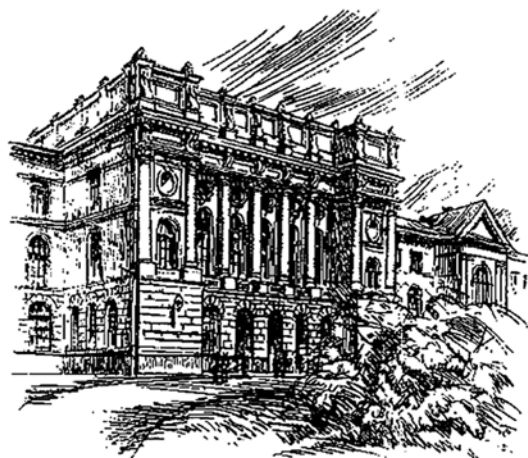




НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

2(170) 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; *Фортков 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;
Варишлов 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;
Сулис 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 года 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 ВИНТИ 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».

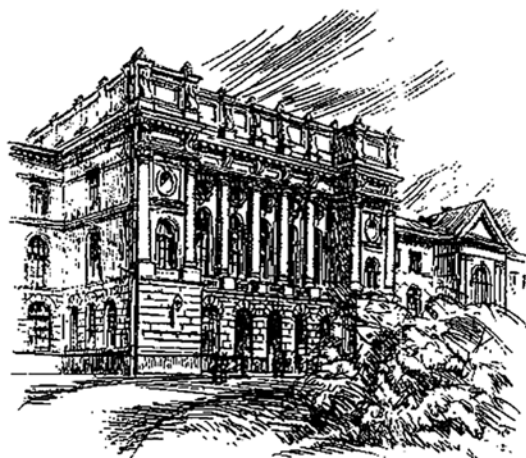
Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте <http://www.elibrary.ru>

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.

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics
and Mathematics

2(170) 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 RAS, prof.;
I.N. Toptygin – 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

<i>Из выступления президента РАН академика Ю.С. Осипова на Общем собрании Российской академии наук 28 мая 2013 года</i>	9
---	---

Физика конденсированного состояния

Донецкий Д.В., Беленький Г.Л., Воробьев Л.Е., Винниченко М.Я., Фирсов Д.А., Балагула Р.М., Бобылев А.В., Свенссон С.П. <i>Время жизни носителей заряда в сверхрешетках InAs / GaSb</i>	15
Марценюк М.А., Фуфачев М.А. <i>Параметризация киральности и оптическая активность нанокмполитов</i>	22
Давлетшина А.Д., Якшибаев Р.А., Биккулова Н.Н. <i>Зонная структура твердых растворов халькогенидов меди и серебра</i>	33
Зеликман М.А., Поцелуев К.А. <i>Пиннинг и возможные расстояния между линейными вихрями в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде</i>	39

Математическое моделирование физических процессов

Тихомиров В.В. <i>Взаимодействие макротрещины с дугообразными микротрещинами в условиях антиплоского сдвига</i>	47
Сенчина Н.П. <i>Перераспределение химических элементов под действием естественного электрического поля (на примере Буруктальского месторождения никеля, Южный Урал)</i>	57

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Ипатов А.Н. <i>Эффективный учет влияния ионного окружения на оптические свойства металлических кластеров в рамках модели желе</i>	62
--	----

Приборы и техника физического эксперимента

Сидоров В.Г., Шмидт Н.М. <i>Деградационные явления и проблема надежности полупроводниковых источников излучения</i>	71
Керносов М.Ю., Киселев Ю.В., Мельничук Г.В., Чуляева Е.Г. <i>Подавление поляризационной неустойчивости в частотно-стабилизированных гелий-неоновых лазерах</i>	81
Дворцов Д.В., Парфенов В.А. <i>Одночастотный режим работы лазерных диодов</i>	89
Ермак С.В., Зимницкий П.В., Смолин Р.В., Семенов В.В. <i>Предельная разрешающая способность самогенерирующих магнитометров на парах щелочных металлов с лазерной накачкой</i>	97

Физическая электроника

Бондаренко В.Б., Гнучев Н.М., Давыдов С.Н. <i>Энергетическое распределение электронов полевой эмиссии тестового металлического образца</i>	105
Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. <i>Особенности спектра излучения YAG:Nd-лазера в режиме одновременной генерации двух длин волн</i>	110

Физическая оптика

- Петров В.М., Хоменко А.В., Криницкий Я.А., Гарсиа М.А.** Анализ чувствительности оптического голографического интерферометра на отражательных динамических решетках..... 115
- Погода А.П., Ермолаев А.А., Лебедев В.Ф., Сметанин С.Н., Борейшо А.С.** Спектральная селективность голографических решеток коэффициента усиления в лазере с петлевым резонатором..... 121

Физическое материаловедение

- Трегулов В.В.** Улучшение и стабилизация оптических характеристик пористого кремния..... 130
- Андреева Н.В., Санина В.А., Вахрушев С.Б., Филимонов А.В., Фотиади А.Э.** Применение методов атомно-силовой микроскопии для анализа сегнетоэлектрических и магнитных свойств манганита тербия, легированного висмутом, при низких температурах..... 137
- Королева Е.Ю., Набережнов А.А., Нижанковский В.И., Поречная Н.И.** Магнитострикция и намагниченность железосодержащих стекол..... 144

Биофизика и медицинская физика

- Якимов А.П., Федечкин С.О., Нериновский К.Б., Шабалин К.А., Смирнов С.Л.** Структурная стабильность домена в виллина в отсутствие ионов кальция 149
- Лебедев Д.В., Соколова М.Л., Федорова Я.В., Побегалов Г.Е., Червякова Д.Б., Ланда С.Б., Ходорковский М.А.** Надмолекулярные структуры, образуемые *in vitro* белком TIP49A 156

Ядерная физика

- Иванищев Д.А., Иванов А.Е., Котов Д.О., Сафонов А.С.** Рождение легких нейтральных мезонов в столкновениях протонов при энергии 500 ГэВ..... 163
- Бердников А.Я., Головин А.В., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г.** Измерение выходов частиц, содержащих тяжелые кварки, в столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ .. 171
- Бердников А.Я., Головин А.В., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г.** Измерение эллиптического потока частиц, содержащих тяжелые кварки, в столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ 176

Математика

- Хохлюк В.И.** Процедуры разбиения смешанной задачи оптимизации 181

Механика

- Фоминский Д.А., Шарифулин А.Н.** Численное определение границ существования аномального конвективного течения в наклоняемом цилиндре..... 191

Дискуссионные вопросы физики

- Кириян Д.Г., Кириян Г.В.** О чандлеровском движении 197

Хроника

- Васильева М.А., Гаврикова Т.А., Ильин В.И., Мусихин С.Ф.** Композитные материалы – новое направление развития нанотехнологий (по материалам XIV Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике)..... 212

Contents

<i>From the speech of the President and full member of the Russian Academy of Sciences Yu.S. Osipov at the general meeting of the RAS on May 28, 2013.....</i>	9
--	---

Condensed matter physics

Donetsky D.V., Belenky G.L., Vorobjev L.E., Vinnichenko M.Ya., Firsov D.A., Balagula R.M., Bobylev A.V., Svensson S.P. <i>Carrier lifetime in InAs / GaSb superlattice structures.....</i>	15
Martsenyuk M.A., Fufachev M.A. <i>Parametrization of chirality and optical activity of nanocomposites ...</i>	22
Davletshina A.D., Yakshibaev R.A., Bickulova N.N. <i>The band structure of solid solutions of copper and silver chalcogenides.....</i>	33
Zelikman M.A., Potseluev K.A. <i>Pinning and possible distances between linear vortex in 3D ordered Josephson medium.....</i>	39

Simulation of physical processes

Tikhomirov V.V. <i>Macrocrack interaction with arched microcracks under antiplane shear.....</i>	47
Senchina N.P. <i>Redistribution of chemical elements under the natural electric field influence (the Buruktalsky nickel deposit, South Ural, as an example).....</i>	57

Atom physics and physics of clusters and nanostructures

Ipatov A.N. <i>Effective account of ionic surrounding influence on optical properties of metallic clusters within the jellium model.....</i>	62
---	----

Experimental technique and devices

Sidorov V.G., Shmidt N.M. <i>Degradation phenomena and the problem of semiconductor light emitting sources reliability.....</i>	71
Kernosov M.Yu., Kiselev Yu.V., Melnichuk G.V., Chulyaeva E.G. <i>Polarization instability reduction in frequency-stabilized helium-neon lasers.....</i>	81
Dvortsov D.V., Parfenov V.A. <i>Single-frequency mode regime of laser diodes.....</i>	89
Ermak S.V., Zimnitsky P.V., Smolin R.V., Semenov V.V. <i>Extreme resolution of the laser pumped alkaline vapor self-oscillating magnetometers.....</i>	97

Physical electronics

Bondarenko V.B., Gnuchev N.M., Davydov S.N. <i>Energy distribution of field-emitted electrons from test metal sample.....</i>	105
Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. <i>Spectral features of YAG:Nd laser emission in regime of simultaneous generation of two wavelengths.....</i>	110

Physical optics

- Petrov V.M., Khomenko A.V., Krinitsky Ya.A., Garcia M.A.** *Sensitivity analysis of an optical holographic interferometer based on reflective dynamic gratings* 115
- Pogoda A.P., Ermolaev A.A., Lebedev V.F., Smetanin S.N., Boreysho A.S.** *Spectral selectivity of holographic gain gratings in the multiloop cavity laser*..... 121

Physical materials technology

- Tregulov V.V.** *Improvement and stabilization of optical characteristics of the porous silicon* 130
- Andreeva N.V., Sanina V.A., Vakhrushev S.B., Filimonov A.V., Fotiadi A.E.** *Using atomic-force microscopy techniques for an analysis of ferroelectric and magnetic properties of bismuth-doped terbium manganite at low temperatures* 137
- Koroleva E.Yu., Naberezhnov A.A., Nizhankovskii V.I., Porechnaya N.I.** *Magnetostriction and magnetization of ferriiferous glasses*..... 144

Biophysics and medical physics

- Yakimov A.P., Fedechkin S.O., Nerinovskiy K.B., Shabalin K.A., Smirnov S.L.** *Structural stability of the villin domain 6 in the absence of calcium ions*..... 149
- Lebedev D.V., Sokolova M.L., Fedorova Ya.V., Pobegalov G.E., Chervyakova D.B., Landa S.B., Khodorkovskiy M.A.** *Supramolecular structures formed by TIP49A protein in vitro*..... 156

Nuclear physics

- Ivanishchev D.A., Ivanov A.E., Kotov D.O., Safonov A.S.** *Light mesons production in proton-proton collisions at 500 GeV* 163
- Berdnikov A.Ya., Golovin A.V., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G.** *The yields measurement of particles containing heavy quarks in Au+Au collisions at 200 GeV* 171
- Berdnikov A.Ya., Golovin A.V., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Riabov V.G., Riabov Yu.G.** *Elliptic flow measurement of particles containing heavy quarks in Au+Au collisions at 200 GeV*..... 176

Mathematics

- Khokhlyuk V.I.** *Partitioning procedures for a mixed optimization problem* 181

Mechanics

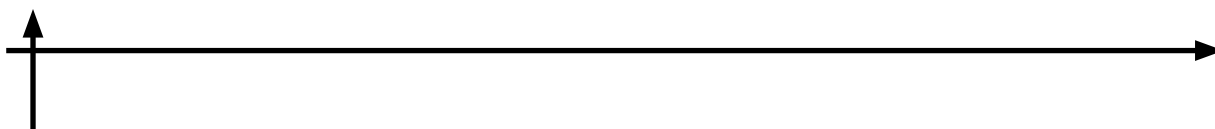
- Fominskiy D.A., Sharifulin A.N.** *Numerical determination of the borders for existence of anomalous convective flow in a cylinder tilted* 191

Open to debate

- Kiryan D.G., Kiryan G.V.** *On the Chandler wobble* 197

Chronicle

- Vasil'eva M.A., Gavricova T.A., Ilyin V.I., Musikhin S.F.** *Composite materials as a new direction of nanotechnology development (on the 14th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and Nanostructure Physics and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics* 212



29 мая 2013 года на сессии Общего собрания Российской академии наук, по итогам тайного голосования, президентом РАН был избран академик Владимир Евгеньевич Фортов. Приятно отметить, что Владимир Евгеньевич является членом редакционного совета журнала «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета».

Члены редакционного совета и редакционной коллегии журнала сердечно поздравляют Владимира Евгеньевича с избранием на этот пост.

28 мая президент РАН Юрий Сергеевич Осипов (на фотографии) в своем выступлении подвел итоги своей многолетней работы на посту президента РАН, отметив наиболее яркие достижения научных коллективов Академии. В завершение доклада Юрий Сергеевич изложил свое понимание сложившейся ситуации в российской науке в целом и РАН в частности. Общее собрание РАН встретило выступление Юрия Сергеевича Осипова аплодисментами. Когда он покидал трибуну, зал встал, отдавая должное человеку, руководившему Академией в течение последних 22 лет [Поиск № 23 от 31.05. 2013].

Вниманию читателей предлагается версия для печати материалов заключительного выступления академика Ю.С. Осипова, выставленная на сайте Российской академии наук (печатается с разрешения автора — почетного доктора СПбГПУ).

ИЗ ВЫСТУПЛЕНИЯ ПРЕЗИДЕНТА РАН АКАДЕМИКА Ю.С. ОСИПОВА НА ОБЩЕМ СОБРАНИИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК 28 МАЯ 2013 ГОДА

Уважаемые коллеги!

Это мое последнее, 22-е, вступительное слово на отчетных Общих собраниях Академии наук. Все эти выступления я писал всегда сам. И в них встречаются осознанные повторы. Не обессудьте, если и сегодня я кое-что повторю, комментируя некоторые моменты в моей многолетней работе и делясь некоторыми соображениями на будущее.

1. Безусловно, главный результат нашей с вами работы — работы сотрудников, руководителей лабораторий, отделов и, особенно, директорского корпуса, руководителей отделений, центров, Президиума, членов Академии наук и работы всех тех, кто слу-

жил Академии наук эти 22 года, состоит в том, что нелегкими усилиями воссозданная в конце 1991 года Российская академия наук выстояла в водовороте тяжелых политических, экономических, социальных, психологических проблем. Она сохранилась и давно уже развивается, она остается главным научным центром России, одним из признанных научных центров мировой науки.

И это следует особо подчеркнуть, так как многочисленные (в том числе и в нашей среде) дискуссии, споры, разговоры о финансовых проблемах, о непродуманных нововведениях, о падении престижа науки в стране — дискуссии и разговоры, которые

ведутся часто абстрактно, легковесно и безответственно, в отрыве от реалий, — создают в общественном мнении представление о глубоком научном кризисе, о крахе отечественной науки. Но они не породили в Академии выжидательных настроений, не остановили работу.

Напомню слова Президента Российской Федерации В.В. Путина, сказанные год назад здесь, в этом зале. Он благодарил Российскую академию наук (цитирую) «за огромный вклад в развитие страны, за сохранение исторических традиций служения Отечеству и народу, о которых говорил Пётр Великий, создавая Академию наук».

2. Во многих направлениях нашей деятельности мы, без сомнения, могли бы продвинуться существенно дальше, если бы было полнокровно реализовано переоснащение нашей материально-технической базы, о котором мы говорили почти на каждом Общем собрании после 2008 года.

В это же время наблюдалось резкое увеличение государственного финансирования научных исследований в вузах. Одновременно, после завершения в 2008 году пилотного проекта по повышению заработной платы научных сотрудников РАН, позволившего, в частности, кардинально переломить тенденцию снижения доли молодых ученых в академических институтах (сейчас около 30 % составляют сотрудники до 40 лет), динамика финансирования Академии резко замедлилась.

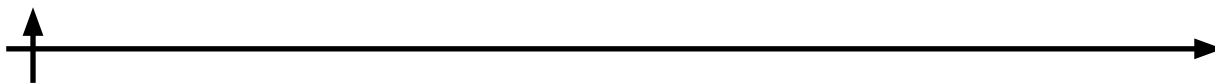
Практически после 2008 года основной прирост финансирования связан с индексацией заработной платы и коммунальных расходов. В результате в 2011 году доля фонда заработной платы (с начислениями) в общем объеме бюджетного финансирования РАН составила около 75 %, а величина внутренних бюджетных затрат на одного научного сотрудника Академии (280,4 тыс. руб.) более чем в два раза отставала от соответствующего показателя, например, в национальных исследовательских университетах (604,7 тыс. руб.). По сравнению с 2003 годом стоимость машин и оборудования в текущих ценах увеличилась в вузовском секторе в 6,9 раза, а в академическом секторе науки — в 2,9 раза. В то же время

значительная часть закупленных в вузах за последние годы приборов не используется должным образом из-за отсутствия квалифицированных кадров.

Я много раз говорил и еще раз скажу: мы кровно заинтересованы в развитии вузов и немало для этого делаем (многие сотни открытых кафедр, созданные научно-образовательные центры, факультеты и многое-многое другое). Но нельзя развивать науку в вузах, подрывая системообразующее древо отечественной науки — Российскую академию наук.

3. Считаю своим долгом проинформировать собрание о моем понимании ситуации, которая в последний год — вопреки выступлению Президента Российской Федерации В.В. Путина на майском 2012 года Общем собрании — усиленно конструировалась всеми дозволенными и недозволенными приемами вокруг Российской академии наук и отечественных фундаментальных исследований в целом, причем конструировалась, к сожалению, и не без участия (в явной и неявной форме) некоторых сотрудников Академии. Эта ситуация меня крайне беспокоит. Думаю, сегодня есть все основания говорить о беспрецедентном наступлении на академическую науку, чреватом нанесением не только ей, но и стране в целом, колоссального ущерба. Мы все помним многочисленные заявления и действия министра и других деятелей Минобрнауки.

Обществу усиленно навязывалось представление о том, что академическая форма организации фундаментальных исследований безнадежно устарела. Активно внедрялась мысль о полной бюрократизации всей системы управления академической наукой. В центре критики оказывается Президиум Российской академии наук. Дело дошло до того, что министр образования и науки РФ считал возможным публично давать оскорбительные характеристики высшему органу управления текущей деятельностью Академии и его членам. Исследовательские институты представляются как ненужные структуры, сковывающие деятельность «подлинных творцов науки» — лабораторий. Действующие механизмы распределения финансовых ресурсов академи-



ческим сообществом между различными направлениями исследований объявляются препятствием на пути формирования здоровой конкурентной среды в фундаментальной науке. Сама Российская академия наук отождествляется с супермонополией, подавляющей исследования в других секторах науки. Назойливо проводилась мысль о том, что научный потенциал, сосредоточенный в Российской академии наук и других государственных академиях, полностью деградировал. В кадровой сфере — демографический кризис, ответственность за который министр образования и науки РФ публично возложил на руководство РАН. Молодежь не только малочисленна, но и не имеет перспектив, поскольку все высокие позиции в академической науке заняты престарелыми учеными, всячески блокирующими любые возможности изменения сложившегося положения.

И, как результат, — непрерывные обвинения в неэффективности научных исследований, проводимых РАН. Руководству страны настойчиво подбрасывается идея о том, что низкая отдача от существенно возросших за 2000-е годы ассигнований на науку и инновационную деятельность связана, главным образом, с низкой результативностью исследований в академическом секторе науки. При этом идет непрерывная манипуляция данными о публикационной активности и индексе цитируемости в зарубежных научных журналах, которые (данные) упорно навязываются в качестве важнейших для государства показателей эффективности фундаментальной науки.

Со ссылкой на деградацию кадрового потенциала предлагается резко сократить численность ученых, занятых в фундаментальных исследованиях, оказывая поддержку лишь тем из них, которые имеют высокие показатели публикационной активности и цитируемости в ведущих западных изданиях. Для проведения «санации» имеется в виду использовать институт зарубежной экспертизы, причем бремя финансирования этой деятельности возлагается на сами инспектируемые организации. Наконец, обеспечение достойного уровня российской фундаментальной науки не мыслит-

ся без широкого привлечения зарубежных специалистов и представителей научной диаспоры на условиях, кардинальным образом отличающихся от тех, которые распространяются на отечественных ученых.

Подлинная война была развернута в нормативно-правовой сфере. Вопреки протестам РАН и других государственных академий была принята Программа инновационного развития страны, которая в части, касающейся фундаментальных исследований, базируется на изложенной выше концепции. Минобрнауки всячески пыталось добиться утверждения Правительством таких проектов Государственной программы фундаментальных исследований, которые привели бы к передаче министерству всех основных функций по организации и управлению фундаментальными исследованиями в стране. Одновременно, несмотря на имеющиеся поручения, министерство в течение длительного времени блокировало вынесение на утверждение в правительство Программы фундаментальных исследований государственных академий наук. Между тем, наличие такой программы предусмотрено законом «О науке и государственной научно-технической политике», а сама она является основанием для финансирования государственных академий.

Наконец, почти год правительство, вопреки установленному порядку, не принимает решения по существу внесенных общими собраниями государственных академий поправок в их уставы. Парадоксально, но речь идет о поправках, прямо вытекающих из вошедшего в силу в ноябре прошлого года закона «О внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации в части, касающейся деятельности государственных академий наук и подведомственных им организаций». Участвовавшие в согласовании представители органов исполнительной власти все это время пытались вынудить государственные академии дополнительно внести в уставы не вытекающую из требований упомянутого закона поправку, лишаящую их права на создание, ликвидацию и реорганизацию подведомственных организаций. Дело дошло до того, что вместо ответа по существу

представленных поправок РАН и Академия образования получили указание о разработке новых редакций их уставов. Пропагандировались и другие новшества.

Вы спросите, как я воспринимаю происходящее. Ответу: как попытки начать «культурную революцию» в российской науке с целью ее разрушения, захвата ресурсов; как попытки разрушения и уничтожения одной из главных и ярких исторических культурных традиций в России — академической науки; как полное непонимание (не исключено — умышленное) устройства РАН, ее задач и функций, ее участия в решении государственных и общественных задач; как уничтожение всемирно известного бренда «Российская академия наук»; наконец, как навязывание западной схемы организации науки, причем в извращенной форме.

Не берусь судить о подлинных мотивах тех лиц, которые стоят за этим поворотом в государственной научной политике.

Мой общий вывод состоит в том, что обозначившиеся перемены в научной политике идут вразрез с задачами всесторонней модернизации нашей страны. И свою точку зрения я дважды изложил Президенту Российской Федерации в устной и письменной форме и получил поддержку.

Из всего сказанного, разумеется, никак не следует, что российская наука в целом и Российская академия наук в частности не нуждаются ни в каких переменах, ни в усовершенствовании работы. Но эти перемены должны быть мотивированы не идеологическими предпочтениями или, что еще хуже, частными интересами отдельных лиц, а новым уровнем задач, стоящих перед нашей страной, и мотивированы логикой развития самой науки.

Проблематика организации фундаментальных исследований и задач, стоящих в этой области, приобрела сегодня исключительно актуальный характер. И в этой связи большое значение имеет предстоящее осенью этого года обсуждение проблем развития фундаментальной науки на заседании Совета по науке и образованию при Президенте Российской Федерации. Этому заседанию должны предшествовать широкое и содержательное обсуждение проблем в

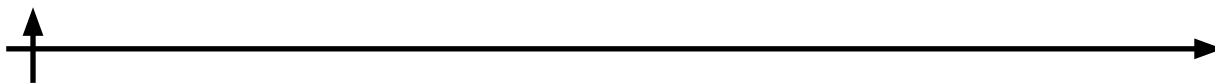
самом научном сообществе и большая подготовительная работа нового руководства РАН.

Считаю необходимым также сказать, что ценой огромных усилий удалось парировать многие инициативы Минобрнауки. Правительство РФ утвердило Программу фундаментальных исследований госакадемий и поддержало предложенные РАН изменения в министерские проекты Государственной программы развития науки и технологий и Государственной программы фундаментальных исследований. Кроме того, администрацией Президента РФ была внесена в Правительство РФ исключительно важная для нас поправка о наделении госакадемий правом создавать, ликвидировать и реорганизовывать подведомственные организации. Поправка была представлена Правительством в Думу и единогласно принята.

4. Академия наук сохранилась и развивается и потому, что с самого момента ее воссоздания понимали, что она не должна в своей работе исходить из политических и идеологических вкусов, пристрастий и действий всевозможных партий и групп, отдельных лиц, в том числе и работающих в Академии наук. И это спасало нас не раз. Достаточно вспомнить 1993 год.

И сейчас я настаиваю: Академия не должна играть в политические игры, но она обязана конструктивно сотрудничать с государством на профессиональной основе и на этой основе защищать и обеспечивать все наши права и существование. Опираясь на конструктивное профессиональное взаимодействие с властью, мы должны добиваться, чтобы на всех уровнях государственного управления у правительства было ясное понимание, что поддержка науки и академического сообщества не есть благотворительность и одолжение. Это миссия и функция государства, принятая во всем цивилизованном мире, миссия и функция, уходящие глубокими корнями в российские традиции.

Те во власти, кто уверен в высокой значимости отечественной науки, в решении проблем социально-экономического и духовного развития России, столь же отчетливо должны понимать, что наука (главным



образом фундаментальная) без серьезной государственной поддержки не сможет себя проявить как социально эффективное явление.

Безусловно, Академия должна усиливать свою роль в обществе и государстве. Речь идет не об обслуживании политики, а о том, чтобы, безусловно выполняя свою главную уставную обязанность — создавать новые знания, давать обществу глубокий анализ происходящих процессов и рекомендации по практической деятельности. И должен сказать, что диалог с властью, обмен мнениями в последние годы существенно нарастает. И во всей этой работе трудно переоценить роль наших обществоведов и гуманитариев.

5. За последние годы я много раз говорил, что самоуправление — великое право академического сообщества. Оно завоевано двадцать с лишним лет назад. Без этого права говорить о развитии современной эффективной фундаментальной науки вряд ли содержательно.

Это право мы обязаны хранить и оберегать, пользоваться им ответственно. Его недопустимо дискредитировать, путать с вседозволенностью. Право самоуправления совсем не означает, что организационная структура Академии должна быть заморожена на веки вечные.

Организация нашей работы, сохраняя лучшие традиции академического сообщества, должна быть живой, мобильной, гибкой на всех уровнях: лаборатории, отдела, института, отделений, Президиума, Общего собрания, научно-вспомогательных подразделений. Она должна обеспечивать разумную конкуренцию на всех уровнях.

По объективным и субъективным причинам мы недостаточно работаем в этом направлении. Перемены в Академии, конечно, необходимы, об этом уже говорилось. Ведь Академия — живой организм, существующий в современных, отнюдь не ласковых реалиях.

Тематическое, особенно структурно-организационное, кадровое обновление в науке, в том числе в фундаментальной, — естественный процесс. И такие изменения происходят в Академии наук, но порой

медленнее, чем хотелось бы. Я просмотрел материалы почти всех наших отчетных Общих собраний за последние 20 лет, стенограммы многих заседаний Президиума. И утвердился в понимании, что целый ряд дельных, существенных предложений по улучшению нашей работы, сделанных на них, так и остался только на бумаге. Это серьезное упущение, и, прежде всего, Отделений и членов Президиума, ответственных за направление работы. И в связи с этим скажу, что стремление переждать, отложить, «замотать» принятие непопулярных и порой даже болезненных решений, хотя и позволяет продлить относительно спокойную, бесконфликтную жизнь администрации некоторых институтов, некоторых руководителей Отделений и научных центров, некоторых членов Президиума Академии и его аппарата, — такое стремление может завести Академию только в тупик.

Все должны понимать, что ни одна страна в мире не в состоянии поддерживать из бюджета и развивать весь фронт научных исследований. Поэтому столь важен для Академии (в рамках права самоуправления) выбор разумного баланса между сосредоточением усилий на важнейших направлениях и поддержанием многообразия научных исследований в разных областях — поддержанием академической среды в целом.

Развитие многообразия научных исследований — условие полнокровной жизни организма фундаментальной науки и возникновения принципиально новых идей и направлений прорыва к новым знаниям. Подобная стратегия развития науки аналогична экологической стратегии сохранения биоразнообразия биогеоценозов для развития биосферы в целом. Только в таком случае фундаментальная наука может служить для государства своеобразной системой слежения в бескрайнем море знаний и помогать выбирать верные решения.

6. И последнее. Главная опасность для Академии наук — не внешние нападки и упреки (кстати, часто малопродуманные и бессодержательные, но иногда, признаем, и справедливые) и не фантастические некалифицированные предложения по реформированию академической науки.

Главная опасность исходит изнутри — в попытках разрушения академических традиций и правил этичного интеллигентного взаимодействия внутри самого академического сообщества.

На поле Академии внедряются пиаровские технологии и приемы из внеакадемической жизни, замешанные порой на поисках компромата, на распространении ложных слухов и домыслов. Иногда обсуждения и споры принимают недопустимые формы, и понятно, кто на них (обсуждениях) солирует.

Все это дезориентирует наше сообщество, разъедает его, создает почву для личных, хотя и временных, успехов, слава Богу, немногочисленных, — очень зрелых павликов морозовых, некоторые из которых еще в недалеком прошлом на идеологическом пару учили нас житью-бытью, подобострастно служили власти, выполняя ее указания, и с удовольствием пользова-

лись идеологическими привилегиями.

Все это ослабляет жизненный иммунитет Академии, разрушает ее облик в глазах общества.

Почему мы не осуждаем все это открыто?

Поэтому скажу: Академическое Отечество в опасности!

Глубокоуважаемые коллеги!

На этом Общем собрании мы примем решение, которое определит на многие годы жизнь нашей Академии, жизнь ее сотрудников, решение, которое имеет огромное значение для развития науки в стране.

Я призываю всех во имя славной истории Российской академии наук и ее будущего консолидироваться вокруг президента РАН, которого мы выберем.

Мы все должны проникнуться общей ответственностью за судьбу Российской академии наук.

Я верю в наш успех!

119991, г. Москва, Ленинский пр., 14
Тел.: (495) 938-03-09 (справочное бюро),
Факсы: (495) 954-3320 (Ленинский пр., 14),
(495) 938-18-44 (Ленинский пр., 32а)

УДК 535.3

*Д.В. Донецкий, Г.Л. Беленький,
Л.Е. Воробьев, М.Я. Винниченко, Д.А. Фирсов,
Р.М. Балагула, А.В. Бобылев, С.П. Свенссон*

ВРЕМЯ ЖИЗНИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В СВЕРХРЕШЕТКАХ InAs / GaSb

*D.V. Donetsky¹, G.L. Belenky²,
L.E. Vorobjev³, M.Ya. Vinnichenko⁴, D.A. Firsov⁵,
R.M. Balagula⁶, A.V. Bobylev⁷, S.P. Svensson⁸*

^{1, 2} Department of Electrical and Computer Engineering, Stony Brook University,
100 Nicolls Rd, Stony Brook, NY 11794, United States.

^{3, 4, 5, 6, 7} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

⁸ U.S. Army Research Laboratory, Sensors & Electron Devices Directorate,
2800 Powder Mill Rd, Adelphi, Maryland 20783-1197, United States.

CARRIER LIFETIME IN InAs/GaSb SUPERLATTICE STRUCTURES

Исследована фотолюминесценция высокого временного разрешения в сверхрешетках InAs/GaSb при различных энергиях возбуждения, получены спектры фотолюминесценции и поглощения, исследована фотолюминесценция в условиях слабой синусоидальной модуляции интенсивности излучения накачки. По зависимости интенсивности фотолюминесценции от частоты модуляции определено время жизни неосновных носителей заряда в структуре. Аналогичные результаты получены с использованием фотолюминесценции высокого временного разрешения. Показано, что фактором, ограничивающим время жизни неосновных носителей заряда в исследуемой структуре, является рекомбинация Шокли–Рида–Холла.

СВЕРХРЕШЕТКИ. ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ. ВРЕМЯ ЖИЗНИ. ИНФРАКРАСНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ.

The time-resolved photoluminescence (PL) data are studied for strained-layer InAs / GaSb superlattice structures at different excitation powers. Photoluminescence and absorption spectra are obtained. The minority carrier lifetime is obtained from PL frequency response to sin-wave modulated excitation. Similar results follow from analysis of the time-resolved PL data. It has been concluded that the minority carrier lifetime is limited by Shockley-Read-Hall recombination.

SUPERLATTICE. OPTICAL ABSORPTION. CARRIER LIFETIME. INFRARED LIGHT.

Структуры со сверхрешетками из напряженных слоев InAs/GaSb перспективны для использования в качестве фотоприемников и лазеров среднего инфракрасного (ИК) диапазона спектра [1 – 4]. Для опти-

мизации устройств на базе сверхрешеток с напряженными слоями необходимо более детальное понимание процессов рекомбинации носителей заряда.

В умеренно легированных полупрово-

дниковых соединениях A^3B^5 время жизни неосновных носителей заряда, как правило, определяется с помощью измерения фотолюминесценции с высоким временным разрешением. Если концентрация неравновесных носителей заряда незначительно превышает концентрацию основных носителей заряда, то по затуханию фотолюминесценции (ФЛ) можно определять время жизни неосновных носителей заряда. Однако при малой концентрации неравновесных носителей заряда довольно сложно обнаружить необходимый малый сигнал на фоне шума. Для повышения отношения сигнал/шум необходимо уменьшить полосу пропускания системы. В настоящей работе приводятся результаты непосредственного измерения времени жизни носителей заряда по частотному отклику ФЛ при синусоидальном возбуждении. Такая методика позволяет понизить уровень накачки (концентрацию неравновесных носителей заряда) и одновременно уменьшить шумы.

Скорость изменения числа неравновесных носителей заряда в единицу времени определяется стационарной скоростью генерации G_0 , модулированной синусоидальным сигналом с амплитудой $G_1 \ll G_0$ и частотой ω , а также рекомбинацией носителей заряда с характерным временем рекомбинации τ :

$$\frac{d(\Delta n)}{dt} = G_0 + G_1 \cos(\omega t) - \frac{\Delta n}{\tau}. \quad (1)$$

Решение уравнения (1) дает зависимость изменения концентрации носителей заряда от времени, содержащую стационарную и осциллирующую части:

$$\Delta n(t) = G_0 \tau + \frac{G_1 \tau}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}} \cos(\omega t - \varphi), \quad (2)$$

где φ — начальный сдвиг фазы.

Зависимость сигнала ФЛ на частоте ω пропорциональна осциллирующей части изменения концентрации:

$$I_{PL}(\omega) \sim \frac{G_1 \tau}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}}. \quad (3)$$

Измерение зависимости времени затухания ФЛ от уровня стационарного возбуждения $\tau(G_0)$ позволяет определить время жизни неосновных носителей τ_0 в пределе

$G_0 \rightarrow 0$. В материале p -типа с собственной концентрацией дырок p_0 избыточная концентрация неосновных носителей заряда (электронов) мала: $\Delta n \ll p_0$. Исходя из этого, время жизни неосновных носителей заряда может быть представлено следующим образом:

$$\frac{1}{\tau_0} = A + B p_0, \quad (4)$$

где A , B — коэффициенты рекомбинации Шокли–Рида–Холла и излучательной рекомбинации, соответственно. В уравнении (4) мы пренебрегли оже-рекомбинацией ввиду малого значения концентрации носителей заряда и низкой температуры.

Поскольку стационарная интенсивность ФЛ измеряется с помощью узкополосного усилителя, отклик ФЛ на частоте $\omega \ll 1/\tau$ определяется осциллирующей концентрацией электронов и дырок с общей амплитудой $G_1 \tau$ (см. формулу (2)) и соответствующими равновесными концентрациями дырок $(p_0 + G_0 \tau)$ и электронов $(G_0 \tau)$:

$$I_{PL}(G_0) \Big|_{\omega \rightarrow 0} \sim \frac{B}{\varphi} (p_0 + 2G_0 \tau) G_1 \tau. \quad (5)$$

Из зависимости интенсивности ФЛ от уровня накачки (5) можно определить собственную концентрацию равновесных основных носителей заряда p_0 . Знание этой величины важно для оптимизации параметров роста сверхрешеток, а также для определения коэффициента рекомбинации Шокли–Рида–Холла, связанного с генерационно-рекомбинационной частью темнового тока p – n -перехода.

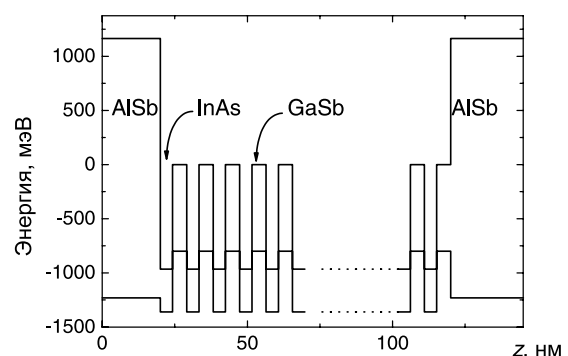


Рис. 1. Схематичная зонная диаграмма структуры с напряженными слоями InAs/GaSb

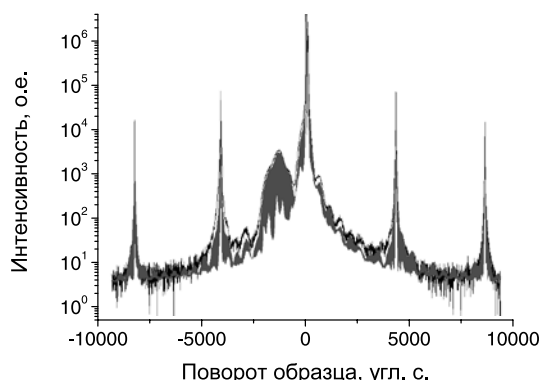


Рис. 2. Спектр рентгеновской дифракции высокого разрешения структуры с напряженными слоями InAs/GaSb

Исследуемая структура со сверхрешеткой InAs/GaSb была выращена методом молекулярно-пучковой эпитаксии на слабо легированной подложке *p*-GaSb. Активная область состояла из 200 периодов InAs (7 монослоев) и GaSb (8 монослоев), для пространственного ограничения носителей заряда она была ограничена слоями AlSb толщиной 20 нм. Схематичная зонная диаграмма структуры представлена на рис. 1. На поверхности структуры был выращен слой GaSb толщиной 20 нм.

Анализ структур с помощью спектров рентгеновской дифракции высокого разрешения показал наличие в сверхрешетке малых остаточных напряжений и резких гетерограниц. На рис. 2 представлен спектр рентгеновской дифракции высокого разрешения, полученный для исследуемых структур. Интенсивные узкие дифракционные пики указывают на хорошо сформировавшиеся периоды сверхрешетки напряженных слоев InAs/GaSb и высокое качество кристаллической структуры образцов. Пик нулевого порядка от сверхрешетки накладывается на пик от подложки, что означает, что напряженные слои InAs/GaSb не имеют отклонения от кубической решетки, а остаточные напряжения в структуре пренебрежимо малы. Вероятно, столь низкий уровень механических напряжений был достигнут благодаря формированию переходного слоя InSb между слоями InAs и GaSb в каждом периоде сверхрешетки. Исходя из расстояния между дифракционными пика-

ми, можно оценить период сверхрешетки, который составил 45,45 Å. Результаты аппроксимации полученных спектров рентгеновской дифракции позволяют предположить, что толщины слоев InAs, InSb и GaSb составили 19,28, 1,93 и 24,24 Å, соответственно. Широкий пик слева от пика нулевого порядка соответствует напряженным ограничивающим слоям AlSb. Толщина слоя AlSb в расчетах считалась равной 19,2 Å.

Спектры ФЛ были измерены на установке, представленной на рис. 3. Для измерения временной зависимости ФЛ избыточные носители заряда возбуждались в структуре либо с помощью модулируемого током лазерного диода с обратной оптической связью по оптоволокну, излучающего на длине волны 1,3 мкм, либо с помощью ИАГ-лазера, легированного неодимом ($\lambda = 1064$ нм, $\Delta t = 0,5$ нс, $\Delta t < \tau$).

Спектры фотолюминесценции и поглощения структуры были получены при $T = 77$ К с помощью фурье-спектрометра. Они представлены на рис. 4. Спектры ФЛ измерялись при мощности возбуждения избыточных носителей заряда 1 Вт/см² на длине волны 0,98 мкм (энергия кванта 1,26 эВ). Из рис. 4 видно, что спектр ФЛ соответствует переходам носителей заряда между основными состояниями краев запрещенной зоны: зоны проводимости С и валентной зоны V1. Отдельной стрелкой на рис. 4 указано положение переходов между основным состоянием в зоне прово-

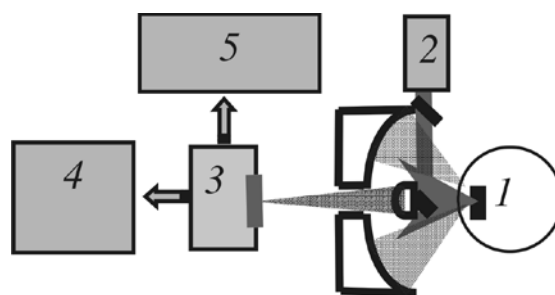


Рис. 3. Блок-схема экспериментальной установки для получения времяразрешенных спектров ФЛ:
1 – азотный криостат с образцом, 2 – диодный лазер, 3 – фотоприемник InSb с фильтром, 4 – осциллограф, 5 – селективный микровольтметр

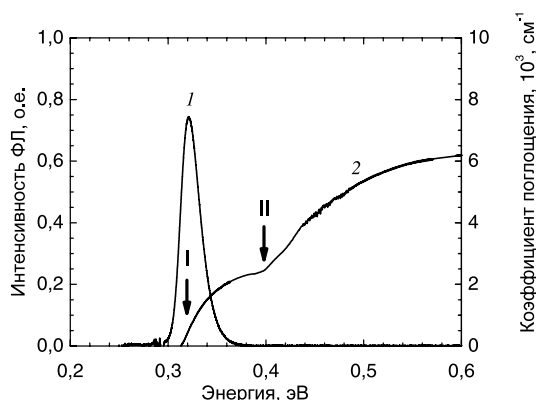


Рис. 4. Спектры фотолуминесценции (1) и поглощения (2) при $T = 77$ К.

I, II – переход C-V1 и переход C-V2 соответственно

димости и вторым состоянием в валентной зоне сверхрешетки C-V2. Из-за того, что энергия накачки меньше ширины запрещенной зоны AlSb, в этих ограничивающих слоях свет не поглощался. Фотолуминесценции из подложки GaSb обнаружено не было. Этот результат согласуется с предположением, что большая часть падающего излучения поглощается в самой структуре и не доходит до подложки. Коэффициенты поглощения света с длинами волн 1,0 и 1,3 мкм в сверхрешетке InAs/GaSb, по нашим оценкам, составляют $3,4 \cdot 10^4$ и $2,1 \cdot 10^4$ см⁻¹, соответственно [5]; это отвечает 95 и 85 % поглощения падающего света на всей сверхрешетке.

