}$ вторым слагаемым в правой части данного равенства, а значит и влиянием конвективного движения на распределение токов, можно пренебречь.

Исходя из того, что в уравнении Навье – Стокса конвективное слагаемое $(\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v}$ и слагаемое с подъемной силой $\mathbf{g} \beta \Delta T$ имеют один порядок, для характерного значения скорости получим оценку $\nu \sim \sqrt{g \beta R \theta}$, где характерная разность температур $\theta = 20$ К, а течение считалось установившимся. В этом случае получаем

$$\nu R^{-1} = R^{-1} \sqrt{g \beta R \theta} = 0,4 \text{ с}^{-1}.$$

Значение частоты колебаний тока в индукторе изменяется в пределах 1 – 2 кГц и значительно превосходит критические, при которых

генерируемые конвективным движением расплава электрические токи влияют на распределение магнитного поля внутри расплава.

Таким образом, сопряженная магнитно-гидродинамическая задача может рассматриваться последовательным решением следующих подзадач:

расчет пространственного распределения магнитного поля индуктора в объеме расплава без учета его движения;

расчет индукционных токов \mathbf{J} и объемной мощности источников Джоулевой теплоты;

решение задачи теплопереноса с известным распределением магнитного поля и внутренних источников теплоты.

Распределение магнитного поля и внутренних источников тепла

Решение уравнения диффузии магнитного поля в металле (2) будем искать в виде суперпозиции составляющих магнитного поля: внешней гармонической \mathbf{H}^{out} , создаваемой индуктором, и внутренней \mathbf{H}^{ind} , создаваемой индукционными токами:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{out} \cos \omega t + \mathbf{H}^{ind}. \quad (3)$$

Внутри рассматриваемой области $\text{rot } \mathbf{H}^{out} = 0$.

Выберем в качестве характерных масштабов следующие величины: для координаты – внутренний радиус тигля R_m , для времени – обратную частоту пульсаций магнитного поля в индукторе ω^{-1} , для магнитного поля – H_0 , равную

$$H_0 = NI/4\pi R_m \approx 10^3 \text{ А} \cdot \text{м}^{-1}.$$

Учитывая выражение (3), запишем безразмерное уравнение для индукционной составляющей магнитного поля:

$$\frac{\partial \mathbf{H}^{ind}}{\partial \tau} = \frac{1}{\text{Re}_m} \nabla^2 \mathbf{H}^{ind} + \mathbf{H}^{out} \sin \tau, \quad (4)$$

где $\text{Re}_m = \mu_0 \sigma R_m^2 \omega$ – магнитное число Рейнольдса.

Подстановка физических констант и характерных величин технологического процесса (см. таблицу) дает значение для $\text{Re}_m \sim 10^3$.

Уравнение (4) решалось в цилиндрической системе координат. Решение полагалось не зависящим от азимутальной координаты и сим-

метричным относительно оси z , что позволило свести задачу к двумерному варианту и проводить расчеты в половине вертикального сечения цилиндра. За пределами расплава индукционным полем пренебрегаем в силу малости по сравнению с внешним, а на оси симметрии отсутствует нормальная компонента плотности тока:

$$\begin{cases} \mathbf{H}^{ind} = 0 & \text{при } r = 1, z = 0, z = h; \\ \mathbf{J} = \text{rot}\mathbf{H}^{ind} = 0 & \text{при } r = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Внешнее магнитное поле создается индуктором, который представляет собой короткую катушку. Стенка тигля не проводит электрического тока и при температуре расплава диамагнитна, следовательно, на основании теоремы о циркуляции магнитного поля, не влияет на напряженность магнитного поля индуктора \mathbf{H}^{out} .

Аксиальная и радиальная компоненты напряженности магнитного поля индуктора в безразмерной форме, рассчитанные на основании закона Био – Савара – Лапласа, имеют вид

$$H_z = \sum_{k=1}^N \int_0^{2\pi} \frac{R(R - r_k \cos \varphi)}{\left[R^2 + r_k^2 + z_k^2 - 2Rr_k \cos \varphi \right]^{\frac{3}{2}}} \cdot d\varphi; \quad (6)$$

$$H_r = \sum_{k=1}^N \int_0^{2\pi} \frac{Rz_k \cos \varphi}{\left[R^2 + r_k^2 + z_k^2 - 2Rr_k \cos \varphi \right]^{\frac{3}{2}}} \cdot d\varphi,$$

где $R = 1 + \delta_T / R_M$ – безразмерный радиус витка индуктора; r_k, z_k – компоненты радиус-вектора от элемента тока k -го кольца индуктора к точке наблюдения; φ – азимутальный угол цилиндрических координат. Схема для расчета по формулам (6) приведена на рис. 2.

Алгоритм решения задачи (4) – (6) реализован в виде пакета программ, написанных на языке Фортран. При аппроксимации уравнения (4) использовалась явная конечно-разностная схема. Квазистационарное решение считалось установившимся, если относительная погрешность в определении амплитуды \mathbf{H}^{ind} не превышала $\epsilon = 10^{-5}$.

Результаты вычислительных экспериментов

На рис. 3 показаны распределение магнитного поля соленоида \mathbf{H}^{int} , результирующее поле в расплаве при $Re_m = 1000$, азимутальная со-

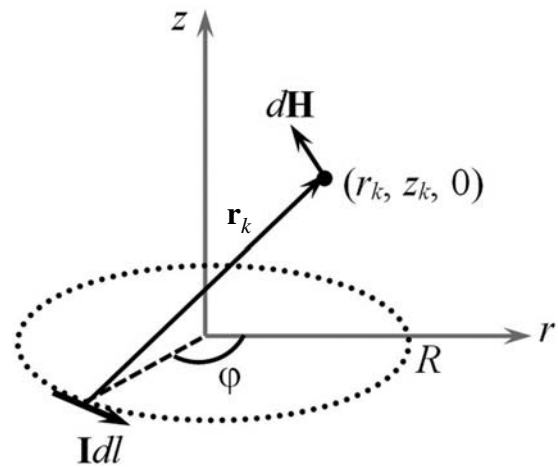


Рис. 2. Схема к определению магнитного поля кольца в точке с координатами $(r_k, z_k, 0)$

ставляющая плотности индукционных токов и мощность Джоулевых источников теплоты $q_V = J^2$. Для перехода к размерным величинам \mathbf{J} и q_V необходимо их умножить на размерные коэффициенты:

$$J_0 = \frac{H_0}{R_0} \sim 10^4 \frac{A}{m^2}; \quad q_0 = \frac{H_0^2}{\sigma R_0^2} \sim 500 \frac{Вт}{m^3}.$$

Для установления закономерностей генерации теплоты проведены вычислительные эксперименты с различными магнитными числами Рейнольдса Re_m , результаты которых приведены на рис. 4.

Из рис. 3, ϵ и 4, $a, б$ видно, что магнитное поле присутствует только в приграничной области, а в центральной части полностью гасится индукционным полем, что хорошо согласуется с оценками, приведенными выше. В области, где градиенты магнитного поля велики, возникают электрические токи, причем на торцевых гранях и на боковой поверхности области противонаправлены (рис. 3, $д$ и 4, $в, з$). Следует отметить, что токи на боковой поверхности значительно превышают таковые на торцах (см. рис. 4, $в, з$). Области интенсивного выделения теплоты локализованы около боковой поверхности, тепловыделение на торцевых гранях значительно слабее (рис. 4, $д, е$).

Установлено, что с ростом магнитного числа Рейнольдса магнитное поле проникает в проводник на меньшую глубину, индукционные токи и тепловыделение возрастают и локализуются ближе к поверхности области.