Временные зависимости фотолуминесценции представлены на рис. 5 для разных энергий кванта излучения накачки: 23, 11 и 2,3 нДж. С учетом известной площади поперечного сечения лазерного луча ($3,4 \cdot 10^{-3}$ см²), было рассчитано значение максимального уровня возбуждения – $2,5 \cdot 10^{16}$ см⁻³ для энергии импульса 2,3 нДж. Для этого уровня возбуждения из временных зависимостей была рассчитана константа спада ФЛ (см. рис. 5). Ее значение составило 42 нс. На рис. 6 показана зависимость интенсивности ФЛ от интенсивности накачки и, соответственно, от концентрации неравновесных носителей заряда. При малых интенсивностях накачки количество инжектированных носителей заряда невелико, следовательно, квазиуровни Фер-

ми электронов и дырок находятся вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, соответственно. В этом случае электроны и дырки описываются невырожденной статистикой. Таким образом, интенсивность фотолуминесценции прямо пропорциональна концентрациям инжектированных электронов Δn и дырок Δp [6]:

$$J_{PL}(t) \sim \Delta n(t) \cdot \Delta p(t), \quad (6)$$

$$J_{PL}(t) \sim [\Delta n(t)]^2. \quad (7)$$

Спадающий участок зависимости ФЛ от времени можно аппроксимировать экспонентой с характерным временем τ , следовательно (см. формулу (8)):

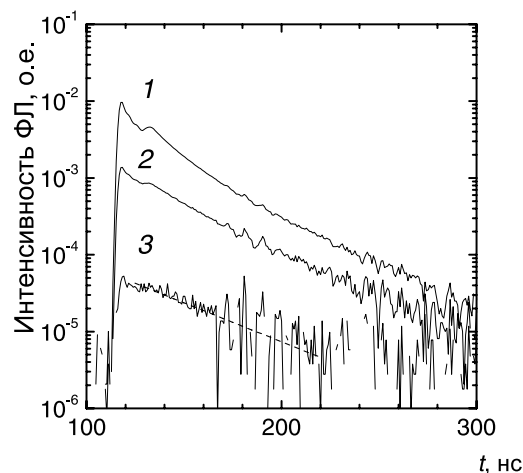


Рис. 5. Временные зависимости ФЛ при различных энергиях возбуждения, нДж: 23 (1), 11 (2), 2,3 (3)

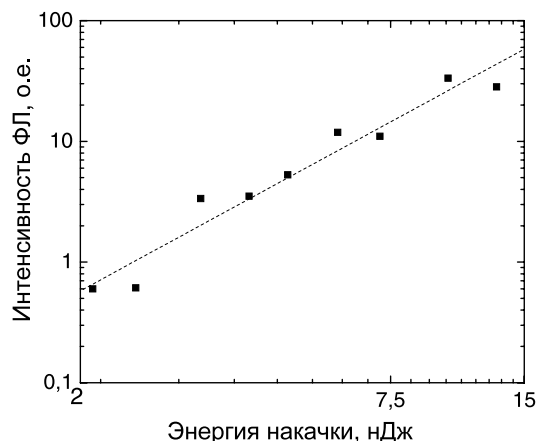


Рис. 6. Зависимость интенсивности ФЛ от энергии возбуждения

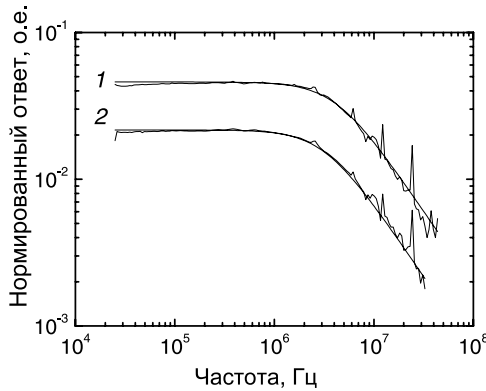


Рис. 7. Частотный отклик ФЛ на малое синусоидальное возбуждение для двух интенсивностей постоянной накачки 9,8 мВт (1) и 5,5 мВт (2) при $T = 77$ К

$$J_{PL}(t) \sim \exp(-2t / \tau). \quad (8)$$

Заметим, что при уменьшении интенсивности накачки возможен переход от квадратичной (см. формулу (7)) к линейной зависимости от концентрации. Квадратичная зависимость интенсивности ФЛ от уровня возбуждения (см. рис. 6) указывает, что исходная концентрация носителей в обоих образцах была ниже, чем $2,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

При уровнях возбуждения неравновесных носителей заряда ниже, чем 10^{16} см^{-3} , время жизни носителей заряда определялось путем измерения отклика ФЛ на периодическое возбуждение. На рис. 7 представлены полученные результаты зависимости фотоответа от частоты модулирующего сигнала. Время жизни носителей заряда при данной мощности возбуждения было определено путем аппроксимации кривых, показанных на рис. 7, уравнением (3). На рис. 8 приведены зависимости обратного времени жизни носителей заряда и отклика ФЛ от мощности накачки на низкой частоте (50 кГц). При площади возбуждения $1,5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2$ и мощности 2 мВт оценки дают для значения концентрации неравновесных носителей заряда величину $3,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Из экстраполяции экспериментальной зависимости $1/\tau$ к нулевым значениям интенсивности накачки (см. рис. 8) было найдено значение времени жизни неосновных носителей заряда $\tau = 80$ нс. Быстрое монотонное уве-

личение интенсивности низкочастотного отклика от мощности, начиная от самого низкого уровня накачки, показало, что исходная концентрация носителей была ниже, чем $3,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Сублинейный характер этой зависимости определяется уравнением (5) и связан с уменьшением времени жизни носителей заряда при увеличении мощности возбуждения. Сопоставление наклона зависимости $1/\tau(G_0)$ с ростом излучательной рекомбинации позволило определить коэффициент $B = 4 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3/\text{с}$ при $T = 77$ К. Вычитание возможного излучательного слагаемого из времени жизни неосновных носителей в предположении, что значение собственной концентрации носителей заряда не превышает $3,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, позволило оценить величину времени жизни носителей заряда при рекомбинации Шокли–Рида–Холла; она находится в диапазоне от 80 до 90 нс. Таким образом, можно сделать вывод, что найденное время жизни неосновных носителей заряда при низком возбуждении определяется в основном временем рекомбинации Шокли–Рида–Холла.

Таким образом, по зависимости ФЛ от частоты модуляции возбуждающего излучения определено время жизни неосновных носителей заряда $\tau = 80$ нс для нелегированной короткопериодной напряженной сверхрешетки. Аналогичные результаты получены с использованием фотолюминесценции высокого временного разрешения. По зависимости интенсивности

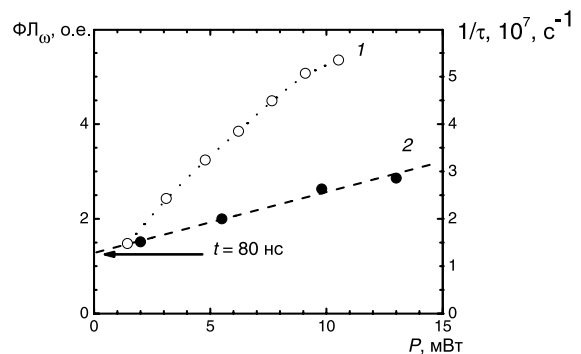


Рис. 8. Зависимости отклика ФЛ (1) и обратного времени жизни носителей заряда (2) от мощности накачки на низкой частоте (50 кГц)

ФЛ от мощности возбуждения определена собственная концентрация носителей заряда, не превышающая $3,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Показано, что фактором, ограничивающим время жизни неосновных носителей заряда, является рекомбинация Шокли–Рида–Холла.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.132.21.1408 «Фотоэлектрические и оптические свойства кристаллических наноструктур на основе полупроводников Ge/Si и AZB5 в среднем инфракрасном диапазоне спектра», а также грантов Правительства Санкт-Петербурга и РФФИ №11-02-01128.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Koerperick, E.J.** Active region cascading for improved performance in InAs-GaSb superlattice LEDs [Text] / E.J. Koerperick, J.T. Olesberg, J.L. Hicks, [et al.] // Quantum Electronics, IEEE Journal of. — 2008. — Vol. 44. — P. 1242–1247.
2. **Haugan, H.J.** Optimizing residual carriers in undoped InAs/GaSb superlattices for high operating temperature mid-infrared detectors [Text] / H.J. Haugana, S. Elhamrib, B. Ullrichc, [et al.] // Journal of Crystal Growth. — 2009. — Vol. 311. — № 7. — P. 1897–1900.
3. **Zhang, W.D.** InAs/GaSb broken-gap heterostructure laser for terahertz spectroscopic sensing application [Text] / W.D. Zhang, D.L. Woolard // Nanotechnology, IEEE Transactions on. — 2010. — Vol. 9. — Iss. 5. — P. 575–581.
4. **Gautam, N.** Performance improvement of longwave infrared photodetector based on type-II InAs/GaSb superlattices using unipolar current blocking layers [Text] / N. Gautam, H.S. Kim, M.N. Kutty [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2010. — Vol. 96. — Iss. 23. — P. 231107-1–231107-3.
5. **Levinshtein, M.** Handbook series on semiconductor parameters [Text] / M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur. — New Jersey: World Scientific, 1996. — 232 с.
6. **Рывкин, С.М.** Фотоэлектрические явления в полупроводниках [Текст] / С.М. Рывкин. — М.: Физматгиз, 1963. — 496 с.

ДОНЕЦКИЙ Дмитрий Владимирович (DONETSKY Dmitry) — *PhD, профессор (professor) факультета электротехники и компьютерных технологий университета штата Нью-Йорк в Стоуни Брук, США.*

Department of Electrical and Computer Engineering, State University of New York at Stony Brook, New York 11794-2350, USA.

БЕЛЕНЬКИЙ Григорий Львович (BELENKY Gregory) — *доктор физико-математических наук, почетный профессор (distinguished professor) факультета электротехники и компьютерных технологий университета штата Нью-Йорк в Стоуни Брук, США.*

Department of Electrical and Computer Engineering, State University of New York at Stony Brook, New York 11794-2350, USA.

ВОРОБЬЕВ Леонид Евгеньевич — *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

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

ВИННИЧЕНКО Максим Яковлевич — *старший преподаватель кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

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

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич — *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

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

БАЛАГУЛА Роман Михайлович — аспирант кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

rmbal@spbstu.ru

БОБЫЛЕВ Александр Викторович — аспирант кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

mvin@spbstu.ru

СВЕНССОН Стефан (Svensson Stefan P.) — Дирекция отдела сенсоров и электроники, Исследовательская лаборатория армии США, Адельфи, штат Мэриленд, США.

U.S. Army Research Laboratory, Sensors & Electron Devices Directorate, Adelphi, Maryland, USA.

УДК 537.226.5

М.А. Марценюк, М.А. Фуфачев

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ КИРАЛЬНОСТИ И ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НАНОКОМПОЗИТОВ

M.A. Martsenyuk, M.A. Fufachev

Perm State National Research University,
15 Bukireva St., Perm, 614990, Russia.

PARAMETRIZATION OF CHIRALITY AND OPTICAL ACTIVITY OF NANOCOMPOSITES

В работе введены скалярные параметры χ_1, χ_2, χ_3 , позволяющие оценить киральность агрегатов из диэлектрических частиц. Киральные агрегаты разделены на три класса в зависимости от симметрии и по признаку нулевых значений параметров. Для анализа связи между киральностью и оптической активностью рассмотрены гармонические деформации агрегатов, при этом обнаружены интересные эффекты. Предложенная параметризация может быть использована для описания стереоселективного взаимодействия между киральными частицами.

ИСКУССТВЕННЫЕ ГИРОТРОПНЫЕ СРЕДЫ. КИРАЛЬНОСТЬ СРЕДЫ. ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ КИРАЛЬНОСТИ. ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ. СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ.

The scalar parameters to assess the chirality of aggregates of dielectric particles have been introduced. The chiral aggregates were classified into three parts by characters of symmetry and zero-value of parameters. To analyze the relationship between chirality and optical activity the harmonic deformation units were considered bringing out effects of interest. The parametrization proposed can be used to describe the interaction between the stereoselectivity of chiral particles.

ARTIFICIAL GYROTROPIC MATERIALS. CHIRALITY OF MEDIUM. PARAMETRIZATION OF CHIRALITY. OPTICAL ACTIVITY. STEREOSELECTIVE INTERACTION.

Одной из загадок природы на сегодняшний день является наличие в составе всех живых объектов только левых энантиомеров аминокислот и только правых сахаров. Такая «избирательность» ставит чрезвычайно интересный вопрос о связи киральности объектов (геометрическая характеристика, присущая системам, которые при отражении в плоском зеркале не совпадают друг с другом ни при каких поворотах и перемещениях) с их физическими свойствами. Например, встает вопрос о связи киральности с естественной оптической активностью (ЕОА), а именно различием в реакции структуры на свет с разной поляризацией. Указанной активностью обладают многие объекты живой природы, ее также можно

создать искусственно, конструируя среду особым образом [1 – 3]. К новым объектам изучения относятся киральные нанометакомпозиты [4, 5]. Оптические свойства этих структур исследуют такие области оптики, как нанооптика и наноплазмоника; понимание связи между ЕОА и киральностью может быть использовано также в различных биохимических приложениях.

Часто ЕОА связывают с киральностью, и, действительно, условием существования естественной оптической активности является отсутствие центра симметрии у молекулы или структурной единицы нанокompозита. Однако, как известно [6], для групп низкой симметрии C_s , C_{2v} , S_4 и D_{2d} естественная оптическая активность возможна



и при наличии плоскости симметрии или зеркально-поворотной оси. Таким образом, наблюдаемость ЕОА не обязательно предполагает существование кристалла/молекулы в двух энантиоморфных формах, т. е. зеркальные отражения объекта могут совпадать друг с другом, и, следовательно, киральность не является определяющим признаком наличия ЕОА.

В статье [7] был предложен способ формирования нанокиральной среды по заданной группе симметрии методом орбит, а также реализован численный метод расчета угла вращения плоскости поляризации (УВПП), выражаемого через тензор гирации среды. Основная идея метода состоит в том, что в окрестности данной точки оптически активной среды под действием внешнего электрического поля волны возникает неоднородное распределение диполей, которое можно описать при помощи аксиального тороидного момента $\mathbf{G}$ [8]. Тензор гирации оказывается пропорциональным перекрестной диполь-тороидной поляризуемости среды, которую можно найти, вычисляя наведенный тороидный момент распределения диполей при наложении однородного внешнего поля. Как показано ниже, методы, развитые в статье [7], остаются справедливыми и для сред с симметрией C_s , C_{2v} , S_4 и D_{2d} .

Представляет интерес введение параметризации киральности среды и ее сопоставление с физическими параметрами. Как и в работе [7], далее мы считаем, что локальное окружение данной точки среды представляет собой агрегат, образованный частицами, каждая из которых характеризуется симметричным тензором поляризации $\lambda_{ik}^{(a)}$, где a — номер частицы, i, k — декартовы индексы. Далее для наглядности мы считаем, что каждый из тензоров $\lambda_{ik}^{(a)}$ может быть интерпретирован геометрически как тензорный эллипсоид

$$(\lambda_{ik}^{(a)})^{-1} x_i x_k = 1.$$

Совокупность (агрегат) этих эллипсоидов определяет диэлектрические свойства в окрестности точки среды. В качестве параметров киральности вводятся тензорные моменты распределения эллипсоидов, об-

разующих агрегат. Как оказалось, можно выделить три класса киральных агрегатов в зависимости от их симметрии. На примере малых гармонических деформаций рассмотрено изменение параметров киральности и оптической активности среды. Показано, что поскольку растяжение и сжатие неодинаково влияют на киральность агрегата, колебания УВПП становятся негармоническими, содержащими вторую гармонику.

Киральные наноагрегаты привлекают внимание исследователей в связи с возможностью управления излучением киральных молекул с помощью взаимодействующих с ними киральных наночастиц, что в перспективе дает возможность оптического разделения рацемических смесей биомолекул [9]. Поэтому представляет интерес оценить в рамках представленной выше модели взаимодействие киральных агрегатов между собой. Геометрическое взаимодействие киральных молекул называют стереоселективным, поскольку взаимодействие правых и левых изомеров молекул между собой не совпадают друг с другом. Точно так же электромагнитное взаимодействие поляризованных киральных агрегатов зависит от того, какие стереоизомеры молекулы взаимодействуют между собой.

В следующем разделе описывается способ расчета псевдотензорных моментов тензорного поля, параметризация киральности и метод расчета тензора гирации при помощи тороидной поляризуемости (подробно описан в работе [7]).

Параметризация киральности

Представим агрегат как тензорное поле $\lambda_{ik}(\mathbf{r}_a)$, т. е. считаем, что к каждой точке среды $\mathbf{r}_a$ ($a = 1, 2, \dots, N$) привязан симметричный бесследовый декартов тензор $\lambda_{ik}(\mathbf{r}_a)$. Скалярная часть этого тензора не дает вклада в псевдотензорные моменты и поэтому здесь не учитывается. Введем моменты распределения $\lambda_{ik}(\mathbf{r}_a)$, которые представляют собой суммы вида

$$\begin{aligned} Q_{i_1 i_2 \dots i_p k j}^{(p)} &= \sum_{a=1}^N x_{a_{i_1}} x_{a_{i_2}} \dots x_{a_{i_p}} \lambda_{ik}(\mathbf{r}_a) = \\ &= \overline{x_{a_{i_1}} x_{a_{i_2}} \dots x_{a_{i_p}} \lambda_{ik}(\mathbf{r}_a)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где для краткости суммирование по всем точкам обозначено чертой над выражением, стоящим под знаком суммы.

Как известно, любой тензор может быть разложен на неприводимые части, которыми только и следует оперировать. Напомним, что неприводимым называется тензор, симметричный и бесследовый по любой паре своих индексов. Число независимых компонент неприводимого тензора l -го ранга равно $2l + 1$. В дальнейшем будем называть число сомножителей x_{a_i} в слагаемых суммы (1) порядком p мультипольного момента $Q^{(p,l)}$, а число декартовых индексов неприводимой части тензора — его рангом l .

Рассмотрим подробнее выражение (1) для мультипольных моментов низких порядков, когда $p = 0, 1$ и 2 .

В нулевом порядке ($p = 0$) имеется один мультипольный параметр — тензор 2-го ранга $Q_{ik}^{(0,2)}$. Формула для его вычисления имеет вид

$$Q_{ik}^{(0,2)} = \overline{\lambda_{ik}}.$$

В первом порядке ($p = 1$) существует уже три тензорных параметра:

$$Q_i^{(1,1)} = \overline{\lambda_{ik} x_k}; \quad Q_{ik}^{(1,2)} = \overline{\langle \lambda_{ij_1} x_{j_2} e_{i_1 j_2 k} \rangle^{(2)}}; \quad (2)$$

$$Q_{ikj}^{(1,3)} = \overline{\langle \lambda_{ij} x_k \rangle^{(2)}},$$

где символами

$$\langle \lambda_{ij_1} x_{j_2} e_{i_1 j_2 k} \rangle^{(2)}; \quad \langle \lambda_{ij} x_k \rangle^{(3)}$$

обозначены неприводимые тензоры 2-го и 3-го рангов соответственно, образованные из компонент тензоров, стоящих в угловых скобках.

Операция приведения включает в себя симметризацию по всем свободным индексам и вычитание свертки. Из трех перечисленных тензоров в этом порядке аксиальным является только тензор 2-го ранга $Q_{ik}^{(1,2)}$, который в подробной записи имеет следующий вид:

$$Q_{ik}^{(1,2)} = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N (e_{ijn} x_{aj} \lambda_{nk}(\mathbf{r}_a) + e_{kjn} x_{aj} \lambda_{ni}(\mathbf{r}_a)). \quad (3)$$

Во втором порядке ($p = 2$) существует уже шесть тензорных параметров $Q_{ik}^{(2,l)}$. Они получаются путем комбинирования

тензоров $\lambda_{ik}^{(2)}$ с неприводимыми тензорами

$$x^{(2,0)} = \frac{1}{3} r^2, \quad x_{ik}^{(2,2)} = x_i x_k - \frac{1}{3} r^2 \delta_{ik}.$$

Могут быть образованы следующие мультиполи:

$$Q^{(2,2)} = \overline{x^{(2,0)} \lambda^{(2)}}; \quad Q^{(2,l)} = \overline{\langle x^{(2,2)} \lambda^{(2)} \rangle^{(l)}},$$

где для краткости опущены декартовы индексы.

В последнем из представленных выражений угловые скобки, как и ранее, обозначают выделение неприводимой части l -го ранга из тензора, стоящего в угловых скобках. При этом тензорный индекс l , согласно известному правилу треугольника, может принять пять значений: $l = 0, 1, 2, 3, 4$. Из шести тензорных параметров аксиальными будут только вектор

$$Q^{(2,1)} = \overline{\langle x^{(2,2)} \lambda^{(2)} \rangle^{(1)}}$$

и тензор 3-го ранга

$$Q^{(2,3)} = \overline{\langle x^{(2,2)} \lambda^{(2)} \rangle^{(3)}},$$

которые могут использоваться для параметризации степени киральности заданного распределения. В дальнейшем нас будет интересовать векторный параметр, который мы представим в более подробной записи как

$$Q_i^{(2,1)} = \overline{e_{ijk} x_j \lambda_{km} x_m},$$

или с учетом принятых выше обозначений как

$$Q_i^{(2,1)} = \sum_{a=1}^N e_{ijk} x_{aj} \lambda_{km}(\mathbf{r}_a) x_{am}. \quad (4)$$

Для получения аксиальных скаляров образуем свертки полученных псевдотензоров $Q_{ik}^{(1,2)}$, $Q_i^{(1,1)}$ с полярными тензорами $Q_{ik}^{(0,2)}$, $Q_i^{(2,1)}$:

$$\chi_1 = Q_{ik}^{(1,2)} Q_{ki}^{(0,2)}; \quad \chi_2 = Q_i^{(1,1)} Q_i^{(2,1)}. \quad (5)$$

Оказывается, что параметр χ_1 характеризует некоторую закрученность агрегата, а параметр χ_2 — направленную (стреловидную) киральность, причем с плоским «оперением» (рис. 1).

Однако выяснилось, что для частиц, обладающих симметрией высшего порядка, а именно для частиц групп T и O , параметры

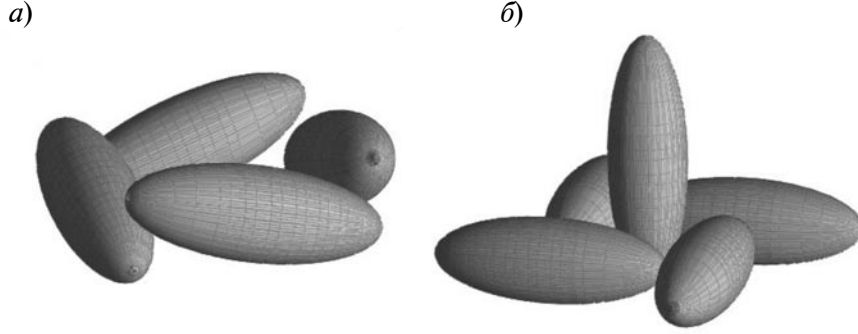


Рис. 1. Схематические изображения киральных агрегатов с различными параметрами: а – $\chi_1 \neq 0$, $\chi_2 = 0$; б – $\chi_1 = 0$, $\chi_2 \neq 0$

χ_1 и χ_2 равны нулю. Это вполне логично, так как эти частицы не обладают ни закрученностью, ни стреловидностью. Ближайшие отличные от нуля псевдоскаляры для таких частиц можно получить, сворачивая друг с другом аксиальный и полярный тензоры 4-го ранга (группы T и O допускают такие тензоры). Построим аксиальный и полярный тензоры 4-го ранга:

$$Q_{ijkp}^{(2,4)} = \lambda_{ij} \left(x_i x_j - \frac{1}{3} r \delta_{ij} \right), \quad (6)$$

$$Q_{ijkp}^{(4,4)} = \lambda_{il} x_k x_p x_m e_{lmj}.$$

Свернув их неприводимые части (обозначены волнистой линией) друг с другом, получим третий скалярный параметр киральности:

$$\chi_3 = \tilde{Q}_{ijkp}^{(2,4)} \tilde{Q}_{ijkp}^{(4,4)}. \quad (7)$$

Этот параметр наиболее интересен, так как характеризует киральность, вносящую одинаковый вклад в ЕОА во всех направлениях, т. е. имеющую одинаковые углы вращения плоскости поляризации. Такую киральность мы назвали скалярной.

Опишем кратко алгоритм расчета параметров оптической активности агрегатов. Согласно квазистатической теории [6], пространственная дисперсия обусловлена тем, что индукция электрического поля $\mathbf{D}$ зависит не только от значения напряженности электрического поля $\mathbf{E}$ в точке, но и от поля в ее окрестности. В слабо неоднородном поле имеем:

$$D_i = \varepsilon_{ik}^{(0)} E_k + \gamma_{ikl} \frac{\partial E_k}{\partial x_l}, \quad (8)$$

где $\varepsilon_{ik}^{(0)}$ – тензор диэлектрической проницаемости; γ_{ikl} – тензор 3-го ранга; $\gamma_{ikl} = e_{ikm} g_{ml}$ (g_{ml} – тензор гирации, через который непосредственно выражается угол вращения плоскости поляризации).

Как следует из выражения (8), в неоднородном электрическом поле диэлектрическая киральная среда поляризуется не только однородным полем, но и его вихрем:

$$P_i = \varepsilon_{ik}^{pp} E_k + \varepsilon_{ij}^{pg} (\text{rot } \mathbf{E})_j, \quad (9)$$

где ε^{pp} – тензор дипольной поляризуемости, ответственной за поляризацию агрегата однородной составляющей поля; ε^{pg} – тензор «перекрестной» диполь-тороидной поляризуемости, который отвечает за поляризацию агрегата вихрем поля.

Можно показать, что транспонированный тензор $\varepsilon^{gp} = (\varepsilon^{pg})^T$ определяет возникновение аксиального тороидного момента

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2} \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a$$

[8, 10 – 11] в приложенном поле

$$G_i = \varepsilon_{ik}^{gp} E_k + \varepsilon_{ij}^{gg} (\text{rot } \mathbf{E})_j, \quad (10)$$

где ε^{gp} – тензор тороидной поляризуемости в однородном, а ε^{gg} – в вихревом полях.

На рис. 2 показан пример перекрестной поляризации кирального агрегата.

Отметим, что в литературе обычно вместо аксиального тороидного момента $\mathbf{G}$ вводится магнитный момент агрегата $\mathbf{M}$ [12], а вместо выражения $\text{rot } \mathbf{E}$ – магнитное поле $\mathbf{H}$, которые связаны друг с другом соответствующими соотношениями:

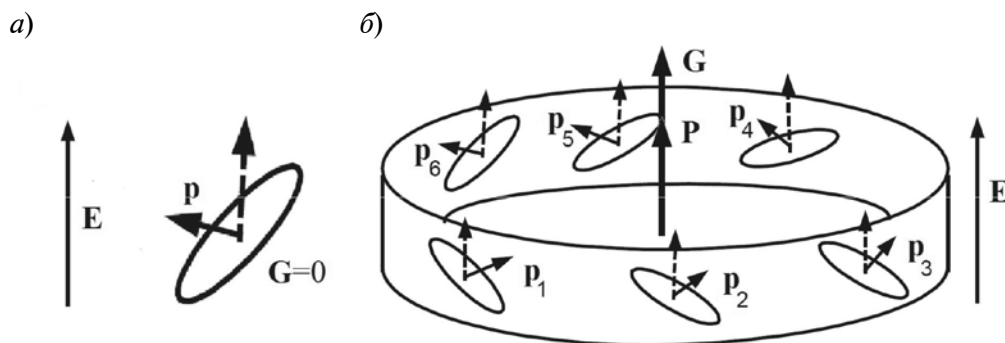


Рис. 2. Приобретение дипольного ($\mathbf{p}$) и тороидного ($\mathbf{G}$) моментов эллипсоидом (а) и киральным агрегатом группы C_6 (б) в однородном электрическом поле $\mathbf{E}$

$$\mathbf{M}^{eff} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{G}}, \quad \text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{H}}.$$

В поле периодической волны имеем следующие соотношения:

$$\dot{\mathbf{G}} = -i\omega \mathbf{G}, \quad \dot{\mathbf{H}} = -i\omega \mathbf{H}.$$

Поэтому вместо выражений (9), (10) можно записать:

$$\begin{aligned} P_i &= \varepsilon_{ik}^{pp} E_k + \frac{i\omega}{c} \varepsilon_{ik}^{pg} H_k; \\ M_i^{eff} &= -\frac{i\omega}{c} \varepsilon_{ik}^{gp} E_k - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{ik}^{gg} H_k. \end{aligned} \quad (11)$$

Отметим, что в этих соотношениях отражена только часть возможных эффектов взаимодействия агрегата с полем. Для охвата полной картины, кроме моментов $\mathbf{P}$, $\mathbf{G}$ и полей $\mathbf{E}$, $\text{rot} \mathbf{E}$, необходимо учесть магнитные эффекты, описываемые моментами $\mathbf{M}$, $\mathbf{T}$ (полярный тороидный момент), и поля $\mathbf{H}$, $\text{rot} \mathbf{H}$. Обычно магнитные эффекты не учитываются (см., однако, работу [13]).

Тороидный момент $\mathbf{G}$ системы вычисляется по распределению дипольных моментов $\mathbf{p}_a$ ($a = 1, 2, \dots$), возникающих при наложении на агрегат внешнего поля. Зная тороидный момент $\mathbf{G}$ и внешнее поле $\mathbf{E}$, можно вычислить тензор восприимчивости ε^{gp} , который связан с нужным нам тензором ε^{pg} соотношением $\varepsilon^{pg} = (\varepsilon^{gp})^T$.

Для расчета моментов $\mathbf{p}_a$ ($a = 1, 2, \dots$) использовался так называемый метод дискретной дипольной аппроксимации (ДДА). Суть метода состоит в том, что мы пред-

ставляем агрегат в виде системы диполей — точек дипольной аппроксимации (ТДА). При наложении внешнего (в общем случае неоднородного) электрического поля $\mathbf{E}_a^{ext}$ каждая ТДА приобретает дипольный момент $\mathbf{p}_a$, который зависит также и от поля, наведенного соседними ТДА. Таким образом, необходимо решить следующую систему линейных уравнений относительно $\mathbf{p}_a$:

$$\mathbf{p}_A = \bar{\bar{\lambda}}_A \cdot \left(\mathbf{E}_A^{ext} + \sum_{B \neq A} \frac{3(\mathbf{r}_{AB} \mathbf{p}_B) \mathbf{r}_{AB} - \mathbf{p}_B r_{AB}^2}{r_{AB}^5} \right), \quad (12)$$

$A, B = 1, \dots, N,$

где $\mathbf{E}_a^{ext}$ — внешнее поле в точке A ; $\bar{\bar{\lambda}}_A$ — тензор поляризуемости A -й ТДА; r_{AB} — расстояние от A -й до B -й ТДА, N — количество ТДА.

После решения системы (12) будет найдена совокупность диполей $\mathbf{p}_A$ ($A = 1, 2, \dots, N$), аппроксимирующих данную систему физических частиц, на основе которой можно вычислить необходимые интегральные характеристики системы.

С помощью простых преобразований (см. работу [7]) можно выразить тензор гирации g_{mi} через тензор диполь-тороидной поляризуемости ε^{pg} :

$$g_{ij} = 8\pi \left(\varepsilon_{ij}^{pg} - \frac{1}{2} \varepsilon_{kk}^{pg} \delta_{ij} \right). \quad (13)$$

Таким образом, мы имеем несколько рассчитываемых величин. С одной стороны, это набор геометрических псевдотен-

зорных параметров $Q^{(p,l)}$ и псевдоскаляров χ_1, χ_2, χ_3 , а с другой — тензор гирации g_{ij} , по которому можно судить об оптической активности исследуемых агрегатов.

Примеры вычисления параметров киральности и тензора гирации агрегатов заданной симметрии

В литературе имеются сведения о том, какие из групп симметрии допускают ЕОА [6]. Также известно, какие из ком-

понент симметричной части тензора гирации останутся для них ненулевыми. Таких групп 15:

$$C_1, C_2, C_s, C_{2v}, D_2, C_3, C_4, C_6, D_3, D_4, D_6, S_4, D_{2d}, T, O.$$

В табл. 1. представлены примеры рассмотренных нами агрегатов. Каждый агрегат получается путем размножения затра- вочного эллипсоида λ_a с помощью всех операций группы (орбита эллипсоида по

Таблица 1

Изображения фигур симметрии для групп, допускающих оптическую активность, и агрегаты, соответствующие этим группам

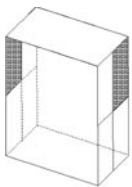
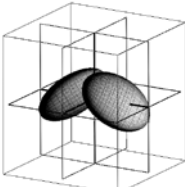
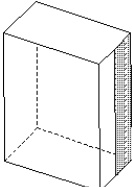
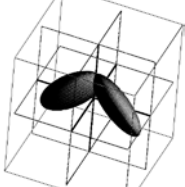
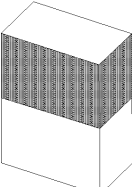
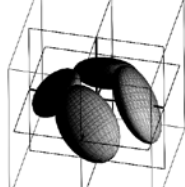
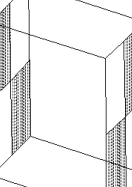
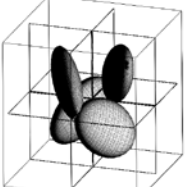
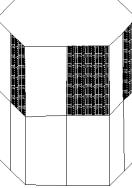
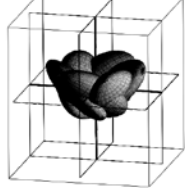
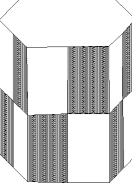
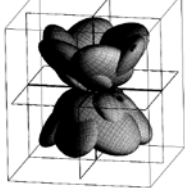
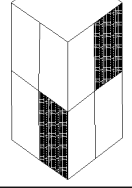
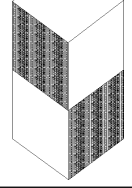
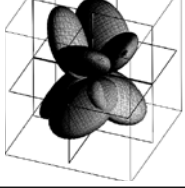
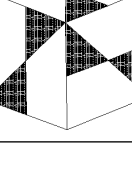
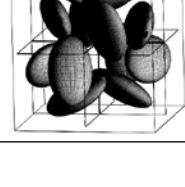
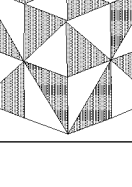
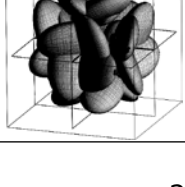
Группа	Образ	Частица	Группа	Образ	Частица
C_2			C_s		
C_{2v}			D_2		
C_6			D_6		
S_4			D_{2d}		
T			O		

Таблица 2

Тензоры гирации и параметры киральности для всех точечных групп симметрии, предполагающих наличие оптической активности

Группа	Тензор гирации g	Псевдотензорный момент $Q^{(1,2)}$	χ_1	χ_2	χ_3
C_2	$\begin{pmatrix} 0,278 & 0,952 & 0 \\ 0,952 & -1,36 & 0 \\ 0 & 0 & 0,896 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1,028 & 0 \\ 1,028 & -1,125 & 0 \\ 0 & 0 & 1,125 \end{pmatrix}$	-4,243	-8,485	2,27
C_s	$\begin{pmatrix} 0 & 0,943 & 1,101 \\ 0,943 & 0 & 0 \\ 1,101 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1,028 & 1,191 \\ 1,028 & 0 & 0 \\ 1,191 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	0
C_{2v}	$\begin{pmatrix} 0,982 & 0 & 0 \\ 0 & -0,982 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,125 & 0 & 0 \\ 0 & -1,125 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	0
D_2	$\begin{pmatrix} -6,252 & 0 & 0 \\ 0 & 1,394 & 0 \\ 0 & 0 & 4,437 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -6,658 & 0 & 0 \\ 0 & 1,885 & 0 \\ 0 & 0 & 4,773 \end{pmatrix}$	25,711	0	0,174
C_6	$\begin{pmatrix} -3,089 & 0 & 0 \\ 0 & -3,089 & 0 \\ 0 & 0 & 3,042 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1,266 & 0 & 0 \\ 0 & -1,266 & 0 \\ 0 & 0 & 2,531 \end{pmatrix}$	11,747	-37,2	0,007
D_6	$\begin{pmatrix} -19,412 & 0 & 0 \\ 0 & -19,412 & 0 \\ 0 & 0 & -5,913 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -3,375 & 0 & 0 \\ 0 & -3,375 & 0 \\ 0 & 0 & 6,75 \end{pmatrix}$	62,648	0	-2,467
S_4	$\begin{pmatrix} 1,072 & 1,763 & 0 \\ 1,763 & -1,072 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1,125 & 2,057 & 0 \\ 2,057 & -1,125 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	0
D_{2d}	$\begin{pmatrix} -5,98 & 0 & 0 \\ 0 & 5,98 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -7,276 & 0 & 0 \\ 0 & 7,276 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	0
T	$\begin{pmatrix} -0,521 & 0 & 0 \\ 0 & -0,521 & 0 \\ 0 & 0 & -0,521 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	-1,637
O	$\begin{pmatrix} 8,643 & 0 & 0 \\ 0 & 8,643 & 0 \\ 0 & 0 & 8,643 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	0	0	19,889



группе). Затравочный эллипсоид можно задать при помощи следующих параметров: длин полуосей a , b , c и углов ориентации относительно главной системы координат — углов Эйлера. В расчетах для всех эллипсоидов было принято, что

$$a : b : c = 3 : 2 : 1, \alpha = 0^\circ, \beta = \gamma = 30^\circ.$$

В табл. 2 приведены симметричные части тензоров гирации g_{ik} , псевдотензорные моменты $Q_{ij}^{(1,2)}$ и параметры киральности χ_1 , χ_2 , χ_3 для всех групп, показанных в табл. 1. Следует отметить, что для групп C_s , C_{2v} , S_4 и D_{2d} скалярные параметры киральности равны нулю, что вполне логично, так как эти частицы не имеют двух энантиоморфных форм, однако псевдотензор $Q_{ij}^{(1,2)}$ отличен от нуля, и он может служить для них геометрической мерой оптической активности.

Из табл. 2 видно, что все агрегаты можно разделить на три класса по виду их киральности:

1) $\chi_1 \neq 0$, $\chi_2 \neq 0$, $\chi_3 \neq 0$ — киральные агрегаты с одноосной симметрией, определяемой группами C_2 , C_3 , C_4 , C_6 ;

2) $\chi_1 \neq 0$, $\chi_2 = 0$, $\chi_3 \neq 0$ — киральные агрегаты с двухосной симметрией, определяемой группами D_2 , D_3 , D_4 , D_6 ;

3) $\chi_1 = 0$, $\chi_2 = 0$, $\chi_3 \neq 0$ — агрегаты кубической симметрии T , O .

Некиральные агрегаты групп C_s , C_{2v} , S_4 , D_{2d} , обладающие оптической активностью, имеют все псевдоскаляры равными нулю: $\chi_1 = \chi_2 = \chi_3 = 0$, но у них отличен от нуля псевдотензор второго ранга $Q^{(1,2)}$.

Анализируя вид тензора гирации, можно заметить, что все некиральные агрегаты вращают плоскость поляризации, если только волновой вектор проходящей сквозь них волны направлен не вдоль осей или плоскостей симметрии группы.

Изменение оптической активности при пространственной деформации среды

С помощью введенных параметров можно количественно отслеживать изменения киральности при тех или иных воздействиях на агрегаты. В качестве примера рассмотрим влияние линейных деформаций

(сжатие, растяжение) на оптическую активность композита. Управляя деформацией, можно менять угол вращения плоскости поляризации волны, проходящей через композит, для осуществления модуляции сигнала. Такую систему можно применить в волноводах различного вида, в том числе и в оптоволокне. Рассмотрим два простейших вида деформации на примере кирального агрегата симметрии O . Группа O обладает высокой симметрией, и для данной группы УВПП не зависит от направления волны относительно осей агрегата. Проследим, как меняется киральность и УВПП в зависимости от деформации.

В качестве характеристики УВПП воспользуемся тремя параметрами, введенными в статье [7] для характеристики тензора гирации: ξ , η и ζ . Параметр изотропии ξ характеризует вклад в указанный угол вращения как не зависящий от направления волнового вектора; параметр эллиптичности η — как зависящий только от угла θ_k ; параметр асимметрии ζ характеризует зависимость угла вращения плоскости поляризации от двух углов: θ_k и φ_k — азимутального и полярного системы координат, расположенной по главным осям тензора гирации соответственно.

Изначально для недеформированного агрегата с симметрией O ненулевыми являются только параметры ξ и χ_3 . Подвергнем агрегат периодической по времени деформации всестороннего сжатия, которая выражается как

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1 + \sigma \sin(\omega t) & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \sigma \sin(\omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \sigma \sin(\omega t) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где σ , ωt — параметр и переменная, характеризующие амплитуду сжатия/растяжения и его фазу.

Данная деформация не нарушает симметрии объекта, соответственно меняться будут только те параметры, которые изначально (для недеформированного объекта) не равны нулю, а именно — ξ и χ_3 . На рис. 3 представлены графики зависимостей ξ и χ_3 от фазы ωt для $\sigma = 0,1$, нормированные на единицу.

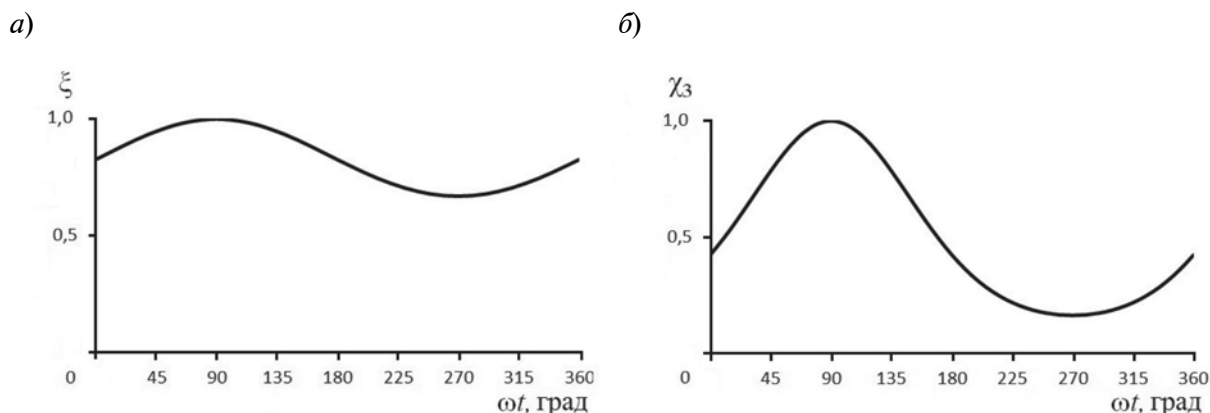


Рис. 3. Зависимости параметров изотропии (а) и киральности (б) от фазы деформации

Из графиков видно, что при объемной деформации агрегата, изменении всех его геометрических параметров на одинаковую величину, можно добиться увеличения (уменьшения) его киральности, и, как следствие, — его оптической активности.

Далее рассмотрим деформацию, которая меняет симметрию объекта (линейная деформация):

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \sigma \sin(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Мы рассматривали деформацию вдоль оси четвертого порядка (проходящую через центры противоположных граней). Графики зависимостей параметров УВПП и параметров киральности от фазы деформации представлены на рис. 4. В данном случае с увеличением деформации симметрия агрегата изменяется: он приобретает форму объекта D_4 .

Из графиков видно, что с увеличением деформации агрегат перестает быть изотропным в отношении вращения плоскости поляризации и параметры η , ζ вносят

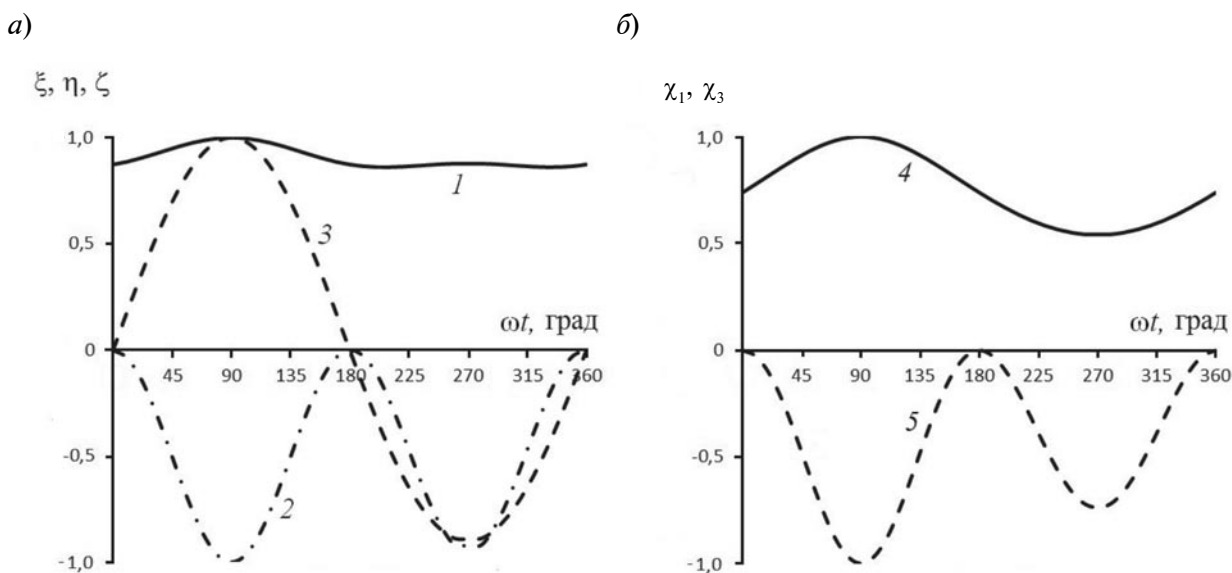


Рис. 4. Зависимости параметров УВПП (а) и киральности (б) от фазы деформации; 1, 2, 3 — параметры ξ , η , ζ ; 4, 5 — χ_1 , χ_3



дополнительный вклад в УВПП. Появление киральности другого вида служит причиной появления второй гармоники в сигнале, модулируемом растяжениями: из графиков видно, что при растяжении киральность увеличивается в большей степени, чем при сжатии.

В представленной работе нами введены псевдотензорные параметры, с помощью которых можно охарактеризовать величину киральности частицы. Были рассмотрены все группы симметрии, предполагающие наличие оптической активности, и для каждой из них были рассчитаны параметры киральности, в соответствии с которыми все группы были разделены на классы по признаку киральности. Показано, что оптическая активность и киральность связаны между собой, но не определяют друг друга. Наконец, были рассмотрены деформации частицы высокой группы симметрии O и показано, как меняются киральность

и оптическая активность в зависимости от величины деформации.

Анализ проделанных расчетов позволяет заключить, что модуляция сигнала киральным нанокомпозитом осуществима путем деформации объекта, которой можно управлять, используя пьезоэлемент. Более того, модулированный сигнал может иметь несколько гармоник, а следовательно и несколько каналов передачи данных.

Следует также отметить, что введенные нами параметры киральности удобно применять для описания стереоселективного взаимодействия между киральными агрегатами либо между киральными молекулами. Добавим, что естественно описывать взаимодействие между агрегатами диэлектрических частиц с помощью введенных выше моментов агрегата: электрическим дипольным $\mathbf{p}$ и аксиальным тороидным $\mathbf{G}$. В дальнейшем предполагается обсудить эти вопросы более подробно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Borreddy, S.R.** Advances in nanocomposites [Электронный ресурс] / S.R. Borreddy, ed. // In-Tech, 2011. — www.intech.com/books. — 980 p.
2. **Schwartz, M.** Encyclopedia of smart materials [Text] / M. Schwartz, ed. — Willey, 2002. — 1073 p.
3. **Серова, В.Н.** Полимерные оптические материалы [Текст] / В.Н. Серова. — СПб.: Изд-во «Научные основы и технологии», 2011. — 384 с.
4. **Новотный, Л.** Основы нанооптики [Текст] / Л. Новотный, Б. Хехт. — М.: Физматлит, 2009. — 484 с.
5. **Климов, В.В.** Наноплазмоника [Текст] / В.В. Климов. — М.: Физматлит, 2010. — 480 с.
6. **Ландау, Л.Д.** Электродинамика сплошных сред [Текст]: 3-е изд., испр. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1992. — 532 с.
7. **Марценюк, М.А.** Формирование среды с искусственной оптической активностью [Текст] / М.А. Марценюк, М.А. Фуфачев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — № 1 (141). — С. 6–92.
8. **Дубовик, В.М.** Аксиальные тороидные моменты в электродинамике и физике твердого тела [Текст] / В.М. Дубовик, Л.А. Тосунян, В.В. Тугушев // ЖЭТФ. — 1986. — Т. 90. — С. 590–605.
9. **Климов, В.В.** Управление излучением киральных молекул с помощью киральных нанометастастиц [Текст] / В.В. Климов, Д.В. Гузатов // УФН. — 2012. — Т. 182. — С. 1130–1135.
10. **Азанов, С.В.** Расчет тороидной поляризации хиральных молекул в однородном поле [Текст] / С.В. Азанов, М.А. Марценюк, И.Н. Сурков // Вестник Пермского ун-та. Физика. — 1999. — Вып. 5. — С. 16–21.
11. **Dubovik, V.M.** Material equations for electromagnetism with toroidal polarizations [Text] / V.M. Dubovik, M.A. Martseyuk, B. Saha // Phys. Rev. E. — 2000. — Vol. 61. — № 6. — P. 7087–7097.
12. **Barron, L.D.** Molecular light scattering and optical activity [Text]: 2nd ed. / L.D. Barron. — Cambridge: Cambridge Univ. Press. — 2004. — 443 p.
13. **Dong, Z.-G.** Optical toroidal dipolar response by an asymmetric double-bar metamaterial [Text] / Z.-G. Dong, J. Zhu, J. Rho, [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2012. — Vol. 101. — P. 144105-1–144105-4 (View online: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4757613>).

МАРЦЕНЮК Михаил Андреевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой компьютерных систем и телекоммуникаций Пермского государственного национального исследовательского университета.

614990, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15
mrcn@psu.ru

ФУФАЧЕВ Михаил Андреевич — аспирант кафедры компьютерных систем и телекоммуникаций Пермского государственного национального исследовательского университета.

614990, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15
iwantgroup@mail.ru



УДК 537.311.1 +544.6.018.42-16

*А.Д. Давлетшина, Р.А. Якшибаев, Н.Н. Биккулова***ЗОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ
ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕДИ И СЕРЕБРА***A.D. Davletshina, R.A. Yakshibaev, N.N. Bickulova*Bashkir State University,
32 Zaki Validi St., Ufa, 450000, Baskortostan, Russia.**THE BAND STRUCTURE OF SOLID SOLUTIONS
OF COPPER AND SILVER CHALCOGENIDES**

Выполнен расчет зонной структуры твердых растворов халькогенидов меди и серебра с помощью программного пакета Quantum Espresso. Указанная структура была рассчитана для высокотемпературной кубической фазы. Установлено, что для всех рассмотренных соединений зонная структура имеет сходный вид.

СУПЕРИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ. ЗОННАЯ СТРУКТУРА. ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ. ГИБРИДИЗАЦИЯ.

The band structure of solid solutions of copper and silver chalcogenides has been investigated theoretically using the Quantum Espresso software package. That structure was calculated for the high-temperature cubic phase. For all compounds the band structure was established to be of the same kind.

SUPERIONIC CONDUCTION. BAND STRUCTURE. SOLID SOLUTIONS. HYBRIDIZATION.

Полупроводниковые соединения $Me_{2-\delta}X$ ($Me = Cu, Ag$; $X = S, Se, Te$) проявляют большое разнообразие физических и физико-химических свойств, что выдвигает их в число перспективных материалов для электронной техники [1, 2]. Широкий спектр электрофизических и теплофизических свойств, возможность управления этими свойствами путем контролируемого отклонения δ от стехиометрии, высокие параметры ионного переноса делают эти объекты удобными модельными системами при изучении явлений переноса в смешанных ионно-электронных проводниках [3 – 5]. Следует отметить, что высокая катионная проводимость и высокие значения коэффициентов самодиффузии, сравнимые с проводимостью и диффузией в жидких электролитах, проявляются на фоне преимущественной электронной проводимости [6 – 8].

Фазовые соотношения бинарных халькогенидов в зависимости от температуры и отклонения от стехиометрии, а также их электрофизические свойства изучены достаточно хорошо [2].

Наиболее общим электрофизическим свойством бинарных халькогенидов является полупроводниковый характер зависимости $\sigma_e(T)$ для составов, близких к стехиометрическим. Отклонение δ от стехиометрии сильно влияет на величину электропроводности, и такие, даже незначительные, отклонения приводят к вырождению электронного газа и изменению характера проводимости от полупроводникового до металлического. Изменение характера проводимости в некоторых системах происходит и в результате полиморфных превращений с изменением температуры для фиксированных составов [1].

Особый интерес к исследованию халькогенидов меди и серебра также обусловлен тем, что в данных системах катионы проявляют аномально высокую подвижность. В ряде работ сделаны попытки объяснить возникновение высокоподвижного состояния катионов особенностями строения зонной структуры, в частности степенью гибридизации d -уровней металла и p -уровней халькогена. Такой подход выходит на более высокий уровень трактовки формирования свойств ионного переноса в подобных системах, чем кристаллохимический, и представляется перспективным. Поэтому, наряду с попыткой объяснить особенности электронного переноса на основе построения зонной структуры таких систем, мы также будем обращать внимание и на возможное влияние dp -гибридизации на делокализацию катионов и повышение их подвижности.

Исследования зонной структуры халькогенидов меди и серебра проведены различными методами [9 – 12]. В работе [9] был проведен расчет зонной структуры халькогенидов серебра методом присоединенных плоских волн. Были получены абсолютные величины эффективной массы электронов, которые находятся в качественном согласии с экспериментальными данными. Абсолютные величины эффективной массы электронов, рассчитанные для халькогенидов серебра со структурами перовскита, хлорида натрия и флюорита составляют около $0,1m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) независимо от структуры, в то время как экспериментально определенные эффективные массы электронов лежат в интервале $(0,05 – 0,24)m_0$. Непараболичность зоны проводимости вблизи дна объясняется эффектом ss -гибридизации. Также расчеты показывают, что эффективная масса дырок зависит от гибридизации $4d$ -состояний серебра и p -состояний халькогена, а ширина запрещенной зоны – от ss - и pd -гибридизации.

Зонная структура для Ag_2Te и Cu_2Te рассчитана методом линейаризованных присоединенных плоских волн [10, 11]. В работе [10] рассмотрено явление pd -гибридизации и его влияние на зонную структуру теллурида серебра, рассчитаны также эффективные

массы электронов и дырок, которые равны, соответственно, $0,039m_0$ и $(1,3 – 2,1)m_0$. Было показано, что уменьшение степени гибридизации между d -зонами серебра и p -зонами теллура не влияет на характеристики зонной структуры вблизи энергетической щели. На основе полученных результатов авторы делают вывод, что pd -гибридизация не оказывает существенного влияния на динамику ионов в соединении α - Ag_2Te . Оценка степени pd -гибридизации в теллуридах Ag_2Te и Cu_2Te проведена в работе [11]. В Cu_2Te d -зоны более тесно связаны с p -зоной, по сравнению с такой связью в Ag_2Te . Меньшая степень pd -гибридизации обуславливает, по мнению авторов, более быструю диффузию катионов в теллуриде Ag_2Te , чем в Cu_2Te .

Изучение электронной структуры для Ag_2S проведено в работе [12] экспериментально с помощью фотоэлектронной спектроскопии и теоретически с использованием расчета FP-LMTO (Full-Potential Linear Muffin-Tin Orbital). При комнатной температуре сульфид Ag_2S имеет моноклинную структуру (β -фаза) и при температуре 453 К переходит в кубическую (α -фаза). Для β - Ag_2S фотоэмиссионные данные качественно согласуются с рассчитанной плотностью состояний. Зонная структура рассчитана для α - и β -фаз. В модифицированной объемно-центрированной кубической (ОЦК) структуре атомы серебра занимают две различные позиции: октаэдрические и тетраэдрические, причем в первом случае только октаэдрические (все четыре атома), а во втором четыре атома серебра распределены по октаэдрическим и тетраэдрическим позициям с равной вероятностью. Распределение атомов серебра по указанным позициям влияет на ширину запрещенной зоны. В первом случае энергетическая щель вообще отсутствует, во втором – ширина запрещенной зоны имеет значение около 2 эВ.

Сводные данные по определению параметров зонной структуры и величин эффективных масс халькогенидов меди и серебра приведены в табл. 1 [13].

Исследований зонной структуры твер-

Таблица 1

Величины зонных параметров халькогенидов меди и серебра [13]

Соединение	Кристаллическая структура	E_g , эВ	m_n/m_0	m_p/m_0
Ag_2S	МФ	1,0	4,55 (m_d)	7,8 (m_d)
	Та же при низкой температуре (0 К)	1,3		
	ОЦК (73–179 °С)	—		
	ГЦК (571–622° С)	—		
Ag_2Se	ОФ	—	0,2	0,54
	(низкие температуры)	0,15	—	—
Ag_2Te	МФ	0,67	0,026 – 0,034	—
	(низкие температуры)	0,2	0,11	1,5
	ГЦК(105 – 145°С)		0,039 [11]	1,3 – 2,1 [11]
	ОЦК(689 – 802°С)			
Cu_2S	ОФ	1,3	—	1,8
	(низкие температуры)			
	ГФ (103 – 110°С)			
Cu_2Se	ГЦК (420 – 470°С)			
	МФ			
Cu_2Se	(низкие температуры)	1,25		
	ГЦК (130 – 900°С)			
Cu_2Te	ГФ	0,5	—	0,5
	(низкие температуры)		0,9	0,8
	ГЦК (520 – 640°С)			

Обозначения: МФ, ОФ – моноклинная и орторомбическая фазы; ОЦК, ГЦК – объемно-центрированная и гранецентрированная кубические решетки; m_n , m_p – эффективные массы электронов и дырок; m_d – эффективная масса плотности состояний электронов или дырок; m_0 – масса свободного электрона.

дых растворов к настоящему времени не проводилось. В данных соединениях ионная проводимость осуществляется как катионами Ag^+ , так и Cu^+ [6, 7].

Методика расчета

Расчет зонной структуры был выполнен в рамках теории функционала электронной плотности с помощью метода псевдопотенциала в базисе плоских волн, реализованный в программном пакете Quantum Espresso [14]; обменно-корреляционные эффекты учитывались в приближении локальной плотности (LDA). При расчетах

данным методом для меди учитываются 3d- и 4s-электроны, для серебра – 4d- и 5s-, для серы – 3s-, 3p-, для селена – 4s-, 4p-, для теллура – 5s-, 5p-электроны. Были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы для серебра и меди, а для халькогенов – псевдопотенциалы, сохраняющие норму [15]. Кинетическая энергия обрезки плоских волн имела величину 35 Ry (476 эВ). Использовался автоматический выбор точек обратной решетки (k -точек) при помощи метода Монкхорста – Пака [16] на сетке 4×4×4 (со сдвигом от начала координат). При самосогласованных вы-

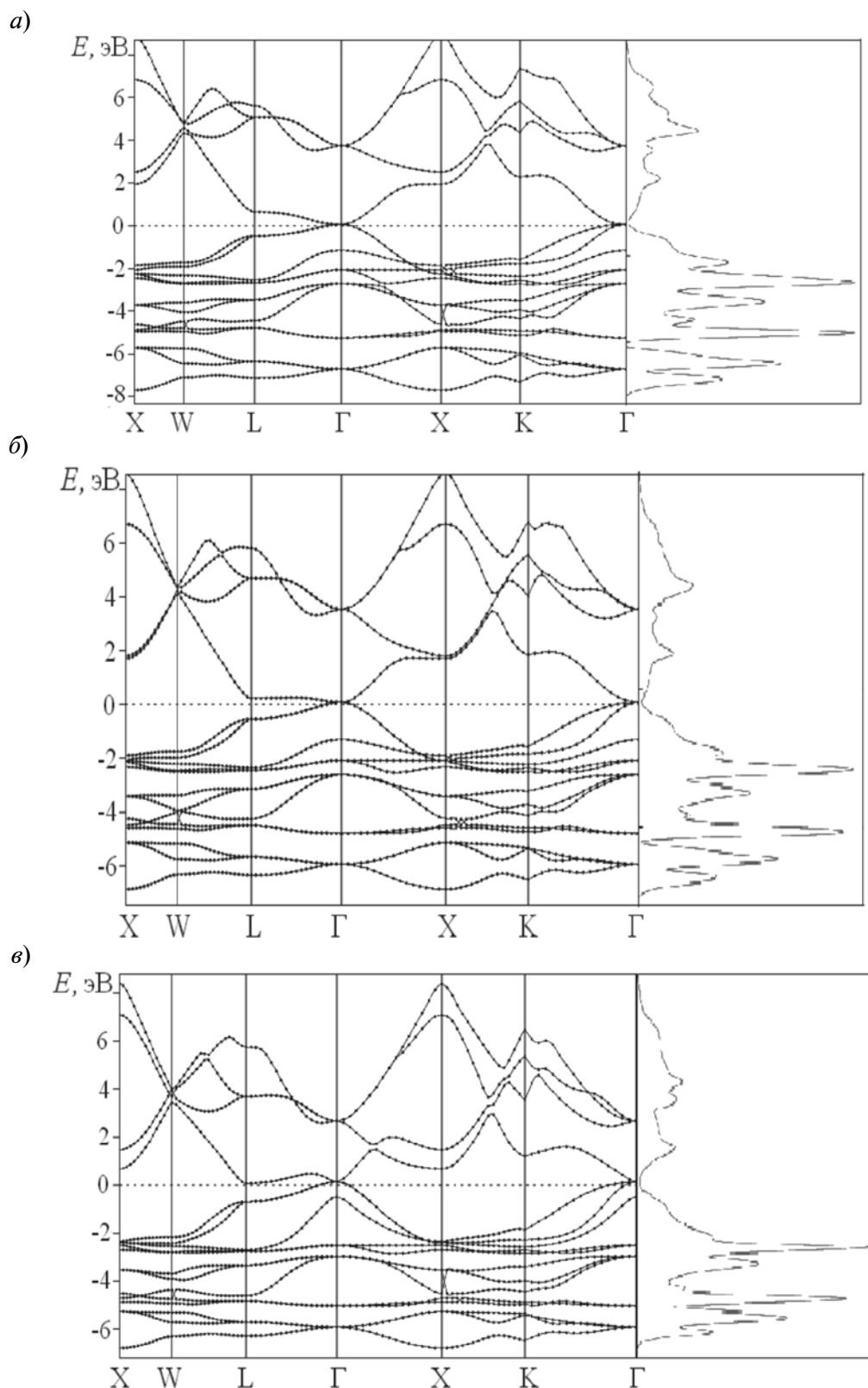


Рис. 1. Зонные структуры твердых растворов AgCuS (a), AgCuSe (б), AgCuTe (в).
В правых частях рисунков представлены плотности электронных состояний



числениях уровень сходимости по полной энергии определялся величиной 10^{-9} Ry.

Результаты и их обсуждение

Твердые растворы AgCuX ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) при температурах выше 473 К переходят в суперионную фазу с кубической структурой [2, 17, 18]. Данное состояние характеризуется разупорядоченностью катионов, занимающих тетраэдрические позиции в ГЦК-решетке халькогена. Параметры решетки для высокотемпературной фазы данных соединений приведены в табл. 2.

Результаты расчетов зонной структуры исследуемых соединений представлены на рис. 1.

Точки зоны Бриллюэна имеют следующие координаты в единицах векторов обратной решетки: $\Gamma(0, 0, 0)$, $W(1/2, 0, 1)$, $L(1/2, 1/2, 1/2)$, $X(0, 0, 1)$, $K(3/4, 0, 3/4)$. За нуль энергии принято последнее заполненное состояние. Энергетический уровень, соответствующий -14 эВ, образован s -зоной халькогена с незначительным вкладом s -, d -уровней металла обоих типов (на рис. 1 не приведен). В интервале от $-7,7$ эВ до уровня Ферми расположены гибридные p -состояния серы, а также s - и d -состояния серебра и меди. Анализ плотности состояний показывает, что в интервале от $-7,7$ до $-5,7$ эВ преобладает вклад d -состояний серебра, а в интервале от $-5,7$ эВ до уровня Ферми — d -состояний меди.

Зависимость энергии от волнового вектора во всех случаях имеет на качественном уровне примерно одинаковый характер. В зонной структуре твердого раствора AgCuS (см. рис. 1, а) наблюдается отсутствие запрещенной зоны, что является характерной особенностью всех исследуемых соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горбачев, В.В. Полупроводниковые соединения АПВVI [Текст] / В.В. Горбачев. — М.: Металлургия, 1980. — 132 с.
2. Полупроводниковые халькогениды, сплавы на их основе [Текст] / Под ред. Н.Х. Абрикосова. — М.: Наука, 1975. — 220 с.
3. Кадргулов, Р.Ф. Особенности ионного

Таблица 2

Параметры решетки твердых растворов

Состав	Параметр решетки, Å
AgCuS	5,729
AgCuSe	6,085
AgCuTe	6,375

В случаях соединений AgCuSe (рис. 1, б) и AgCuTe (рис. 1, в) наблюдается сужение валентной зоны по сравнению с соответствующей зоной AgCuS .

Дно зоны проводимости для всех соединений образуется из s -состояний катионов и p -состояний аниона.

Как известно, при уменьшении степени ионности химической связи уменьшается ширина запрещенной зоны. Отсутствие запрещенной зоны в системах AgCuX для высокотемпературных фаз указывает на увеличение степени металличности химической связи. По своим электрофизическим свойствам данные системы относятся к полуметаллам.

Таким образом, в данной работе был выполнен расчет зонной структуры твердых растворов AgCuX ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$), которые проявляют высокую ионную проводимость в высокотемпературной кубической фазе. Расчеты показали, что при переходе из низкого- в высокосимметричную фазу имеет место изменение характера химической связи. В частности, происходит уменьшение ионной и увеличение ее металлической составляющих. Наблюдаемая pd -гибридизация приводит к уменьшению эффективного радиуса катионов, что обуславливает их делокализацию и повышение их подвижности.

Твердые растворы AgCuX ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) в высокотемпературной фазе являются бесщелевыми полупроводниками.

переноса в твердом электролите с двумя сортами подвижных катионов [Текст] / Р.Ф. Кадргулов, Р.А. Якшибаев // Вестник Башкирского университета. — 2001. — № 3. — С. 13–14.

4. Kadrgulov, R.F. Phase relations, ionic conductivity and diffusion in the alloys of Cu_2S and Ag_2S mixed conductors [Text] / R.F. Kadrgulov,

R.A. Yakshibaev, M.A. Khasanov // Ionics. — 2001. — Vol. 7. — № 1, 2. — P. 156–160.

5. **Якшибаев, Р.А.** Фазовые соотношения и области гомогенности сплавов Cu_2Se с Ag_2Se [Текст] / Р.А. Якшибаев, В.Н. Конев, Н.Н. Мухамадеева, М.Х. Балапанов // Изв. АН СССР. Неорган. матер. — 1988. — Т. 24. — № 3. — С. 501–503.

6. **Miyatani, S.** Electronic and ionic conduction in $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})_2\text{Se}$ [Text] / S. Miyatani // J. Phys. Soc. Japan. — 1973. — Vol. 34. — № 2. — P. 422–432.

7. **Miyatani, S.** Mixed conduction in AgCuSe [Text] / S. Miyatani, J. Miura, H. Ando // J. Phys. Soc. Japan. — 1979. — Vol. 46. — № 6. — P. 1825–1832.

8. **Якшибаев, Р.А.** Ионная проводимость и термо-эдс в сплавах суперионных проводников $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Cu}_2\text{S}$ [Текст] / Р.А. Якшибаев, М.Х. Балапанов, В.Н. Конев // ФТТ. — 1987. — Т. 29. — № 3. — С. 937–939.

9. **Hasegawa, A.** On the electronic structure of Ag chalcogenides [Text] / A. Hasegawa // Solid State Ionics. — 1985. — Vol. 15. — P. 81–88.

10. **Kikuchi, H.** The p-d hybridization in the electronic structure of $\alpha\text{-Ag}_2\text{Te}$ [Text] / H. Kikuchi, H. Iyetomi, A. Hasegawa // J. Phys.: Condens. Matter. — 1997. — Vol. 9. — P. 6031–6048.

11. **Kikuchi, H.** Insight into the origin of

superionic conductivity from electronic structure theory [Text] / H. Kikuchi, H. Iyetomi, A. Hasegawa // J. Phys.: Condens. Matter. — 1998. — Vol. 10. — P. 11439–11448.

12. **Kashida, S.** Electronic structure of Ag_2S , band calculation and photoelectron spectroscopy [Text] / S. Kashida, N. Watanabe, T. Hasegawa, H. Iida [et al.] // Solid State Ionics. — 2003. — Vol. 158. — P. 167–175.

13. Физические величины [Текст]: Справочник / Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихой. — М.: Энергоатомиздат, 1991. — 1232 с.

14. Quantum-ESPRESSO [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.quantum-espresso.org>

15. Pseudopotentials Database [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.pwscf.org>

16. **Monkhorst, H.J.** Special points for Brillouin-zone integrations [Text] / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // Phys. Rev. B. — 1976. — Vol. 13. — № 12. — P. 5188–5192.

17. **Yalverde, N.** Untersuchungen zur Thermodynamik des Systems Kupfer-Silber-Selen [Text] / N. Yalverde // Z. Phys. Chem. — 1968. — Vol. 61. — P. 92–107.

18. **Нуриев, И.Р.** Исследование фаз в системе $\text{Ag}_2\text{Te}-\text{Cu}_2\text{Te}$ [Текст] / И.Р. Нуриев, Э.Ю. Салаев, Р.Н. Набиев // Изв. АН СССР. Неорган. матер. — 1983. — Т. 19. — № 9. — С. 1074–1076.

ДАВЛЕТШИНА Алиса Данисовна — аспирантка кафедры общей физики Башкирского государственного университета.

450074, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

daletshinaalisa@rambler.ru

ЯКШИБАЕВ Роберт Асгатович — доктор физико-математических наук, профессор, директор Физико-технического института Башкирского государственного университета.

450074, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

fti_bsu@mail.ru

БИККУЛОВА Нурия Нагимьяновна — доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой общей физики Стерлитамакского филиала Башкирского государственного университета.

453103, г. Стерлитамак, пр. Ленина, 49

bickulova@mail.ru



УДК 538.945

М.А. Зеликман, К.А. Поцелуев

**ПИННИНГ И ВОЗМОЖНЫЕ РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ
ЛИНЕЙНЫМИ ВИХРЯМИ В ТРЕХМЕРНОЙ УПОРЯДОЧЕННОЙ
ДЖОЗЕФСОНОВСКОЙ СРЕДЕ**

М.А. Zelikman, К.А. Potseluev

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

**PINNING AND POSSIBLE DISTANCES BETWEEN LINEAR VORTEX
IN 3D ORDERED JOSEPHSON MEDIUM**

Получена система разностных уравнений и предложен метод расчета конфигурации двух линейных вихрей, взаимодействующих в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде. Рассчитаны токовые конфигурации, а также критические значения параметра пиннинга, при которых вихри уже не могут находиться на заданном расстоянии друг от друга. Исследовано влияние параметра b , учитывающего неоднородность магнитного поля, на эти критические значения.

ГРАНУЛИРОВАННЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ. ТРЕХМЕРНАЯ УПОРЯДОЧЕННАЯ ДЖОЗЕФСОНОВСКАЯ СРЕДА. ЛИНЕЙНЫЕ ВИХРИ. УСЛОВИЯ КВАНТОВАНИЯ ФЛЮКСОИДА.

A system of difference equations and a method of calculating the configuration of two linear vortices interacting in a three-dimensional ordered Josephson medium are proposed. Current configurations are calculated as well as the critical values of the pinning parameter at which vortex can no longer be located at a predetermined distance from each other. The influence of the parameter b , which takes into account the inhomogeneity of the magnetic field is investigated.

GRANULATED SUPERCONDUCTORS. 3D ORDERED JOSEPHSON MEDIUM. LINEAR VORTEX. CONDITIONS OF FLUXOID QUANTIZATION.

Исследования высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП), проведенные в последние годы, показали, что очень важную роль в происходящих процессах играют возникающие в образце вихревые структуры. В частности, пиннингом и взаимодействием вихрей друг с другом определяются процессы, происходящие при помещении образца ВТСП во внешнее магнитное поле. Движение вихрей ведет к нежелательному выделению энергии в образце, что приводит к нарушению сверхпроводимости. Решение принципиальной для физики и техники проблемы повышения величин критических токов и полей требует понимания деталей поведения вихрей, их строения, взаимодействия, механизмов и величины возможного пиннинга.

Для обычных сверхпроводников теория вихрей, базирующаяся на уравнениях Гинзбурга — Ландау, построена еще до создания теории БКШ [1, 2]. Однако эта теория применима только в непрерывной среде, поэтому в случае гранулированных ВТСП приходится искать другой математический подход. Это связано, в первую очередь, с ячеистой структурой таких ВТСП, когда между соприкасающимися сверхпроводящими гранулами находятся диэлектрические области. Дополнительные трудности вносит тот факт, что в местах соприкосновения гранул друг с другом образуются джозефсоновские контакты [3], являющиеся нелинейными элементами, что сильно усложняет анализ таких сред. Кроме того, при возникновении абрикосовского вихря

в обычном сверхпроводнике его центральная область переходит из сверхпроводящего состояния в нормальное. В ячеистой среде, которую представляют собой гранулированные сверхпроводники, такой переход не требуется, так как уже существуют диэлектрические области, в которых может расположиться остов вихря. Поэтому все токовые состояния — как экранирующие, так и вихревые, — отличаются по своей структуре от существующих в обычных сверхпроводниках. Уравнения Гинзбурга — Ландау неприменимы в этой ситуации, и нужно искать другую основу для математического описания гранулированных сверхпроводников.

Джозефсоновские среды — как упорядоченные, так и неупорядоченные, уже давно привлекают внимание физиков [4 — 9], поэтому изучение свойств таких сред лежит в русле современного исследования ВТСП. В работе [9] предложена модель гранулированного ВТСП, представляющая собой кубическую решетку, состоящую из сверхпроводящих проводов, каждая связь которой содержит один джозефсоновский контакт. Аналогичные модели джозефсоновской среды для одномерного и двумерного случаев предлагались и в других исследованиях [4, 5]. В частности, в статье [4] рассматривалась система узлов, соединенных связями, содержащими джозефсоновские контакты; авторами целой серии работ (см., например, [5]) изучался длинный джозефсоновский контакт. Модель трехмерной упорядоченной джозефсоновской среды [9 — 12] позволяет на качественном уровне ответить на многие вопросы, возникающие при изучении физических свойств такой сложной системы. С помощью данной модели, например, удалось получить характерные значения критических магнитных полей, при которых нарушается мейсснеровское состояние [10], рассмотреть возможные конфигурации возникающих вихрей [11], рассчитать их энергию. Математическое описание упомянутой модели содержит два безразмерных параметра: параметр пиннинга I и структурный фактор b . Поскольку эта модель оказалась столь полезной, есть смысл исследовать этот же круг вопросов полно-

стью, не считая, как ранее (см., например, работу [12]), параметр b равным нулю. Параметр I , аналогичный параметру пиннинга I , рассматривался также С.Л. Гинзбургом как в статье [4], так и в более ранних его работах. Важная роль этого параметра I в описании джозефсоновской среды отмечается также и в других публикациях [5, 8].

В работе [4] также указывается на недостаточное внимание к вопросу о влиянии структурных свойств сложных сетей на происходящие в них процессы, несмотря на его очевидную актуальность. В настоящей работе рассмотрение будет проводиться на модели, предложенной в статье [9]. Исследование этой модели при ненулевых значениях параметра b соответствует учету влияния структурных свойств джозефсоновской среды на происходящие в ней процессы.

При превышении некоторого критического значения магнитного поля в рассматриваемую нами модельную упорядоченную джозефсоновскую среду будут проникать вихри. Возникшие в среде вихри будут между собой взаимодействовать: притягиваться или отталкиваться в зависимости от направления соответствующих им токов. Наличие пиннинга препятствует движению вихрей. В работе [12] были рассчитаны критические значения I_c параметра пиннинга I , при котором вихри уже не могут находиться на выбранном расстоянии друг от друга, так как сила отталкивания (или притяжения) не может быть скомпенсирована силой пиннинга. В системе уравнений, обсуждаемой в статье [12], параметр b присутствует только как множитель в произведении Ib . При решении этой системы значения указанных параметров предполагались такими, что соблюдалось неравенство $Ib \ll 1$; это позволяло считать $b = 0$ и сильно упрощало решаемые уравнения.

Целью настоящей работы является нахождение критических значений I_c параметра пиннинга для произвольных значений b и изучение влияния параметра b на I_c . Рассмотрение проводится для двух случаев: первый — это когда вихри сонаправлены, то есть токи в вихрях закручены в одну сторону, например, против часовой стрелки; второй — когда вихри противоположны по



направлениям, например, токи одного вихря направлены по часовой стрелке, а другого — против нее. Первый случай соответствует отталкиванию вихрей, а второй — их притяжению.

Сонаправленные вихри

Рассмотрение будем проводить на модели [9], представляющей собой кубическую решетку с периодом a , состоящую из сверхпроводящих проводов радиусом δ ; каждая связь этой решетки содержит один джозефсоновский контакт, причем все контакты имеют малые размеры и обладают одной и той же величиной критического тока J_c . Токовое распределение имеет плоскую структуру, т. е. во всех параллельных плоскостях, перпендикулярных оси вихря и расположенных на расстоянии a друг от друга, токи распределены идентично. Такая модель, являясь в достаточной степени простой, позволяет сделать определенные выводы о структуре вихрей, их пиннинге и динамике. Среду, содержащую много джозефсоновских контактов, называют джозефсоновской. Исследуемая модель тогда представляет собой трехмерную упорядоченную джозефсоновскую среду.

Проанализируем сначала ситуацию, когда центры вихрей находятся на расстоя-

нии, равном одной ячейке ($d = 1$). Пусть оси обоих линейных вихрей проходят по середине бесконечной в обоих направлениях плоской пластины толщиной $(2N - 1)$ ячеек и находятся на расстоянии $d = 1$ друг от друга (рис. 1). Тогда в плоскости, разделяющей центральные ячейки вихрей, будут находиться ребра, на которых скачки фазы будут равны нулю, так как на этих ребрах токи вихрей протекают в противоположных направлениях, и в силу симметричности расположения вихрей, величины этих токов одинаковы (см. рис. 1). Сечение этой картины плоскостью, перпендикулярной осям вихрей, будет представлять собой бесконечную полосу шириной $(2N - 1)$ ячеек, в среднем ряду которой находятся центры двух рассматриваемых вихрей. На рис. 1 изображен один квадрант такой конфигурации для полосы шириной 13 ячеек ($N = 7$). Центр второго вихря расположен внизу, симметрично нижней токовой линии. Расстояние между центрами вихрей равно одной ячейке. В центре каждой ячейки указан ее «контурный» скачок фазы. Все контурные токи направлены против часовой стрелки. Незатушеванными кружками обозначены те ребра, на которых скачок фазы равен нулю. Штрихами отмечены контурные скачки фаз, соответствующие второму вихрю. Ячейки, через которые проходят оси вихрей, отмечены жирными точками.

В каждой из ячеек выполняется условие квантования флюксоида [12]:

$$2\pi \frac{\Phi_m}{\Phi_0} + \sum_k \varphi_k^{(m)} = 2\pi K_m, \quad (1)$$

где $\sum_k \varphi_k^{(m)}$ — сумма скачков фазы на джозефсоновских элементах m -й ячейки; Φ_m — полный магнитный поток через m -ю ячейку; Φ_0 — квант магнитного потока; K_m — целое число, равное единице для центральной ячейки вихря (отмечена жирной точкой) и нулю для всех остальных.

Величины джозефсоновских токов $J_k = J_c \sin \varphi_k$ убывают по мере удаления от центра вихря. Мы будем рассматривать лишь такие конфигурации, в которых $\varphi_k \ll 1$, т. е. $\sin \varphi_k \approx \varphi_k$, для всех φ_k , кроме самых больших по величине скачков фазы $\varphi_1 - \varphi_6$

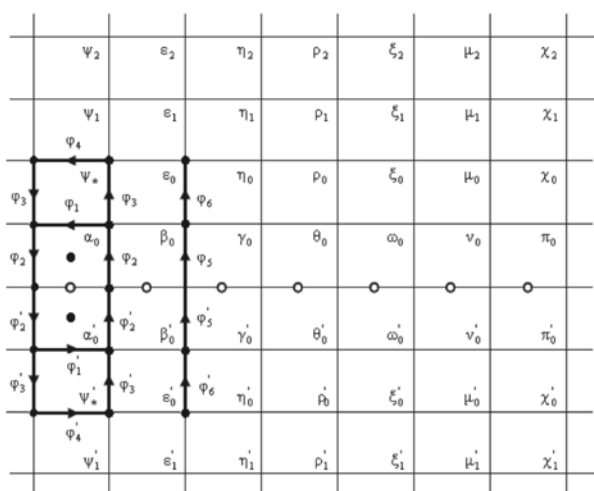


Рис. 1. Распределение скачков фазы для двух вихрей в бесконечной полосе шириной в 13 ячеек в плоскости, перпендикулярной осям вихрей

в ближайших к центру ячейках (см. рис. 1). Справедливость этого предположения будет подтверждена расчетом. Участки, на которых скачки фаз не считаются малыми, выделены на рис. 1 толстыми линиями.

Чтобы избежать выписывания условий баланса токов в узлах, удобно воспользоваться методом контурных токов ячеек. Пусть в каждой ячейке протекает контурный ток против часовой стрелки, равный произведению J_c на соответствующий «контурный» скачок фазы. На рис. 1 указаны обозначения контурных скачков фазы в каждой ячейке (например, ряд от α_0 до π_0). Тогда значения скачков фазы φ_k на контактах (кроме $\varphi_1 - \varphi_6$) определяются как разности соответствующих «контурных» значений.

Магнитный поток через m -ю ячейку можно записать в следующем виде [12]:

$$\Phi_m = \frac{\mu_0 S}{a} \left(i_m + b \sum_k J_k^{(m)} \right), \quad (2)$$

где

$$b = [2\pi(1 - 2\alpha)]^{-1} \ln(E / D);$$

$$E = 1 - \exp[2\pi(1 - \alpha)];$$

$$D = 1 - \exp[-2\pi\alpha], \quad \alpha = \delta/a.$$

Здесь b — коэффициент неоднородности поля ввиду дискретности токового распределения вдоль оси вихря; $\sum_k J_k^{(m)}$ — алгебраическая сумма токов контактов m -й ячейки, S — площадь ячейки; i_m — контурный ток m -й ячейки.

В отличие от [12], мы будем рассматривать такие значения параметра пиннинга I и структурного фактора b , при которых нельзя пренебречь суммой в правой части (2). Подставляя (2) в (1), получим следующую систему уравнений (для $k \geq 1$):

$$\begin{aligned} (4 + g)\psi_k - \psi_{k+1} - \psi_{k-1} - 2\varepsilon_k &= 0; \\ (4 + g)\varepsilon_k - \varepsilon_{k+1} - \varepsilon_{k-1} - \psi_k - \eta_k &= 0; \\ (4 + g)\eta_k - \eta_{k+1} - \eta_{k-1} - \varepsilon_k - \rho_k &= 0; \\ \dots\dots\dots; \\ (4 + g)\chi_k - \chi_{k+1} - \chi_{k-1} - \mu_k &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где $g = I / (Ib + 1)$, а I — параметр пиннинга, определяемый выражением

$$I = 2\pi\mu_0 J_c a / \Phi_0.$$

В системе (3) присутствует неизвестное слагаемое ψ_0 (в первом уравнении, при $k = 1$), смысл которого будет ясен далее. В отличие от уравнений для ряда ψ_k при $k > 1$, уравнение для ячейки с ψ_1 выглядит иначе:

$$(4 + g)\psi_1 - \psi_2 - \frac{Ib\psi_* + \psi_1 + \varphi_4}{Ib + 1} - 2\varepsilon_1 = 0. \quad (4)$$

Это уравнение отличается от других, так как скачок фазы на ребре между ψ_* и ψ_1 мы не считаем малым и его нельзя заменить на разность контурных токов ψ_* и ψ_1 . Чтобы это уравнение имело вид, аналогичный виду уравнений (3), введем новое неизвестное ψ_0 :

$$\psi_0 = \frac{\psi_1 + Ib\psi_* + \varphi_4}{(Ib + 1)}. \quad (5)$$

Тогда уравнение (4) примет вид, совпадающий с видом уравнения (3) при $k = 1$:

$$(4 + g)\psi_1 - \psi_2 - \psi_0 - 2\varepsilon_1 = 0.$$

Отметим, что все скачки фаз ψ_k при $k \geq 1$ и ψ_* — контурные, а ψ_0 — нет. Следует обратить внимание, что на рис. 1 в ячейке под ψ_1 контурный скачок фазы обозначен как ψ_* , а не ψ_0 . Введение ψ_0 позволило унифицировать уравнения системы (3).