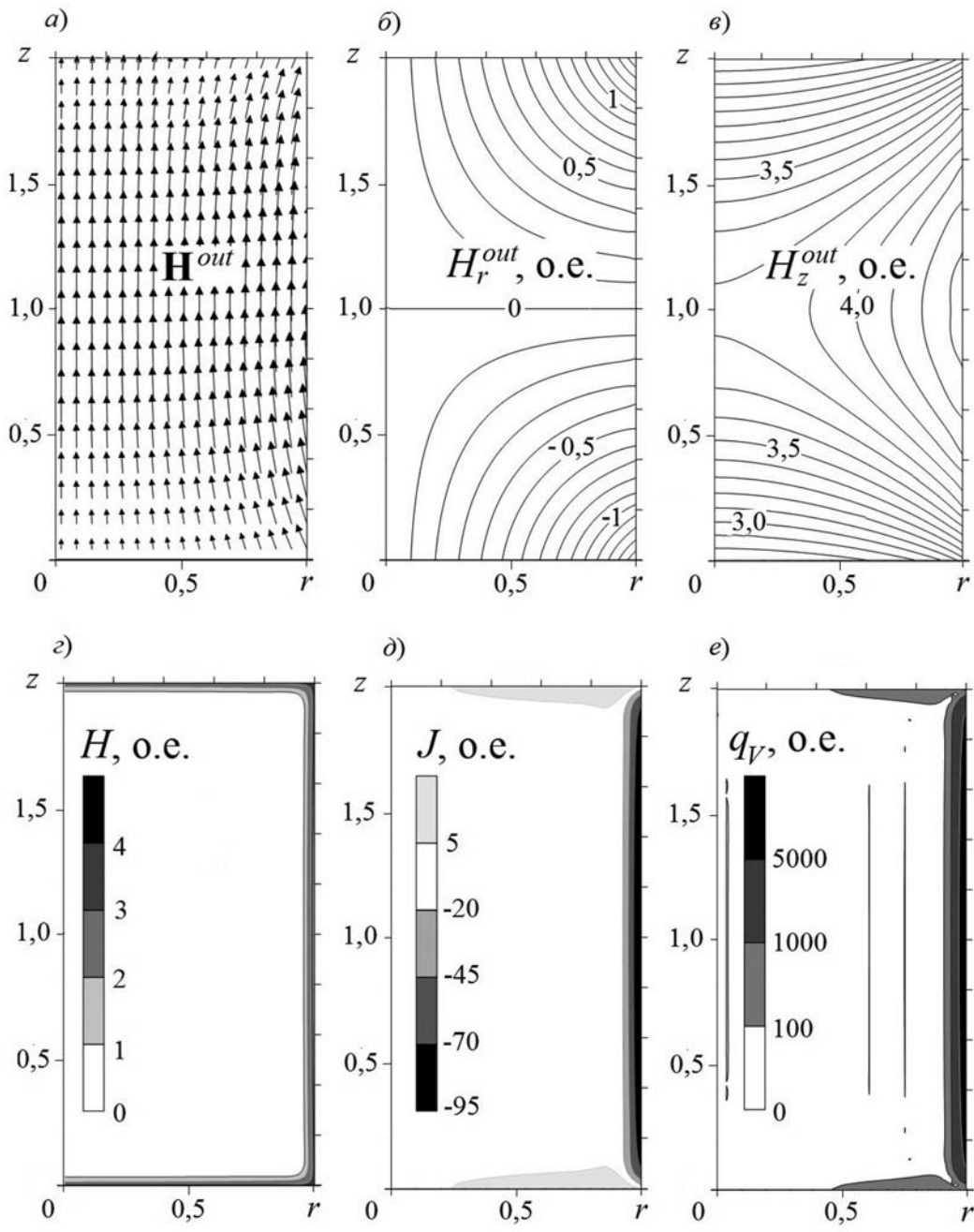


Рис. 3. Вычисленные распределения основных величин по расплаву в цилиндрической полости: вектора \mathbf{H}^{out} (а), его радиальной (H_r^{out}) (б) и аксиальной (H_z^{out}) (в) компонент; результирующего магнитного поля H (г); плотности токов J (д) и мощности q_V внутренних источников тепла (е)

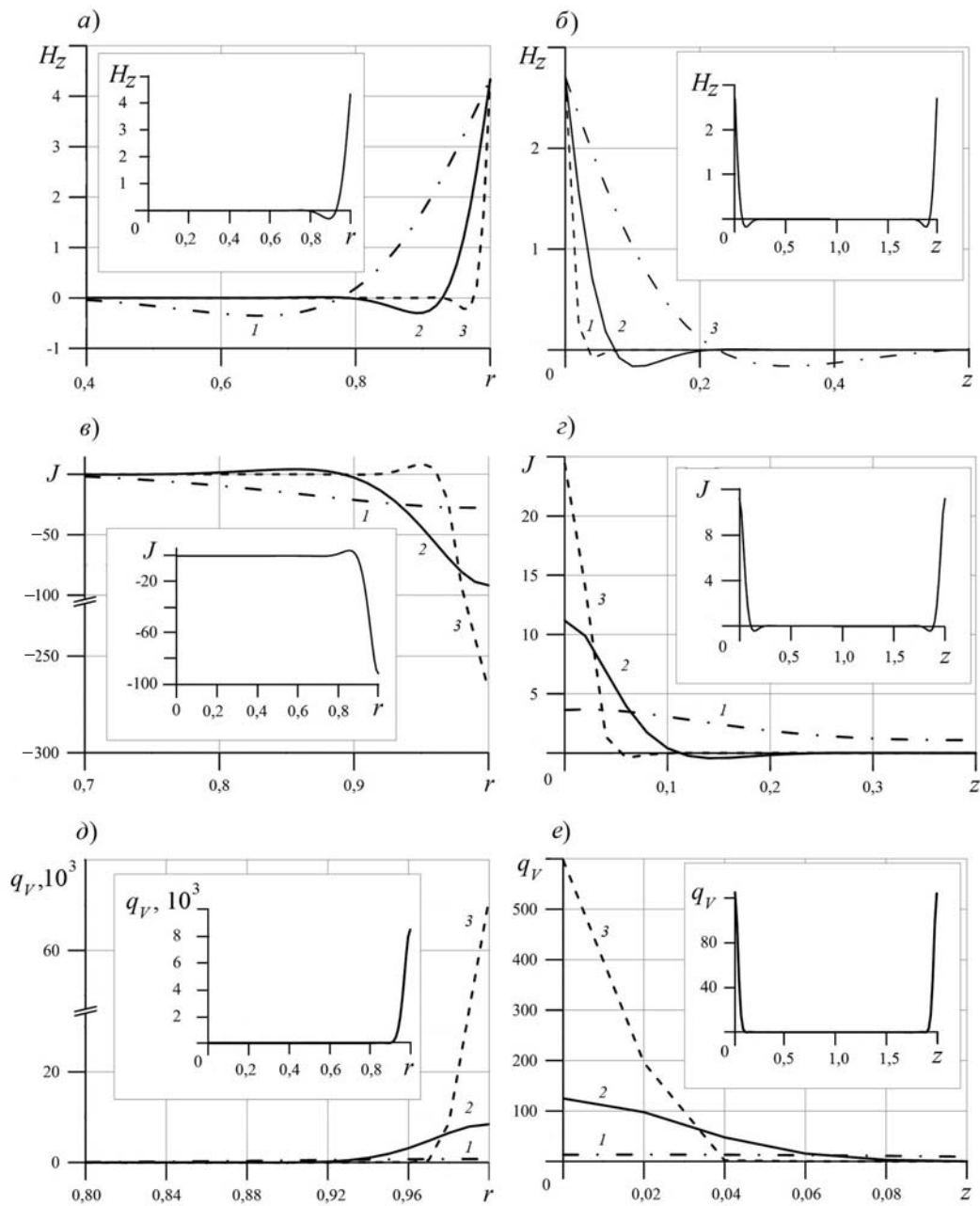


Рис. 4. Зависимости аксиальной компоненты результирующего магнитного поля (а, б), плотности тока (в, з) и объемной мощности источников тепла (д, е) от радиуса (а, в, д) и высоты (б, з, е) расплава в цилиндрической полости для различных значений числа Рейнольдса Re_m : 10^2 (1), 10^3 (2), 10^4 (3). На вставках представлены зависимости для всей области ($Re_m = 10^3$), на основных графиках – только для приграничных областей (но подробно).