Решение системы линейных разностных уравнений (3) при $k \geq 0$ можно искать в виде [12]:

$$\begin{aligned} \psi_k &= A\lambda^k; \quad \varepsilon_k = B\lambda^k; \quad \eta_k = C\lambda^k; \\ \rho_k &= D\lambda^k; \quad \xi_k = E\lambda^k; \quad \mu_k = F\lambda^k; \\ \chi_k &= G\lambda^k. \end{aligned} \quad (6)$$

Подставляя соотношения (6) в систему (3), преобразуем ее к следующему виду:

$$\begin{pmatrix} t & -2\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda & t & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & t & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & t \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A \\ B \\ \dots \\ F \\ G \end{pmatrix} = (0), \quad (7)$$



где введено обозначение

$$t = (4 + g)\lambda - \lambda^2 - 1.$$

Раскладывая определитель n -го порядка вида (7) по первой строке, получим следующее рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} \Delta_n &= t f_n - 2\lambda^2 f_{n-1}; \\ f_n &= t f_{n-1} - \lambda^2 f_{n-2}, \end{aligned} \quad (8)$$

где f_n — определитель n -го порядка вида

$$\begin{vmatrix} t & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda & t & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & t & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & t \end{vmatrix}. \quad (9)$$

Используя формулы (8), (9), найдем определитель матрицы (7):

$$\Delta_7 = \lambda^7 k(k^6 - 7k^4 + 14k^2 - 7), \quad (10)$$

где $k = t / \lambda$.

Приравнявая соотношение (8) к нулю, получим условия существования ненулевого решения системы (3):

$$\begin{aligned} k_1 &= 0; \quad k_{2,3} = \pm 0,867767; \\ k_{4,5} &= \pm 1,56366; \quad k_{6,7} = \pm 1,94985. \end{aligned} \quad (11)$$

Подставляя (9) в выражение для t , найдем собственные числа λ_i (i от 1 до 7):

$$\lambda_i = 4 + g - k_i - 0,5\sqrt{(4 + g - k_i)^2 - 4}. \quad (12)$$

Варианты с плюсами перед корнем в определителе (10) были отброшены, так как контурные токи в соотношениях (6) не должны неограниченно возрастать с увеличением k , т. е. все $|\lambda_i|$ должны быть меньше единицы.

Решая систему (7), выразим коэффициенты B , C , ..., G в выражениях (6) через A :

$$\begin{aligned} B &= kA; \quad C = (k^2 - 2)A; \quad D = k(k^2 - 3)A; \\ E &= (k^4 - 4k^2 + 2)A; \quad F = k(k^4 - 5k^2 + 5)A; \\ G &= (k^6 - 6k^4 + 9k^2 - 2)A. \end{aligned} \quad (13)$$

Общее решение системы (3) имеет следующий вид (при $m \geq 0$):

$$\psi_m = \sum_{i=1}^7 A_i \lambda_i^m; \quad \varepsilon_m = 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i k_i \lambda_i^m;$$

$$\begin{aligned} \eta_m &= 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i (k_i^2 - 2) \lambda_i^m; \\ \rho_m &= 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i k_i (k_i^2 - 3) \lambda_i^m; \\ \xi_m &= 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i (k_i^4 - 4k_i^2 + 2) \lambda_i^m; \\ \mu_m &= 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i k_i (k_i^4 - 5k_i^2 + 5) \lambda_i^m; \\ \chi_m &= 0, 5 \sum_{i=1}^7 A_i (k_i^6 - 6k_i^4 + 9k_i^2 - 2) \lambda_i^m. \end{aligned} \quad (14)$$

Для нахождения A_i (i меняется от 1 до 7), шести скачков фаз φ_i и семи контурных токов (от α_0 до π_0) необходимо записать 14 условий для ячеек двух рядов: с α_0 до $\pi_0 - 7$ и с ψ_* до χ_0 (выражаются через A_i) — формулы (15а) плюс еще 6 условий баланса токов для ребер, отмеченных жирными линиями (см. рис. 1) — формулы (15б):

$$\begin{aligned} I(3b + 1)\alpha_0 - Ib(\psi_* + 2\beta_0) + \varphi_1 + 2\varphi_2 &= 2\pi; \\ [I(3b + 1) + 1]\beta_0 - Ib(\alpha_0 + \gamma_0) - \\ - (Ib + 1)\varepsilon_0 - \varphi_2 + \varphi_5 &= 0; \\ \dots\dots\dots; \\ [I(4b + 1) + 4]\chi_0 - (Ib + 1)(\chi_1 + \mu_0 + \pi_0) &= 0; \end{aligned} \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \psi_* - \varepsilon_0 &= \sin \varphi_3; \\ \psi_* - \psi_1 &= \sin \varphi_4; \\ \beta_0 - \gamma_0 &= \sin \varphi_5; \\ \dots\dots\dots; \\ \alpha_0 - \beta_0 &= \sin \varphi_2. \end{aligned} \quad (15b)$$

В результате, учитывая условия (5) с дополнительным неизвестным ψ_0 , получим 21 уравнение с 21 неизвестным. В статье [12] предлагался метод решения подобной системы, основанный на ее сведении к линейному виду, за исключением двух уравнений, решение которых проводилось численным методом. В отличие от метода в статье [12], для данной системы мы будем использовать метод полной линеаризации уравнений с последующим итеративным приближением к решению. Для этого разложим все синусы по формулам

$$\sin \varphi_i = \sin \varphi_i^0 + \delta_i \cos \varphi_i^0,$$

где $\varphi_i = \varphi_i^0 + \delta_i$, и будем считать новыми переменными δ_i . Полученная система будет полностью линейной относительно всех 21 неизвестных. Применимость такого метода подтверждается результатами расчетов. С каждой последующей итерацией значения δ_i становятся меньше и в конце концов стремятся к нулю, что оправдывает использованное разложение синуса $\sin \varphi_i$. При апробации метода оказалось, что для первой итерации в качестве начальных условий большими достаточно взять только значения φ_1^0 и φ_2^0 (например, $\varphi_1^0 = \varphi_2^0 = 0,7$), остальные φ_i^0 можно взять равными нулю. Если же все φ_i^0 взять равными нулю, то система уравнений может не иметь решения. Решая полученную линейную систему, найдем все δ_i и вычислим новые φ_i^0 по формуле

$$\varphi_i^0 = \varphi_i^0 + \delta_i.$$

После этого проведем расчет системы с новыми φ_i^0 . В результате мы приходим к ситуации, когда $\delta_i \ll 1$. Результаты, полученные при полной линейаризации уравнений, полностью совпали с полученными методом, который описан в статье [12].

Подобный расчет был также проделан для случаев, когда $d = 2$ и $d = 3$. Количество решаемых уравнений в этих случаях увеличивалось в связи с появлением новых рядов ячеек ниже ряда с контурными токами от α_0 до π_0 .

Для значений параметра пиннинга I , больших некоторой критической величины I_c , система имеет два решения, соответствующие двум возможным позициям центра вихря: конфигурации А и В в работе [11]. При уменьшении параметра I решения сближаются и при $I = I_c$ совпадают. При $I < I_c$ система (13) решений не имеет, что означает невозможность расположения вихрей на выбранном расстоянии d друг от друга. Для $b = 0$ и для расстояний $d = 1, 2$ и 3 значения I_c полностью совпали с результатами [12], полученными другим методом.

Выяснилось (см. рис. 2), что при увеличении параметра b значение I_c монотонно уменьшается. Такое поведение может на первый взгляд показаться необычным, поскольку b входит в уравнения (3) и (15)

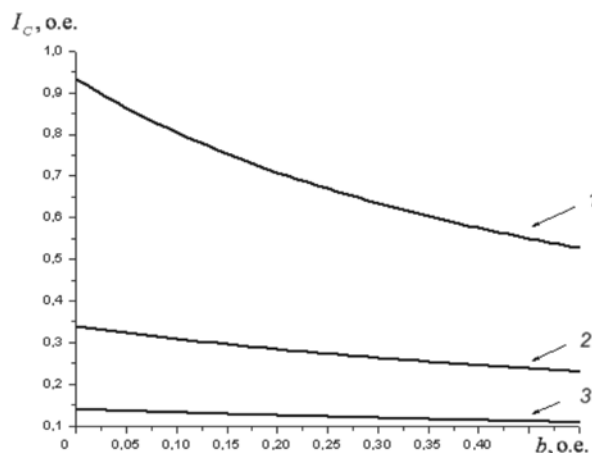


Рис. 2. Зависимости критического значения I_c от структурного фактора b при различных значениях расстояния d : 1 (1), 2 (2) и 3 (3).
Случай сонаправленных вихрей

только как множитель Ib . При $Ib \ll 1$ параметр b , казалось бы, не должен влиять на I_c , однако из рис. 2 видно, что это влияние заметно. Чтобы понять причину такого феномена, найдем математическое выражение, описывающее кривые на рис. 2. Для этого ограничимся двумя первыми членами в разложении

$$I_c(b) = I_c(0) - k_c I_c(b) \cdot b + \dots, \quad (16)$$

где k_c — коэффициент разложения, зависящий от расстояния между вихрями. Отсюда

$$I_c(b) = I_c(0) / (1 + k_c b). \quad (17)$$

Значения k_c для разных расстояний d могут быть легко рассчитаны из формулы (17) при известных значениях I_c для разных b . Выражение (17) очень точно описывает графики на рис. 2 для всех значений d : с увеличением расстояния d влияние b на величину I_c становится слабее. Погрешности описания не превышают долей процента во всем диапазоне изменения b (от 0 до 0,45).

Как легко убедиться, наше предположение о малости скачков фаз на всех связях, кроме выделенных на рис. 1 жирными линиями (т. е. кроме $\varphi_1 - \varphi_6$), подтвердилось (рис. 3).

Результаты расчета для $d = 3$, представленные на рис. 3, соответствуют значениям $b = 0,454$, $I_c = 0,11045$. Стрелочками обо-

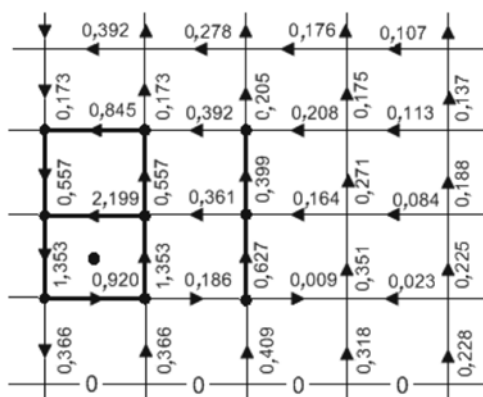


Рис. 3. Рассчитанное распределение скачков фазы по контактам модели при $b = 0,454$, $I_c = 0,11045$, $d = 3$. Случай сонаправленных вихрей

значены направления протекания токов. Картина распределения скачков фаз продолжается симметрично вниз относительно нижних ребер, на которых скачки фаз равны нулю.

Вихри противоположны по направлениям

Аналогичный расчет был проведен для вихрей, противоположных по направлениям для $d = 1, 2$ и 3 . Конфигурация вихрей уже не будет иметь ребер с нулевыми скачками фаз между вихрями, как это было в случае параллельных вихрей. Все формулы с (1) по (12), полученные в предыдущем разделе, остаются справедливыми и в данном случае. Изменению подвергнется лишь система (13). Теперь в ней появятся скачки фазы, соответствующие нижней токовой линии, а также поменяются коэффициенты перед некоторыми неизвестными из ряда ячеек с α_0 до π_0 ввиду иного направления протекания токов. Рассчитанные значения I_c в рассматриваемом случае больше (рис. 4). Монотонное уменьшение значений I_c с ростом b сохраняется.

Таким образом, предложен новый метод решения нелинейной системы уравнений квантования флюксоида в ячейках трехмерной упорядоченной джозефсоновской среды, позволяющий найти токовую конфигурацию двух взаимодействующих линейных вихрей, а также минимально возможное

расстояние между ними при данном значении параметра пиннинга.

Этот метод позволяет весьма точно рассчитывать токовую конфигурацию, сечение которой плоскостью, перпендикулярной ее оси, представляет собой бесконечную полосу шириной 13 ячеек. В среднем ряду указанной полосы находятся центры вихрей. Рассмотрены два случая: в первом — токи в обоих вихрях протекают по часовой стрелке; во втором — токи в одном вихре протекают по часовой, в другом — против часовой стрелки.

Выведены и решены системы уравнений, описывающие эти случаи. Базой для составления системы уравнений послужило условие квантования флюксоида в каждой ячейке. Для решения полученной нелинейной системы уравнений в конечных приращениях используется специальный итеративный метод, на каждом шаге которого система представляется в виде, когда все неизвестные входят в систему линейно. В более ранних работах возможность полной линеаризации системы уравнений не рассматривалась.

Показано, что математический подход, основанный на условиях квантования флюксоида в ячейках, позволяет рассчитывать критические значения параметра пиннинга I_c , при которых исходные два вихря

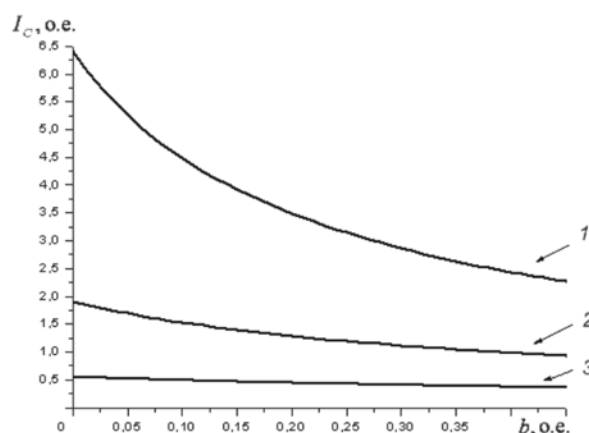


Рис. 4. Зависимости критического значения I_c от структурного фактора b при различных значениях расстояния d : 1 (1), 2 (2) и 3 (3). Случай противоположно направленных вихрей

еще могут удерживаться на заданном расстоянии d друг от друга во всем диапазоне значений структурного фактора b .

Исследовано влияние структурного фактора b , связанного с неоднородностью поля вследствие дискретности токового распре-

деления вдоль оси вихря, на значения I_c . В обеих конфигурациях с увеличением структурного фактора b значение I_c монотонно убывает. Предложена математическая формула, объясняющая влияние b на I_c , которая хорошо согласуется с численным расчетом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Абрикосов, А.А.** О магнитных свойствах сверхпроводников второй группы [Текст] / А.А. Абрикосов // ЖЭТФ. — 1957. — Т. 32. — С. 1442 — 1452.
2. **Goodman, B.B.** Type II or London superconductors [Text] / B.B. Goodman // Rev. Mod. Phys. — 1964. — Vol. 36. — № 1. — P. 12–19.
3. **Кулик, И.О.** Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах. [Текст] / И.О. Кулик, И.К. Янсон.—М.: Наука, 1970. —272 с.
4. **Гинзбург, С.Л.** Влияние структуры сложной сети на свойства динамических процессов на ней [Текст] / С.Л. Гинзбург, А.В. Накин, Н.Е. Савицкая // Письма в ЖЭТФ. — 2009. — Т. 90. — № 12. — С. 873–878.
5. **Брыксин, В.В.** Проникновение магнитного потока в контакт в критическом состоянии [Текст] / В.В. Брыксин, А.В. Гольцев, С.Н. Дороговцев, А.Н. Самухин //ФТТ. — 1992. — Т. 34. — № 7. — С. 2306–2309.
6. **Сонин, Э.Б.** Теория джозефсоновской среды в ВТСП: вихри и критические магнитные поля [Текст] / Э.Б. Сонин // Письма в ЖЭТФ. — 1988. — Т. 47. — № 8. — С. 415–418.
7. **Кузьмичев, Н.Д.** Критическое состояние среды Джозефсона [Текст] / Н.Д. Кузьмичев // Письма в ЖЭТФ. —2001. —Т. 74. —№ 5. —С. 291–295.
8. **Герашенко, О.В.** Лавины магнитного потока в джозефсоновской среде [Текст] / О.В. Герашенко // Письма в ЖЭТФ. — 2007. —Т. 86. — № 7. — С. 539–543.
9. **Zelikman, M.A.** Vortex states and screening currents in a 3D Josephson medium [Text] / M.A. Zelikman //Superconductor Science & Technology. — 1997. — Vol. 10. — № 7. — P. 469–474.
10. **Зеликман, М.А.** Влияние структурного фактора на меисснеровское состояние в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде [Текст] / М.А. Зеликман, К.А. Поцелуев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — Т. 1. — № 116. — С. 18–25.
11. **Зеликман, М.А.** Влияние структурного фактора на конфигурацию линейных вихрей в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде [Текст] / М.А. Зеликман, К.А. Поцелуев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — № 1(141). — С. 17–27.
12. **Зеликман, М.А.** Пиннинг линейных вихрей и возможные расстояния между ними [Текст] / М.А. Зеликман // Журнал технической физики. — 2006. — Т. 76. — № 9. — С. 65–73.

ЗЕЛИКМАН Марк Аронович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
marzelik@mail.ru

ПОЦЕЛУЕВ Кирилл Андреевич — аспирант кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
roc-kira@mail.ru



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 539.3

В.В. Тихомиров

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МАКРОТРЕЩИНЫ С ДУГООБРАЗНЫМИ МИКРОТРЕЩИНАМИ В УСЛОВИЯХ АНТИПЛОСКОГО СДВИГА

V.V. Tikhomirov

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, Russia

MACROCRACK INTERACTION WITH ARCHED MICROCRACKS UNDER ANTIPLANE SHEAR

В статье рассматривается взаимодействие полубесконечной трещины моды III с системой дугообразных трещин, расположенных на дуге окружности с центром в вершине основной трещины. В результате использования обобщенного интегрального преобразования Меллина задача сведена к сингулярному интегральному уравнению, точное решение которого получено в замкнутой форме. Изучена зависимость коэффициента интенсивности напряжений от микроструктурных параметров системы.

ДУГООБРАЗНЫЕ ТРЕЩИНЫ. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МАКРОТРЕЩИНЫ С МИКРОТРЕЩИНАМИ. ПЛОТНОСТЬ ТРЕЩИН.

The paper focuses on the semi-infinite III-mode crack interaction with a structure of arched cracks that arranged in the arc centered at the main crack vertex. Through the use of a generalized integral Mellin transform the problem has been reduced to a singular integral equation with a closed-form exact solution. The relationship between the stress intensity factor and the microstructure parameters has been studied.

ARC CIRCULAR CRACKS. MACROCRACK INTERACTION WITH MICROCRACKS. CRACK DENSITY.

Характерной особенностью микроструктуры многих материалов, в особенности металлов, керамики и горных пород, является наличие микротрещин. По этой причине проблема учета влияния подобных микроструктурных дефектов на прочностные характеристики твердых тел вызывает большой интерес механиков уже несколько десятилетий. При этом можно выделить два направления исследований:

изучение влияния трещиноподобных дефектов на макроскопические свойства

упругих тел и нахождение упругих модулей материалов;

анализ локального упрочнения или разупрочнения материалов и распространения макротрещин, находящихся в поле массивов микротрещин. Поскольку настоящая работа лежит в русле последнего направления, то приводимый далее краткий литературный обзор в основном будет касаться работ именно этого направления.

Влияние микротрещин на напряженное состояние в вершине макротрещины про-

является возникновением одного из двух противоположных эффектов:

экранирования (shielding effect), при котором коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в ее вершине уменьшается по сравнению с бездефектной средой, что обуславливает локальное упрочнение материала;

ослабления (amplification effect), связанного с уменьшением КИН и приводящего к локальному разупрочнению материала.

Преобладание какого-либо из этих эффектов определяется расположением и ориентацией микротрещин [1]. Даже для одного и того же массива микротрещин возможны различные результаты [2], так как это зависит от микроструктурных геометрических параметров.

С математической точки зрения проблема взаимодействия трещин для произвольного их расположения в упругой плоскости сводится к системе сингулярных интегральных уравнений [3]. Точные решения на настоящий момент получены для частных видов периодических систем прямолинейных и дугообразных трещин [3, 4]. В силу циклической симметрии такие задачи по сути дела сводятся к рассмотрению одной трещины. Возможно, что единственным примером, имеющим точное решение, может служить задача о взаимодействии полубесконечной трещины с периодической системой коллинеарных микротрещин [5].

В связи с этим для оценки влияния на КИН произвольно ориентированных систем микротрещин, расположенных вблизи вершины макротрещины, разработаны два приближенных подхода: континуальный и дискретный. При первом подходе зона микрорастрескивания, прилегающая к вершине магистральной трещины, рассматривается как зона поврежденного материала, имеющего пониженные эффективные упругие модули [6, 7]. Определенные сомнения в адекватности моделирования зоны микрорастрескивания материалом с эффективными свойствами высказаны в работах [8, 9]. В дискретном подходе многочисленные микротрещины принимаются во внимание как отдельные дискретные элементы структуры упругой среды. В силу возникаю-

щих на этом пути математических трудностей, для реализации дискретного подхода разработан ряд приближенных методов.

Исторически в первых работах, относящихся к данному подходу, учет взаимодействия между микротрещинами не производился [2]. Простейший способ учета взаимодействий трещин был предложен М. Качановым в 1985 году [10]. Основная идея метода состояла в том, что эффект воздействия микротрещины A на любую другую микротрещину B обуславливается только осредненной нагрузкой на берегах трещины A . Помимо приближенного характера, данный метод имеет еще ряд ограничений. Существенно, что он опирается на допущение о локализации всех микротрещин в зоне, прилегающей к вершине макротрещины, и использует асимптотики напряжений в этой зоне. Кроме того, метод Качанова требует знания фундаментальных решений, которые доступны в плоских задачах для прямолинейных трещин, и, следовательно, данный метод ограничен трещинами только такой формы [11].

Аппроксимации усилий на берегах трещин полиномами более высоких порядков породили другие приближенные методы учета взаимодействий микротрещин [12, 13]. Численный метод граничных элементов привлекался для анализа проблемы в работе [14].

В настоящей работе с помощью обобщенного интегрального преобразования Меллина (так называемого преобразования «через дефект») [15] построено точное решение антиплоской задачи о взаимодействии полубесконечной трещины с дугообразными трещинами, расположенными на дуге окружности. При этом не делалось допущений о близости расположения микротрещин к вершине магистральной трещины и о способе их распределения по дуге окружности.

Постановка задачи

Макротрещину, находящуюся в однородной изотропной среде в условиях антиплоского сдвига, будем рассматривать как полубесконечную. К ее берегам на расстоянии r_0 от вершины приложены само-

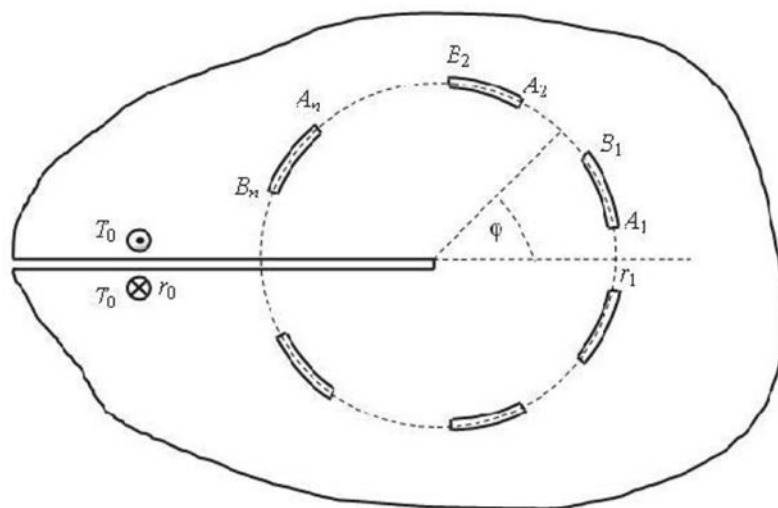


Рис. 1. Схема к постановке задачи: полубесконечная трещина моды III, взаимодействующая с системой дугообразных трещин; A_k, B_k – вершины микротрещин; r_1 – радиус окружности; r_0 – расстояние от центра окружности до точки приложения нагрузки T_0

уравновешенные сосредоточенные силы T_0 . На окружности радиуса r_1 с центром в вершине макротрещины расположены симметричным образом относительно ее линии дугообразные трещины $A_k B_k$ ($k = 1, 2, \dots, n$) (рис. 1). Пусть вершины микротрещин A_k и B_k определяются центральными углами α_{k1} и α_{k2} , соответственно, причем $\alpha_{k1} < \alpha_{k2}$ и $\alpha_{n2} < \pi$. Последнее неравенство означает, что рассматривается неособая система микротрещин, т. е. не имеющая пересечений с магистральной трещиной.

В силу симметрии задачи достаточно рассмотреть только верхнюю полуплоскость, в которой расположено n микротрещин. Пусть контур L_α представляет собой совокупность разомкнутых дуг $L_{\alpha k} = A_k B_k$ ($k = 1, 2, \dots, n$), а L_α^* – совокупность перемычек между вершинами микротрещин. Тогда перемещение $w(r, \varphi)$ (r, φ – полярные координаты) является гармонической функцией и удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$w(r, 0) = 0; \quad \tau_{\varphi z}(r, \pi) = T_0 \delta(r - r_0); \quad (1)$$

$$\tau_{rz}(r_1, \varphi) = 0 \quad \text{на } L_\alpha; \quad (2)$$

($\delta(r)$ – дельта-функция), а касательные напряжения определяются формулами

$$\tau_{\varphi z} = \frac{\mu}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi}; \quad \tau_{rz} = \mu \frac{\partial w}{\partial r}. \quad (3)$$

С точки зрения механики разрушения интерес представляют коэффициенты интенсивности напряжений в вершинах трещин.

Сингулярное интегральное уравнение задачи и его решение

С помощью обобщенного интегрального преобразования Меллина [15] аналогичным образом, как это было сделано в работах [16, 17], удовлетворяя гармоническому уравнению равновесия и граничным условиям (1), получаем

$$w(r, \varphi) = w_0(r, \varphi) + R(r) \int_{L_\alpha} u(\theta) \chi(r, \varphi, \theta) d\theta. \quad (4)$$

Здесь функция

$$u(\theta) = w(r_1 - 0, \theta) - w(r_1 + 0, \theta) \quad (\theta \in L_\alpha)$$

представляет собой относительное проскальзывание берегов трещины, $w_0(r, \varphi)$ – решение задачи о полубесконечной трещине, находящейся в однородной среде, которое определяется формулой

$$w_0(r, \varphi) = \frac{T_0}{2\pi\mu} \ln \frac{r + r_0 + 2\sqrt{rr_0} \sin \frac{\varphi}{2}}{r + r_0 - 2\sqrt{rr_0} \sin \frac{\varphi}{2}},$$

а остальные функции в представлении (4) имеют вид

$$R(r) = (r_1 - r)\sqrt{r_1 r} / (2\pi),$$

$$\chi(r, \varphi, \theta) = \frac{\cos(\theta + \varphi) / 2}{r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos(\theta + \varphi)} - \frac{\cos(\theta - \varphi) / 2}{r_1^2 + r^2 - 2r_1 r \cos(\theta - \varphi)}.$$

Определяя согласно формулам (3) касательные напряжения τ_{rz} и удовлетворяя граничному условию (2), которое отражает отсутствие напряжений на берегах дугообразных трещин, придем к сингулярному интегральному уравнению:

$$\int_{L_\alpha} \frac{\cos \theta / 2}{\cos \theta - \cos \varphi} u'_*(\theta) d\theta = f(\varphi) \quad (\varphi \in L_\alpha), \quad (5)$$

где

$$f(\varphi) = \frac{\sqrt{\rho(\rho-1)}}{1 + 2\rho \cos \varphi + \rho^2}, \quad \rho = \frac{r_0}{r_1};$$

$$u'_*(\theta) = \frac{\mu}{T_0} \frac{d}{d\theta} [w(r_1 - 0, \theta) - w(r_1 + 0, \theta)].$$

Будем искать решение уравнения (5) в виде

$$u'_*(\theta) = 2 \sin \frac{\theta}{2} \nu(\theta), \quad (6)$$

где $\nu(\theta)$ — новая неизвестная функция.

Подставляя представление (6) в уравнение (5) и производя очевидную замену переменной $\xi = \cos \theta$, получим:

$$\frac{1}{\pi} \int_{L_\beta} \frac{V(\xi) d\xi}{\xi - x} = F(x), \quad (7)$$

$$V(\xi) = \nu(\arccos \xi), \quad F(x) = \gamma(1 + 2\rho x + x^2)^{-1},$$

$$\gamma = \sqrt{\rho(\rho-1)} / \pi.$$

Контур L_β представляет совокупность отрезков $[\beta_{k2}, \beta_{k1}]$ ($\beta_{kj} = \cos \alpha_{kj}$, $k = 1, 2, \dots; j = 1, 2$), расположенных в интервале $(-1, 1]$.

Общее решение уравнения (7) имеет вид [4]:

$$V(\xi) = \frac{1}{\pi X(\xi)} \left[- \int_{L_\beta} \frac{X(t)F(t)}{t - \xi} dt + Q_{n-1}(\xi) \right]. \quad (8)$$

Здесь $X(\xi)$ — каноническая функция

Племеля, определяемая формулой

$$X(\xi) = [(\beta_{11} - \xi)(\xi - \beta_{12})(\xi - \beta_{21}) \dots \dots (\xi - \beta_{n1})(\xi - \beta_{n2})]^{1/2}, \quad (9)$$

а $Q_{n-1}(\xi)$ — полином степени $n - 1$.

Заметим, что представление канонической функции в форме (9) обеспечивает ее вещественность при любом $\xi \in L_\beta$.

Интеграл, входящий в представление (8), можно вычислить, если использовать подход, предложенный в работе [4]:

$$\int_{L_\beta} \frac{X(t)F(t)}{t - \xi} dt = \pi \gamma D[d^{-2}(\xi) + q_{n-1}(\xi)], \quad (10)$$

$$d^2(\xi) = 1 + 2\rho\xi + \rho^2, \quad D = (2\rho)^{-2n} \prod_{k=1}^n d_{k1} d_{k2};$$

$$d_{kj} = \sqrt{1 + 2\rho \cos \alpha_{kj} + \rho^2} \quad (k = 1, 2, \dots; j = 1, 2);$$

$q_{n-1}(\xi)$ — полином степени $n-1$ с известными коэффициентами.

Заметим, что величины d_{kj} представляют собой безразмерные расстояния от точки приложения нагрузки до вершин микротрещин.

Тогда, на основании формул (6), (8) и (10) для производной безразмерного скачка смещений на берегах микротрещин, получим выражение:

$$u'_*(\theta) = - \frac{2\gamma D \sin \theta / 2}{X(\cos \theta)} \times \quad (11)$$

$$\times [d^{-2}(\cos \theta) - P_{n-1}(\cos \theta)];$$

$$P_{n-1}(\xi) = c_0 + c_1 \xi + \dots + c_{n-1} \xi^{n-1}.$$

Коэффициенты полинома c_k ($k = 0, 1, \dots, n-1$), входящего в формулу (11), получим из условий однозначности перемещений на каждой дугообразной трещине-разрезу:

$$\int_{\alpha_{k1}}^{\alpha_{k2}} u'_*(\theta) d\theta = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, n). \quad (12)$$

В результате подстановки представления (11) в условия (12) придем к системе n линейных алгебраических уравнений относительно констант c_k :

$$\sum_{j=0}^{n-1} c_k \int_{\beta_{k2}}^{\beta_{k1}} \frac{\xi^j d\xi}{\sqrt{1 + \xi X(\xi)}} = \int_{\beta_{k2}}^{\beta_{k1}} \frac{1}{\sqrt{1 + \xi X(\xi)}} \frac{d\xi}{1 + 2\rho\xi + \rho^2} \quad (13)$$

$$(k = 1, 2, \dots, n).$$

Коэффициенты интенсивности напряжений

Вычислим на основе представления (4) касательные напряжения на продолжении макротрещины с помощью формул (3). При $r \rightarrow 0$ получим следующее выражение:

$$\tau_{rz}(r, 0) \sim \frac{T_0}{\pi\sqrt{r_0}} \left[1 - \sqrt{\rho} \int_{L_u} u'_*(\theta) \cos \frac{\theta}{2} d\theta \right] r^{1/2}.$$

Подставим сюда представление (11) и определим КИН стандартной формулой

$$K_{III} = \lim_{r \rightarrow 0} \sqrt{2\pi r} \tau_{\varphi z}(r, 0).$$

Тогда для нормализованного КИН в вершине макротрещины получаем:

$$N = \frac{K_{III}}{K_{III}^0} = 1 + \frac{\rho(\rho - 1)D}{\pi} \times \times \int_{L_\varphi} \left[d^{-2}(\xi) - P_{n-1}(\xi) \right] \frac{d\xi}{X(\xi)}. \quad (14)$$

Здесь $K_{III}^0 = \sqrt{2/(\pi r_0)} T_0$ представляет собой КИН для полубесконечной трещины в однородной среде при таком же нагружении и отсутствии микротрещин [16]. Отсюда вытекает, что интегральное слагаемое в выражении (14) определяет добавку в КИН, которая обусловлена взаимодействием трещин.

Для нахождения коэффициентов интенсивности в вершинах микротрещин A_k и B_k вычислим касательные напряжения на перемычках между микротрещинами:

$$\tau_{rz}(r_1, \varphi) = \tau_{rz}^0(r_1, \varphi) - \frac{T_0}{\pi r_0} \sin \frac{\varphi}{2} \int_{L_u} \frac{\cos \theta/2}{\cos \theta - \cos \varphi} u'_*(\theta) d\theta \quad (15)$$

$$(\varphi \in L_u^*).$$

Подчеркнем, что первое слагаемое в правой части (15), определяемое точечной нагрузкой на макротрещине при отсутствии микротрещин, особенностей не имеет, а интеграл во втором слагаемом является регулярным. Определим КИН в вершине B_k формулой

$$K_{III}^{B_k} = \lim_{\varphi \rightarrow \alpha_{k2} + 0} \sqrt{2\pi r_1(\varphi - \alpha_{k2})} \cdot \tau_{rz}(r_1, \varphi). \quad (16)$$

Очевидно, что вклад в КИН будет да-

вать только интеграл по дуге $L_{\alpha k}$. Отсюда, применяя формулы (11) и (15), приходим к необходимости вычисления следующего предела:

$$K_{III}^{B_k} = \frac{T_0}{\pi r_1} \gamma D \sin \frac{\alpha_{k2}}{2} \lim_{\varphi \rightarrow \alpha_{k2} + 0} \sqrt{2\pi r_1(\varphi - \alpha_{k2})} \times \times \int_{\alpha_{k1}}^{\alpha_{k2}} \frac{\sin \theta}{X(\cos \theta)(\cos \theta - \cos \varphi)} d\theta.$$

Используя значение интеграла

$$\int_{\alpha_{k1}}^{\alpha_{k2}} \frac{\sin \theta d\theta}{(\cos \theta - \cos \varphi)^{3/2}} =$$

$$= 2[(\cos \alpha_{k2} - \cos \varphi)^{-1/2} - (\cos \alpha_{k1} - \cos \varphi)^{-1/2}],$$

находим:

$$N_{B_k} = \frac{K_{III}^{B_k}}{K_{III}^0} = = \frac{2\rho(\rho - 1)D}{\pi\sqrt{\sin \alpha_{k2}}} \Phi(\cos \alpha_{k2}) \sin \frac{\alpha_{k2}}{2}; \quad (17)$$

$$\Phi(t) = [d^{-2}(t) - P_{n-1}(t)]X_*^{-1}(t).$$

Здесь значок звездочки означает, что в функции (9) множитель $\sqrt{\xi - \beta_{k2}}$ отсутствует.

Аналогичным путем приходим к выражению для нормализованного КИН в вершинах A_k :

$$N_{A_k} = \frac{K_{III}^{A_k}}{K_{III}^0} = = - \frac{2\rho(\rho - 1)D}{\pi\sqrt{\sin \alpha_{k1}}} \Phi(\cos \alpha_{k1}) \sin \frac{\alpha_{k1}}{2}. \quad (18)$$

Таким образом, согласно формулам (15), (17) и (18), коэффициенты интенсивности напряжений в вершинах трещин зависят от $2n + 1$ микроструктурных параметров: ρ , α_{k1} и α_{k2} ($k = 1, 2, \dots, n$).

Две симметричные дугообразные трещины

В этом случае в верхней полуплоскости находится только одна дугообразная трещина (либо ее половина, если трещина центральная, у которой $\alpha_{11} = 0$) и, следовательно, $n = 1$. При этом система (13) вырождается в одно уравнение, решение которого выражается через полные эллиптические интегралы $K(\lambda)$ и $\Pi(\pi/2, \eta, \lambda)$ пер-

вого и третьего рода, соответственно [18]:

$$c_0 = \frac{\Pi(\pi/2, \eta, \lambda)}{d_{11}^2 K(\lambda)}; \quad \lambda = \sqrt{\frac{\beta_{11} - \beta_{12}}{1 + \beta_{11}}};$$

$$\eta = -\frac{2\rho(\beta_{11} - \beta_{12})}{d_{11}^2}.$$

Интегралы, входящие в представление (14), вычисляются в замкнутой форме, и нормализованный КИН в вершине полубесконечной трещины принимает вид:

$$N = 1 + \frac{\rho - 1}{2} \left[1 - \frac{d_{12}}{d_{11}} \frac{\Pi(\pi/2, \eta, \lambda)}{K(\lambda)} \right]. \quad (19)$$

Отметим, что второе слагаемое в этой формуле представляет собой вклад, который вносит в КИН взаимодействие между макротрещиной и микротрещинами. Из формулы (19) видно, что если окружность, на которой располагаются микротрещины, проходит через точку приложения нагрузки (т. е. $\rho = r_0/r_1 = 1$), то этот вклад будет равен нулю.

Используя представления полных эллиптических интегралов в виде рядов [18], нетрудно показать, что в случае очень боль-

шого удаления микротрещин от вершины макротрещины $N \rightarrow 1$ при $\rho \rightarrow 0$. В противоположной предельной ситуации, когда $\rho \rightarrow \infty$ (что имеет место при очень близком расположении дугообразных трещин к вершине основной трещины), получаем асимптотическую формулу:

$$N \sim 1 + \frac{\beta_{11} - \beta_{12}}{2} \left[1 - 2 \frac{D(\pi/2, \lambda)}{K(\lambda)} \right],$$

где $D(\pi/2, \lambda)$ – эллиптический интеграл третьего рода [18].

Из общих представлений (17) и (18), при $n = 1$, вытекают следующие формулы для коэффициентов интенсивности в вершинах A и B дугообразных трещин:

$$N_{A(B)} = \frac{\rho - 1}{2} \Lambda_{A(B)}(\alpha_{11}, \alpha_{12}, \rho) \times$$

$$\times \frac{\sin \alpha_{A(B)}/2}{\sqrt{(\cos \alpha_{11} - \cos \alpha_{12}) \sin \alpha_{A(B)}}}, \quad (20)$$

где

$$\Lambda_A = \frac{d_{12}}{d_{11}} \left[\frac{\Pi(\pi/2, \eta, \lambda)}{K(\lambda)} - 1 \right];$$

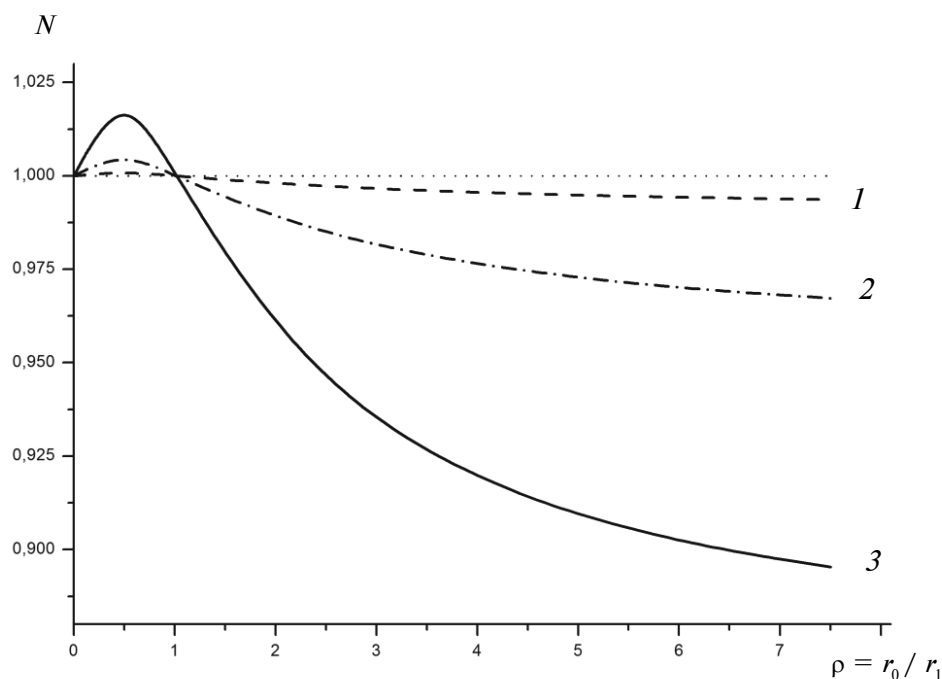


Рис. 2. Зависимости нормализованного КИН в вершине микротрещины, взаимодействующей с центральной микротрещиной, от безразмерного расстояния при различных значениях угла α_{12} , град: 60 (1), 90 (2), 120 (3); $\alpha_{11} = 0$

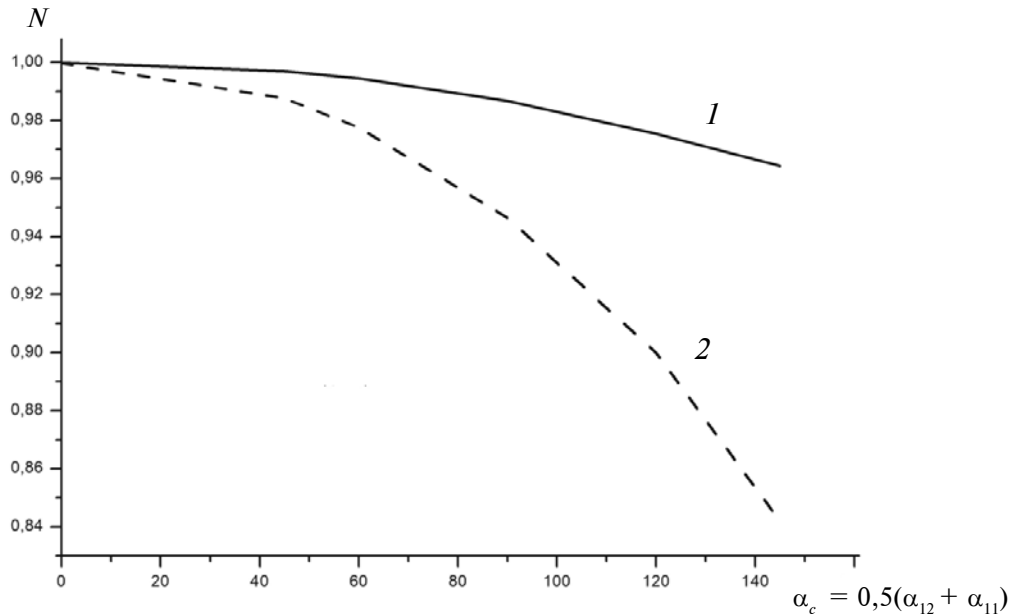


Рис. 3. Зависимости нормализованного КИН в вершине макротрещины от положения центра α_c для симметрично расположенных микротрещин при различных значениях их относительной длины $l/r_1 = \alpha_{12} - \alpha_{11}$, град: 30 (1) и 60 (2)

$$\Lambda_B = \frac{d_{11}}{d_{12}} - \frac{d_{12}}{d_{11}} \frac{\Pi(\pi/2, \eta, \lambda)}{K(\lambda)};$$

$$\sin \alpha_A = \sin \alpha_{11}, \quad \sin \alpha_B = \sin \alpha_{12}.$$

Легко установить, что при $\rho \rightarrow 0$ нормализованные коэффициенты интенсивности (20) стремятся к единице, а при $\rho \rightarrow \infty$ их предельные значения определяются асимптотиками

$$\begin{aligned} N_A &\sim \frac{D(\pi/2, \lambda)}{\sqrt{2}K(\lambda)} \times \\ &\times \sqrt{(\cos \alpha_{11} - \cos \alpha_{12}) \operatorname{tg} \frac{\alpha_{11}}{2}}; \\ N_B &\sim \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 - \frac{D(\pi/2, \lambda)}{K(\lambda)} \right] \times \\ &\times \sqrt{(\cos \alpha_{11} - \cos \alpha_{12}) \operatorname{tg} \frac{\alpha_{12}}{2}}. \end{aligned}$$

Из формулы (20), в частности, следует, что при $\alpha_{11} = 0$, т. е. для центральной трещины, $N_A = 0$, а N_B неограниченно растет при $\alpha_{12} \rightarrow \pi$.