Таким образом, разработана математическая модель, описывающая магнитное поле в электропроводящем цилиндре, который помещен во внешнее неоднородное переменное магнитное поле индуктора. Модель позволяет рассчитывать распределение индукционных токов и генерацию Джоулевой теплоты.

Методами вычислительного эксперимента получены распределения напряженности магнитного поля, индукционных токов и объемной плотности источников теплоты в металлическом расплаве, находящемся в цилиндрической полости. На основе результатов вычислительных экспериментов выявлены за-



кономерности в изменениях указанных выше величин при варьировании управляющего параметра — магнитного числа Рейнольдса. Эта информация в перспективе позволит мо-

делировать конвективные течения в расплаве и выявить эффекты, важные для понимания процессов, влияющих на распределения примесей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Цаплин, А.И.** Теплофизика внешних воздействий при кристаллизации стальных слитков на машинах непрерывного литья [Текст] / А.И. Цаплин. — Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 1995. — 238 с.
2. **Шейден, О.** Разработки в области электромагнитного перемешивания (ЭМП) расплава в печах для плавки алюминия [Текст] / О. Шейден, А. Леман // Цветные металлы Сибири. Сб. научн. статей. — Красноярск: ООО «Версо», 2009. — С. 648 — 656.
3. **Хрипченко, С.Ю.** Кристаллизация цилиндрических алюминиевых слитков при МГД-перемешивании [Текст] / С.Ю. Хрипченко, В.М. Долгих, С.А. Денисов [и др.] // Рос. конф. по магнитной гидродинамике. Тез. докл. Пермь, 18 — 22 июня 2012 г. — Пермь: ИМСС УрО РАН, 2012. — С. 101.
4. **Lyubimova, T.P.** Numerical investigation of dynamic magnetic field influence on vertical Bridgman crystal growth [Text] / T.P. Lyubimova, P. Dold, A. Croell [et al.] // Proc. of Int. Conf. 'Advanced Problems in Thermal Convection'. — Perm, 2004. — P. 343 — 349.
5. **Любимова, Т.П.** Численное исследование влияния бегущего магнитного поля на тепломассоперенос в жидкой зоне [Текст] / Т.П. Любимова, И.С. Файзрахманова // Гидродинамика: Сб. науч. трудов. Вып. 11. — Пермь: Изд.-во Перм. ун.-та, 2004. — С. 173 — 190.
6. **Демин, В.А.** Влияние вращающегося магнитного поля на расплав в цилиндрической жидкой зоне [Текст] / В.А. Демин, Д.В. Макаров // Вестник Пермского университета. Вып. 1. Физика. — Пермь, 2004. — С. 106 — 111.
7. **Дрица, М.Е.** Свойства элементов [Текст]: Справ. изд. в 2-х кн. Кн. 1. Под ред. М.Е. Дрицы; 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Metallurgy, ГУП «Журнал «Цветные металлы»», 1997. — 432 с.
9. **Ландау, Л.Д.** Электродинамика сплошных сред [Текст] / Л.Д. Ландау, И.М. Лившиц. — М.: Наука, 1982. — 620 с.
10. **Lyubimov, D.V.** Stability of convection in a horizontal channel subjected to a longitudinal temperature gradient. Part 2. Effect of a magnetic field [Text] / D.V. Lyubimov, T.P. Lyubimova, A.V. Perminov [et al.] // J. Fluid Mech.—2009.—Vol. 635.— P. 297 — 319.

НИКУЛИН Илларион Леонидович — кандидат технических наук, доцент кафедры общей физики Пермского национального исследовательского политехнического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
nikulin.illarion@mail.ru

ПЕРМИНОВ Анатолий Викторович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики Пермского национального исследовательского политехнического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
perminov1973@mail.ru

УДК 539.183

А.Ю. Карсеев, В.В. Давыдов, В.И. Дудкин

ИЗМЕНЕНИЕ ВРЕМЕНИ СПИН-РЕШЕТОЧНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЧИСТОЙ ВОДЫ СИЛЬНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОТОКЕ

A.Yu. Karseev, V.V. Davydov, V.I. Dudkin

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

THE VARIATION OF THE DISTILLED WATER SPIN-LATTICE RELAXATION TIME IN TURBULENT STREAM BY THE STRONG ELECTRICAL FIELD

Рассмотрены проблемы омагничивания чистой воды для производства тяжелой воды. Экспериментально исследовано одновременное влияние постоянного электрического и магнитного полей на время спин-решеточной релаксации T_1 при различных значениях температуры чистой воды.

ВРЕМЯ СПИН-РЕШЕТОЧНОЙ РЕЛАКСАЦИИ. ЧИСТАЯ ВОДА. ТЯЖЕЛАЯ ВОДА. ТЕКУЩИЙ ПОТОК. ОМАГНИЧИВАНИЕ.

The problems of distilled water magnetizing for the heavy water production are considered. The simultaneous effect of constant magnetic and electric fields on the T_1 spin-lattice relaxation time for distilled water at different temperatures are investigated experimentally.

SPIN-LATTICE RELAXATION TIME. DISTILLED WATER. HEAVY WATER. FLOWING STREAM. MAGNETIZING.

Различным отраслям промышленности с каждым годом требуется все больше и больше воды, причем в некоторых случаях вода должна пройти предварительную подготовку. Эта жидкость, как известно, отличается от других по целому ряду аномальных свойств, обусловленных особенностями ее структуры [1].

Эти особенности определяются не просто полярными свойствами молекул воды, но и характером распределения электронной плотности. Каждая из молекул имеет два некомпенсированных положительных заряда у атомов водорода, а также два отрицательных, ввиду наличия неподеленной p -электронной пары кислорода. Данные заряды расположены практически по углам тетраэдра, что позволяет каждой молекуле воды образовывать четыре водородные связи с соседями, причем с точным балансом числа донорных и акцепторных связей и с направлениями, близкими к опти-

мальным для таких связей, т. е. практически с максимальной для них энергией [1].

В атомной энергетике в качестве охлаждающей жидкости используют тяжелую воду D_2O . В последние годы в МАГАТЭ разработана методология комплексной оценки инновационных ядерных энергетических систем (ИЯЭС) в рамках международного проекта «Инновационного развития ядерных реакторов и замкнутого ядерного топливного цикла» ИНПРО. По этой программе разрабатывается новая конструкция реактора, позволяющая вовлечь в цикл получения энергии изотопы урана-238 и тория-232, обеспечив при этом полное замыкание топливного цикла, с большим сокращением добычи природной сырьевой компоненты и отправки отработанного ядерного топлива в «могильники» [2].

Как показали предварительные исследования, для атомных станций будущего потребуются значительно больше тяжелой воды, чем



производится сейчас. В настоящее время для ее производства используется проточная омагниченная вода. Устройство омагничивания содержит сосуд, помещенный между полюсами магнита. Эффект омагничивания зависит как от времени нахождения воды в зазоре магнитной системы, так и от напряженности магнитного поля H в этом зазоре.

В настоящее время технологии по созданию принципиально новых магнитных систем, имеющих высокое значение постоянного магнитного поля в зазоре между полюсными наконечниками, себя почти исчерпали. В связи с этим, единственным и экономически оправданным решением для увеличения степени намагниченности быстрого (турбулентного) потока чистой воды является локальное уменьшение времени продольной (спин-решеточной) релаксации T_1 в момент ее нахождения в магнитной системе.

Постановка задачи

Механизм формирования времени релаксации T_1 в воде обусловлен вращательным и поступательным (трансляционным) движением ее молекул, вызванным диполь-дипольным взаимодействием протонов [3]. Экспериментально установлено, что вклад от вращательного движения в величину T_1 в три раза больше, чем от поступательного. Кроме того, время продольной релаксации T_1 чистой воды обладает характерной зависимостью от температуры [4, 5]. Поэтому необходимо было решить следующие задачи:

измерить время продольной релаксации T_1 чистой воды в диапазоне температур от 0 до 100 °С;

разработать способ локального уменьшения времени продольной релаксации T_1 и провести соответствующую экспериментальную проверку для чистой воды в быстром потоке в момент ее нахождения в магнитной системе с фиксированием изменения значения T_1 .

Результаты экспериментальных исследований

Для измерения температурной зависимости T_1 для чистой воды была использована разработанная ранее экспериментальная установка на основе схемы меточного ядерного магнитного резонансного расходомера [6]. Для более точного измерения значения T_1 в текущем потоке (двумя методами) в ее конструкцию включили переменный объем [7].

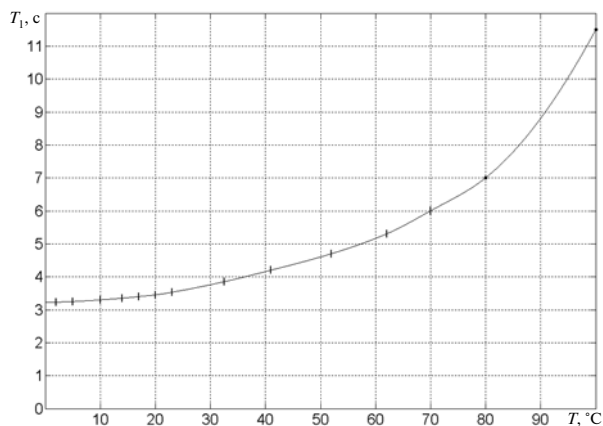


Рис. 1. Экспериментальная зависимость времени продольной релаксации T_1 чистой воды от температуры

На рис. 1 представлена экспериментальная зависимость, полученная в результате измерений различными методами.

Сравнивая полученные нами значения T_1 для чистой воды с опубликованными ранее в работах [3 – 5], а также с результатом, представленным в работе [8], где время продольной релаксации чистого льда $T_1 = 3,2$ с при $T = -1,5$ °С, можно убедиться в том, что в контрольных точках полученные нами значения совпадают с измеренными ранее. Характер экспериментально измеренной зависимости для T_1 отражает физические процессы, происходящие при изменении температуры в чистой воде.

С учетом особенностей структуры молекулы воды и механизма формирования T_1 был предложен метод, позволяющий сократить время продольной релаксации чистой воды за время ее нахождения в сосуде-поляризаторе. Для этих целей была разработана новая конструкция магнита-поляризатора (рис. 2).

В разработанной конструкции между полюсными наконечниками магнита были расположены две пластинки, на которые подавалось постоянное напряжение U . Расстояние между пластинками составляло 14 мм. В качестве источника постоянного напряжения (ИПН) использовался прибор CPR-3000H05D. В результате на участке трубопровода, расположенного между этими пластинками, на поток чистой воды помимо постоянного магнитного поля оказывает дополнительное воздействие постоянное электрическое поле. Под действием сильного

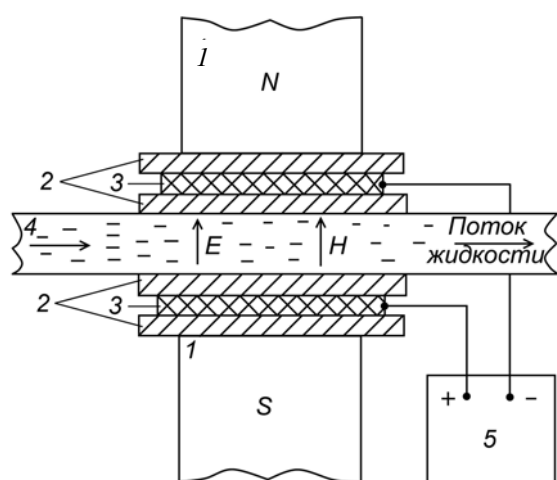


Рис. 2. Структурная схема поляризатора:
 1 – полюса постоянного магнита; 2 – изолирующие прокладки; 3 – проводящие пластины; 4 – участок трубопровода, 5 – источник постоянного напряжения

электрического поля изменится средняя ядерная конфигурация молекул: электрический дипольный момент молекул воды выстроится по полю E , а также сместятся электронные облака отрицательного заряда в пространстве вокруг ядер [1, 3].

Время продольной релаксации T_1 для жидких сред, содержащих молекулы с двумя одинаковыми спинами, равными $1/2$, рассчитывается по следующей формуле [3, 9]:

$$T_1 = \frac{kT}{2\pi\hbar^2\gamma^4\eta} \left(\frac{b^6}{a^3} + \frac{5}{3\pi N} \right),$$

где T – температура воды; a – радиус твердой сферы, который аппроксимирует молекулу по формуле Стокса; b – расстояние между протонами; N – число протонов в 1 см^3 ; η – вязкость.

При постоянном значении температуры изменение T_1 связано с изменением вязкости или факторами, на нее влияющими [3, 9]. Для того, чтобы наблюдать уменьшение T_1 , необходимо путем регулирования расхода воды переместить «точку регистрации» сигнала ЯМР на спадающий участок кривой намагниченности [5, 6]. При такой величине расхода для данного трубопровода в диапазоне температур от 10 до 30 °C число Рейнольдса превышает значение в 3000. Это означает, что поток жидкости – турбулентный [10]. В этом случае основной вклад в величину вязкости потока чистой воды дает динамический коэффициент тур-

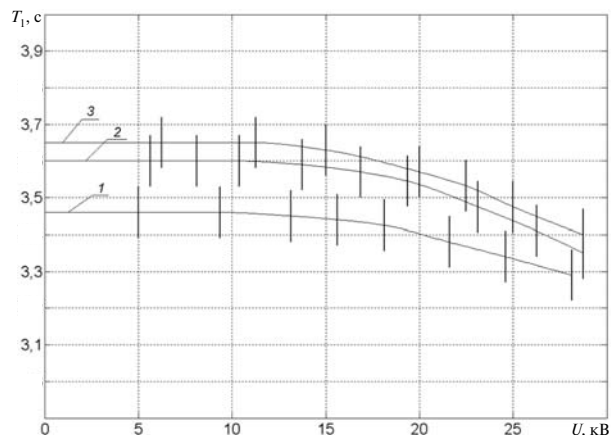


Рис. 3. Зависимость времени продольной релаксации от постоянного напряжения, приложенного к пластинам, для различных значений температуры потока чистой воды T , °C: 16,2 (1); 19,4 (2); 25,1 (3)

булентной вязкости η^t . С увеличением скорости и температуры потока вклад остальных компонент вязкости становится несущественным [10].

Турбулентная вязкость сложным образом зависит от многих факторов потока, в частности от турбулентной пульсации скорости, которая зависит от энергий вращения и колебания в молекуле [1, 10]. В сильном электрическом поле у молекулы увеличивается дипольный момент, что приводит к уменьшению этих энергий [1].

Для трех значений комнатной температуры (в этом диапазоне чистая вода используется для производства тяжелой воды и приготовления биологических растворов) было исследовано влияние электрического поля на время продольной релаксации T_1 . На рис. 3 представлены данные зависимости.

На основании полученных экспериментальных результатов можно сделать вывод, что приложенное сильное электрическое поле (близкое по величине к напряжению пробоя воздуха) уменьшило значение T_1 настолько, что его удалось достоверно зарегистрировать. Экспериментальные данные согласуются с теоретическими представлениями, согласно которым при увеличении температуры чистой воды изменение величины T_1 будет большим при одном о том же воздействии.

В результате проведенных экспериментальных исследований получены результаты, представляющие большой интерес как для практики, так и для физики магнитных явлений.



Наибольший интерес представляет полученный результат для проведения дальнейших исследований структуры льда, полученного из воды, обработанной одновременно электрическим и магнитным полями. Такой лед можно получить, например, путем быстрого замораживания чистой воды сразу после одновременного воздействия на нее магнитного и электрического полей на выходе из поляризатора как в кювете, так и в ответвлении трубопровода.