На рис. 2 представлены зависимости от параметра ρ нормализованного КИН (N) в

вершине основной трещины, взаимодействующей с центральным дугообразным разрезом ($\alpha_{11} = 0$), при различных углах α_{12} . Рисунок 3 иллюстрирует изменение величины N в зависимости от положения дугообразного разреза на окружности, задаваемого углом $\alpha_c = (\alpha_{12} + \alpha_{11})/2$, которой соответствует центру разреза, при двух значениях относительных длин разрезов $l/r_1 = \alpha_{12} - \alpha_{11}$. Представленные данные показывают, что при $\rho > 1$ наличие дугообразной трещины приводит к уменьшению КИН в вершине основной трещины, т. е. к эффекту экранирования (упрочнения) материала, а при $\rho < 1$ наблюдается противоположный эффект, т. е. эффект ослабления материала. С увеличением относительной длины трещины, а также с возрастанием угла α_c эти эффекты усиливаются. Таким образом, доминирующая роль того или иного эффекта определяется не положением микротрещины на дуге окружности, а относительным расстоянием $\rho = r_0/r_1$ до точки приложения нагрузки.

Зависимости нормализованных коэффициентов интенсивности в вершинах микротрещин от их расположения на окружности

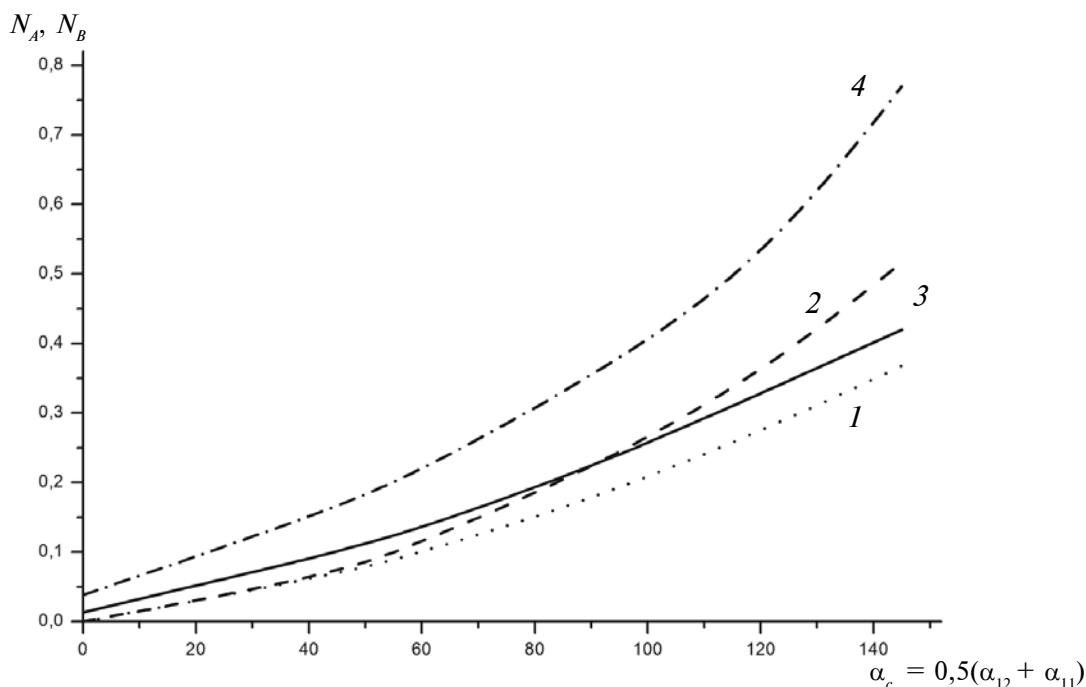


Рис. 4. Зависимости нормализованных КИН $N_A(1, 2)$ и $N_B(3, 4)$ в вершинах микротрещин A и B от положения их центра α_c при различных значениях их относительной длины $l/r_1 = \alpha_{12} + \alpha_{11}$, град: 30 (1, 3) и 60 (2, 4)

показаны на рис. 4. Видно, что с увеличением угла α_c величины N_A и N_B монотонно возрастают и, следовательно, возрастает вероятность роста микротрещин.

Система симметричных дугообразных трещин

В случае нескольких дугообразных трещин, когда $n > 1$, интегралы, входящие в систему (13) и формулу для КИН (14), могут быть оценены только численно (хотя при $n = 2$ интегралы в (14) выражаются через полные эллиптические интегралы). При этом удобно использовать квадратурную формулу Гаусса—Чебышева.

В дальнейшем будем рассматривать регулярные системы дугообразных трещин, у которых

$$\Delta = \alpha_{k1} - \alpha_{(k-1)1} = \alpha_{k2} - \alpha_{(k-1)2} = \text{const} \\ (k = 2, 3, \dots, n),$$

причем $\Delta \leq \pi/n$. Параметр Δ можно назвать шагом системы трещин, а в случае ее периодичности — периодом.

Отсюда вытекает, что в случае регуляр-

ной системы n дугообразных трещин число микроструктурных параметров уменьшается до четырех, в качестве которых, например, можно выбрать следующие: ρ , α_{11} , $\alpha = \alpha_{k2} - \alpha_{k1}$, Δ . Параметр α , определяющий длину микротрещин l , связан с линейной плотностью дугообразных трещин ω соотношением

$$\omega = \frac{1}{\pi r_1} \sum_{k=1}^n l_k = \frac{n\alpha}{\pi}.$$

Вычисления по формулам (13) и (14) проводились для $n = 4$ и $\rho = 5$, что соответствует достаточно близкому расположению микротрещин к вершине магистральной трещины. Остальные микроструктурные параметры подвергались варьированию. Для сравнения находились значения N_* нормализованного КИН, полученные в предположении, что дугообразные трещины не взаимодействуют друг с другом. На основе формулы (19) для N_* имеем:

$$N_* = 1 + \frac{\rho - 1}{2} \sum_{s=1}^n \left[1 - \frac{d_{s2}}{d_{s1}} \frac{\Pi(\pi/2, \eta_s, \lambda_s)}{K(\lambda_s)} \right];$$

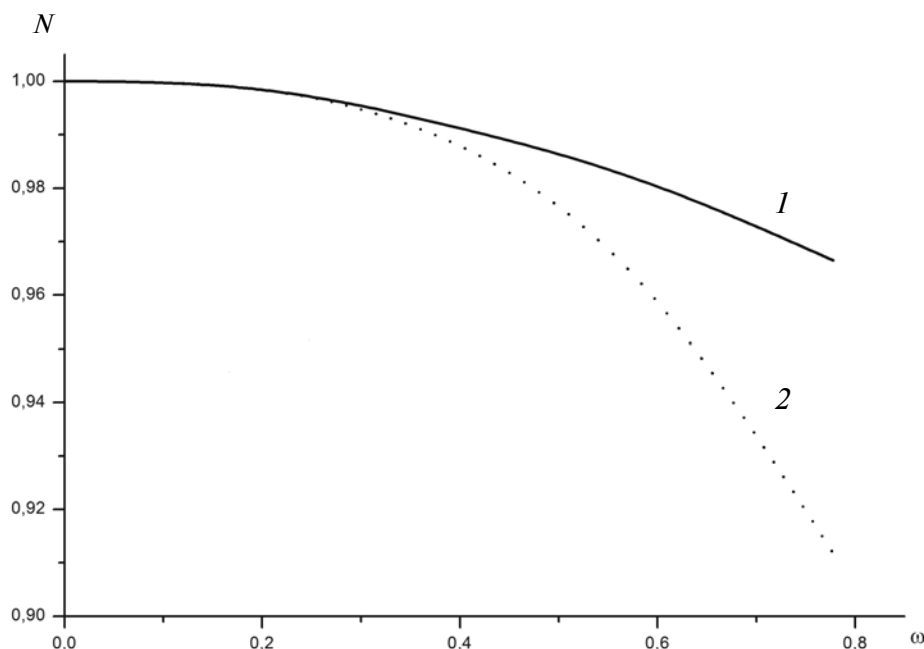


Рис. 5. Зависимости нормализованного КИН в вершине макротрещины от линейной плотности микротрещин с учетом (1) и без учета (2) их взаимодействий

$$\lambda_s = \sqrt{\frac{\beta_{s1} - \beta_{s2}}{1 + \beta_{s1}}}, \quad \eta_s = -\frac{2\rho(\beta_{s1} - \beta_{s2})}{d_{s1}^2}.$$

Результаты вычислений коэффициентов интенсивности N и N_* приведены на рис. 5 для $\alpha_{11} = 20^\circ$, $\alpha = 35^\circ$ и $\Delta = 40^\circ$.

Полученные численные данные позволяют сделать ряд выводов:

система дугообразных трещин, независимо от их расположения на окружности, вызывает при $\rho > 1$ экранирующий эффект, т. е. уменьшение коэффициента интенсивности в вершине магистральной трещины;

с ростом линейной плотности микротрещин (что достигается путем увеличения

их длины либо путем возрастания их числа) эффект экранирования усиливается;

модель, не учитывающая взаимодействия микротрещин между собой, дает при $\rho > 1$ нижнюю оценку коэффициента интенсивности в вершине основной трещины при любых значениях микроструктурных параметров;

уменьшение шага системы микротрещин Δ при сохранении всех остальных микроструктурных параметров приводит к ослаблению экранирующего эффекта;

коэффициент интенсивности напряжений в вершине основной трещины слабо чувствителен к изменению структурного параметра α_{11} .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Meguid, S.A. Maincrack-microcrack interaction under mode I, II and III loadings: Shielding and amplification [Text] / S.A. Meguid, S.X. Gong, P.E. Gaultier // Int. J. Mech. Sci. — 1991. — Vol. 33. — № 5. — P. 351–359.
2. Kachanov, M. On the effective elastic properties of cracked solids — editor's comments [Text] / M. Kachanov // Int. J. Fracture — 2007. — Vol. 146. — № 2. — P. 295–299.
3. Панасюк, В.В. Распределение напряжений

- около трещин в пластинах и оболочках [Текст] / В.В.Панасюк, М.П. Саврук, А.П. Дацышин. — Киев: Наукова Думка, 1976. — 444 с.
4. Саврук, М.П. Двумерные задачи упругости для тел с трещинами [Текст] / М.П. Саврук. — Киев: Наукова Думка, 1981. — 324 с.
5. Rubinstein, A.A. Macrocrack interaction with semi-infinite microcrack array [Text] / A. A. Rubinstein // Int. J. Fracture. — 1985. — Vol. 27. — № 1. — P. 113–119.

6. **Hutchinson, J.W.** Crack tip shielding by micro-cracking in brittle solids [Text] / J.W. Hutchinson // Acta Metall. — 1987. — Vol. 35. — № 7. — P. 1605–1619.
7. **Ortiz, M.** A continuum theory of crack shielding in ceramics [Text] / M. Ortiz // Trans. ASME. Ser.E. J. Appl. Mech. — 1987. — Vol. 54. — № 1. — P. 54–58.
8. **Kachanov, M.** Mechanics of crack-microcrack interactions [Text] / M. Kachanov, E.L.E. Montagut, J.P. Laures // Mech. Materials. — 1990. — Vol. 10. — № 1. — P. 59–71.
9. **Wu, S.** Effect of microcrack array on stress intensity factor of main crack [Text] / S. Wu, A. Chudnovsky // Int. J. Fracture. — 1993. — Vol. 59. — № 1. — P. 41–52.
10. **Kachanov, M.** A simple technique of stress analysis in elastic solids with many cracks [Text] / M. Kachanov // Int. J. Fracture. — 1985. — Vol. 28. — № 1. — P. R11–R19.
11. **Kachanov, M.** On the problems of crack interactions and crack coalescence [Text] / M. Kachanov // Int. J. Fracture. — 2003. — Vol. 120. — № 3. — P. 537–543.
12. **Gross, D.** Stress intensity factors of systems of cracks [Text] / D. Gross // Ing.-Archiv. — 1982. — Vol. 51. — P. 301–310.
13. **Horii, H.** Elastic fields of interacting inhomogeneities [Text] / H. Horii, S. Nemat-Nasser // Int. J. Solids Struct. — 1985. — Vol. 21. — P. 731–745.
14. **Brencich, A.** Interaction of a main crack with ordered distributions of microcracks: a numerical technique by displacement discontinuity boundary elements. [Text] / A. Brencich, A. Carpinteri // Int. J. Fracture. — 1996. — Vol. 76. — № 3. — P. 373–389.
15. **Попов, Г.Я.** Концентрация упругих напряжений возле штампов, разрезов, тонких включений и подкреплений [Текст] / Г.Я. Попов. — М.: Наука, 1982. — 344 с.
16. **Тихомиров, В.В.** Трещина продольного сдвига, частично проникающая в упругое круговое включение с покрытием [Текст] / В.В. Тихомиров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 2(122). — С. 142–149.
17. **Тихомиров, В.В.** Антиплоская задача для трещины, проникающей в упругое включение при неидеальном контакте фаз [Текст] / В.В. Тихомиров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 2(146). — С. 150–155.
18. **Градштейн, И.С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений [Текст]: справочник / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. — М.: Наука, 1971. — 1108 с.

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 victikh@mail.ru



УДК 550.8.4

Н.П. Сенчина

**ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЕСТЕСТВЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ
(НА ПРИМЕРЕ БУРУКТАЛЬСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ НИКЕЛЯ,
ЮЖНЫЙ УРАЛ)**

N.P. Senchina

National Mineral Resources University,
2, 21st Line V.O., St. Petersburg, 199106, Russia.

**REDISTRIBUTION OF CHEMICAL ELEMENTS UNDER
THE NATURAL ELECTRIC FIELD INFLUENCE
(THE BURUKTALSKY NICKEL DEPOSIT, SOUTH URAL, AS AN EXAMPLE)**

В статье рассмотрены различные виды моделирования естественных электрических полей, образованных вблизи рудных тел магнетита в условиях смены окислительно-восстановительного потенциала подземных вод и влияние таких полей на движение ионов металлов во флюиде в породе.

КОРА ВЫВЕТРИВАНИЯ. ЕСТЕСТВЕННОЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ. ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ. НЕЛИНЕЙНОЕ ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ.

The different types of natural electric fields modeling have been considered. Those fields are usually formed near ore bodies of magnetite in the conditions of underground waters oxidation-reduction potential change. The electric fields influence on metal ions movement in a fluid in breed was studied.

WEATHERING CRUST. NATURAL ELECTRIC FIELD. OXIDATION-REDUCTION POTENTIAL. NONLINEAR INTEGRAL EQUATION.

Надежно установлен факт существования естественного электрического поля (ЕП) в горных породах. В прошлом веке природа таких полей была изучена и описана ученым-геофизиком А.С. Семеновым. Метод естественного электрического поля (ЕП) широко применяется в разведочной геофизике. При этом было высказано предположение о возможности массопереноса под действием электрического поля. Однако кажущаяся незначительность вклада электрических явлений на большинстве месторождений, по сравнению с механическим переносом, гравитационным перераспределением и другими механизмами изменения состава горных пород привлекала внимание исследователей — геофизиков и геохимиков — в недостаточной степени.

В данной работе рассматриваются процессы перераспределения элементов геологической среды под действием естественного электрического поля на примере Буруктальского никелевого месторождения (Южный Урал) с помощью различных инструментов моделирования.

**Физико-геологическое описание
объекта исследования**

Особенностью Буруктальского месторождения является наличие протяженных по глубине субвертикальных зон, обогащенных магнетитом (до 45 — 50 вес.%). Они приурочены к нижней части окисно-железной зоны месторождений («черный» горизонт) и слагают пластообразные залежи мощностью 1 — 10 м со сложной морфоло-

гией подошвы: с карманами, уходящими на глубины до 100 – 150 м [1], при мощности зоны окисления 30 – 40 м. Такие зоны представляют собой электронно-проводящие тела, пересекающие зону окисления, что приводит к формированию естественного электрического поля величиной в первые сотни милливольт (согласно материалам автора работы [2]). Окружающие породы представлены охрами в верхней части профиля и серпентинитами в нижней (сокращенный профиль коры выветривания), при этом наблюдается незначительное обогащение редкими металлами и более значительное – никелем, руды которого и разрабатываются на данном месторождении [1].

Математическое моделирование

Величина электродного потенциала магнетитовых рудных тел в данных условиях определяется содержанием кислорода в окружающих подземных водах [3]. Рассмотрим случай распространения растворенного газообразного кислорода путем диффузии от дневной поверхности вниз вдоль оси z при наличии реакции окисления пород второго порядка, скорость которой выражается пропорционально квадрату концентрации кислорода (реагента) [4]. Обозначим концентрацию растворенного кислорода $C(z, \tau)$, где τ – время.

При нулевом начальном значении

$$C \Big|_{\tau=0} = 0$$

распределение концентрации этого элемента подчиняется нелинейному интегральному уравнению [5]:

$$C = C_0 \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z}{2\sqrt{D\tau}} \right) \right] - \frac{\beta q_{\max}}{2\sqrt{\pi D}} \times \left\{ \int_0^\tau \left[\int_0^z \frac{\exp \left(\frac{-(z-z')^2}{4D(\tau-\xi)} \right)}{\sqrt{\tau-\xi}} - \frac{\exp \left(\frac{-(z+z')^2}{4D(\tau-\xi)} \right)}{\sqrt{\tau-\xi}} \right] \times \right. \\ \left. \times C(z', \xi) \exp \left(-\beta \int_0^\xi C(z', \eta) d\eta \right) d\xi \right\} dz', \quad (1)$$

где

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$$

– интеграл вероятности, C_0 – концентрация растворенного кислорода у дневной поверхности (при $z = 0$), $q_{\max}$ – максимально возможная концентрация окисленной формы твердой фазы, β – постоянная кинетики гетерогенной реакции окисления магнетита, D – коэффициент диффузии растворенного кислорода в пористых горных породах.

Концентрацию q окисленной формы окисляемой части твердой фазы (например, гематита при окислении магнетита) можно затем найти из соотношения [5]:

$$q = q_{\max} \left(1 - \exp \left[-\beta \int_0^\tau C(z, \eta) d\eta \right] \right). \quad (2)$$

Решение нелинейного интегрального уравнения (1) получено нами методом последовательных приближений (формулы не приведены ввиду их громоздкости); при этом найдена относительная концентрация окисленной части магнетита, представленной гетитом и гематитом. Полученная теоретическая зависимость при специально подобранном значении параметра β достаточно удовлетворительно совпадает со сглаженной экспериментальной кривой (рис. 1). В результате подбора параметра удалось оценить естественное значение скорости окисления магнетита в условиях Буруктальского месторождения.

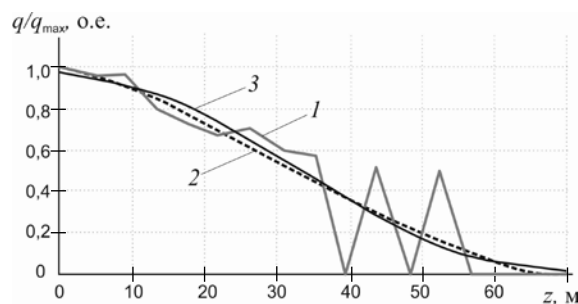


Рис. 1. Экспериментальные (1, 2) и теоретическая (3) зависимости относительной концентрации окисленной формы магнетита от глубины залегания. 1, 2 – исходная и сглаженная кривые соответственно; 3 – рассчитанная по формуле (2) при $\tau = 3 \cdot 10^5$ лет, $\beta = 7 \cdot 10^{-10} \text{ м}^3 / (\text{кг} \cdot \text{с})$



Полученные результаты говорят о том, что при наличии близвертикально падающих магнетитовых тел, протяженных до глубин, превышающих 30 – 40 м, вполне возможно формирование естественного электрического поля (ЕП) значительной интенсивности. Такое ЕП может вызывать соответствующие геоэлектрoхимические процессы [6].

Лабораторное физико-химическое моделирование

Для проверки возможности перехода в раствор ионов металлов под действием электрического поля, был предпринят специальный эксперимент. Использовалась лабораторная установка, состоящая из источника питания в режиме стабилизации тока, а также емкости с дистиллированной водой, подкисленной азотной кислотой ($\text{pH} \approx 4$). Емкость была разделена на семь ячеек полупроницаемыми пергаментными мембранами. Образец дробленой (для сокращения длительности эксперимента) рудоносной породы весом 0,2 кг был помещен в центральную ячейку. Через указанную емкость в течение двух недель мы пропускали постоянный ток силой 0,1 А. Регулярно изымались пробы и проводились анализы растворов в ячейках, приближенных к аноду и катоду (использовался высокочувствительный ИСП-анализ). Заявленный лабораторией порог чувствительности для платиноидов не превышал 0,001 мкг/л, что составляет 0,2 % от общего измеренно-

го содержания платины, 0,007 % – от такового для изотопа Pd-108; для остальных представленных элементов эта величина еще ниже.

Результаты, полученные из эксперимента, представлены в таблице. Их анализ позволяет заключить, что переход элементов горных пород и руд в подвижную форму под действием электрического поля не только возможен, но и процентная доля элементов, переходящих в подвижную форму, весьма высока.

Из этих же данных можно сделать вывод, что металлы, в том числе благородные, перемещаются в составе комплексных соединений, имеющих как положительные, так и отрицательные заряды.

По итогам проведенного опыта и расчетов доли элементов, выведенных в раствор, эти элементы можно разделить на две группы, различающиеся своим поведением в электрическом поле. К первой группе относятся изотоп Pd-108, Cr и Fe (в меньшей степени), ко второй – Pt, Co, Ag, Ni. В связи с высокой чувствительностью анализа разделение по величинам в доли процента является достоверным. Элементы первой группы образуют преимущественно анионную форму, а для элементов второй характерно двойственное поведение с преобладанием мобильных свойств катиона. Такой результат несколько противоречит известной сидерофильности платины, однако его можно объяснить свойствами минеральных ассоциаций.

Результаты лабораторного опыта по электролизу раздробленной горной породы в слабокислом водном растворе

Элемент	Доля элементов, перешедших в раствор, %		
	Вблизи анода	Вблизи катода	Суммарная
Cr	1,25	1,53	2,78
Fe	0,30	0,38	0,68
Co	10,87	10,50	21,37
Ni	3,40	3,26	6,66
Pd-108	4,84	13,92	18,76
Ag	18,92	18,18	37,10
Pt	13,41	10,21	23,62

Примечание. Водородный показатель раствора азотной кислоты $\text{pH} = 4$.

Результаты лабораторного эксперимента по использованию дробленой рудоносной породы можно перенести на массивы горных пород в естественном залегании. Это полностью справедливо в изучаемой на Буруктаальском месторождении довольно рыхлой коре выветривания, а в случае плотных монокристаллических пород необходимо учитывать замедление электрохимических процессов, вызванное малым флюидонасыщением, т. е. сокращением количества путей миграции химических элементов.

Особенности распределения элементов на Буруктаальском месторождении

Из работ И.В. Таловиной с соавторами [7] известны группировки элементов, отражающие единство их свойств при передвижении и накоплении на месторождении. Например, в рудах серпентинитовой зоны месторождения значимые положительные корреляционные связи выявлены у группы, состоящей из элементов Pt, Au, Ni, Co, которая отрицательно коррелирует с Pd. Также наблюдается отрицательная корреляция элементов Fe и Ni, которая говорит о том, что к накоплению никеля приводят не только процессы латеритного

выветривания (что типично для железа), но и более сложные (рис. 2). Стрелками на разрезах обозначена область, соответствующая предлагаемой модели. Видна картина перераспределения никеля в зоне влияния естественного электрического поля, сформированного глубинным магнетитсодержащим телом. Полученные данные в целом позволяют заключить, что корреляция элементов между собой в зоне месторождения, подверженной влиянию электрического поля, аналогична их корреляционному поведению в проведенном лабораторном эксперименте. Это косвенно свидетельствует о причинно-следственной связи между процессами электрической природы и результатами накопления химических элементов в указанных условиях. Однако объемы платиноидов, скапливающихся таким способом, невелики; их добыча рациональна только при попутной добыче с основным рудным элементом месторождения — никелем [8].

Итак, известно, что при выветривании горных пород металлы выносятся либо, наоборот, концентрируются в породах, образуя тем самым и месторождения. Причинами различного поведения элементов в этих

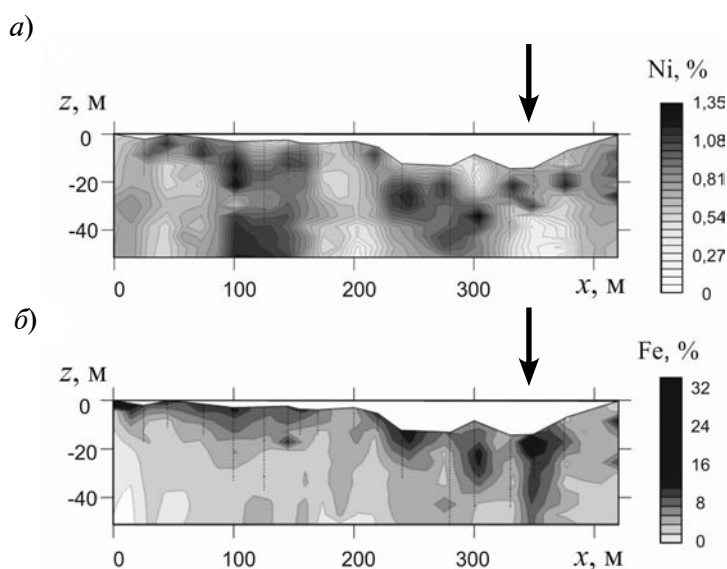


Рис. 2. Распределение концентраций никеля (а) и железа (б) в разрезе участка исследованного месторождения по данным изучения керна скважин; вертикальными линиями показаны промежутки изученного керна скважин



процессах являются множество факторов: влияние электрических полей, различия в содержании других элементов, разница в температуре и кислотности и другие.

Выяснено, что длительное наличие естественных электрических полей создает предпосылки для накопления одних элементов (например, Pd) вблизи анодной зоны рудных электронно-проводящих тел, других — вблизи катодной, и у многих элементов проявляется двойственность.

В данном случае естественное электрическое поле может служить немаловажным фактором дифференциации наряду с явлениями механического, гравитационного, химического и прочих видов разделения вещества в верхней части земной коры. При формировании неоднородного поля, без четко выраженных полюсов, аналогичные процессы приведут к рассеиванию элементов, а не к их концентрации, либо к концентрации, недостаточной для рудообразования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Рыжкова, С.О.** Никеленосные оксиды железа Буруктальского месторождения, Южный Урал [Текст] / С.О. Рыжкова, И.В. Таловина, В.Г. Лазаренков [и др.] // Записки Горного института. — 2009. — Т. 183. — С. 101–111.
2. **Электроразведка.** Справочник геофизика [Текст]: В 2 кн. Кн. 1./Под ред. В.К. Хмелевского, В.М. Бондаренко; 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Недра, 1989. — 438 с.
3. **Свешников, Г.Б.** Электрохимические процессы на сульфидных месторождениях [Текст] / Г.Б. Свешников. — Л.: Недра, 1967. — 158 с.
4. **Голубев, В.С.** Гетерогенные процессы геохимической миграции [Текст] / В.С. Голубев, А.А. Гарибянц. — М.: Недра, 1968. — 192 с.
5. **Путиков, О.Ф.** Основы теории нелинейных геоэлектрохимических методов поисков и разведки [Текст] / О.Ф. Путиков. — СПб.: Изд-во СПГГИ(ТУ), 2009. — 534 с.
6. **Комаров, В.А.** Геоэлектрохимия [Текст] / В.А. Комаров. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 1994. — 136 с.
7. **Таловина, И.В.** Платиноиды и золото в оксидно-силикатных никелевых рудах Буруктальского и Уфалейского месторождений, Урал [Текст] / И.В. Таловина, В.Г. Лазаренков, Н.И. Воронцова // Литология и полезные ископаемые. — 2003. — № 5. — С. 474–487.
8. **Михайлов, Б.И.** Проблемы Fe-Co-Ni месторождения Буруктал, Южный Урал [Текст] / Б.И. Михайлов, Л.А. Иванов // Руды и металлы. — 2003. — Т. 1. — С. 5–12.

СЕНЧИНА Наталия Петровна — студентка *Национального минерально-сырьевого университета «Горный»*.

199106, г. Санкт-Петербург, В.О., 21-я линия, 2
archie3@mail.ru

УДК: 539.1.01, 539.189.2.

А.Н. Ипатов

ЭФФЕКТИВНЫЙ УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ИОННОГО ОКРУЖЕНИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ В РАМКАХ МОДЕЛИ ЖЕЛЕ

A.N. Ipatov

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

EFFECTIVE ACCOUNT OF IONIC SURROUNDING INFLUENCE ON OPTICAL PROPERTIES OF METALLIC CLUSTERS WITHIN THE JELLIUM MODEL

В статье обсуждается влияние параметров потенциала межчастичного взаимодействия на оптические свойства металлических кластеров. Исследуются зависимости статической дипольной поляризуемости и частоты плазмонного резонанса кластеров щелочных металлов от параметра экранирования и эффективной диэлектрической константы.

ЭКРАНИРОВАНИЕ. КЛАСТЕРЫ. ФОТОПОГЛОЩЕНИЕ. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ.

An influence of interparticle potential parameters on optical properties of metallic clusters is discussed in the article. Dependences of the static dipole polarisability and the plasmon resonance frequency of alkali metal clusters upon the screening parameter and the effective dielectric constant are studied.

SCREENING. CLUSTERS. PHOTOABSORPTION. POLARIZABILITY.

Физические свойства наноразмерных Ферми-систем, примером которых служат, в частности, микроскопические атомные кластеры, являются предметом интенсивных исследований, ведущихся в последние десятилетия [1]. Наибольший интерес при изучении физических свойств таких систем вызывают гигантские дипольные резонансы в спектрах фотопоглощения кластеров различного состава, в особенности кластеров щелочных металлов [1, 2], а также их высокая поляризуемость. Оптические свойства подобных объектов определяются валентными электронами, которые полностью делокализованы по всему объему кластера и образуют оболочечную структуру [2, 3].

Целью данной работы являлось исследование влияния параметров потенциала межчастичного взаимодействия на оптические свойства металлических кластеров. В рамках поставленной задачи были проведены расчеты статической дипольной поляризуемости и спектров фотопоглощения для ряда наиболее стабильных систем, содержащих «магические» числа делокализованных электронов [1], при различных значениях параметров эффективного потенциала электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействий, и определены значения параметров, обеспечивающие наилучшее согласие расчетных данных с экспериментом.

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

Оптические свойства металлических кластеров в рамках модели желе

Основные особенности оптических характеристик конечных систем, в которых свободные электроны движутся в поле ионного остова, хорошо описываются в рамках модели «желе», согласно которой положительный остов представляется в виде заряженного фона с некоторой непрерывной функцией распределения [3]. Наибольшее распространение получила так называемая сферическая желе-модель в приближении *bulk material* [2, 3], согласно которому радиус ионного кора с однородным сферически симметричным распределением заряда $\rho_{core}(r) = \rho_0$ принимается равным

$$R_0 = r_s N^{1/3},$$

где N – число атомов в кластере, а r_s – размер ячейки Вигнера – Зейца соответствующего объемного материала.

Именно в рамках этой модели была проведена большая часть теоретических расчетов электронной структуры, спектров фотопоглощения, статической дипольной поляризуемости и других физических параметров кластеров щелочных металлов [1 – 4]. В большинстве опубликованных теоретических работ было обнаружено качественное согласие между результатами, полученными как на основе методов квантовой теории многих тел, так и в приближении локальной плотности [1, 2, 5, 6]. В то же время при сравнении результатов расчетов, полученных в рамках *bulk material* (БМ) желе-модели, с экспериментальными

данными наблюдается систематическое количественное расхождение между теоретическими значениями и результатами измерений. Для примера в таблице приведены расчетные значения статической дипольной поляризуемости α_0 для нескольких кластеров, содержащих различное число атомов натрия, полученные с использованием БМ-желе-модели в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО, или RPAE), и соответствующие экспериментальные значения [7]. Из данных таблицы видно, что для всех рассмотренных металлических кластеров (МК) расчетные значения оказываются примерно на 15 % ниже экспериментальных данных [7, 8].

В свою очередь результаты квантовомеханических расчетов значительно превышают значения статической дипольной поляризуемости $\alpha_0 = R_0^3$, которые следуют из классической модели, рассматривающей кластер в виде металлической сферы радиуса R_0 . Последний факт подтверждает необходимость учета многочастичных эффектов при теоретическом описании оптических свойств МК, особенно в случае кластеров, содержащих сравнительно небольшое число атомов ($N \leq 10^2$).

Сходная картина наблюдается при проведении расчетов спектров фотопоглощения МК. В работах [5, 9] показано, что квантовомеханические вычисления, выполненные рамках БМ-желе-модели, качественно адекватно воспроизводят основные характеристики оптического спектра МК, но при этом ведут к систематически завышенным значениям резонансных частот по сравнению с данными эксперимента [8].

Таким образом, простая сферически-

Расчетные и экспериментальные значения статической дипольной поляризуемости α_0 (ат. ед.) кластеров натрия, содержащих различное число атомов; расчеты в различных приближениях

Кластер	RPAE	TDLDA[5]	Экспериментальные данные [7]	Классическая модель
Na ₈	755	722	879	512
Na ₂₀	1808	1721	2138	1280
Na ₃₄	2806	2717	3520	2176
Na ₄₀	3529	3340	4090	3260

симметричная модель желе в сочетании с квантовомеханическим описанием системы делокализованных электронов, двигающихся в поле положительно заряженного ядра, качественно верно описывает основные оптические свойства кластеров щелочных металлов с замкнутыми электронными оболочками. В то же время в ее рамках точного количественного описания достигнуть не удастся, и возможным путем решения этой проблемы может стать внесение изменений в саму модель желе.

При исследовании физических характеристик кластеров с различным числом атомов выяснилось, что многоэлектронная система очень чувствительна к изменениям в характере сил межчастичного взаимодействия [10]. В подавляющем большинстве теоретических работ, посвященных исследованиям МК на основе модели желе, предполагалось чисто кулоновское взаимодействие между частицами системы, в частности, между делокализованными валентными электронами, в то время как электроны внутренних оболочек считались «замороженными», и их влияние учитывалось в виде эффективного потенциала распределенного заряда «желе». В то же время, возможно, эффективный учет влияния электронов внутренних оболочек, а также некоторой части многочастичных эффектов, не описываемых непосредственно в рамках ПСФО [11], может быть обеспечен путем отказа от использования чисто кулоновского взаимодействия в системе и, таким образом достигнуто лучшее количественное согласие расчетных результатов с экспериментальными данными. Проблема учета многочастичных эффектов, выходящих за рамки ПСФО, в частности поляризационного взаимодействия между электронами валентных и внутренних оболочек атомов, обсуждалась в работе [12]. Было показано, что учет динамической поляризации приводит к эффективному экранированию межчастичного взаимодействия в многоэлектронной системе и таким образом влияет на ее оптические свойства. При этом непосредственное включение так называемых поляризационных диаграмм [12, 13] путем численного решения уравне-

ния Дайсона [12, 13] приводит к существенному усложнению вычислений при моделировании оптического отклика системы.

В качестве альтернативного пути для улучшения согласия теории с экспериментом в данной работе предлагается использовать эффективное экранированное кулоновское взаимодействие между всеми элементами системы кластера, оставаясь в рамках желе-модели, привлекательной своей простотой.

Теоретический подход

Рассмотрим систему, состоящую из N делокализованных электронов в поле положительного сферического ядра с плотностью распределения заряда $\rho_{core}(r)$. Ее полный гамильтониан $\hat{H}_0$ с потенциалом парного межчастичного взаимодействия $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ записывается в виде

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + U_{core}(r) + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (1)$$

Здесь и далее индексы i, j обозначают заполненные, индексы m, n — незаполненные (виртуальные) одночастичные состояния. При этом полная волновая функция $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ основного состояния, являющаяся решением уравнения Шредингера

$$\hat{H}_0 \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = E_{el} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2)$$

зависит от N координат $\mathbf{r}_i$ всех электронов и от N проекций их спинов σ_i , где $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, а E_{el} — полная электронная энергия системы.

В потенциале межчастичного взаимодействия можно выделить чисто кулоновский множитель $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{-1}$ и некоторую ограниченную функцию $K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ (неотрицательную во всей области определения), учитывающую, в частности, эффект экранирования [10]:

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{K(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2)$$

где коэффициент ϵ играет роль эффективной диэлектрической проницаемости среды.

Потенциал положительного ядра с радиальной плотностью $\sigma(r) = 4\pi r^2 \rho_{core}(r)$ записывается в виде [10]



$$U_{core}(r) = \frac{1}{2\epsilon r} \int_0^\infty \frac{\sigma(r')}{r'} \int_{|r-r'|}^{r+r'} K(x) dx dr'. \quad (3)$$

В качестве потенциала парного взаимодействия точечных зарядов при проведении расчетов был взят экранированный кулоновский потенциал в форме

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{\exp(-\kappa|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{\epsilon|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{\exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/D_{scr})}{\epsilon|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (4)$$

где $D_{scr} = \kappa^{-1}$ – эффективный радиус экранирования.

В случае однородного сферически-симметричного распределения $\rho_{core}(r) = \rho_0$, используемого в БМ-модели желе для электронейтрального кластера, потенциал ионного остова имеет вид

$$U_{core}(r) \equiv U_{core}(r, \epsilon, \kappa) = \begin{cases} \frac{3N}{\epsilon \kappa^2 R_0^3 r} (\kappa r - \exp(-\kappa R_0)) \times \\ \times (1 + \kappa R_0) \text{sh}(\kappa r), & r \leq R_0; \\ \frac{N \exp(-\kappa r)}{\epsilon r} \times \\ \times \left(\frac{\text{ch}(\kappa R_0) - \frac{\text{sh}(\kappa R_0)}{\kappa R_0}}{\kappa^2 R_0^2} \right), & r > R_0. \end{cases} \quad (5)$$

Расчеты электронной структуры кластеров проводились в приближении Хартри – Фока с потенциалом парного взаимодействия в форме (4). Одночастичные волновые функции $\varphi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ и соответствующие энергии ϵ_i , полученные в результате численного решения системы уравнений Хартри – Фока [11],

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\nabla^2}{2} + U_{core}(r) \right) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma_i) + \\ & + \sum_j \int \varphi_j^*(\mathbf{r}', \sigma_j) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\varphi_j(\mathbf{r}', \sigma_j) \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma_i) - \\ & - \delta_{\sigma_i \sigma_j} \varphi_i(\mathbf{r}', \sigma_i) \varphi_j(\mathbf{r}', \sigma_j)) d\mathbf{r}' = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}, \sigma_i), \end{aligned} \quad (6)$$

в дальнейшем были использованы для

вычисления оптических характеристик исследуемых систем. При этом в сферически-симметричном потенциале (5) одночастичные волновые функции могут быть представлены в виде произведения радиальной, угловой и спиновой составляющих [14]:

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

и характеризуются набором квантовых чисел n, l, m, μ .

Расчеты спектров фотопоглощения и статической дипольной поляризуемости были проведены в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО), в рамках которого частоты Ω_v дипольных переходов из основного в многочастичные возбужденные состояния определялись путем решения матричного уравнения [11]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ -\mathbf{Y} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где элементы эрмитовых матриц $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ записываются как

$$\begin{aligned} A_{im,jn}^{(e)} &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle nm || ji \rangle = \\ &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle in || mj \rangle; \\ B_{im,jn}^{(e)} &= \langle ij || mn \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь матричные элементы

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

межчастичного взаимодействия состоят из «прямой» (хартриевской) и обменной компонент, где множитель 2 учитывает суммирование по проекции спина в хартриевском члене; $\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle$ – матричный элемент, включающий в себя потенциал (4):

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle &= \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\gamma} \delta_{\sigma_\beta \sigma_\delta} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\gamma(\mathbf{r}) \times \\ &\times V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_\delta(\mathbf{r}') \varphi_\beta^*(\mathbf{r}'); \end{aligned} \quad (10)$$

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

Статическая дипольная поляризуемость электронной системы кластера вычислялась как [13]

$$\alpha_0 = \sum_v \frac{f_v}{\Omega_v^2}. \quad (11)$$

Здесь суммирование проводится по всем возбужденным состояниям системы, включая интегрирование по непрерывной области спектра, а f_v — сила осциллятора дипольного перехода между основным и v -м многочастичным возбужденным состоянием:

$$f_v = \frac{4}{3} \Omega_v D_v^2. \quad (12)$$

Силы осцилляторов при этом удовлетворяют правилу сумм [13]:

$$\sum_v \Omega_v f_v = N. \quad (13)$$

Матричные элементы D_v , в свою очередь, вычислялись путем суммирования по всем одночастичным возбуждениям:

$$D_v = \sum_{im} (X_{im}^v d_{im} + Y_{im}^v d_{mi}), \quad (14)$$

где d_{im} — одночастичные дипольные амплитуды;

$$d_{im} = \int P_{n,l_i}(r) r P_{n,l_m}(r) dr; \quad l_m = l_i \pm 1, \quad (15)$$

а коэффициенты X_{im}^v , Y_{im}^v представляют собой элементы собственных векторов уравнения (8).