Лед представляет собой поликристаллическое тело, состоящее из множества кристаллов неправильной формы, называемых зернами. Зерна состоят из упорядоченных в пространстве однотипных элементарных ячеек, образу-

ющих кристаллическую решетку. Существует много типов решеток. Кристаллическая структура льда определяется строением молекул воды и некоторыми ее макроскопическими свойствами: вязкостью, модулем упругости и др. [11].

Уменьшение времени продольной релаксации T_1 в жидкой среде, связанное с увеличением вязкости этой среды, может вызвать изменения в кристаллической структуре льда [4, 10].

В настоящее время известны три аморфных разновидности и 15 кристаллических модификаций льда. Возможное появление новых модификаций льда вызывает как научный, так и практический интерес.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Татевский, В.В.** Строение молекул [Текст] / В.В. Татевский. – М.: Химия, 1977. – 512 с.
2. **Велихов, Е.П.** Развитие ядерной и термоядерной энергетики [Текст] / Е.П. Велихов // Санкт-Петербургский научный форум «Наука и общество» и «Наука и прогресс человечества»: VII Петербургская встреча лауреатов Нобелевской премии. Тез. пленарн. докл.; Санкт-Петербург, 8 – 12 октября, 2012. – С. 16.
3. **Абрагам, А.** Ядерный магнетизм [Текст] / А. Абрагам. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1967. – 686 с.
4. **Жунке, А.** Ядерный магнитный резонанс в неорганической химии [Текст] / А. Жунке. – М.: Мир, 1974. – 284 с.
5. **Жерновой, А.И.** Ядерно-магнитные расходомеры [Текст] / А.И. Жерновой. – Л.: Машиностроение, 1985. – 136 с.
6. **Давыдов, В.В.** Режим работы меточного ЯМР-расходомера на основе эффекта параметрического резонанса [Текст] / В.В. Давыдов, В.И. Дудкин // Изв. вузов. Приборостроение. – 2002. – № 5. – С. 49 – 51.
7. **Davydov, V.V.** The chemical factory sewage control by nuclear-magnetic relaxometer [Text] / V.V. Davydov, A.V. Dolgopolo, P.V. Matveev // The 7th International Youth Science Environmental Forum «ECOBALTI-SA'2008». Proceedings. St. Petersburg, June 26 – 28, 2008. – P. 269 – 270.
8. **Ранелс, Л.К.** Явление диффузии и релаксации во льду: Физика льда [Текст] / Л.К. Ранелс // Обзор докл. Междунар. симп. 9–14 сентября 1968 г., Мюнхен. – Л.: Лениздат, 1973. – 124 с.
9. **Лёше, А.** Ядерная индукция [Текст] / А. Лёше. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1963. – 678 с.
10. **Гиргидов, А.Д.** Механика жидкости и газа (гидравлика) [Текст] / А.Д. Гиргидов. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2007. – 545 с.
11. **Богородский, В.В.** Лед. Физические свойства. Современные методы гляциологии [Текст] / В.В. Богородский, В.П. Гаврилов. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 584 с.

КАРСЕЕВ Антон Юрьевич – студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
antonkarseev@gmail.com

ДАВЫДОВ Вадим Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
davydov_vadim66@mail.ru

ДУДКИН Валентин Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vidoodkin@mail.ru

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2013

УДК 537.635

Н.С. Клёхта, И.В. Плешаков, В.И. Дудкин

ИМПУЛЬСНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ОТКЛИКАМИ ЯДЕРНОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ В МАГНЕТИКЕ С ДОМЕННЫМИ ГРАНИЦАМИ

N.S. Klekhta, I.V. Pleshakov, V.I. Dudkin

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

PULSE OPERATION OF THE NUCLEAR SPIN SYSTEM RESPONSES IN A MAGNETIC MATERIAL WITH DOMAIN WALLS

Рассмотрены вопросы, связанные с воздействием импульсов магнитного поля на формирование сигнала ядерного спинового эха в феррите. Представлена качественная модель наблюдавшихся эффектов, показана важная роль доменных границ. Результаты работы должны быть полезны при совершенствовании методов исследования магнитоупорядоченных веществ.

ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС. СПИНОВОЕ ЭХО. МАГНИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ. ИМПУЛЬСНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ.

The questions related with the action of magnetic field pulses on the spin echo formation in a ferrite are discussed. The qualitative model of the observed phenomena is developed; the importance of the domain walls is shown. The results of the work should be useful for the improvement of the magnetic materials research technique.

NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE. SPIN ECHO. MAGNETIC MATERIALS. PULSE ACTION.

В настоящей работе рассматривается импульсное воздействие на сигналы нестационарного ядерного магнитного резонанса (ЯМР), наблюдаемого в некотором магнитном материале, находящемся в многодоменном состоянии. С точки зрения общего подхода это может быть любое соединение, обладающее магнитным порядком; важным здесь является то, что оно содержит доменные границы (ДГ). Такие исследования актуальны [1, 2] и представляют интерес, прежде всего потому, что дают дополнительную информацию о строении ДГ, то есть относятся к радиоспектроскопическим методам физики магнитных явлений. Кроме того, вплоть до настоящего времени спиновое эхо в магнитных материалах (в этом виде регистрируется ЯМР в нашем случае) рассматривается как эффект, на основе которого можно создавать устройства обработки информации [3]; развитие в этой области различных способов управления выходными сигналами эхо-процессоров является одной из первостепенных задач [3, 4].

Хотя действие импульсного магнитного поля на ЯМР проявится в любом случае, при наличии ДГ оно, как будет показано далее, оказывается наиболее эффективным. Более того, рассматривать сколько-нибудь существенное влияние видеоимпульсов на ядерную спиновую систему большинства магнетиков можно только в том случае, если они обладают доменной структурой (отметим, однако, что такая структура есть наиболее распространенное состояние данного типа веществ). Поэтому в качестве конкретного образца, на котором выполнен эксперимент, нами был выбран феррит – поликристалл с ферримагнитным типом упорядочения и такими размерами зерен, при которых доменная структура заведомо считается сформированной.

Образцы и методика эксперимента

В качестве наиболее удобного модельного объекта, позволяющего проверить принципы



методики, связанной с воздействием импульсного магнитного поля на сигнал ЯМР через систему ДГ, использовался литий-цинковый феррит состава $\text{Li}_{0,425}\text{Fe}_{2,425}\text{Zn}_{0,150}\text{O}_4$. Он является типичным представителем материалов данного типа, широко применяемых в электронике, и достаточно хорошо исследован средствами радиоспектроскопии. Образец состоял из колец, изготовленных по керамической технологии при обогащении (до 85 %) изотопом ^{57}Fe , на котором наблюдался ЯМР.

Отклики спиновой системы регистрировались в виде эхо-сигналов на стандартном импульсном радиоспектрометре [5], дополненном устройством воздействия на образец видеоимпульсами магнитного поля. Его блок-схема и геометрия эксперимента представлены на рис. 1. Эхо наблюдалось при комнатной температуре и возбуждалось двух- или трехимпульсными последовательностями радиочастотных (РЧ) импульсов на несущей частоте 68 МГц. Последовательность формировалась в канале, содержащем программатор, модулятор и генератор РЧ импульсов, поступающих через

аттенюатор на катушку, входящую в состав резонансного контура и намотанную на образец. Сигнал от образца наводился в той же катушке, далее он проходил усилительную систему (предусилитель, усилитель и детектор) и отображался на экране цифрового осциллографа. Вид последовательности и возбужденных ею откликов показан на вставке рис. 1. Параллельно РЧ магнитному полю другой катушкой, намотанной на кольцо и питаемой от генераторов видеоимпульсов, создавалось импульсное магнитное поле h_v (см. вторую вставку рис. 1). Его максимальная величина составляла 1,4 мТл, длительность импульсов регулировалась в пределах 1 – 10 мкс, а полярность могла быть любой.

В ряде экспериментов образец намагничивался в постоянном поле H_0 (0 – 0,3 Тл), ориентированном параллельно оси кольца, т. е. таким образом, что бы оно было перпендикулярно h_v и полю РЧ импульсов h_{rf} (см. вторую вставку рис. 1).

Как видно из осциллограммы, приведенной на первой вставке, наблюдался полный набор нестационарных откликов, типичных для

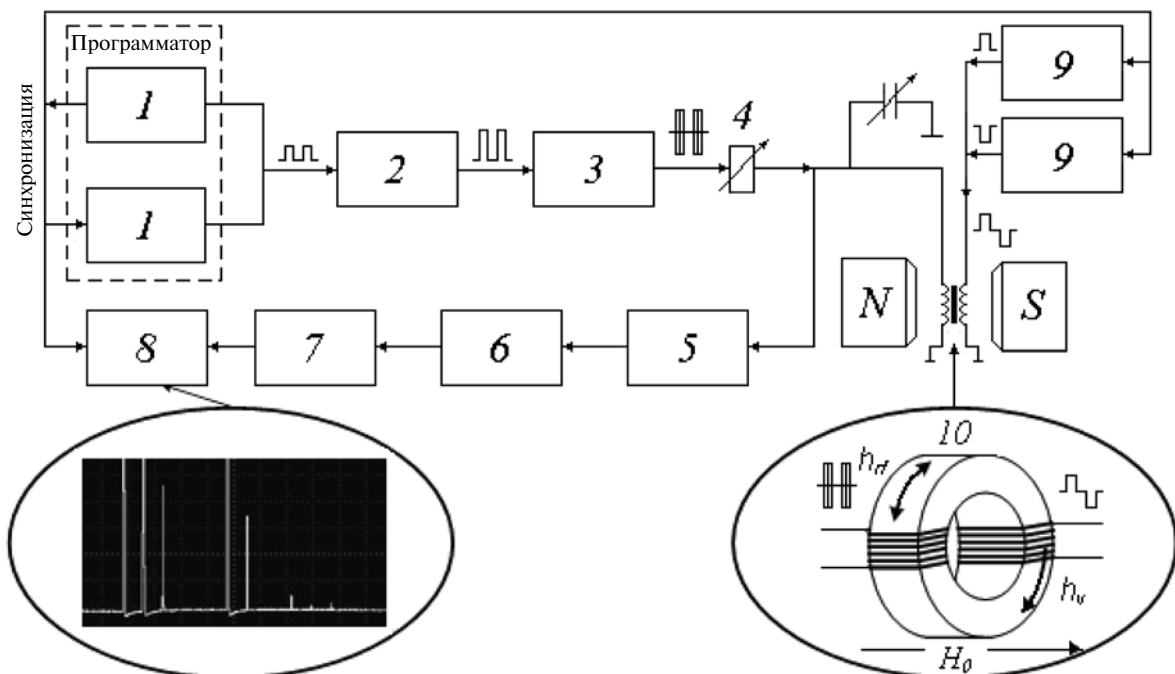


Рис. 1. Структурная схема радиоспектрометра ЯМР:

1 – генераторы видеоимпульсов Г5-54; 2 – модулятор; 3 – генератор радиочастотных импульсов; 4 – аттенюатор; 5 – антенный предусилитель 2820VF; 6 – супергетеродинный приемник; 7 – детектор; 8 – осциллограф; 9 – генераторы видеоимпульсов Г5-15; 10 – образец.

В овалах показана осциллограмма импульсов возбуждения и сигналов спинового эха, а также геометрия эксперимента

случая возбуждения спиновой системы трехимпульсной последовательностью [5]: двухимпульсное эхо, стимулированное эхо и тройка вторичных эхо-сигналов. Выполненные нами опыты заключались в изучении действия одного или двух импульсов магнитного поля, подаваемых в различные моменты времени, на амплитуды двухимпульсного и стимулированного эха.

Модель действия импульса магнитного поля на спиновую систему

Заметное влияние на спиновое эхо наблюдается уже при амплитудах импульсов порядка нескольких десятых долей миллитесла. Очевидно, что при столь малой величине поля воздействие на ядерную спиновую систему не может быть непосредственным, и даже не может быть опосредовано через электронную намагниченность по обычному механизму ЯМР в магнетике, [6, 7]. В работе [8] было показано, что в феррите состава $\text{Li}_{0,425}\text{Fe}_{2,425}\text{Zn}_{0,150}\text{O}_4$, помещенном в статическое магнитное поле, снижение интен-

сивности сигнала ЯМР происходит, начиная приблизительно со значения $H_0 = 50$ мТл, т. е. природа рассматриваемого нами эффекта не связана с уменьшением коэффициента усиления ЯМР или полного объема границ в момент подачи видеоимпульса. Однако во время небольшого обратимого смещения ДГ, вызванного импульсом, локальные поля на ядрах расположенных в ней атомов изменяются, причем это изменение, как и в случае смещения, учитываемого при выводе выражений для внутриграницного коэффициента усиления [9], неоднородно по толщине границы. Это означает, что к частоте прецессии i -й изохроматы ω_i на протяжении интервала τ_{V1} добавляется величина $\delta\omega_i$, зависящая от координаты, в направлении которой происходит сдвиг (рис. 2). Таким образом, в систему собственных колебаний ядер вносится возмущение, нарушающее фокусировку изохромат в момент формирования эхо-сигнала. Поскольку последний происходит преимущественно от ДГ [8], полный отклик системы уменьшается.

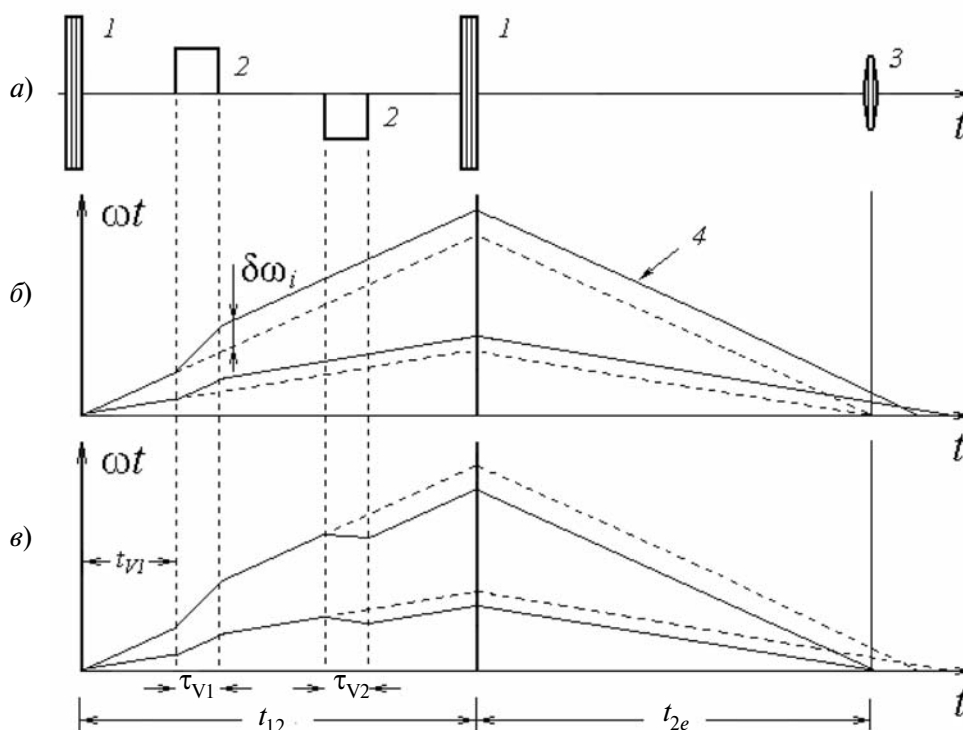


Рис. 2. Действие импульсов магнитного поля на сигнал двухимпульсного эха: *a* – импульсные последовательности и отклик; *б* – действие одиночного видеоимпульса, разрушающее сигнал; *в* – восстановление сигнала в последовательности разнополярных импульсов; 1, 2 – радиочастотные и видеоимпульсы соответственно; 3 – эхо-сигнал; 4 – линия, изображающая эволюцию i -й изохроматы



В дальнейшем предполагается более строгое рассмотрение поведения спинов ДГ в условиях импульсного воздействия, основанное на соответствующих уравнениях движения, но уже на данном этапе можно дать качественную картину изучаемых явлений. Для описания поведения спинов удобно ввести упрощенную модель, названную нами «оптической аналогией», суть которой иллюстрируется рис. 2. Изображено поведение фаз отдельных изохромат ω_i в зависимости от времени t . Считается, что РЧ импульсы последовательности, возбуждающей сигналы эха, гораздо короче межимпульсных интервалов, и могут рассматриваться как δ -импульсы. После первого из них неоднородно уширенная ядерная спиновая система начинает свободную прецессию, что на диаграмме проявляется как «разбегание» изохромат, подобное поведению оптических лучей некоторого источника. Второй импульс «фокусирует» изохроматы, играя роль собирающей линзы. Здесь следует отметить, что на полной фазовой плоскости эволюция спинов после второго импульса должна демонстрироваться ниже оси абсцисс, поскольку именно это соответствует их перевороту, необходимому для образования эха [5], однако симметрия картины позволяет показать «лучи» в верхней полуплоскости без нарушения понимания сущности процесса.