Оптические свойства металлических кластеров с экранированным межчастичным взаимодействием

Как было показано в работе [10], введение эффективного экранирования в числителе потенциала межчастичного взаимодействия (4) вызывает возрастание среднего радиуса электронной системы $\langle r \rangle$, что в свою очередь должно приводить к увеличению статической дипольной поляризуемости кластера. На рис. 1 представлены зависимости приведенной статической дипольной поляризуемости $\alpha_0(\kappa)/N\alpha_1$, где $\alpha_1 = 162$ ат.ед. — статическая поляризуемость атома натрия [15], от параметра экранирования, полученные при $\varepsilon = 1,0$ для кластеров Na_8 и Na_{20} в рамках БМ-модели. Как видно из рисунка, для обоих кластеров учет экранирования ведет к лучшему согласию с экспериментальными данными [7], по сравнению с чисто кулоновским случаем, и обеспечивает их совпадение при значениях параметра $\kappa \approx 0,075$ для Na_8 и $\kappa \approx 0,061$ для

Na_{20} , соответственно.

Расчеты показали, что спектры фотопоглощения МК также чувствительны к изменению потенциала взаимодействия между частицами системы. На рис. 2, а приведены распределения сил осцилляторов в спектре фотопоглощения Na_8 в окрестности плазмонного резонанса, рассчитанные при значениях параметра экранирования $\kappa = 0,0; 0,05$ и $0,10$ для БМ-модели желе при $\varepsilon = 1,0$. Из рис. 2, б, на котором показана зависимость частоты плазмонного резонанса Ω_{res} от параметра экранирования, видно, что экранирование кулоновского межчастичного взаимодействия вызывает сдвиг резонансного пика в сторону более низких энергий и в случае Na_8 приводит к совпадению расчетного значения с экспериментом [8, 16] при $\kappa \approx 0,058$. При этом сдвиг частоты сопровождается усилением фрагментации самой плазмонной линии, что проявляется в перераспределении сил осцилляторов в спектре. Так, по мере увеличения параметра экранирования в интервале от $\kappa = 0,0$ до $\kappa = 0,1$ вклад доминирующего пика уменьшается с 67 до 45 % правила сумм (13).

Сферическая модель желе дает возможность описывать не только электронейтральные МК, но также их положительно заряженные ионы [1 – 5], в спектрах фотопоглощения которых также наблюдают-

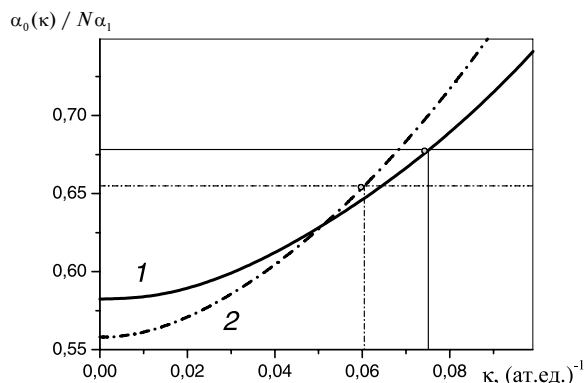


Рис. 1. Зависимости приведенной статической дипольной поляризуемости кластеров Na_8 (1) и Na_{20} (2) от параметра экранирования потенциала межчастичного взаимодействия. Горизонтальными линиями обозначены экспериментальные значения [7]

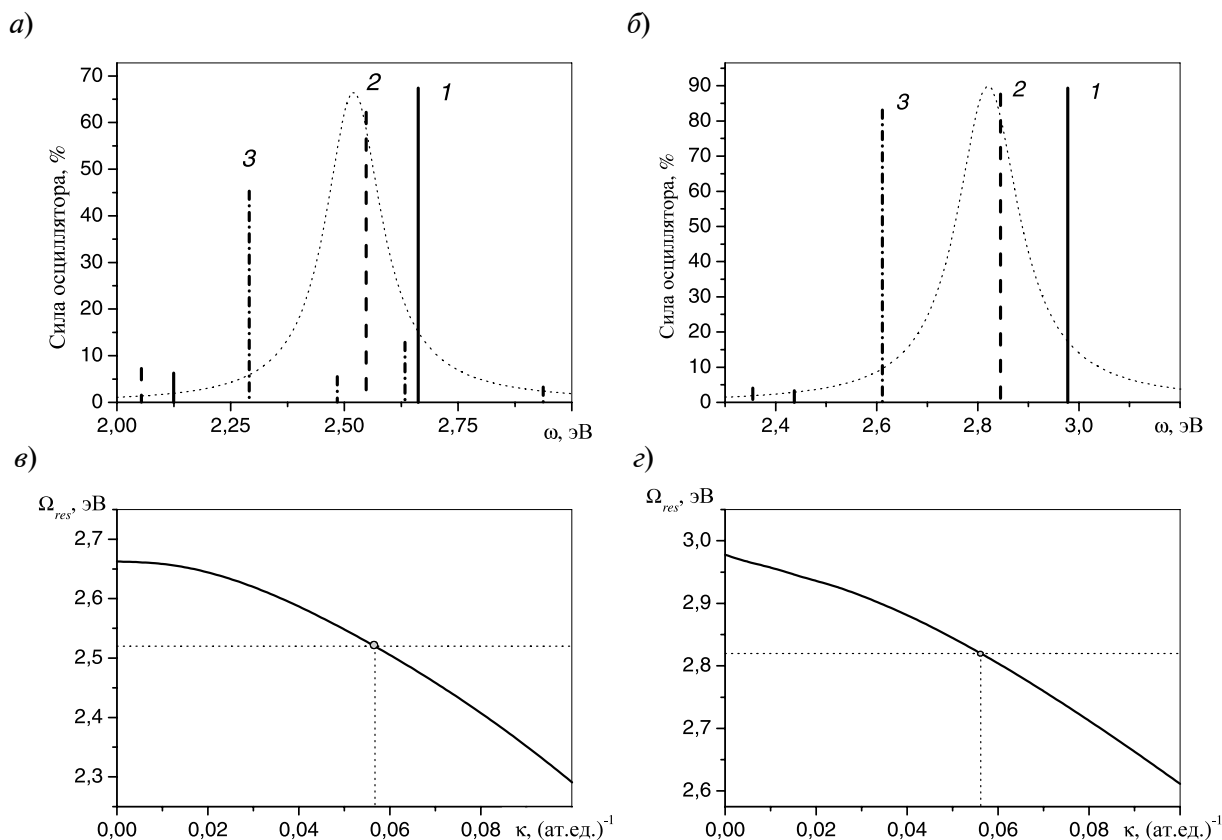


Рис. 2. Сопоставление экспериментальных данных (точечные линии) с расчетными оптическими характеристиками фотопоглощения (остальные линии) кластеров Na₈ (а, б) и Na₉⁺ (в, з): а, в – распределение сил осцилляторов в спектрах для БМ-модели желе при ε = 1,0 и различных значениях параметра экранирования κ; б, з – резонансные частоты как функции параметра экранирования. Значения κ: 0,00 (1), 0,05 (2), 0,10 (3). Экспериментальные сечения фотопоглощения для кластеров Na₈ [8] и Na₉⁺ [16] (а, в) показаны точечными линиями

ся гигантские дипольные резонансы [16]. На рис. 2, в представлены распределения сил осцилляторов в спектре фотопоглощения положительного иона Na₉⁺ в окрестности плазмонного резонанса, рассчитанные при значениях параметра экранирования κ = 0,0; 0,05 и 0,10 для БМ-модели желе при ε = 1,0. Как и в случае нейтрального кластера Na₈, имеющего идентичную электронную конфигурацию 1s²2p², из приведенной на рис. 2, з зависимости частоты главного резонансного пика от параметра экранирования κ отчетливо видно, что эффективное экранирование кулоновского межчастичного взаимодействия вызывает сдвиг резонансной линии в область более низких частот. При этом введение экранирования обеспе-

чивает совпадение расчетного значения Ω_{res} с экспериментом [8, 16] при κ ≈ 0,058, т. е. практически при том же значении κ, что и в случае нейтральной системы. Важно отметить, что во всех рассмотренных случаях эффективный радиус экранирования $D_{scr} = \kappa^{-1}$, соответствующий значению параметра экранирования, при котором достигается совпадение результатов расчетов и экспериментальных данных, существенно превышает геометрические размеры кластера, определяемые радиусом ионного кора R₀.

Таким образом, оказалось, что, оставаясь в рамках простой сферической модели желе с однородным сферически-симметричным распределением плотности положительного заряда, путем введения эффективного

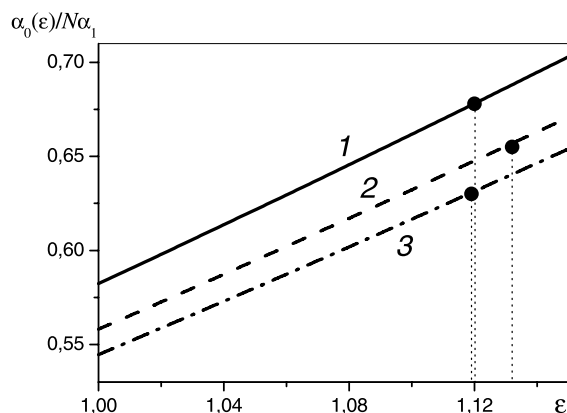


Рис. 3. Зависимости приведенной статической дипольной поляризуемости кластеров Na_8 (1), Na_{20} (2) и Na_{40} (3) от диэлектрической константы потенциала межчастичного взаимодействия при $\kappa = 0,0$. Для сравнения на графиках жирными точками отмечены экспериментальные значения [7]

экранирования кулоновского взаимодействия между частицами можно добиться улучшения согласия расчетных оптических характеристик МК с экспериментальными данными. Следует отметить, что при этом, как было показано в работе [10], во всем исследуемом диапазоне значений κ полные энергии кластеров остаются отрицательными, что свидетельствует о сохранении стабильности системы при изменении параметра экранирования в рассматриваемых пределах.

Как было показано в работе [9], основной вклад в оптический отклик МК дают делокализованные электроны, двигающиеся в сравнительно узкой приповерхностной области кластера. При значениях константы экранирования, обеспечивающих согласие с экспериментом, числитель в потенциале (4) является медленно убывающей функцией, которую в пределах объема кластера можно приближенно заменить некоторым средним значением. Таким образом, экранирование межчастичного взаимодействия можно учесть путем незначительного изменения эффективной диэлектрической константы ε в потенциале взаимодействия (4), оставаясь по-прежнему в рамках БМ-модели.

На рис. 3 представлены результаты рас-

чета статической дипольной поляризуемости кластеров Na_8 , Na_{20} и Na_{40} с однородным БМ-распределением плотности заряда кора как функции диэлектрической константы ε при фиксированном параметре экранирования $\kappa = 0,0$. Оказалось, что, как и в случае с экранированием кулоновского потенциала (см. рис. 1), статическая дипольная поляризуемость МК чувствительна к изменениям межчастичного взаимодействия в системе и увеличивается с ростом ε . Как видно из приведенных графиков, зависимость $\alpha_0(\varepsilon)$ имеет линейный характер в рассмотренном диапазоне значений ε независимо от числа атомов в системе, и при $\varepsilon \approx 1,12 - 1,14$ достигается согласие расчетных значений с результатами экспериментальных измерений [7]. При этом, как и при использовании эффективного экранирования кулоновского потенциала, во всем исследуемом диапазоне значений ε полные энергии кластеров остаются отрицательными [13], то есть система остается стабильной.

Спектр фотопоглощения МК при варьировании диэлектрической константы также претерпевает изменения. Как следует из рис. 4, а, на котором представлены распределения сил осцилляторов в спектре фотопоглощения кластера Na_8 при различных значениях диэлектрической константы ε для БМ-модели желе и $\kappa = 0,0$, по мере увеличения ε происходит сдвиг частоты основного резонансного пика Ω_{res} в область более низких энергий. При этом, как следует из рис. 4, б, при $\varepsilon \approx 1,07$ достигается согласие с экспериментальным значением резонансной частоты. Важно отметить, что сила осциллятора главного пика плазмонной моды изменяется от 67 % правила сумм при $\varepsilon = 1,0$ до 61 % при $\varepsilon = 1,15$, и, таким образом, в данном случае сдвиг плазмонной частоты сопровождается заметно меньшей фрагментацией резонансной линии, чем это наблюдалось при изменении параметра экранирования κ . С этой точки зрения метод расчета, основанный на учете влияния ионного окружения за счет введения эффективной диэлектрической константы, является более предпочтительным, поскольку вносит меньшие измене-

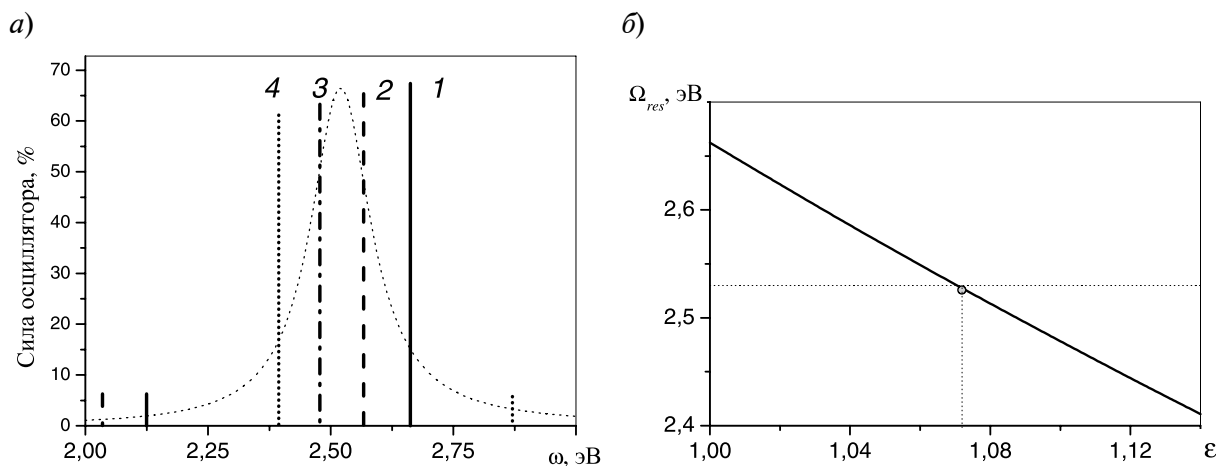


Рис. 4. Сопоставление экспериментальных данных (точечные линии) с расчетными характеристиками фотопоглощения (остальные линии) кластера Na_8 : *a* – распределение сил осцилляторов в спектре для БМ-модели желе при $\kappa = 0,0$ и различных значениях диэлектрической константы ϵ ; *б* – резонансная частота как функция диэлектрической константы.

Значения ϵ : 1,00 (1), 1,05 (2), 1,10 (3), 1,15 (4). Экспериментальное сечение фотопоглощения [8] показано точечной линией

ния в структуру спектра фотопоглощения по отношению к исходной модели с чисто кулоновским взаимодействием. При этом согласие результатов расчета с экспериментом достигается при практически одинаковых значениях диэлектрической константы для кластеров, содержащих различное число атомов.

На основании вышеизложенного можно сделать вывод, что БМ-модель желе, описывающая ионную структуру МК в виде однородного распределения плотности положительного заряда, в поле которого движутся делокализованные валентные электроны, позволяет качественно верно описывать основные свойства металлических кластеров, в частности их спектры фотопоглощения в окрестности плазмонного резонанса. При этом наблюдаемое систематическое количественное расхождение результатов численных расчетов с экспериментальными данными мо-

жет быть объяснено влиянием электронов внутренних оболочек, не учитываемых в рамках желе-модели, с чисто кулоновским взаимодействием. Путем введения эффективного экранирования межчастичного потенциала (4) можно достичь лучшего согласия расчетных оптических характеристик МК с экспериментальными данными за счет изменения параметров потенциала взаимодействия в пределах 5 – 10 %, не выходя за рамки простой БМ-модели.

В то же время, учитывая, что изменение параметров экранированного потенциала в пределах, обеспечивающих количественное согласие с экспериментом, не приводит к принципиальному изменению структуры спектров фотопоглощения, традиционная желе-модель, описывающая межчастичное взаимодействие в системе как чисто кулоновское, может быть по-прежнему использована при качественном моделировании основных свойств металлических кластеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kreibig, U. Optical properties of metal clusters [Text]: Springer Series in Materials Science. Vol. 25. / U. Kreibig, M. Vollmer. – Berlin: Springer – Verlag, 1995. – 532 p.

2. De Heer, W.A. The physics of simple metal clusters: Experimental aspects and simple models [Text] / W.A. de Heer // Rev. Mod. Phys. – 1993. – Vol. 65. – P. 611–676.

3. **Brack, M.** The physics of simple metal clusters: Self-consistent jellium model and semiclassical approaches [Text] / M. Brack // Rev. Mod. Phys. — 1993. — Vol. 65. — P. 677–732.
4. **Ivanov, V.K.** Many-body calculations for metallic clusters using the jellium model [Text] / 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.
5. **Madjet, M.** Comparative study of exchange-correlation effects on the electronic and optical properties of alkali-metal clusters [Text] / M. Madjet, C. Guet, W.R. Johnson // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 51. — P. 1327–1339.
6. **Hansen, M.S.** Exchange effects on electronic states in jellium clusters [Text] / M.S. Hansen, H. Nishioka // Z. Phys. D. — 1993. — Vol. 28. — P. 73–80.
7. **Knight, W.D.** Optical response of small metal clusters [Text] / W.D. Knight, K. Clemenger, W.A. de Heer, W.A. Saunders // Phys. Rev. B. — 1985. — Vol. 31. — P. 445–457.
8. **Selby, K.** Photoabsorption spectra of sodium clusters [Text] / K. Selby, V. Kresin, J. Masui [et al.] // Phys. Rev. B. — 1991. — Vol. 43. — P. 4565–4572.
9. **Guet, C.** Dipole excitations of closed-shell alkali-metal clusters [Text] / C. Guet, W.R. Johnson // Phys. Rev. — 1992. — Vol. 45. — P. 11283–11287.
10. **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.
11. **Амусья, М.Я.** Атомный фотоэффект [Текст] / М.Я. Амусья. — М.: Наука, 1987. — 272 с.
12. **Amusia, M.Ya.** Many-electron correlations in the scattering processes [Text] / M.Ya. Amusia, N.A. Cherepkov // Case Studies in Atomic Physics, North-Holland Publishing Company. — 1975 — Vol. 5. — P. 47–179.
13. **Amusia, M.Ya.** Collective effects in photoionization of atoms [Text] // Adv. At. Mol. Phys. — 1981. — Vol. 17. — P. 1–121.
14. **Ландау, Л.Д.** Курс теоретической физики в 10 тт, Т. III. Квантовая механика. Нерелятивистская теория [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Наука, 1989. — 766 с.
15. **Радциг, А.А.** Параметры атомов и атомных ионов [Текст]: Справочник / А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. — М.: Энергоатомиздат, 1986. — 344 с.
16. **Schmidt, M.** Optical spectra and their moments for sodium clusters Na_n^+ with $3 \leq n \leq 64$ [Text] / M. Schmidt, H. Haberland // Eur. Phys. J. D. — 1999. — Vol. 6. — P. 109–118.

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

УДК 621.372.038

В.Г. Сидоров, Н.М. Шмидт

ДЕГРАДАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ И ПРОБЛЕМА НАДЕЖНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ

V.G. Sidorov ¹, N.M. Shmidt ²

¹ St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

² Ioffe Physical Technical Institute,
26 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.

DEGRADATION PHENOMENA AND THE PROBLEM OF SEMICONDUCTOR LIGHT EMITTING SOURCES RELIABILITY

Рассмотрены механизмы деградации в источниках излучения на основе полупроводниковых соединений A^3B^5 , а также особенности процесса деградации в структурах InGaN/GaN. Анализируется проблема надежности полупроводниковых источников излучения.

МЕХАНИЗМЫ ДЕГРАДАЦИИ. НАДЕЖНОСТЬ. ИСТОЧНИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ. СТРУКТУРЫ InGaN/GaN. ДИСЛОКАЦИИ. ВНУТРЕННИЕ МЕХАНИЧЕСКИЕ НАПРЯЖЕНИЯ.

The degradation mechanisms in light emitting sources based on A^3B^5 semiconductors and also the peculiarities of degradation processes in light emitting sources based on InGaN/GaN structures have been reviewed. The problem of semiconductor light emitting sources reliability have been analyzed.

DEGRADATION MECHANISMS. RELIABILITY LIGHT EMITTING SOURCES. InGaN/GaN STRUCTURES. DISLOCATIONS. INTERNAL MECHANICAL STRESSES.

Современные информационные технологии, используемые практически во всех областях человеческой деятельности, немыслимы без полупроводниковых приборов. Именно поэтому проблеме надежности и деградационным явлениям в полупроводниковых материалах и приборах уделяется большое внимание как в прикладной, так и в фундаментальной науке. Деградацией принято называть необратимое ухудшение эксплуатационных параметров прибора во время его работы. Время, в течение которого параметры прибора при его эксплуатации сохраняются в пределах гаран-

тированных допусков, называют сроком службы, долговечностью или ресурсом прибора. Тогда как под надежностью понимают способность прибора выполнять свои функции в течение заданного условиями эксплуатации промежутка времени и в соответствии с предъявляемыми к прибору техническими требованиями. Отсюда следует, что прибор может иметь малый срок службы и быть надежным в течение этого срока. Если бы не сложности в определении индивидуального срока службы для каждого прибора в отдельности, то все полупроводниковые приборы могли бы найти свое применение.

Особое значение проблема надежности имеет для полупроводниковых источников излучения, прежде всего, для мощных светодиодов и лазеров, поскольку они работают при больших уровнях возбуждения, когда процессы деградации идут с повышенной скоростью. Многолетние исследования позволили установить основные механизмы деградации оптической мощности и разработать методы прогнозирования срока службы для светодиодов и лазеров, изготавливаемых на основе традиционных соединений A^3B^5 – арсенидов, фосфидов, антимонидов [1, 2]. Появление в конце XX века светодиодов и лазеров на основе соединений металлов третьей группы с азотом (III-нитридов AlN, GaN, InN) заставило вернуться к проблеме надежности полупроводниковых источников излучения на новом уровне. Имеющихся представлений о механизмах и природе развития деградационных процессов в источниках излучения на основе традиционных A^3B^5 , а также о методах прогнозирования их сроков службы оказалось недостаточно применительно к источникам излучения на III-нитридах.

В связи с принятием во многих странах мира государственных программ по созданию твердотельного энергосберегающего освещения задача по увеличению срока службы мощных синих светодиодов InGaN/GaN приобрела лидирующее значение. Несмотря на заявленные рядом ведущих мировых фирм сроки службы в 50 тыс. ч и более для этих светодиодов, в их массовом производстве – картина иная. Непредсказуемые выходы из строя мощных светодиодов за короткие времена эксплуатации ставят под угрозу рентабельность перехода на твердотельное освещение. Успешное решение этой проблемы осложняется тем, что до сих пор, несмотря на 20-летние усилия многих лабораторий мира, не удается разработать общепринятой модели деградационного процесса в этих светодиодах [3]. Ситуация с лазерами InGaN/GaN для синей и зеленой областей спектра еще сложнее, так как для них, даже на экспериментальных образцах, сроки службы оказываются на порядки меньше. Причины наблюдаемых явлений связаны с особенностями кристал-

лической структуры этих материалов.

В статье кратко рассмотрены общепринятые механизмы, определяющие долговечность полупроводниковых источников излучения, изготавливаемых на основе традиционных соединений A^3B^5 , проанализированы общие закономерности деградационных процессов в светодиодах и лазерах и указаны возможные пути увеличения их срока службы. Для светодиодов и лазеров на InGaN/GaN рассмотрены как общие закономерности процесса деградации, так и особенности, типичные только для этих источников излучения.

Механизмы деградации

Рассмотрим механизмы объемной деградации, заключающиеся в уменьшении внутреннего квантового выхода материала активной области излучателя. Наибольший интерес представляет исследование неустраняемых причин деградации, свойственных от природы полупроводниковым материалам и излучателям и определяющих срок службы наиболее долгоживущих источников излучения.

Экспериментально установлено, причем для источников излучения на всех известных полупроводниковых материалах [1, 2, 4 – 6], что значительные скорости деградации наблюдаются только при пропускании прямого тока через излучатель. Скорость деградации всегда растет с увеличением плотности тока, температуры источника излучения во время его работы и с увеличением внутренних механических напряжений. Дефектные реакции, ответственные за рост безызлучательного канала рекомбинации в активной области излучателя, обусловлены наличием избыточных носителей заряда и составляют класс рекомбинационно-стимулированных дефектных реакций. Область физики, которая занимается их изучением, называют химией или фотохимией дефектов.

В соответствии со скоростью протекания процесса объемную деградацию разделяют на быструю и медленную. Быстрая деградация (часы, десятки и сотни часов) носит пространственно-неоднородный характер и связана с относительно быстрым развитием в активной области излучателей



дефектов «темных линий» (ДТЛ) и дефектов «темных пятен» (ДТП) [1, 7]. В соединениях A^3B^5 ДТЛ представляют собой трехмерные дислокационные сетки с локальной плотностью дислокаций 10^8 – 10^9 см $^{-2}$. Такие дефекты начинаются от гетерограниц, от ростовых дислокаций, пересекающих активную область, от дефектов упаковки, царапин и других неоднородностей. Темные линии растут во время работы прибора в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. ДТП также представляют собой скопления дислокаций. Основными механизмами образования и развития ДТЛ и ДТП являются генерация, скольжение и переползание дислокаций в условиях сильного электронного возбуждения системы.

Медленная деградация развивается однородно в объеме активной области излучателя в течение тысяч, десятков тысяч часов и связана, как считает большинство авторов, с генерацией глубоких безызлучательных центров в результате реакций дефектов в твердой фазе. Важным фактором в этом процессе является состав исходных дефектов структуры в активной области излучателя: остаточные и легирующие примеси, собственные точечные дефекты кристалла и дислокации. Для описания процессов деградации источников излучения предложен ряд моделей, которые преимущественно носят феноменологический характер [1, 4 – 7].

Диффузионная модель. Эта модель предполагает генерацию дефектов, создающих глубокие уровни в активной области диода за счет перераспределения быстро диффундирующих примесей. Скорость диффузии заряженных примесей увеличивается в электрическом поле p – n -перехода, а также при их перезарядке, поскольку в этих случаях уменьшаются барьеры для диффузии. Если компоненты сложного центра (донорно-акцепторной пары, комплекса, молекулы) удерживаются между собой за счет кулоновских сил, то перезарядка компонент центра при захвате неравновесных носителей заряда может привести к развалу центра из-за ослабления сил связи, а их последующая диффузия – к образованию дефектов нового типа. Диффузия приоб-

ретаает атермический характер, если перезарядка или возбуждение переводят примесный атом в седловую точку функции потенциальной энергии, из которой он без активации может переместиться в соседний узел или междоузлие [5].

Модель «фононного удара». В этой модели предполагается образование точечных дефектов за счет передачи в решетку кристалла энергии, выделяющейся при безызлучательной рекомбинации электронно-дырочных пар. Этой энергии может быть достаточно для генерации пар Френкеля, особенно вблизи дефектов, где существует асимметрия пространства. Если же энергия, выделяющаяся при безызлучательной рекомбинации на центре, поглощается самим центром, то он может перейти на более высокий колебательный уровень или в возбужденное электронное состояние. При этом барьер для диффузии дефекта понижается или исчезает совсем. Возможность поглощения энергии безызлучательного перехода центром подтверждена экспериментами по рекомбинационно-ускоренному отжигу радиационных дефектов [1, 5].

Дислокационная модель. В указанной модели деградации [7] причиной изменения рекомбинационных параметров активной области излучателя считается развивающаяся во время работы прибора сеть дислокаций. В условиях сильного возбуждения электронной подсистемы происходит генерация и ускоренное скольжение дислокаций [4, 9, 10]. Кроме того, дислокации могут сами играть роль центров безызлучательной рекомбинации, а также служить путями для облегченной миграции примесей. Все перечисленные явления могут происходить одновременно, могут быть разнесены во времени, или реализовываться по отдельности.

Модель резонансного дефектообразующего захвата. В этой модели [4] природа элементарного акта дефектообразования рассматривается на языке глубоких центров как «дефектных молекул», внедренных в кристалл в качестве некоторых автономных систем и имеющих локальные уровни в пределах разрешенных зон. При захвате электрона молекула переходит в возбуж-

денное антисвязывающее состояние, из которого она релаксирует через диссоциацию с образованием дефектов нового типа. Данная модель, по всей видимости, единственная, которая позволяет рассчитать вероятность дефектных реакций, причем она в широком понимании вопроса включает в себя все вышеназванные механизмы, кроме дислокационного.

Процесс деградации полупроводниковых источников излучения, как правило, состоит из ряда распределенных во времени этапов. Каждый из названных выше механизмов образования центров безызлучательной рекомбинации неоднократно привлекался для объяснения экспериментальных результатов по деградации различного типа излучателей как преобладающий в пределах отдельных этапов процесса. При этом основные трудности интерпретации явления деградации как единого процесса всегда были связаны с попытками согласования различных механизмов на границах этапов [1, 4 – 7].

Роль внутренних механических напряжений и дислокаций

Любой полупроводниковый прибор представляет собой гетерогенную систему, содержащую границы раздела разнородных материалов. Эти материалы, как правило, имеют различные параметры решеток или различные температурные коэффициенты расширения (ТКР). Такие системы принципиально термодинамически не равновесны. В них всегда на границах раздела имеются остаточные упругие напряжения, которые повышают полную энергию системы. При этом система неминуемо будет стремиться к минимуму энергии с релаксацией механических напряжений через упругую или пластическую деформацию, расслаивание или растрескивание с генерацией дислокаций и других структурных дефектов [1, 4, 9 – 11]. Это позволяет трактовать процесс деградации полупроводникового прибора как общий закон природы о минимизации энергии неравновесной системы. Отсюда следует, что полупроводниковые источники излучения должны и даже обязаны деградировать во время работы, а задача соз-

дания надежных излучателей заключается в разработке способов, уменьшающих скорость деградации, поскольку исключить ее полностью невозможно.

Даже если в неработающем приборе достигнута полная компенсация остаточных механических напряжений, т. е. он находится в разгруженном равновесном состоянии, то во время его работы на границах разнородных слоев обязательно возникнут термоупругие напряжения, вызванные различием ТКР и неоднородным нагревом слоев в приборной структуре. При этом возникающие термоупругие напряжения имеют величину одного порядка с обычно существующими в структурах остаточными напряжениями [10].

Таким образом, можно предполагать, что одной из главных причин деградации полупроводниковых источников излучения может быть их механическая неравновесность – либо остаточная, либо возникающая при локальных перегревах во время работы прибора. А все рассмотренные выше механизмы деградации лишь накладываются на механическую релаксацию системы и могут в конкретных случаях проявлять себя как основные.

Многочисленные эксперименты показывают, что на ранних этапах деградации идет процесс генерации, перестройки и миграции точечных дефектов, а на конечных этапах определяющую роль начинает играть образование дислокационных структур [1, 2, 4, 7]. Роль дислокаций на ранних этапах процесса деградации не ясна. Установлено, что скорость деградации всегда растет с увеличением уровня инжекции, температуры и начального уровня внутренних механических напряжений в приборной структуре. Но поскольку увеличение уровня возбуждения и температуры в значительной степени сводится к изменению величины внутренних механических напряжений, то основной движущей силой, определяющей процесс деградации на всех его этапах, все-таки является механическая неравновесность деградирующей системы. Соответственно, если механическая неравновесность минимальна, то минимальной будет и



скорость деградации системы, а ее долговечность — максимальной.

О преобладающем механизме деградации можно судить по характеру изменения во времени параметров деградирующего прибора. Общей чертой всех рассмотренных выше механизмов дефектообразования в деградирующем приборе, за исключением дислокационного, должно быть постепенное накопление дефектов в активной области прибора в процессе его работы и, как следствие, плавное изменение параметров активной области прибора: проводимости, емкости, геометрических размеров и др. В то же время релаксация механических напряжений в приборной структуре, приводящая к генерации и перемещению дислокаций, всегда оказывается в той или иной степени «замороженной» из-за наличия различных по величине энергетических барьеров, закрепляющих дислокации в решетке кристалла. Поэтому генерация, перемещение и скольжение дислокаций всегда должны иметь пороговый характер [9, 10]. Толчком, приводящим «замороженную» механическую неравновесность системы в движение, может быть внешнее воздействие достаточной интенсивности или локальное внутреннее выделение энергии при безызлучательной рекомбинации. С этим, например, связан пороговый характер фотопластического эффекта в твердом теле.

Пороговый характер процесса деградации может служить критерием при интерпретации механизма деградации прибора.

Предположение о решающей роли механической неравновесности приборной структуры экспериментально продемонстрировано при исследовании свойств светодиодов из арсенида галлия GaAs, легированного амфотерными примесями [12]. Показано, что светодиоды, изготовленные из эпитаксиальных структур с минимальными внутренними механическими напряжениями, имеют минимальную плотность дислокаций в области $p-n$ -перехода, максимальную квантовую эффективность и минимальную скорость деградации. В работе [13] выполнен модельный эксперимент по контролируемому введению внутренних механических напряжений в активные об-

ласти гетеролазеров InGaAsP/InP, также подтверждающий предположение о дислокационной природе процесса деградации и решающему влиянию на срок службы лазеров их начальной механической неравновесности. В этом эксперименте на всех стадиях процесса деградации наблюдался пороговый характер изменения параметров лазеров, свойственный дислокационному механизму.

Большинство из рассмотренных механизмов деградации, надежно установленных для источников излучения на основе традиционных соединений A^3B^5 , являются общими и для излучателей на основе III-нитридов, за исключением механизма, связанного с размножением и скольжением дислокаций, основного для традиционных A^3B^5 .

Особенности деградации оптической мощности в мощных источниках излучения на основе III-нитридов

В отличие от источников излучения на основе традиционных соединений A^3B^5 , для мощных светодиодов на основе квантоворазмерных структур InGaN/GaN наблюдается большое разнообразие в формах развития процесса деградации. В начальные периоды эксплуатации светодиодов в 1000–5000 ч, наряду с обычным постепенным снижением излучаемой мощности, может наблюдаться ее увеличение, волнообразное изменение или катастрофическое падение. Такая неоднозначность процесса характерна также и для светодиодов с близкими исходными параметрами, изготовленных из структур, полученных в одном технологическом процессе [3, 14].

За последние два десятилетия были выявлены и устранены многие причины, приводящие к деградации мощных светодиодов на основе III-нитридов. В основном это были недоработки в их конструкциях и постростовых технологиях [3]. Но эти успехи не приблизили к пониманию физической природы нестандартного развития процесса деградации в мощных светодиодах InGaN/GaN и не ликвидировали их катастрофические отказы. В большинстве работ отмечается, что деградация оптиче-

ской мощности светодиодов и лазеров на InGaN/GaN имеет общую природу [3, 14] и сопровождается генерацией дефектов под действием инжекционного тока и электромиграцией ионов металлов из контактных площадок, а также увеличением числа состояний на гетерограницах, но взаимосвязь свойств дефектной структуры с деградацией оптической мощности остается невыясненной. По-прежнему остаются предметом дискуссий вопросы о природе дефектов, о роли системы протяженных дефектов и структурной разупорядоченности слоев, типичной для III-нитридов. Нет также единой точки зрения о том, в каких областях излучающей структуры происходит генерация дефектов деградации — в p -области или в квантовых ямах активной области [3].

Основные особенности процесса деградации оптической мощности для светодиодов InGaN/GaN состоят в следующем:

неоднозначное течение деградационного процесса во времени [3];

уменьшение квантовой эффективности, в первую очередь, происходит в максимуме ее зависимости от плотности тока при плотностях, меньших 10 А/см^2 , когда преобладает рекомбинация локализованных носителей заряда [14];

деградация носит локальный характер, но не наблюдается генерации и скопления дислокаций в активной области с образованием дислокационных сеток, характерных для светодиодов на традиционных $\text{А}^3\text{В}^5$ [14, 15];

деградация ускоряется при плотностях тока выше 10 А/см^2 и температурах выше $200 \text{ }^\circ\text{С}$ даже без приложения смещения, а также при электростатических воздействиях во время сборки и измерений [14];

скорость деградации существенно зависит от степени разупорядоченности материала светоизлучающих структур, проявляющейся в трехмерном (или близком к трехмерному) характере роста структур, что приводит к развитой системе протяженных дефектов в слоях с повышенным содержанием неравновесной металлической фазы, выделяющейся на поверхности при слабых температурных и радиационных воздействиях [15].

Несмотря на общие черты развития деградационного процесса, поведение дефектной системы III-нитридов принципиально отличается от традиционных $\text{А}^3\text{В}^5$. Этим материалам свойственна более сложная дефектная структура, существование которой предопределяется неравновесными условиями роста в присутствии больших рассогласований параметров решетки с подложкой (до 13 %) и необходимостью при этом формирования переходного зародышевого слоя. В результате образуется квазиэпитаксиальный наноматериал, текстурированный протяженными дислокационными и дилатационными границами, с плотностью дислокаций до 10^9 см^{-2} и их скоплений, понижающих активную область источника излучения [16]. Это порождает многообразие форм организации наноматериала: от плохо сросшихся доменов до практически совершенных эпитаксиальных слоев лишь со следами границ доменной структуры, но с большими локальными, неоднородно распределенными механическими напряжениями и локальными (на наноразмерном уровне) неоднородностями состава твердых растворов. В этом состоит основная причина противоречий в результатах различных авторов, поскольку обычно исследуются источники излучения, имеющие разные формы организации наноматериала.

В ряде работ [14] демонстрируется связь локального характера деградации с системой протяженных дефектов, тогда как большинство авторов, как правило, не рассматривает участия сложной дефектной системы в деградационном процессе, предполагая, что индий экранирует систему протяженных дефектов от взаимодействия с неравновесными носителями заряда [2]. Это противоречит наблюдаемому сложному характеру вольтамперных характеристик (ВАХ), а также результатам исследования ВАХ для светодиодов, имеющих различный характер организации наноматериала [15]. С увеличением степени разупорядоченности материала светодиодных структур, т. е. с увеличением протяженности дислокационных границ и скоплений дислокаций, на ВАХ наблюдается рост на порядки величины туннельных токов. ВАХ и



зависимости спектральной плотности низкочастотного шума от тока свидетельствуют о сложном взаимодействии дефектной системы с неравновесными носителями заряда при частичном подавлении канала безызлучательной рекомбинации [17], что затрудняет выявление взаимосвязи деградационных явлений с системой протяженных дефектов.

Зависимости спектральной плотности шумов от плотности тока показывают, что с увеличением времени испытаний диодов увеличивается неоднородность протекания тока в их активных областях [17]. На зависимостях дифференциального сопротивления диодов появляются омические участки, шунтирующие $p-n$ -переход. В активной области диодов возникают области локального перегрева, присутствие которых выявляется по резкому росту плотности шумов при плотностях тока выше 10 А/см^2 . В светодиодах, деградировавших более чем на 20 %, такие участки роста шумов появляются уже при плотностях тока 10^{-2} А/см^2 , а области локального перегрева могут быть зарегистрированы методом тепловизионной микроскопии. Локальные перегревы активируют миграцию галлия и индия по протяженным дефектам, пронизывающим активную область светодиода, ускоряя процесс деградации [14, 15].

В работе [18] сообщается еще об одном механизме быстрого развития процесса деградации в светодиодах InGaN/GaN , связанного с присутствием локальных областей с неравновесным составом твердого раствора InGaN , содержащих повышенную концентрацию индия. В этих областях при эксплуатации диода изменяется состав твердого раствора, а следовательно, и характеристики излучателя.

Проблемы надежности полупроводниковых источников излучения

К настоящему времени достигнуты значительные успехи в увеличении срока службы полупроводниковых источников излучения, светодиодов и лазеров, так что эти приборы по долговечности вышли на первое место среди элементов квантовой электроники. Но эти успехи достигнуты, в

основном, эмпирическим путем. Существующие методы контроля приборов на долговечность пока далеки от совершенства. Это, главным образом, статистические (вероятностные) методы. Они не позволяют давать физически обоснованные прогнозы надежности приборов и устанавливать каждому из них индивидуальный срок службы, не позволяют четко сформулировать критерии, определяющие надежность прибора, и наметить пути ее повышения. Во многом это определяется тем, что процессы деградации для большей части приборов развиваются медленно, а поэтому для прогнозов используются ускоренные испытания при повышенных тепловых и электрических нагрузках. Неоднозначность результата таких испытаний заключается в неопределенности коэффициента ускорения процесса деградации. Для его точного определения необходимо знать механизм деградации и быть уверенным, что он сохраняется при экстраполяции к нормальным условиям работы прибора. Такие испытания выявляют лишь грубые нарушения в технологии. Они принципиально непригодны для прогноза индивидуального срока службы приборов и не могут быть использованы для выявления потенциально ненадежных приборов.

Существенную неопределенность в определение сроков службы приборов вносят локальные области с «замороженной» механической неравновесностью. Выявление таких областей — задача непростая, поскольку существующие методы, в основном, дают интегральную информацию о внутренних механических напряжениях.

Особенно остро проблема надежности стоит для мощных источников излучения на основе структур InGaN/GaN из-за более сложного развития в них деградации с участием конкурирующих процессов в системе протяженных дефектов и в локальных областях с неравновесным составом твердого раствора. Более того, отсутствуют общепринятые методы количественной оценки существования многочисленных структурных форм существования этого материала, что затрудняет изучение механизмов деградации и эффективного решения проблемы надежности.

Физическая модель деградации часто может быть охарактеризована параметрами, мало связанными с эксплуатационными характеристиками прибора, за которыми принято следить при ускоренных испытаниях. Поэтому поиск таких прогнозирующих параметров с целью разработки методов ранней диагностики надежности приборов является одной из актуальных задач при решении проблемы создания надежных полупроводниковых приборов.

Например, таким интегральным информационным инструментом может быть анализ ВАХ излучающих $p-n$ -структур. На ВАХ в области малых токов и напряжений (прямых и обратных) практически всегда наблюдаются так называемые «избыточные» токи. Эти токи обычно являются безызлучательными и имеют туннельный или термотуннельный характер. Их природа до конца не ясна, а описание еще не нашло последовательного отражения в теории. Характер «избыточных» токов может быть различным, но причины их появления всегда связаны с наличием дефектов в слое объемного заряда (СОЗ) $p-n$ -перехода [2].