Если в межимпульсном интервале включается видеоимпульс магнитного поля длительностью τ_{V1} , действующий так, как описано выше, крутизна траекторий на его протяжении изменяется на величину, зависящую от номера данной изохроматы. Из рис. 2, б видно, что это приводит к дефокусировке и, следовательно, к разрушению отклика.

Описание явления и его трактовка, сходные с приведенными выше, позволяют понять, каким образом действует видеоимпульс отрицательной полярности, если положить, что дополнительные набег фазы $\delta\omega_i$, происходящие на его протяжении, имеют знаки, противоположные тем, которые создавались предыдущим положительным видеоимпульсом. Пояснение приведено на рис. 2, в, из которого очевидно, что действие второго импульса является восстанавливающим. С точки зрения оптической аналогии первый импульс мож-

но представить пластинкой со случайно распределенным коэффициентом преломления, а второй — пластинкой с таким распределением, которое в точности компенсирует возмущение, вносимое первой. В силу того, что направление прецессии изохромат на интервале t_{2e} имеет иной знак, чем на интервале t_{12} , поданный здесь видеоимпульс будет восстанавливающим, если он имеет тот же знак, что и видеоимпульс, воздействующий на систему в момент времени до подачи второго РЧ импульса.

Схема, показанная на рис. 2, дает пояснение к двухимпульсной методике наблюдения эха. Нетрудно рассмотреть также трехимпульсный случай, принимая во внимание то обстоятельство, что после второго РЧ импульса ядерные магнитные моменты переводятся в состояние, релаксирующее с характерным временем $T_1 \gg T_2$ (T_1, T_2 — времена продольной и поперечной релаксации соответственно). На диаграмме это изобразится в виде «линзы», создающей параллельный пучок, и далее фокусирующийся третьим РЧ импульсом. Построение, основанное на оптической аналогии, показывает, что влияние видеоимпульсов на стимулированное эхо на интервале между первым и вторым радиочастотными импульсами носит такой же характер, как при рассмотрении двухимпульсного сигнала, однако должно проявляться гораздо слабее на интервале между вторым и третьим РЧ импульсами.

Возможность подавления и восстановления сигналов в спиновых эхо-процессорах на основе магнетиков отмечалась и ранее (см., например, работы [3, 10]), однако в настоящей статье подчеркивается принципиальная роль наличия ДГ в тех, по крайней мере, случаях, когда поле магнитной анизотропии материала H_A достаточно велико. Действительно, смещая границу хотя бы на половину ее толщины, т. е. заведомо находясь в области обратимого намагничивания (что соответствует использованному в работе величинам h), можно повернуть электронную намагниченность и связанное с ней сверхтонкое поле [9] на угол около 90° . Таким образом, даже при небольших значениях h_V влияние на ω_i оказывается очень существенным. Внутри же домена этот угол, как правило, невелик (исследованные в работе [3] тонкие кобальтовые пленки с малой наведенной ани-

зотропией относятся к специальному случаю). Его можно оценить как величину, примерно равную H_A/h_V , что при магнитных параметрах нашего феррита [11] и $h_V = 1,4$ мТл дает приблизительное значение в $1,5^\circ$.

Экспериментальное подтверждение модели

Развитая здесь качественная модель подтверждается экспериментально. Подавление эхосигнала одиночным видеоимпульсом магнитного поля наблюдалось как для двухимпульсного (рис. 3,а), так и для стимулированного (рис. 3,б) откликов спиновой системы, причем в последнем случае действие видеоимпульса на интервале между вторым и третьим РЧ импульсами было

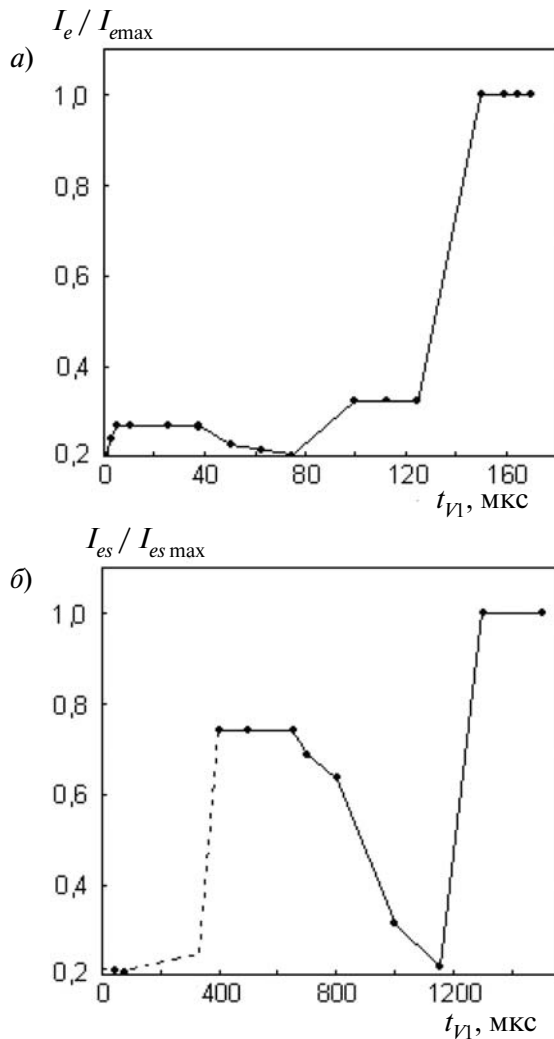


Рис. 3. Зависимости амплитуд двухимпульсного (а) и стимулированного (б) эхосигналов от времени задержки видеоимпульса; в обоих случаях $t_{12} = 185$ мкс, $t_{23} = 790$ мкс

существенно меньше, чем на интервале между первым и вторым. Достигалась значительная величина подавления: при наилучших условиях она составляла около 80 %. Как и в работе [12], этот параметр зависел от внешнего постоянного магнитного поля H_0 , постепенно уменьшаясь с приближением к состоянию насыщения образца, что непосредственно указывает на связь эффекта с ДГ. Восстановление эха в двухимпульсной последовательности регистрировалось в соответствии с ожидаемым согласно выдвинутой модели, а именно: при подаче разнополярных видеоимпульсов – на интервале между РЧ импульсами, а при подаче однополярных – на интервале между вторым РЧ импульсом и эхосигналом. Отметим, что действие восстанавливающего импульса подтверждает правильность принятого нами объяснения характера происходящих процессов, поскольку прямо указывает на их недиссипативный характер.

Очевидным следствием модели, вытекающим из геометрии «лучей», изображающих изохроматы (см. рис. 2,в), является предсказание, что максимальное подавление должно происходить при одинаковых длительностях видеоимпульсов. Это также обнаружено нами на опыте. На рис. 4 приведены зависимости амплитуды двухимпульсного эхосигнала от τ_{V2} при фиксированной длительности τ_{V1} в усло-

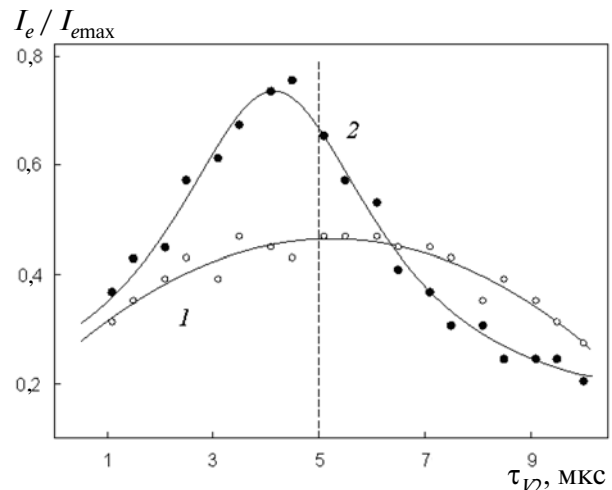


Рис. 4. Зависимости амплитуды восстановленного двухимпульсного эхосигнала от длительности второго видеоимпульса при фиксированной длительности первого ($\tau_{V1} = 5$ мкс) в двух вариантах действия на образец восстанавливающей последовательности видеоимпульсов: разнополярном (1) и однополярном (2)



виях действия на образец восстанавливающей последовательности видеопульсов (в двух вариантах: одно- и разнополярном). Из рисунка видно, что максимальное восстановление действительно достигается при $\tau_{11} = \tau_{12}$, причем уровень восстановленного отклика может приближаться к исходному.

Таким образом, в настоящей работе исследован характер действия импульсов магнитного поля на формирование откликов ядерной спиновой системы (двухимпульсного и стимулированного

эхо-сигналов) в феррите. Обнаружены особенности этого явления, связанные с восстановлением подавленного сигнала в разных последовательностях. Выявлена важная роль доменной структуры, и показано, что в случае вещества с большими полями анизотропии влияние импульсного магнитного поля на сигналы ЯМР должно происходить преимущественно по механизму, связанному со смещением доменных границ. Установленные закономерности должны быть полезны при совершенствовании радиоспектроскопических методов исследования магнитоупорядоченных веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Мамниашвили, Г.И.** Особенности влияния импульсов постоянного магнитного поля на ядерное спиновое эхо в магнетиках [Текст] / Г.И. Мамниашвили, Т.О. Гегечкори, А.М. Ахалкаци, Ц.А. Гавашели // Физика низких температур. – 2012. – Т. 38. – Вып. 6. – С. 598 – 605.
2. **Oliveira, I.S.** A model for domain and domain wall NMR signals in magnetic materials [Text] / I.S. Oliveira, A.P. Guimarães // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1997. – Vol. 170. – № 3. – P. 277 – 284.
3. **Баруздин, С.А.** Нелинейное эхо и обработка сигналов [Текст] / С.А. Баруздин. – СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2011. – 186 с.
4. **Нестеров, М.М.** Информационно-физические свойства нестационарных откликов в системах обработки импульсных сигналов [Текст] / М.М. Нестеров, И.В. Плешаков, Я.А. Фофанов // Научное приборостроение. – 2006. – Т. 16. – № 2. – С. 3 – 21.
5. **Леше, А.** Ядерная индукция [Текст] / А. Леше – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1963. – 684 с.
6. **Петров, М.П.** Электронно-ядерные взаимодействия [Текст]: В кн. «Физика магнитных диэлектриков» / М.П. Петров. – М.: Мир, 1974. – С. 177–284.
7. **Kurkin, M.I.** Problems of nuclear magnetism in magnetically ordered materials [Text] / M.I. Kurkin // Physics of Metals and Metallography. – 2000. – Vol. 89. – № 1. – P. 48 – 57.
8. **Плешаков, И.В.** Анализ поведения сигнала ядерного спинового эха в намагничиваемом феррите [Текст] / И.В. Плешаков, С.И. Голощапов, Ю.И. Кузьмин [и др.] // Научное приборостроение. – 2012. – Т. 22. – № 3. – С. 17 – 24.
9. **Zalesskij, A.V.** Application of the NMR technique to studies of the domain structure of ferromagnets [Text] / I.S. Zalesskij, A.V. Zheludev // Atomic Energy Review. – 1976. – Vol. 14. – № 1. – P. 133 – 63.
10. **Апушкинский, Е.Г.** К вопросу миниатюризации устройств обработки информации на основе ядерного спинового эха [Текст] / Е.Г. Апушкинский, А.В. Казак, О.А. Нестеров // Вопросы радиоэлектроники. – 1982. – Сер. ТПО. – Вып. 1. – С. 13 – 22.
11. **Найден, Е.П.** Магнитные свойства и параметры структуры наноразмерных порошков оксидных ферромагнетиков [Текст] / Е.П. Найден, В.А. Журавлев, В.И. Итин // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50. – № 5. – С. 857 – 863.
12. **Плешаков, И.В.** Исследование действия импульсного магнитного поля на сигнал ядерного спинового эха в феррите [Текст] / И.В. Плешаков, Н.С. Клѣхта, Ю.И. Кузьмин // Письма в ЖТФ. – 2012. – Т. 38. – № 18. – С. 60 – 67.

КЛѢХТА Николай Сергеевич – аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
klekhta@mail.ru

ПЛЕШАКОВ Иван Викторович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

1195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanple@yandex.ru

ДУДКИН Валентин Иванович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

1195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND
MATHEMATICS»
№ 1 (165) 2013**

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

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. 09.04.2013. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 26,0. Уч.-изд. л. 26,0. Тираж 1000. Заказ 61

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.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под двойными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международную систему по периодическим изданиям “Ulrich’s Periodicals Directory”. Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Объем статей докторов наук, профессоров, докторантов, соискателей ученой степени доктора наук, как правило, – 12–20 страниц формата А-4. Количество рисунков не должно превышать четырех, таблиц – трех, литературных источников – пятнадцати.

2. Объем статей преподавателей, сотрудников, соискателей ученой степени кандидата наук, как правило, – 8–15 страниц формата А-4, объем статей аспирантов – 8 страниц формата А-4. Количество рисунков не должно превышать трех, таблиц – двух, литературных источников – десяти.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (0,5–1 стр., актуальность, существующие проблемы); основная часть (постановка и описание задачи, изложение и суть основных результатов); заключительная часть (0,5–1 стр., предложения, выводы), список литературы (оформление по ГОСТ 7.07-2009).

4. Число авторов статьи не должно превышать трех человек.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word, формулы – в редакторе MS Equation. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – TNR, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5, таблицы большого размера могут быть набраны 12 кеглем. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху, снизу – 2,5 см, справа – 2 см, текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

Вместе с материалами статьи должны быть обязательно представлены:

- номер УДК в соответствии с классификатором (в заголовке статьи);
- аннотация (2–3 предложения) на русском и английском языках;
- ключевые слова (5–7) на русском и английском языках;
- сведения об авторах на русском и английском языках: ФИО, место работы, должность, ученое звание, ученая степень, контактные телефоны, e-mail;

• аспиранты предоставляют документ отдела аспирантуры, заверенный печатью;

• рецензия на имя зам. главного редактора, подписанная специалистом, имеющим ученую степень доктора наук и/или ученое звание профессора. Рецензия должна быть **ОБЯЗАТЕЛЬНО** заверена в отделе кадров. Рецензент несет ответственность за содержание статьи, достоверность представленных материалов.

- акт экспертизы о возможности опубликования материалов в открытой печати.

Предоставление всех материалов осуществляется по электронной почте на адрес редакции: physics@spbstu.ru.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

Публикация материалов аспирантов очной бюджетной формы обучения осуществляется бесплатно в соответствии с очередностью.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться **ДОСРОЧНО**.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции: (812) 294-22-85 с 10⁰⁰ до 18⁰⁰ – Александра Сергеевна или по e-mail: physics@spbstu.ru