В настоящее время считается общепринятым, что вид ВАХ, напряжение пробоя и величина обратного тока являются показателями совершенства $p-n$ -структуры. Тем не менее, предполагается, что чувствительность ВАХ к дефектам, расположенным вне активной области излучателя, столь велика, что ВАХ не может быть информативной для определения срока службы источника излучения. Но результаты многочисленных экспериментов свидетельствуют о том, что именно «избыточные» токи на ВАХ наиболее чувствительны к степени дефектности СОЗ $p-n$ -перехода. Изменение дефектной структуры активной области прибора, происходящее во время его работы, приводит к изменению проводимости $p-n$ -перехода и отражается на форме его ВАХ в области малых токов и напряжений. При этом на ВАХ можно выделить различные компоненты токов, каждая из которых связана с появлением определенного сорта дефектов в СОЗ $p-n$ -перехода и характеризуется своей зависимостью тока от напряжения и скоростью возрастания во время работы

прибора, т. е. в процессе его деградации [19]. Этот результат говорит о том, что анализ формы ВАХ в области «избыточных» токов может быть использован для оценки совершенства активных областей источников излучения. Законы эволюции «избыточных» токов, установленные в процессе испытаний источников излучения, могут быть использованы для определения их индивидуальных сроков службы, а значит и для прогнозирования их надежности.

Таким образом, требования к надежности и долговечности светодиодов и лазеров все время повышаются, а дальнейший прогресс полупроводниковой оптоэлектроники, определяющий в значительной степени современное состояние всей физики и техники полупроводников, связан как с повышением эффективности источников излучения, так и с увеличением их надежности.

Рассмотренные в обзоре механизмы, ответственные за деградацию оптической мощности полупроводниковых инжекционных источников излучения, а также физические явления, определяющие их надежность, показывают, что, несмотря на многолетние исследования и безусловные успехи практики, белых пятен в понимании явления деградации как в научном плане, так и с точки зрения практического применения источников излучения осталось немало, особенно для источников на основе III-нитридов.

Физически обоснованный прогноз надежности полупроводникового прибора может быть сделан лишь на основании знания механизмов его деградации, поэтому повышение надежности полупроводниковых источников излучения следует искать на пути создания термодинамически стабильного состояния дефектной структуры полупроводника при широком привлечении физических методов исследования природы явлений, определяющих процесс деградации. Только в этом случае можно надеяться на создание источников излучения с повышенной надежностью и разработку объективных методов прогнозирования индивидуального срока службы для каждого



излучателя без использования ускоренных испытаний при высоких температурах и нагрузках.

Необходимо всестороннее изучение свойств дефектов, возникающих при деградации, их взаимодействий между собой и моделирование устойчивых дефектных ситуаций в активных областях источников излучения.

Требуется детальное изучение процессов деградации, вызванных «замороженными» внутренними механическими напряжениями, с привлечением для анализа представлений синергетики.

До сих пор остаются мало исследованными процессы деградации в упруго напряженных квантоворазмерных структурах, на основе которых в настоящее время изготавливаются практически все светодиоды и лазеры.

Для источников излучения на основе III-нитридов недостаточно изучены различные конкурирующие механизмы, участвующие в деградационном процессе, до сих пор отсутствует единое мнение, в каких областях источников излучения идет генерация дефектов и какого типа эти дефекты, почему влияние генерируемых дефектов на значение внешней квантовой эффективности носит пороговый характер. Не ясна природа обнаруженного эффекта подавления безызлучательной рекомбинации при увеличении тока через светодиод. Эти трудности могут быть связаны со сложной

внутренней структурой этих материалов, выращиваемых в сильно неравновесных условиях, когда существенную роль играют процессы самоорганизации при формировании структуры растущего кристалла.

В связи с этим, необходимо развитие методов для количественной оценки различных форм организации наноматериала, позволяющих отбраковывать потенциально ненадежные приборные структуры на ранних стадиях технологического процесса. Для этой цели, а также для разработки принципов построения светоизлучающих структур с устойчивой дефектной структурой следует, например, использовать метод мультифрактального анализа.

Также необходимо развивать методы диагностики в твердых растворах локальных областей с неравновесным составом и локальными механическими напряжениями.

И, наконец, для выяснения природы избыточных токов, наблюдающихся на вольтамперных характеристиках источников излучения, эволюции этих токов в процессе деградации, порогового характера взаимосвязи потерь оптической мощности с избыточными токами необходимо развитие теории проводимости по протяженным дефектам в полупроводниках, которые играют существенную роль в процессах деградации светодиодов и лазеров, изготовленных как на основе традиционных соединений A^3B^5 , так и на основе III-нитридов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берг, А. Светодиоды [Текст] / А. Берг, П. Дин. — М.: Мир, 1979. — 686 с.
2. Шуберт, Ф.Е. Светодиоды [Текст] / Ф.Е. Шуберт. — М.: Физматлит, 2008. — 384 с.
3. Meneghesso, G. Recent results on the degradation of white LEDs for lighting [Text] / G. Meneghesso, M. Meneghini, E. Zanoni // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2010. — Vol. 43. — P. 354007.
4. Елисеев, П.Г. Теоретическое рассмотрение физических процессов объемной деградации активной среды полупроводниковых лазеров [Текст] / П.Г. Елисеев, И.Н. Завестовская, И.А. Полуэктов, Ю.М. Попов // Инжекционные лазеры. Труды ФИАН. — М.: Наука, 1983. — Т. 141. — С. 154–185.
5. Клингер, М.И. Создание дефектов в твердых телах при распаде электронных возбуждений [Текст] / М.И. Клингер, Ч.Б. Лушик, Т.В. Машовец [и др.] // УФН. — 1985. — Т. 147. — Вып. 3. — С. 523–558.
6. Вавилов, В.С. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках [Текст] / В.С. Вавилов, А.Е. Кив, О.Р. Ниязова. — М.: Наука, 1981. — 368 с.
7. Мильвидский, М.Г. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников [Текст] / М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. — М.: Металлургия, 1985. — 160 с.
8. Petroff, P. Nonradiative recombination at dislocations in III-V compound semiconductors [Text] / P. Petroff, R.A. Logan, A. Savage // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Vol. 44. — № 4. — P. 287–291.

9. **Monemar, B.** Threshold for optically induced dislocation glide in GaAs-AlGaAs double heterostructures: degradation via a new cooperative phenomenon [Text] / B. Monemar, K.M. Peteneski, M.B. Small [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 1978. — Vol. 41. — № 4. — P. 260–264.
10. **Конакова, Р.В.** Прогнозирование надежности полупроводниковых лавинных диодов [Текст] / Р.В. Конакова, П. Кордош, Ю.А. Тхорик, Ф. Штофаник. — Киев: Наукова Думка, 1986. — 188 с.
11. **Тхорик, Ю.А.** Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах [Текст] / Ю.А. Тхорик, Л.С. Хазан. — Киев: Наукова Думка, 1983. — 304 с.
12. **Сидоров, В.Г.** Влияние внутренних механических напряжений на характеристики светодиодов из арсенида галлия [Текст] / В.Г. Сидоров, Д.В. Сидоров, В.И. Соколов // ФТП. — 1998. — Т. 32. — № 11. — С. 1393–1398.
13. **Гореленок, А.Т.** Влияние несоответствия параметров решеток на I-V-характеристики InGaAsP/InP *p-n*-гетероструктур [Текст] / А.Т. Гореленок, В.Г. Груздов, В.В. Евстропов [и др.] // ФТП. — 1984. — Т. 18. — Вып. 8. — С. 1413–1416.
14. **Leung, K.K.** Physical mechanisms for hot-electron degradation in GaN light-emitting diodes [Text] / K.K. Leung, W.K. Fong, P.K.L. Chan, C. Surya // J. Appl. Phys. — 2010. — Vol. 107. — P. 073103 (6 p.).
15. **Kamanin, A.V.** Degradation of blue LEDs related to structural disorder [Text] / A.V. Kamanin, A.G. Kolmakov, P.S. Kopev [et al.] // Phys. Stat. Sol. (c). — 2006. — Vol. 3. — P. 2129–2132.
16. **Шретер, Ю.Г.** Широкозонные полупроводники [Текст] / Ю.Г. Шретер, Ю.Т. Ребане, В.А. Зыков, В.Г. Сидоров. — СПб.: Наука, 2001. — 124 с.
17. **Закгейм, А.Л.** Низкочастотный шум в исходных и деградировавших синих InGaAs/GaN-светодиодах [Текст] / А.Л. Закгейм, М.Е. Левинштейн, В.П. Петров [и др.] // ФТП. — 2012. — Т. 46. — Вып. 2. — С. 219–223.
18. **Басалкевич, Т.М.** Особенности развития деградационного процесса в мощных синих светодиодах InGaN/GaN [Текст] / Т.М. Басалкевич, Н.А. Тальнишних, Н.М. Шмидт // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2012. — Вып. 3 (153). — С. 45–47.
19. **Гореленок, А.Т.** Токи туннельного типа в *p-n*-гетероструктурах InGaAsP/InP [Текст] / А.Т. Гореленок, В.Г. Груздов, В.В. Евстропов [и др.] // ФТП. — 1984. — Т. 18. — Вып. 6. — С. 1032–1038.

СИДОРОВ Валерий Георгиевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ШМИДТ Наталия Михайловна — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Центра физики наногетероструктур Физико-технического института им. А.Ф.Иоффе.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26



УДК 621.373.826

М.Ю. Керносов, Ю.В. Киселев, Г.В. Мельничук, Е.Г. Чуляева

ПОДАВЛЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ В ЧАСТОТНО-СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ГЕЛИЙ-НЕОНОВЫХ ЛАЗЕРАХ

M.Yu. Kernosov, Yu.V. Kiselev, G.V. Melnichuk, E.G. Chulyaeva

Research Institute of Gas Discharge Devices «PLASMA», JSC
24, Tsiolkovsky St., Ryazan, 390023, Russia.

POLARIZATION INSTABILITY REDUCTION IN FREQUENCY-STABILIZED HELIUM-NEON LASERS

Рассмотрено явление поляризационной неустойчивости в серийно выпускаемых гелий-неоновых лазерах, предназначенных для интерферометрии. Исследовано влияние фазовой анизотропии резонатора на поляризационную неустойчивость лазера. Предложен способ управления фазовой анизотропией резонатора с помощью магнитного поля.

ГЕЛИЙ-НЕОНОВЫЙ ЛАЗЕР. ФАЗОВАЯ АНИЗОТРОПИЯ. ПОЛЯРИЗАЦИОННАЯ НЕСТАБИЛЬНОСТЬ.

Polarization instability phenomenon in mass-produced helium-neon lasers for interferometers is considered. Resonator phase anisotropy impact on laser polarization instability is investigated. The method of control of resonator phase anisotropy using a magnetic field is suggested.

HELIUM-NEON LASER. PHASE ANISOTROPY. POLARIZATION INSTABILITY.

Лазерные интерферометры на основе интерферометра Майкельсона и эффекта Доплера широко применяются для прецизионной регистрации перемещений в широком динамическом диапазоне. Источником излучения в таких устройствах является частотно-стабилизированный гелий-неоновый лазер, генерирующий две продольные моды с линейными ортогональными поляризациями [1]. Стабилизация частот продольных мод осуществляется путем разнесения в пространстве соответствующих им лазерных пучков, которые попадают на две различные площадки фотоприемника. Сигналом ошибки для системы обратной связи при автоматической настройке оптического резонатора является разность мощностей ортогонально поляризованных мод. В случае правильной настройки сигнал ошибки отсутствует.

В экспериментах, описанных в работах [2, 3], обнаружена неустойчивость поляри-

заций мод для некоторых гелий-неоновых лазеров с внутренними зеркалами, изготовленных в условиях серийного производства. Обнаруженный дефект исключает возможности применения таких приборов в лазерных интерферометрах.

Исследования, представленные в настоящей работе, были направлены на стабилизацию поляризаций продольных мод, генерируемых двухчастотным гелий-неоновым лазером, путем введения фазовой анизотропии в активный элемент.

Экспериментально изучены четыре гелий-неоновых лазера с внутренними зеркалами, генерирующие излучение с длиной волны 0,6328 мкм. Их активная среда возбуждается разрядом постоянного тока в канале (его диаметр 0,9 мм, длина 180 мм), наполненном до давления 2,8 Торр с соотношением концентраций гелия и неона, равным 9 : 1. Активная среда размещена в оптическом резонаторе длиной 235 мм, об-

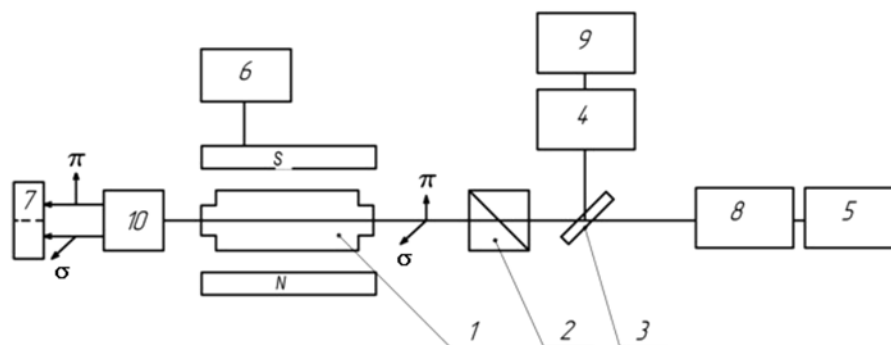


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 – лазер, помещенный в поперечное магнитное поле; 2 – полярOID; 3 – поворотное полупрозрачное зеркало; 4 – сканирующий интерферометр Фабри – Перо; 5 – анализатор спектра С4-74 (СК4-59); 6 – источник питания магнитного поля и устройство формирования поперечного магнитного поля; 7 – секторный фотоприемник, подключенный к мультиметру, соединенному с компьютером; 8 – фотоэлектронный умножитель ФЭУ-55; 9 – осциллограф С1-117; 10 – полярOID; σ , π – обозначения направлений ортогональных поляризаций

разованном плоским и сферическим зеркалами, радиус кривизны сферического зеркала составляет 0,5 м.

Поляризационно-частотные характеристики излучения лазеров исследованы с помощью установки, схема которой приведена на рис. 1.

Излучение лазера 1 направляется на полярOID 2. Светоделительная пластина 3 направляет часть мощности падающего излучения на вход сканирующего интерферометра Фабри – Перо 4 (СКИФ), а другую часть – на фотоэлектронный умножитель 8, сигнал на выходе которого регистрируется с помощью анализатора спектра 5. Сигнал с фотоприемника сканирующего интерферометра поступает на вход осциллографа С1-117, развертка которого синхронизирована с колебаниями расстояния между зеркалами интерферометра; разрешение сканирующего интерферометра по частоте составляет 20 МГц, область свободной дисперсии – 2 ГГц. На экране осциллографа отображается частотный спектр излучения, вышедшего из полярOIDа; диапазон изменения напряжения на пьезоэлектрическом преобразователе, перемещающем одно из зеркал интерферометра, соответствует полосе обзора, в пределах которой помещаются два порядка частотного спектра.

Излучение лазера, выходящее со стороны противоположного зеркала, разделяется

на два пучка с ортогональными поляризациями, которые направляются на соответствующие секции фотоприемника 7. Электрические сигналы фотоприемников после усиления регистрируются с помощью мультиметра АРРА, соединенного с компьютером для непрерывной записи данных.

Рис. 2 иллюстрирует формирование сигнала ошибки при перестройке частот двух продольных мод вследствие самопрогрева лазера. Изменение длины резонатора приводит к перемещениям частот продольных мод в пределах полосы усиления активной

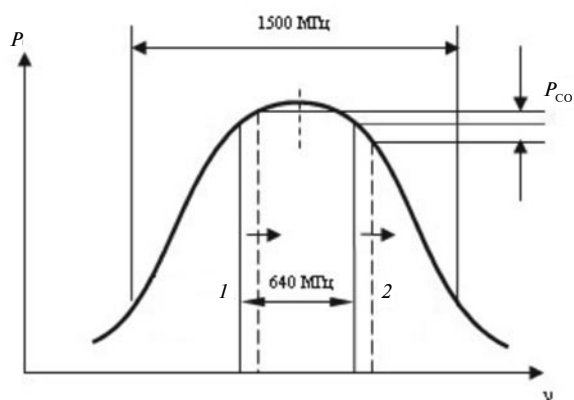


Рис. 2. Формирование сигнала ошибки при изменении длины резонатора двухчастотного лазера; 1, 2 – горизонтальная и вертикальная моды, соответственно; P_{co} – мощность сигнала ошибки



среды при неизменном межмодовом интервале. В процессе перестройки резонатора, при прогреве частота каждой из мод плавно меняется в пределах всей полосы усиления. Для правильной настройки необходимо поддерживать симметричные смещения модовых частот относительно центра полосы усиления. Если длина резонатора выбрана так, чтобы частоты соседних продольных мод были одинаково удалены от центра полосы, то мощности обеих мод одинаковы и сигнал ошибки равен нулю. В случае расстройки спектр продольных мод несимметричен и возникает разбаланс мощностей, что приводит к появлению сигнала ошибки.

Опыт серийного производства двухчастотных гелий-неоновых лазеров показывает, что существуют ситуации, в которых автоматическое поддержание симметричной настройки резонатора невозможно, так как поляризации мод хаотически изменяются, оставаясь при этом ортогональными.

На рис. 3 приведены два случая существования поляризационной нестабильности (перескока), причем во втором из них возможна правильная настройка (рис. 3, б), а в первом (рис. 3, а) невозможно обеспечить равенство мощностей ортогонально поляризованных мод, так как при симметричной настройке относительно центра контура каждая из поляризаций изменяет свое направление на ортогональное.

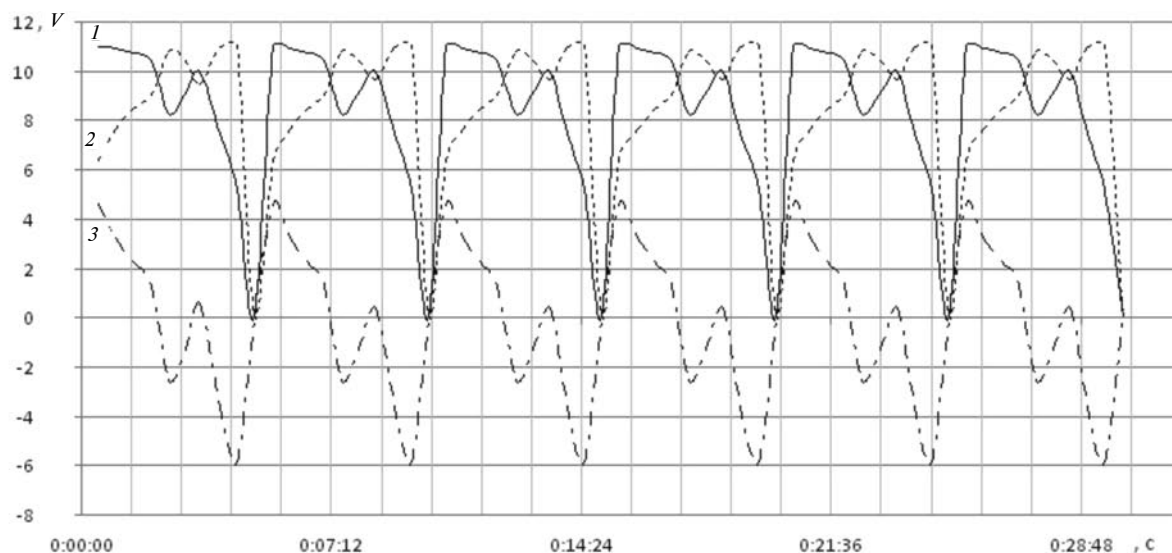
В процессе эксперимента исследованы активные элементы двухчастотных гелий-неоновых лазеров, которые проявили качественно различные поляризационные свойства. В первом случае поляризации соседних мод не имеют стабильной пространственной ориентации, т. е. направления оптических колебаний векторов напряженности электрических полей изменяются случайным образом в процессе перестройки резонатора. При измерении параметров излучения такого активного элемента с помощью сканирующего интерферометра Фабри — Перо невозможно зарегистрировать мощность излучения для каждой моды, так как при спонтанном изменении направления поляризации поляроид, настроенный на пропускание определенной

поляризации, пропускает волны, которые соответствуют обоим модам, и соотношение их мощностей изменяется хаотически. Таким образом, экспериментальная установка не позволяла определять соотношение мощностей генерируемых лазером мод (см. рис. 3, а). Их разностный сигнал был несимметричным и проходил через нуль, т. е. точку стабилизации лазерной частоты, несколько раз. В этом случае диапазон отработки сигнала ошибки был недостаточным для соответствующей отработки колебаний расстройки резонатора. Пределы колебаний резонатора, которые компенсируются системой АПЧ, в основном, зависят от диапазона изменения внешней температуры и прописаны в технических условиях на прибор. Таким образом, активные элементы, для которых явление поляризационной нестабильности наблюдается вблизи четверти контура, следует считать производственным браком.

Во втором случае наблюдается стабильная пространственная поляризация ортогонально-поляризованных мод лазерного излучения (см. рис. 3, б). При равенстве мощностей моды будут находиться симметрично относительно центра контура. Этой ситуации будет соответствовать участок на графике разностного сигнала, где осуществляется переход через нуль — точку стабилизации. Разностный сигнал антисимметричен относительно этой точки, что позволяет эффективно отрабатывать колебания расстройки резонатора. Такие лазеры можно использовать в качестве источника лазерного излучения в приборах интерферометрии: стабильные ортогональные поляризации генерируемых мод дают возможность разделять лазерный пучок в пространстве, причем одна из поляризаций является опорным сигналом, а другая — информационным, что позволяет регистрировать перемещения до долей микрон.

В ходе эксперимента поляризационные свойства активных элементов удалось стабилизировать путем наложения на часть активного элемента постоянного магнитного поля величиной $5 < H < 50$ мТл. Предположительно резонаторы некоторых активных элементов изначально обладают случайной

а)



б)

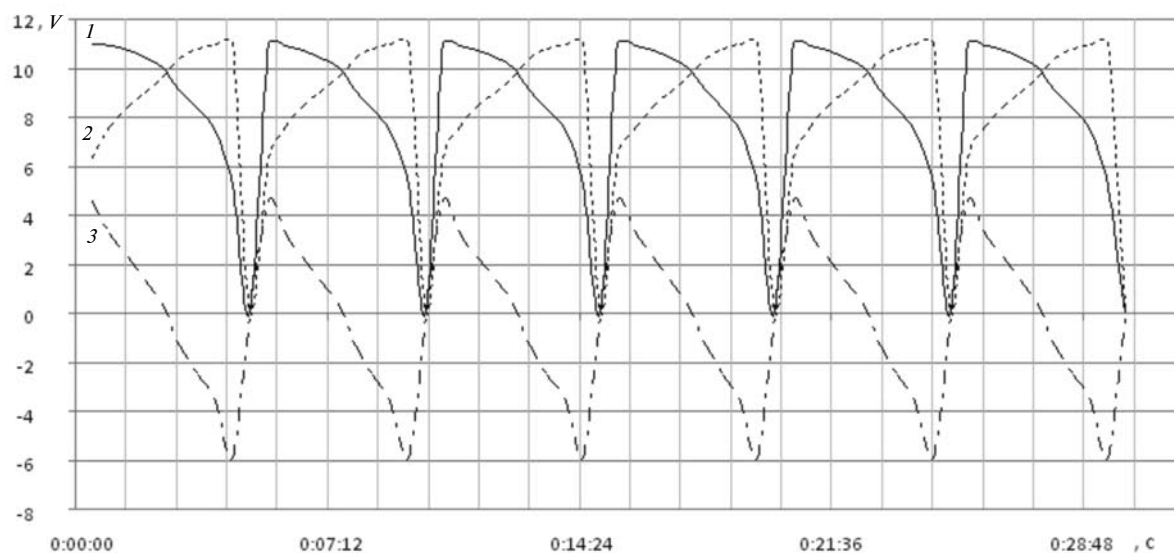


Рис. 3. Экспериментальные зависимости мощности ортогонально-поляризованных мод (1, 2) и разностного сигнала (3) от времени; представлены случаи, когда правильная настройка невозможна (а) и когда она возможна (б)

фазовой анизотропией по отношению к волнам с ортогональными поляризациями, что связано с индивидуальными особенностями используемых зеркал. В этом случае и реализуется стабильная поляризация продольных мод, генерируемых лазером. В случае, когда распределение мод в резонаторе полностью изотропно, направления

поляризаций меняются в процессе его перестройки (см. рис. 3, а).

Экспериментально было установлено, что постоянное магнитное поле, приложенное к части активного элемента (на юстировочные узлы), вносит в резонатор разность набега фаз Δ , что приводит к увеличению поляризационно-фазовой анизотропии.

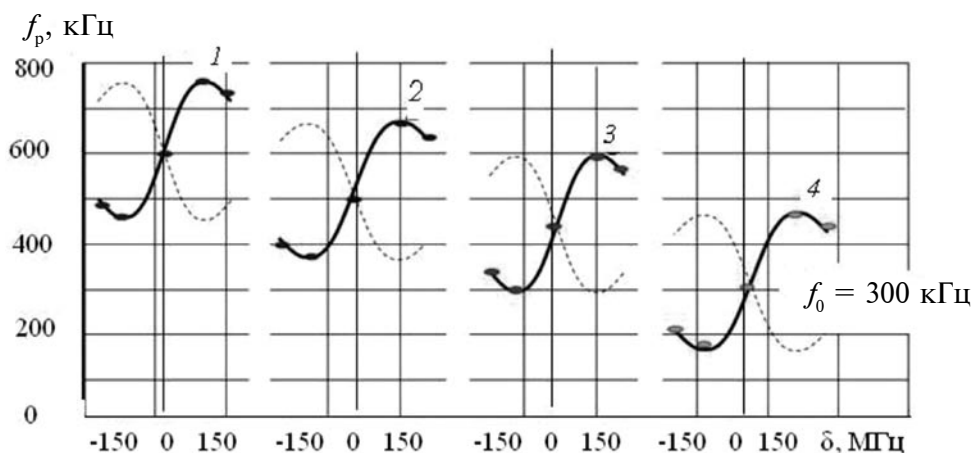


Рис. 4. Зависимости разностной частоты от расстройки резонатора для четырех активных элементов; номера кривых соответствуют номерам активных элементов; сплошные и пунктирные кривые соответствуют разностной частоте при противоположных направлениях приложенного магнитного поля напряженностью 36 мТл

Следовательно, чтобы выяснить причины нестабильности поляризационных характеристик у части активных элементов, необходимо количественно охарактеризовать поляризационно-фазовую анизотропию резонатора.

Во второй части эксперимента мы настраивали резонатор на центр контура усиления, так чтобы одна мода находилась в центре, а соседние — за пределами контура. Перестройка осуществлялась за счет самопрогрева резонатора, при этом в ее процессе на анализаторе спектра наблюдалась разностная частота вблизи центра контура. При наложении поперечного магнитного поля центральная мода расщепляется на две, и их разность образует частоту расщепления f_0 . С помощью анализатора спектра С4-74 мы определяли разностную частоту, накладывая на каждый активный элемент поперечное

магнитное поле величиной 36 мТл. Затем снимали зависимость разностной частоты от расстройки резонатора.

Разностная частота f_0 , которая образуется при включении магнитного поля, соответствует центру контура усиления. Это значение служило для определения поляризационно-фазовой анизотропии резонатора при использовании партии исследуемых активных элементов (см. таблицу):

$$\Delta = \frac{f_p 2\pi L}{c} \cong 10^{-3} \text{ рад},$$

где L — длина резонатора.

Необходимо отметить, что фазовая анизотропия резонатора не воспроизводилась от одного активного элемента к другому (как следует из рис. 4). Поэтому для достижения эффекта стабильности поляризации юстировочные узлы активных элементов намагничивались по-разному (путем наложения поперечного магнитного поля к части активного элемента).

Наибольшее значение фазовой анизотропии составляло 0,0015 рад для активного элемента длиной 220 мм; ей соответствовала разностная частота, равная примерно 600 кГц, при наложении поперечного магнитного поля величиной 30 мТл. При значениях фазовой анизотропии не ниже 0,001 были получены устойчивые ортогональные поляризации.

Экспериментальные значения параметров для четырех гелий-неоновых лазеров

Номер активного элемента	f_0 , кГц	Δ , 10^{-4} рад
1	600	15
2	500	12
3	420	10
4	300	7

Существование поляризационной неустойчивости объясняется в работе [2] через исследование уравнений движения, представленных в монографии [3].

Как показано в работе [2], интенсивность излучения I_1, I_2 каждой из поляризованных мод определяются коэффициентами усиления, само- и взаимонасыщения:

$$I_{1,2} = \frac{\alpha_1 \beta_1 - \alpha_2 \theta_{12}}{\beta_1 \beta_2 - \theta_{21} \theta_{12}}, \quad (1)$$

где α_1, α_2 — коэффициенты усиления на каждой из ортогонально-поляризованных мод; β_1, β_2 — коэффициенты самонасыщения; θ_{12}, θ_{21} — коэффициенты взаимонасыщения (выражения для четырех последних коэффициентов берутся из работы [3]).

Коэффициент усиления как функция от расстройки приведен, например, в работе [3]. В это выражение нами введен коэффициент, связанный с добротностью резонатора Q . После преобразований выражение (1) приобретает следующий вид:

$$I_{1,2} = [a_0 \exp(-(\delta / Ku)^2) - Q^{-1}] \times (\beta_1 - \theta_{12}) / (\beta_1 \beta_2 - \theta_{21} \theta_{12}), \quad (2)$$

где $\alpha_1 = \alpha_2 = a_0 \exp[-(\delta / Ku)^2]$ — ненасыщенные коэффициенты усиления для каждой из поляризационных мод (они равны между собой); $Ku = 900$ МГц; δ — расстройка резонатора в пределах 1500 МГц; Q — добротность резонатора.

Авторы работы [2] получили устойчивые поляризации за счет повышения парциального давления неона.

Однако дальнейшие эксперименты показали, что при использовании зеркал с меньшими рассеянием и потерями на поглощение (с целью повышения мощности генерации) увеличение парциального давления неона для повышения устойчивости оказалось неэффективным. Как следует из равенства (2), улучшение качества зеркал (путем снижения рассеяния и потерь на поглощение) приводит к превышению усиления над потерями и усилению конкуренции между ортогонально-поляризованными модами.

Коэффициенты β и θ определяются только свойствами среды, которую, в свою оче-

редь, можно изменять только наполнением. Поэтому эффективнее будет, на наш взгляд, изменение добротности резонатора, причем так, чтобы для каждой из поляризаций значения добротности были различны. При этом появляются как фазовая, так и амплитудная анизотропии резонатора. Следует отметить, что явление возникновения фазовой анизотропии при наложении магнитного поля на юстировочные узлы резонатора было изучено только экспериментально и для теоретического объяснения явления необходимы дополнительные исследования.

Используя данные, приведенные в работе [2], мы провели оценку влияния фазовой анизотропии резонатора. Для этого в выражения $I_1(\delta)$ и $I_2(\delta)$ [2] были введены функции изменения добротности резонатора (с учетом фазовой анизотропии), выражения для $\beta_1, \beta_2, \theta_{12}, \theta_{21}$ и построена зависимость интенсивности от расстройки резонатора (расчет приведен далее для одного конкретного случая как пример, позволяющий оценить влияние фазовой анизотропии резонатора):

$$\begin{aligned} I_1(\delta) = & \left[\left[a_0 \exp(-(\delta / Ku)^2) - (Q \sin(0, 2))^{-1} \right] \times \right. \\ & \times \left[\left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) \right] - \left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + G^2 \left[c G^2 (\gamma_1 \cdot \gamma_2)^{-1} \left[G^2 + (\delta / 4 + 640)^2 \right] \right] \right] \right] \times \\ & \times \left[\left[\left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) \right]^2 - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + G^2 \left[c G^2 \left[\gamma_1 \cdot \gamma_2 \right]^{-1} \left[G^2 + (\delta / 4 + 640)^2 \right] \right]^{-1} \right] \right]^{-1} \right]; \\ I_2(\delta) = & \left[\left[1, 9^{-1} a_0 \exp(-(\delta / Ku)^2) - Q^{-1} \right] \times \right. \\ & \times \left[\left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) \right] - \left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + G^2 \left[c G^2 (\gamma_1 \cdot \gamma_2)^{-1} \left[G^2 + (\delta / 4 + 640)^2 \right] \right] \right] \right] \times \\ & \times \left[\left[\left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) \right]^2 - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left[1 + G^2 / (G^2 + (\delta / 4)^2) + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + G^2 \left[c G^2 \left[\gamma_1 \cdot \gamma_2 \right]^{-1} \left[G^2 + (\delta / 4 + 640)^2 \right] \right]^{-1} \right] \right]^{-1} \right], \end{aligned}$$

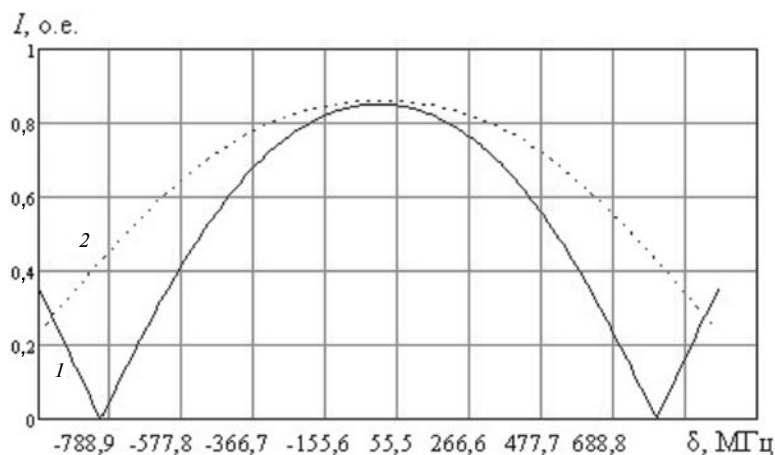


Рис. 5. Зависимость интенсивности от расстройки резонатора при различных значениях добротности резонатора $Q = f(\Delta)$, где Δ – фазовая анизотропия резонатора

где γ_1, γ_2 – естественная ширина линии; G – лоренцева ширина линии излучения; 640 – частотное расстояние между двумя поляризациями; $\sin(0,2)$ – экспериментальное значение фазовой анизотропии; 1,9 – экспериментальное значение амплитудной анизотропии.

Внесение фазовых потерь (рис. 5, кривая 2) приводит к появлению однородности в зависимости интенсивности от расстройки резонатора, причем снижение интенсивности происходит на четверти контура, при снижении фазовой анизотропии примерно до 0,0014 рад. Оценочные данные совпали с экспериментальными результатами.

Таким образом, наличие совокупности факторов, а именно соотношения усиления и потерь резонатора (причем как фазовых, так и изотропных) определяет бистабильность поляризации при расстройке резонатора. Для исключения поляризационной неустойчивости предлагается ввести в резонатор фазовую анизотропию величиной не менее 0,0014 рад, например, путем наложения поперечного магнитного поля к части активного элемента. Следует отметить, что такое техническое решение позволяет исключить брак при выпуске серийных лазеров, стабилизированных по равенству интенсивностей ортогонально поляризованных мод.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Власов, А. Частотно-стабилизированные гелий-неоновые лазеры для интерферометрии [Текст] / А. Власов, С. Хилов // Фотоника. – 2007. – Вып. 5. – С. 7–9.

2. Арефьев, А.С. Стабильная генерация в частотно-стабилизированном гелий-неоновом

лазере [Текст] / А.С. Арефьев, С.П. Борисовский, А.А. Кондрахин, Е.Г. Чуляева // Вестник РГРТА. – 2004. – Вып.14. – С. 80–83.

3. Войтович, А.П. Магнитооптика газовых лазеров [Текст] / А.П. Войтович. – Минск: Наука и техника, 1984. – 208 с.

КЕРНОСОВ Максим Юрьевич – научный сотрудник НПК «Лазер» ОАО «Плазма». 390023, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
mkern@yandex.ru

КИСЕЛЕВ Юрий Владимирович – инженер-технолог НПК «Лазер» ОАО «Плазма». 390023, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
Yuri_kis@mail.ru

МЕЛЬНИЧУК Геннадий Васильевич — *генеральный директор ОАО «Плазма»*.
390023, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
mkern@yandex.ru

ЧУЛЯЕВА Елена Георгиевна — *доктор технических наук, старший научный сотрудник НПК «Лазер» ОАО «Плазма»*.
390023, г. Рязань, ул. Циолковского, 24
elenachuljaeva@yandex.ru



УДК 621.373.8

*Д.В. Дворцов, В.А. Парфенов***ОДНОЧАСТОТНЫЙ РЕЖИМ РАБОТЫ ЛАЗЕРНЫХ ДИОДОВ***D.V. Dvortsov, V.A. Parfenov*St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia**SINGLE-FREQUENCY MODE REGIME OF LASER DIODES**

В статье приводятся результаты экспериментального исследования одночастотного режима генерации лазерных диодов (режим генерации одной продольной моды). Рассмотрено влияние температуры и тока накачки на область существования одночастотного режима. Получены количественные характеристики работы лазера в данном режиме.

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЙ ЛАЗЕР. ЛАЗЕРНЫЙ ДИОД. ОДНА ПРОДОЛЬНАЯ МОДА. ОДНОЧАСТОТНЫЙ РЕЖИМ РАБОТЫ.

Experimental results of study of single-longitudinal-mode regime of laser diodes are presented in the paper. The influence of temperature and injection current on the range of presence of single-frequency mode is considered. Quantitative characteristics of laser operation in this regime are obtained.

SEMICONDUCTOR LASER. LASER DIODE. SINGLE-LONGITUDINAL-MODE REGIME. SINGLE-FREQUENCY MODE.

Полупроводниковые лазерные диоды, благодаря малым размерам, низкому энергопотреблению, большому времени работы на отказ, находят применение в оптической записи цифровой информации, волоконно-оптических системах связи, лазерных принтерах, различных датчиках, дальномерах, устройствах позиционирования и т. п. Большинство этих задач ограничивается требованием минимальной расходимости излучения, и поэтому их решение базируется на использовании лазерных диодов, генерирующих излучение, соответствующее основной моде. Можно с определенностью утверждать, что в настоящее время практически все лазерные диоды с выходной мощностью единицы — десятки милливатт работают в режиме генерации нулевой моды.

Однако для ряда применений, таких как лазерная спектроскопия, интерференционные измерения, системы волоконно-оптической связи с волновым уплотнением, требования к излучению не

ограничиваются наличием нулевой моды. Для решения этих задач необходимы лазеры, работающие в одночастотном режиме (или в режиме генерации одной продольной моды). Под эти применения были разработаны специальные полупроводниковые лазеры с внешним резонатором, например, DBR-лазер [1], лазер с волоконной брэгговской решеткой [2], лазеры с перестройкой частоты для спектроскопических исследований [3]. Эти квантовые генераторы производятся отдельными образцами и представляют собой достаточно уникальные дорогостоящие приборы.

В отличие от них лазеры, относящиеся к первой группе применений, выпускаются в массовых количествах, крайне дешевы и демонстрируют постоянное улучшение параметров выходного излучения. К ним относятся качество излучения в виде нулевой моды, надежность в работе, длительное сохранение выходных характеристик. Более того, как показывают результаты исследований [4, 5], лазеры данной группы

могут работать в одночастотном режиме. Эта информация также находит отражение в технических описаниях к некоторым лазерам и в проспектах их дистрибьютеров [6]. Поэтому было бы интересно, если это возможно, использовать данные лазеры как источники одночастотного излучения.

Вместе с тем, наличие информации лишь о генерации лазером одной продольной моды оставляет в стороне многие важные вопросы работы лазера и не дает представления о возможности применения таких диодов при решении конкретных задач, ввиду отсутствия необходимых для этого данных. Например, неясно, существует ли такой режим во всем допустимом диапазоне изменения рабочих токов, как влияет на него температура, какова ширина спектра излучения, есть ли какие-либо другие особенности генерации в этом режиме.

Поэтому целью настоящей работы являлось экспериментальное исследование одночастотного режима работы серийно выпускаемых лазерных диодов с целью получения информации об условиях его реализации.

Экспериментальная часть

В работе исследовались лазерные диоды с номинальной выходной мощностью 5 и 10 мВт, излучающие в наиболее распространенном, «красном», диапазоне спектра на длинах волн вблизи 635 и 655 нм. Такие уровни мощности излучения представляются достаточными для решения многих практических задач, например, с использованием интерференционных измерений, и в то же время позволяют ограничить возможные варианты выбора лазеров.

Среди исследованных были лазеры HL6358MG (639 нм, 10-милливаттный, Hitachi Laser Diodes), для которых в техническом описании (ТО) указывается наличие одной продольной моды. Можно отметить также, что это одна из немногих фирм, в ТО которых приводится такая информация, а также указывается, что лазеры имеют MQW-структуру.

У остальных исследованных лазеров данная информация в ТО вообще отсутствовала. Это лазеры известной фир-

мы Agima Lasers: ADL-63054TL (635 нм, 5-милливаттный), ADL-63102TL (637 нм, 10-милливаттный), ADL-65052TL (655 нм, 5-милливаттный), ADL-65055TL (655 нм, 5-милливаттный). Существуют таблицы замещения (replacement) этих лазеров продукцией фирм Opnext, Sanyo, что указывает на близость используемых в них технических решений.

Данная группа лазеров включалась в эксперименты в силу соображений, что они в определенных условиях также могли бы работать в одночастотном режиме, так как имеют много общего с лазерами, позиционируемыми как лазеры с одной продольной модой. Это и одинаковый материал активной среды (AlGaInP), и организация резонатора, и близкие значения мощности, длины волны и расходимости излучения, и электрические параметры. Наконец, принималась во внимание информация, опубликованная в работах [4, 5].

Для повышения достоверности результатов каждый тип лазеров присутствовал в экспериментах в количестве не менее трех единиц.

Ввиду большой угловой расходимости излучения полупроводниковых лазеров их спектральные характеристики могут исследоваться только после предварительной коллимации излучения. Для проведения экспериментов была разработана единая модульная конструкция крепления лазерных диодов. Поскольку конструктивно они выполнены в одинаковых корпусах диаметром 5,6 мм, диоды запрессовывались в специальном посадочном месте модуля. Контактные ножки лазера припаивались к микроплате, которая, в свою очередь, посредством ленточного кабеля с разъемом соединялась с источником питания. Асферическая линза с фокусным расстоянием 4,5 мм в резьбовой оправке вворачивалась в корпус модуля и обеспечивала коллимацию выходного излучения.

Лазерный модуль устанавливался в термостате, температура которого автоматически контролировалась и могла пере-страиваться платой термостабилизации в пределах (15 – 30) °С. При этом выбранное значение температуры поддерживалось

с точностью не хуже $0,03^\circ\text{C}$.

Перед проведением экспериментов все лазерные модули тестировались: снимались их ватт-амперные характеристики. Цель этих измерений состояла в фиксации энергетических возможностей конкретного лазера уже в модульном исполнении. Это давало возможность в дальнейшем контролировать мощностные характеристики лазерного диода в течение всего периода работы.

Схема установки для исследования спектра излучения лазерных диодов приведена на рис. 1.

Спектр лазерного излучения контролировался с помощью двух интерферометров Фабри – Перо. Интерферометр 6 имел базу 7 см (постоянная интерферометра – $2,1\text{ ГГц}$). База второго интерферометра 7 могла регулироваться в пределах $(0,2 - 0,5)\text{ мм}$ (постоянная интерферометра составляла $300 - 750\text{ ГГц}$), причем его конструкция позволяла осуществлять эту регулировку плавно. В отличие от первого, второй интерферометр был сканирующим и обеспечивал просмотр всего спектра генерации.

Питание лазерных диодов осуществлялось от источника, работающего в режиме

стабилизации тока. Установка рабочего тока производилась многооборотным потенциометром, позволявшим выбирать значения тока лазера с точностью $0,1\text{ мА}$ в диапазоне $(10 - 70)\text{ мА}$.

При генерации основной поперечной моды в общем случае спектр излучения лазера представляет собой группу эквидистантных частотных компонент, соответствующих продольным модам лазера. Частотное расстояние между продольными модами лазера $\Delta\nu_{\text{мм}}$ следует выражению

$$\Delta\nu_{\text{мм}} = c/(2Ln),$$

где c – скорость света, L – длина резонатора, n – показатель преломления материала полупроводникового кристалла ($n = \text{const}(\lambda)$), λ – длина волны излучения.

При известных значениях длины резонаторов $L = (0,3 - 0,5)\text{ мм}$ и показателе преломления $n = 3,5$ значение $\Delta\nu_{\text{мм}}$ лежит в соответствующих пределах $(143 - 86)\text{ ГГц}$.

В одночастотном режиме должна наблюдаться только одна спектральная компонента.

Результаты экспериментов

Как показали эксперименты, одночастотный режим работы был достижим у

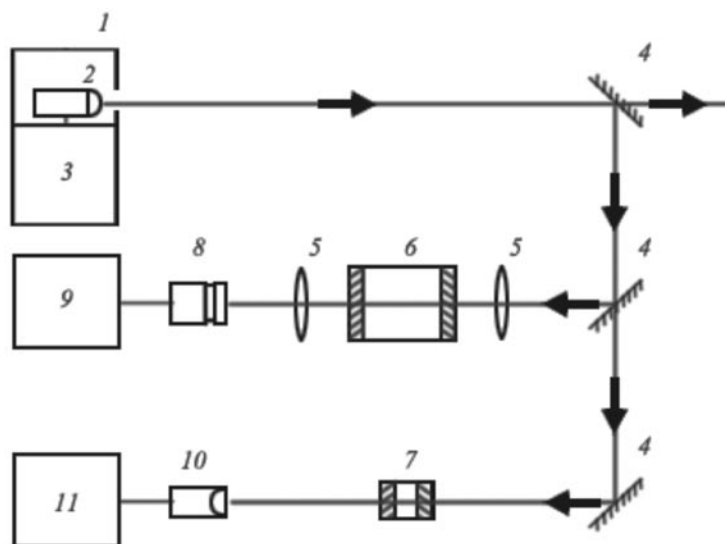


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

- 1 – термостат; 2 – лазерный модуль; 3 – термоэлектрический элемент Пельтье;
4 – отклоняющие зеркала; 5 – линзы; 6, 7 – интерферометры Фабри – Перо;
8 – видеокamera; 9 – монитор; 10 – фотоприемник; 11 – осциллограф

всех лазеров, независимо от наличия или отсутствия в технических описаниях информации о генерации одной продольной моды. Особенности существования этого режима, которые будут описаны далее, в наиболее характерной форме наблюдались у 5-милливаттных лазерных диодов.

Одночастотный режим работы существовал не во всем диапазоне изменения рабочего тока, а только в некоторых интервалах (зонах) его изменения, имеющих величину (2 – 3) мА. Таких зон при изменении тока накачки в пределах от порогового тока $I_{\text{пор}}$ до максимального $I_{\text{макс}}$ у 5-милливаттного лазера может быть две-три. В промежутках между зонами генерируется несколько мод. Причем соотношение между амплитудами мод быстро меняется. Это хорошо наблюдалось с помощью осциллографа. В режи-

ме автоматической развертки спектральные компоненты, регистрируемые сканирующим осциллографом, буквально «живут», меняясь по амплитуде, в то время как выделенная строка при однократной развертке создает иллюзию неизменного спектра и не совпадает с картиной, получаемой при наложении спектров.

В центре зоны доминирует одна частота. По отношению к ней амплитуды ближайших дополнительных компонент не превосходят (2 – 3) %. Ближе к границе зоны их амплитуды растут, достигая (5 – 10) %, после чего при постоянном токе в течение нескольких секунд (моды явно конкурируют между собой) устанавливается многочастотный режим. При дальнейшем увеличении тока может вновь появиться тенденция к одночастотному режиму, а затем окон-

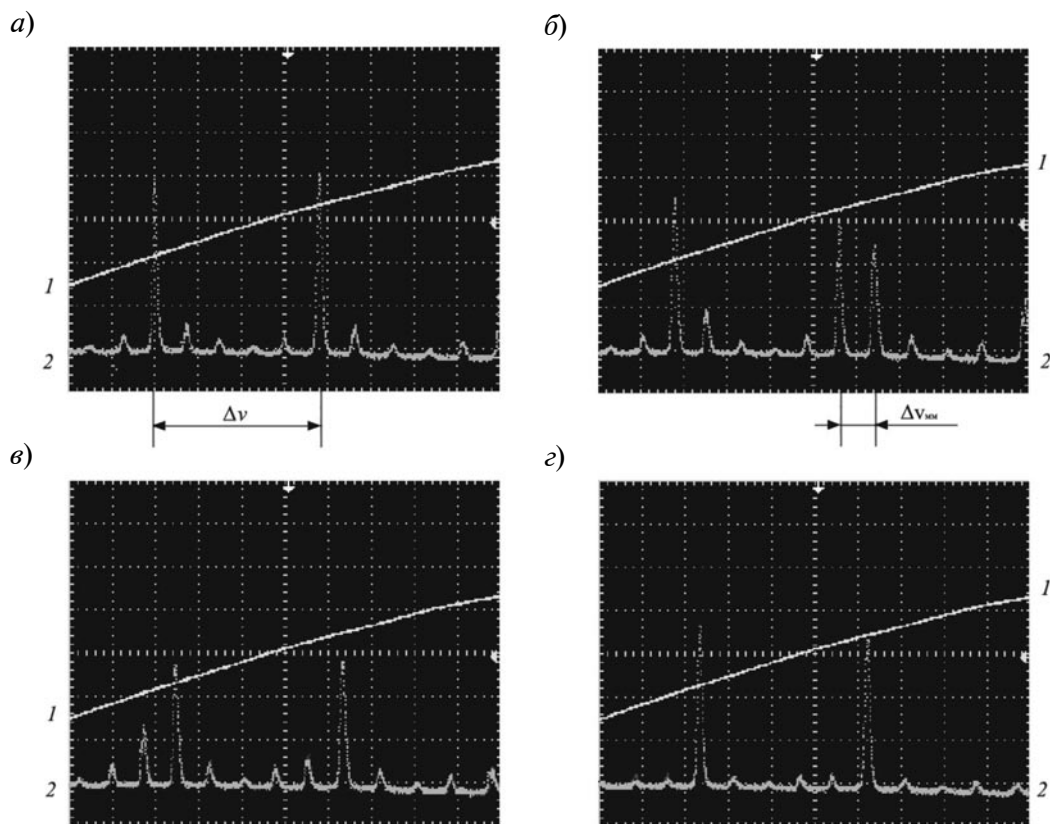


Рис. 2. Осциллограммы напряжений лазерного диода ADL-63054 при увеличении тока накачки от 28,1 мА (а) до 33,4 мА (г): 1 – напряжения, изменяющие базу интерферометра; 2 – спектры лазерного излучения; а, б – одночастотный вблизи срыва и многочастотный режимы генерации; в – восстановление одночастотного режима с началом доминирования соседней моды; г – установившийся одночастотный режим генерации на соседней моде.

Температура 19,3 °С, стабилизирована. $\Delta\nu$ – постоянная интерферометра, $\Delta\nu_{\text{мн}}$ – межмодовый интервал

чительно устанавливается многочастотный режим. Аналогично, но уже в обратном порядке, в новой зоне устанавливается одночастотный режим с генерацией соседней моды. На границе зон наблюдались области гистерезисных явлений. Их величина зависела от скорости перестройки тока.

На рис. 2 приведены осциллограммы, иллюстрирующие работу лазера в этом режиме.

Крутизна S_f зависимости перестройки частоты от тока в пределах зоны определялась с помощью интерферометра δ с большой базой и составляла приблизительно $(7 - 8)$ ГГц/мА. При этом частота генерации уменьшалась с ростом тока накачки.

Аналогичные явления наблюдались при изменении температуры лазера (температура термостата), но при постоянном токе накачки. При этом также имелись интер-

валы температур (температурные зоны) величиной $(0,6 - 0,9)^\circ\text{C}$, в пределах которых существовал устойчивый одночастотный режим. Между указанными зонами возникал многочастотный режим. При непрерывном изменении температуры его вновь сменял одночастотный режим. На границах зон наблюдались гистерезисные явления. Их величина зависела от скорости изменения температуры.

На рис. 3 приведены осциллограммы сигналов с фотоприемника 10 (см. рис. 1), иллюстрирующие последовательную смену режимов генерации с изменением температуры при постоянном токе накачки. На них хорошо видно, особенно при сопоставлении с разворачивающим напряжением на развертке 1 , что после возврата к одночастотному режиму генерация происходит уже на другой, ближайшей к первоначальной, моде резонатора.

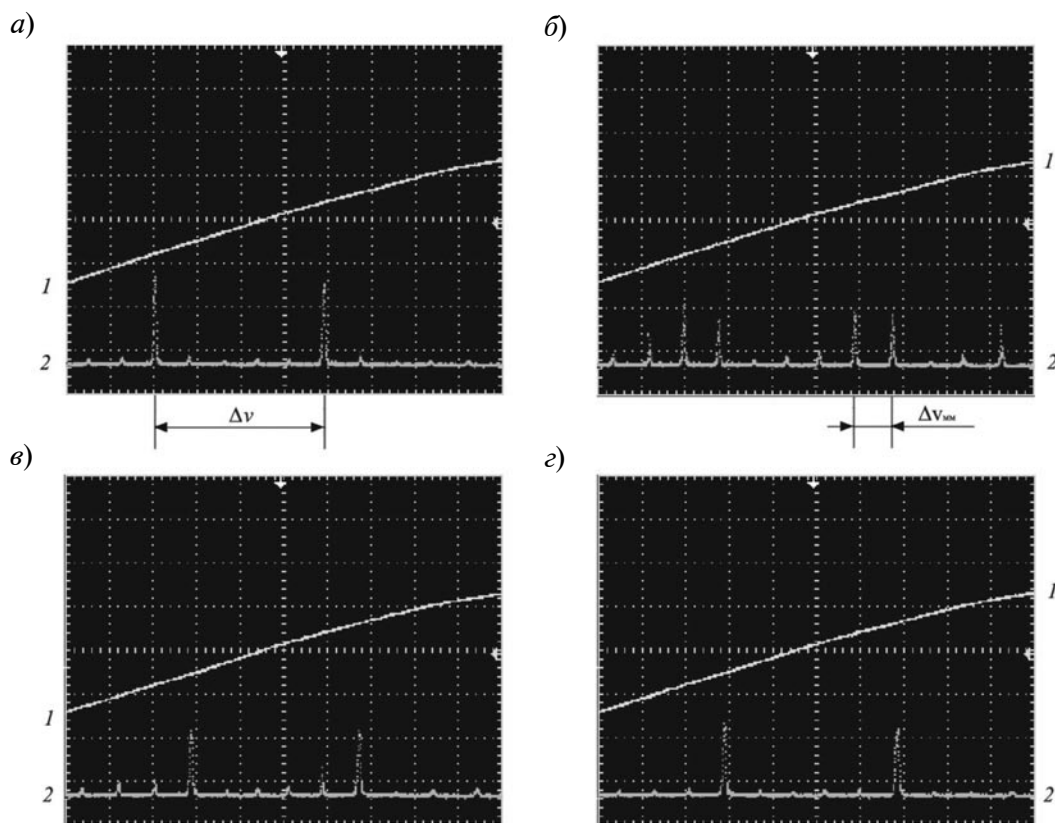


Рис. 3. Осциллограммы напряжений лазерного диода ADL-65055 при увеличении температуры лазера от $23,9^\circ\text{C}$ (а) до $25,0^\circ\text{C}$ (г) (ток накачки 28 мА, стабилизирован). Прикладываемые напряжения (1), спектры лазерного излучения (2), а также характер смены режимов работы аналогичны приведенным на рис. 2

Крутизна S_T зависимости перестройки частоты от температуры в пределах зоны существования одночастотного режима определялась с помощью интерферометра 7 (см. рис. 1) с большой базой и составляла примерно 29 ГГц/°С. При этом частота генерации уменьшалась с ростом температуры.

Было проведено также измерение средней крутизны S перестроенной характеристики лазера от температуры при постоянном токе. Она измерялась с использованием монохроматора МДР-2, без учета наличия или отсутствия одночастотного режима, и составила для исследуемых лазеров величину (0,2 – 0,3) нм/°С. Длина волны росла с ростом температуры.

Представленную картину существования и смены одночастотного режима можно дополнить следующими моментами.

Находясь в пределах одной зоны существования одночастотного режима, можно путем варьирования температуры и тока накачки приближаться к границам зоны, но не выходить из нее. Увеличение температуры можно «скомпенсировать» уменьшением тока и наоборот. Отсюда следует важный практический вывод, что можно получать одночастотный режим (правда, с разной мощностью) практически при любых значениях тока, но при разных температурах.

Закономерность перехода из одной зоны существования одночастотного режима в другую с изменением моды на ближайшую выполняется не всегда. Наблюдались перескоки частоты через одну и даже через две моды, но в ту же сторону, куда происходило плавное смещение частоты с изменением тока или напряжения. Вышеизложенное в целом характерно и для 10-милливаттных лазеров. Для них, по сравнению с 5-милливаттными лазерами, смена зон происходила менее определенно. Устойчивой генерации на ближайшей к генерируемой моде часто не наблюдалось. Соответственно, и количество наблюдаемых зон оказывалось меньшим.

Вблизи порога, то есть при низких уровнях генерации, одночастотный режим был обычно неустойчивым.

Стоит также отметить устойчивость и воспроизводимость одночастотного режима после выключения и последующего включения лазера с прежними значениями рабочего тока и температуры.

Поскольку отмеченные явления наблюдались для всех исследованных лазеров, можно считать одинаковым физический «механизм», лежащий в их основе.

Не останавливаясь подробно на обсуждении полученных результатов, важно отметить следующее.

Ввиду того, что генерация не прекращается со сменой режимов и усиление превышает порог для нескольких мод во всем диапазоне токов (температур), можно считать, что тот или иной режим возникает в результате конкурирующих процессов. Это подтверждается и наличием гистерезисных явлений вблизи границ зон, и визуально наблюдаемым установлением режимов, и самым наличием области многочастотного режима, пока преимущество одной из мод не станет достаточным.

Одночастотный режим может стать более выгодным, например, при однородном съеме инверсной заселенности за счет конкуренции мод вблизи зеркал резонатора при небольшом превышении усиления генерируемой моды над остальными. Другими словами, в этих условиях преимущество оказывается у моды с большим усилением, которая подавляет остальные.

Смещение максимума кривой усиления по частоте приводит к нарушению условий конкуренции мод и разрушению одночастотного режима. Оно происходит вследствие изменения температуры активной среды как при перестройке температуры термостата, так и при изменении тока накачки, который непосредственно влияет на температуру области генерации. Об этом свидетельствует одинаковый результат их воздействия на область существования режима. Рост температуры ведет к увеличению длины волны излучения. Причиной такого влияния температуры на положение максимума усиления является уменьшение ширины запрещенной зоны с ее ростом. Сдвиг максимума усиления характеризуется крутизной S .



Наличие факторов, влияющих на конкуренцию мод, будет оказывать влияние и на возможность существования одночастотного режима.

Частота генерируемой моды изменяется в результате изменения оптической длины резонатора. Последняя растет при повышении температуры, что должно при генерации одной продольной моды приводить к понижению частоты генерации. Скорость изменения частоты в одночастотном режиме определяется величинами крутизны S_l и S_r .

Еще одной характеристикой, важной для практики, является длина временной когерентности, определяющая пространственную базу, на которой можно проводить интерференционные измерения.

Как известно, оценку длины когерентности l можно получить из соотношения

$$l = c / \Delta \nu_{\text{изл}},$$

где $\Delta \nu_{\text{изл}}$ — ширина спектра излучения.

Оценку можно также получить экспериментально, путем прямых интерференционных измерений. Поскольку измерения спектра с помощью интерферометра всегда включают аппаратную функцию прибора, а оценки оставляют открытым вопрос о характеристиках получаемой интерференционной картины, представлялось более корректным провести прямые наблюдения интерференции пучков, полученных из выходного излучения лазера по схеме Маха — Цендера, при разной пространственной задержке. Предварительно проверялась поляризация излучения; оно было линейно поляризованным.

Эксперименты по наблюдению интерференции пучков на выходе интерферометра Маха — Цендера показали, что в диапазоне задержек до 3 м (возможности эксперимен-

та) наблюдается достаточно контрастная интерференционная картина. Это позволяет оценить ширину спектра $\Delta \nu_{\text{изл}}$ исследованных лазеров на уровне 100 МГц.

С такими источниками излучения можно уверенно проводить измерения, по крайней мере в тех задачах, где требуется регистрировать изменение разности хода пучков по числу наблюдаемых интерференционных максимумов.

Таким образом, проведенные эксперименты показали, что все исследованные образцы промышленно выпускаемых лазерных диодов позволяют осуществлять устойчивый и воспроизводимый одночастотный режим работы. Выявленные общие закономерности реализации одночастотного режима исследованных лазеров приводят к выводу о едином для всех лазеров физическом «механизме», лежащем в основе его существования. По-видимому, это справедливо и для других современных лазерных диодов, в том числе с большей выходной мощностью.

В ходе экспериментов получены оценочные значения ряда выходных характеристик лазерного излучения, важные для практического использования лазера, работающего в одночастотном режиме.

Дополнительно следует уточнить, что полученные данные не дают однозначного ответа на вопрос, будет или нет тот или иной лазер работать в одночастотном режиме. Если неизвестно, может ли лазер в нем работать, то лазер надо проверять на наличие такой возможности. Можно лишь утверждать, что если одночастотный режим есть, то особенности его реализации и характеристики будут, скорее всего, аналогичны описанным выше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фриман, Р. Волоконно-оптические системы связи [Текст] / Р. Фриман. — Пер. с англ., 3-е, дополненное, издание. — М.: Техносфера, 2006. — 496 с. — ISBN 5-94836-010-5. — С. 95–96, 113–117.

2. Дураев, В.П. Полупроводниковые лазеры с волоконной брэгговской решеткой и узким спектром генерации на длинах волн 1530 —

1560 нм [Текст] / В.П. Дураев, Е.Т. Неделин, Т.П. Недобывайло [и др.] // Квантовая электроника. — 2001. — Т. 31. — № 6. — С. 529–530.

3. DL-100 Series — Tunable Diode Lasers [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.toptica.com — DL-100 Series.

4. Риле, Ф. Стандарты частоты. Принципы и приложения [Текст] / Ф. Риле. — Пер. с англ.

— М.: Физматлит, 2009. — 512с. — ISBN 978-5-9221-1096-9. — С. 282–292.

5. **Соболев, В.С.** Использование режима обратной связи для оценки крутизны модуляционной характеристики полупроводниковых лазеров [Текст] / В.С. Соболев, Е.Н. Ут-

кин // Письма в ЖТФ. — 2009. — Т. 35. — Вып. 7. — С. 28–34.

6. Hitachi Laser Diodes [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.thorlabs.com — Products Home — Light — Coherent Sources — Laser Diodes — Visible Laser Diodes.

ДВОРЦОВ Денис Валерьевич — аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ПАРФЕНОВ Владимир Александрович — кандидат технических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского политехнического университета.

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



УДК 539.194

*С.В. Ермак, П.В. Зимницкий, Р.В. Смолин, В.В. Семенов***ПРЕДЕЛЬНАЯ РАЗРЕШАЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ
САМОГЕНЕРИРУЮЩИХ МАГНИТОМЕТРОВ НА ПАРАХ
ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С ЛАЗЕРНОЙ НАКАЧКОЙ***S.V. Ermak, P.V. Zimnitsky, R.V. Smolin, V.V. Semenov*St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia**EXTREME RESOLUTION OF LASER PUMPED ALKALINE
VAPOR SELF-OSCILLATING MAGNETOMETERS**

Рассмотрены характеристики самогенерирующего магнитометра с лазерной оптической накачкой щелочных паров в режиме насыщения атомов рабочего вещества. На основе анализа стохастических уравнений получены выражения для естественной и технической ширины линии колебаний самогенерирующего магнитометра, определяющие его разрешающую способность. Полученные зависимости сравниваются с характеристиками самогенерирующего аналога в режиме ограничения колебаний за счет нелинейности усилителя в цепи обратной связи.

САМОГЕНЕРИРУЮЩИЙ МАГНИТОМЕТР. ДВОЙНОЙ РАДИООПТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС. СПИНОВЫЙ ГЕНЕРАТОР. ЛАЗЕРНАЯ ОПТИЧЕСКАЯ НАКАЧКА.

The results of analytic study of optical pumped spin generator with alkaline vapors in saturation mode are presented. According to analysis of stochastic equations for amplitude and frequency fluctuations we have obtained equations for natural and technical line width which determine resolution of spin generator. Resulting dependences are compared with the same ones for spin generator where the mechanism of amplitude limiting is based on nonlinearity of the amplifier feedback.

SELF-OSCILLATING MAGNETOMETER. RADIO-OPTICAL RESONANCE. SPIN GENERATOR. LASER OPTICAL PUMPING.

Спиновые генераторы с оптической накачкой являются в настоящее время одним из наиболее распространенных вариантов квантовых самогенерирующих магнитометров, используемых в различных прикладных и фундаментальных задачах благодаря уникальным прецизионным характеристикам в сочетании с высокими показателями простоты и надежности при эксплуатации [1]. До недавнего времени в таких устройствах использовались ламповые источники накачки, где ресурс обеспечения требуемых характеристик по стабильности и воспроизводимости показаний измерительного устройства в значительной мере себя исчерпал, особенно для малогабаритных конструкций магнитометров. В этой свя-

зи в последние годы наметился интерес перехода к лазерным источникам накачки, имеющих достоинства простоты управления спектрального состава и высокого коэффициента полезного действия преобразования энергии [2, 3]. Интерес к таким источникам вызван возможностью улучшения массогабаритных параметров квантовых магнитометров без потери их вариационной чувствительности и долговременной стабильности. Эти характеристики самогенерирующего магнитометра определяются спектром генерируемых частот в окрестности резонансного значения, однозначно связанного функциональной зависимостью с внешним магнитным полем. Вследствие влияния различного рода флуктуаций в схе-

ме самогенерирующего устройства (в частности, тепловых и дробовых шумов приемного фотодетектора, дрейфа параметров рабочей камеры поглощения и спектрального источника накачки и т. п.), указанный спектр формирует так называемую активную ширину линии, которая определяет предельные значения как вариационной чувствительности, так и зависящее от времени среднеквадратичное двухвыборочное отклонение частоты магнитометра (дисперсию Аллана) [4]. В общепринятой терминологии указанные флуктуации принято разделять на естественные шумы, связанные с принципиально неустранимыми тепловыми и дробовыми вариациями фототока приемного фотодетектора, и технические шумы, обусловленные фликкерным дрейфом параметров в цепи обратной связи самогенерирующего устройства.

Ширина линии генерации спинового генератора – магнитометра является основным параметром, определяющим разрешающую способность устройства, а следовательно и его прикладную ценность. В своем составе подобные устройства содержат некий нелинейный элемент, функциональное предназначение которого состоит в ограничении амплитуды колебаний. В работе [5] рассмотрен механизм ограничения колебаний за счет нелинейности вольтамперной характеристики цепи обратной связи (режим НВХ). При этом подразумевается значительное превышение скорости тепловой релаксации над скоростью индуцированных переходов, вызванных действием резонансного радиополя. Однако подобный режим не соответствует оптимальному, поскольку при таком дисбалансе скоростей переходов не достигается максимума отношения сигнал/шум, определяющего предельную чувствительность магнитометра [6].

В настоящей работе приводятся результаты аналитического исследования характеристик спинового генератора с лазерной оптической накачкой, в котором механизм ограничения колебаний связан с сугубо квантовым явлением – насыщением спиновой системы атомов рабочего вещества магнитометра под действием резонансного радиополя, индуцирующего магнито-

дипольные переходы между магнитными подуровнями основного состояния атомов (режим НСС). При реализации такого режима обеспечивается максимальная вариационная чувствительность квантового магнитометра, поскольку при том же уровне засветки приемного фотодетектора в режиме насыщения наблюдается максимальное отношение сигнал/шум. Как следует из работы [1], при наличии единственного источника шумов – дробового тока и при временах измерения t , значительно превышающих время поперечной релаксации T_2 , максимальная вариационная чувствительность магнитометра определяется следующим выражением:

$$\Delta B_{\min} = \frac{2S_N}{(2\pi t)^{\frac{1}{2}} \gamma S T_2}, \quad (1)$$

где S_N – спектральная плотность дробового шума, S – максимальная амплитуда регистрируемого сигнала, γ – гиромагнитное отношение атомов рабочего вещества.

Следует однако отметить, что оценка параметра $\Delta B_{\min}$ по формуле (1), как правило, носит дидактический характер, поскольку в реальных условиях эксплуатации магнитометра, при значительных временах измерений t , метрологические характеристики измерительного устройства определяются так называемыми техническими шумами его элементов. Последние связаны с медленным дрейфом их параметров (изменение спектрального состава и интенсивности света накачки, температурные вариации рабочей камеры поглощения и т. п.). При этом существует некое предельное значение времени измерения t , при котором девиация $\Delta B_{\min}$ достигает так называемого «фликкерного потолка», и в дальнейшем начинает расти по закону t^n , где показатель степени обычно варьируется в границах от 0 до 3. Подобная ситуация характерна для всех типов квантовых устройств, в том числе и квантовых стандартов частоты, где аллановская девиация номинального значения частоты начинает расти со временем при превышении времени измерения на величину порядка сотен секунд.



Особенностью использования лазеров в качестве источника накачки в самогенерирующих квантовых устройствах на парах щелочных металлов является селективный характер воздействия поля накачки на одну из двух групп атомов, принадлежащих разным значениям полного момента: F и $F + 1$. При использовании циркулярно-поляризованного света, в результате такого воздействия одновременно происходят оптическая ориентация атомов на резонансном оптическом переходе и перекачка атомов в состояние, которое выступает в роли накопителя атомов, не взаимодействующих непосредственно с резонансным излучением. При индуцировании в такой среде низкочастотного радиооптического резонанса его интенсивность будет пропорциональна разности населенностей соответствующих магнитных подуровней, число которых определяется величиной ядерного спина щелочного атома и номером электродипольного перехода. В условиях неразрешенного радиочастотного спектра поглощения основного состояния многоуровневая атомная система щелочных атомов может быть аппроксимирована простой двухуровневой моделью. Такая модель характеризуется эффективными временами продольной и поперечной релаксации, где относительный вклад темпа накачки зависит от целого ряда факторов. Последние связаны как с параметрами источника накачки, так и со способом сохранения поляризации атомов рабочего вещества либо путем применения камер поглощения с покрытием, либо путем использования буферного инертного газа [7]. Для построения указанной модели необходимо определить функциональную зависимость от темпа накачки диагональных элементов матрицы плотности, рассчитанных в балансном приближении, учитывающем только процессы релаксации и оптической накачки. В качестве примера на рисунке представлены подобные зависимости разности диагональных элементов матрицы плотности (определяющих степень поляризации атомов рабочего вещества) от относительного темпа лазерной оптической накачки для атомов щелочного металла с

ядерным спином $3/2$. Приведены зависимости для ячеек с покрытием и для ячеек с буферным газом. Характер представленных зависимостей позволяет аппроксимировать их простой формулой

$$\sigma_{ii} - \sigma_{jj} = E_1 \Gamma^* (1 + E_2 \Gamma^*)^{-1} \exp(-\Gamma^* \lambda), \quad (2)$$

где E_1 — коэффициент, пропорциональный статистическому весу сверхтонкого состояния; E_2 — коэффициент, показывающий относительный вклад темпа накачки в скорость продольной релаксации; λ — коэффициент, учитывающий присутствие резервуара оттока атомов в условиях сверхтонкой оптической накачки; Γ^* — отношение скорости накачки к скорости поперечной релаксации.

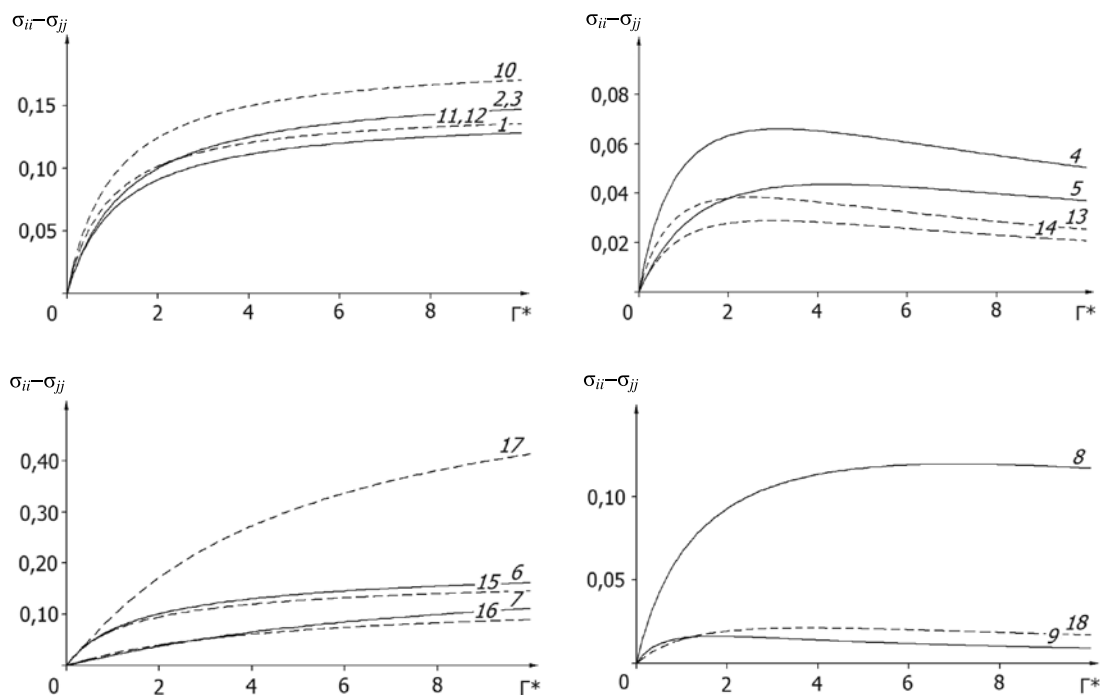
В таблице приведены указанные коэффициенты, которые вычислены при аппроксимации зависимостей, представленных на рисунке (с помощью выражения (2)).

Анализ представленных данных позволяет сделать следующие заключения:

При равных интегральных интенсивностях света накачки лазерного источника наибольшая степень поляризации достигается на длинноволновой компоненте электродипольного перехода как в ячейках с покрытием, так и с буферным газом вследствие превалирования статистического веса магнитных подуровней сверхтонкой структуры с большим значением полного момента атома F .

При использовании двухуровневой модели оптически ориентированных атомов для одного из сверхтонких состояний паров щелочного металла с ядерным спином $3/2$ в условиях селективной лазерной накачки, вклад темпа накачки (коэффициент E_2 , определенной с точностью 0,05) в скорость продольной релаксации по отношению к поперечной варьируется в диапазоне 0,2 — 1,0 вне зависимости от степени разрешения спектра поглощения низкочастотного радиооптического резонанса на магнитодипольных переходах.

Для электродипольных переходов, сопровождающихся увеличением полного момента атома на единицу ($F \leftrightarrow F+1$), характер зависимостей разности диагональных элементов матрицы плотности



Расчетные зависимости разности диагональных элементов матрицы плотности от относительного темпа лазерной накачки для атомов щелочного металла с ядерным спином 3/2.

Использованы два способа сохранения поляризации атомов рабочего вещества: ячейки с покрытием (пунктир) и с буферным газом (сплошные линии)

Результаты аппроксимации зависимостей, приведенных на рисунке, по двухуровневой модели

Электродипольный переход $F \rightarrow F^*$	$\sigma_{ii} - \sigma_{jj}$	Номера кривых на рис.	E_1		E_2		λ	
			БГ	П	БГ	П	БГ	П
$1 \rightarrow 0$	$\sigma_{11} - \sigma_{33}$	1, 10	0,34	0,50	0,87	0,98	0	0
$1 \rightarrow 1$	$\sigma_{11} - \sigma_{33}$ $\sigma_{11} - \sigma_{22}$	2, 11 3, 12	0,34	0,44	0,75	1,10	0	0
$1 \rightarrow 2$	$\sigma_{33} - \sigma_{11}$ $\sigma_{33} - \sigma_{22}$	4, 13 5, 14	0,20 0,09	0,13 0,08	0,41 0,17	0,45 0,35	0,31 0,34	0,34
$2 \rightarrow 1$	$\sigma_{88} - \sigma_{44}$ $\sigma_{77} - \sigma_{66}$ $\sigma_{77} - \sigma_{88}$	6, 15 7 16	0,28 0,07 —	0,30 — 0,08	0,53 0,08 —	0,65 — 0,23	— 0	— 0
$2 \rightarrow 3$	$\sigma_{88} - \sigma_{44}$ $\sigma_{55} - \sigma_{44}$ $\sigma_{44} - \sigma_{55}$	8, 17 9 18	0,22 0,08 —	0,33 — 0,05	0,22 0,88 —	0,19 — 0,20	0,25 0,34 —	0 — 0,35

Обозначения: $\sigma_{ii} - \sigma_{jj}$ — разности диагональных элементов матрицы плотности для электродипольного перехода; E_1, E_2, λ — коэффициенты в формуле (2); БГ, П — камеры поглощения с буферным газом и покрытием, соответственно; нечетные номера кривых относятся к БГ, четные — к П



(определяющих степень макроскопической намагниченности образца) от относительного темпа накачки Γ^* (отношения скоростей оптической и тепловой релаксации) принципиально отличается от подобных зависимостей для переходов $F \leftrightarrow F - 1$ и $F \leftrightarrow F$ наличием максимума, который обусловлен появлением состояний-ловушек, не взаимодействующих с оптическим полем в условиях селективной лазерной накачки. С ростом F этот максимум смещается в сторону больших значений Γ^* . Для электродипольных переходов $F \leftrightarrow F - 1$ и $F \leftrightarrow F$ разность диагональных элементов матрицы плотности монотонно возрастает с ростом Γ^* , стремясь к некоторому пределу, уровень которого зависит от номера электродипольного перехода и способа сохранения поляризации атомов рабочего вещества (ячейки с покрытием либо с буферным газом). Значение оптимального темпа накачки Γ_{opt}^* (соответствует максимальной поляризации атомов) на электродипольных переходах $F \leftrightarrow F - 1$ и $F \leftrightarrow F$ различно для камер поглощения с покрытием и с буферным газом: для последних Γ_{opt}^* в несколько раз выше сходного параметра для первых (при соответственно большей степени поляризации).

Для выяснения влияния технических шумов на динамику вариаций частоты самогенерирующих измерительных устройств необходим анализ уравнения колебаний спинового генератора, учитывающего как действие шумов в контуре обратной связи, так и механизм ограничения амплитуды колебаний. Согласно работе [5], такое уравнение в общем виде может быть представлено следующим образом:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = A \frac{dx}{dt} + Bx + Cx^3 + D, \quad (3)$$

где x — координата, характеризующая состояние спинового генератора; ω — собственная частота колебаний.

В рассматриваемом случае режима НСС коэффициенты уравнения (3) имеют вид:

$$A = \left(\frac{\gamma k M_0}{1 + (\gamma k R_0)^2 \tau_1 \tau_2} - \frac{2}{\tau_2} \right);$$

$$B = \frac{(\gamma k)^3 R_0^2 M_0 \tau_2}{1 + (\gamma k R_0)^2 \tau_1 \tau_2};$$

$$C = (\gamma k M_0)^2,$$

где k — коэффициент обратной связи, M_0 — равновесная намагниченность, пропорциональная разности диагональных элементов матрицы плотности; R_0 — стационарная амплитуда колебаний; τ_1, τ_2 — величины эффективного времени продольной и поперечной релаксации.

Влияние шумов в контуре спинового генератора учитывается коэффициентом D , имеющим следующий вид для случаев естественных и технических шумов соответственно:

$$\frac{2}{\omega^2 \tau_2} \left(\frac{d\delta(t)}{dt} + \frac{\delta(t)}{\tau_2} \right);$$

$$\frac{2}{\omega^2 \tau_2} \left(\frac{d\delta(t)}{dt} + \delta(t) \frac{dx}{dt} \right) + \frac{2\delta(t)x}{\omega^2 \tau_1 \tau_2},$$

где $\delta(t)$ — шумовой ток фотодетектора.

Последовательность решения уравнения (3) аналогична методике, рассмотренной в работах [5, 9], поэтому приведем лишь конечные результаты расчета стационарной амплитуды колебаний R_0 , регулярной поправки к частоте генерации $\Delta\omega$, скоростей затухания амплитудных и фазовых флуктуаций (соответственно p и q) и величину естественной и технической ширины линии автоколебаний квантового генератора, работающего в режиме НСС:

$$R_0 = (\gamma k)^{-1} \left(\frac{\gamma k M_0 \tau_2 - 2}{2 \tau_1 \tau_2} \right)^{\frac{1}{2}}; \quad (4)$$

$$\Delta\omega = -\frac{4 + 3M_0^2}{8\omega \tau_1 \tau_2} \gamma k; \quad (5)$$

$$p = \frac{4\gamma k \tau_1 R_0^2}{M_0 \tau_2}; \quad (6)$$

$$q = \gamma k R^2 \frac{16 + 3\gamma k \tau_2 M_0^3}{4\omega_0 M_0 \tau_2}. \quad (7)$$

Как следует из выражения (4), при значении $(\gamma k)_{\text{opt}} = 4/M_0 \tau_2$ амплитуда автоколебаний достигает максимума:

$$R_{0\max} = \frac{M_0}{4} \left(\frac{\tau_2}{\tau_1} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Естественная ширина линии, определяемая дробовыми шумами приемного фотодетектора, следует выражению:

$$\Delta\Omega = \frac{2\pi e I_0}{R_0^2 \tau_2^2} \left(1 + \frac{q^2}{p^2} \right) \approx \frac{2\pi e I_0}{R_0^2 \tau_2^2}, \quad (9)$$

где I_0 – постоянный ток фотодетектора, e – заряд электрона.

В случае действия технических шумов, учитывающих как амплитудные, так и фазовые флуктуации полезного сигнала и имеющих зависимость спектральной плотности мощности от частоты вида

$$S_{\delta_a} = \frac{A_\Phi}{2\pi\omega^2}, \quad (10)$$

техническая ширина линии определяется выражением

$$\Delta\omega_T = (\pi A_\Phi t)^2 (\tau_1^2 + \tau_2^2) (\omega \tau_2 \tau_1^3)^{-1}. \quad (11)$$

Для более общего случая фликкерных шумов (произвольного показателя степени в выражении (9)) получаются следующие выражения для технической ширины линии, в пренебрежении амплитудными флуктуациями.

При $0 < n < 1$

$$\Delta\omega_T = \frac{\pi(n+1)}{\Gamma\left(\frac{1}{n+1}\right)} \times \left\{ \frac{A_\Phi}{2\omega^2 \tau_1^2 \tau_2^2 \Gamma(n+2) \sin \frac{\pi(n+1)}{2}} \right\}^{\frac{1}{n+1}}. \quad (12)$$

При $1 < n \leq 2$

$$\Delta\omega_T = 2 \left\{ \frac{\pi A_\Phi t^{n-1}}{2\omega^2 \tau_1^2 \tau_2^2 \Gamma(n) \sin \frac{\pi(n-1)}{2}} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

При $2 \leq n < 3$

$$\Delta\omega_T = 2 \left\{ \frac{A_\Phi}{\omega^2 \tau_2^2} \left[\frac{\pi t^{n-1}}{2\tau_1^2 \Gamma(n) \sin \frac{\pi(n-1)}{2}} - \right. \right.$$

$$\left. - \Gamma(3-n) \sin \frac{\pi(n-2)}{2} t^{n-3} \right\}^{n-3}. \quad (14)$$

В варианте НСС, также как и в режиме НВХ [5], поправка к частоте генерации (5) обратно пропорциональна рабочей частоте и поперечному времени релаксации. Однако эта поправка получается меньшей приблизительно в меру отношения τ_1/τ_2 , независимо от коэффициента передачи, темпа накачки и вклада оптической накачки в скорость продольной релаксации. Поскольку поправка к частоте генерации определяет точность измерений магнитного поля, режим НСС оказывается более прецизионным по сравнению с режимом НВХ. При этом в режиме НСС естественная ширина линии спинового генератора становится более чем на порядок меньше, чем в варианте НВХ обратной связи, рассмотренном в работе [5].

Для численной оценки величины $\Delta\Omega$ по формуле (5) необходимо перейти к размерным значениям амплитуды генерации R_0 в долях тока засветки I_0 . Применительно к атомам щелочных металлов реальные значения параметров τ_2 и R_0 имеют порядок 0,01с и $0,01I_0$. Для тока засветки 10 мкА указанные параметры соответствуют естественной ширине линии на уровне 10^{-5} Гц. Представленная оценка по порядку величины близка к фликкерному потолку показаний парощелочных магнитометров, реализованных на изотопах рубидия с общей камерой поглощения за время измерения 100 с [1]. Превышение этого временного порога приводит к существенному увеличению аллановской девиации, связанному с действием технических шумов. Влияние последних на динамику спектра автоколебаний самогенерирующего устройства можно установить из анализа выражений (11) – (13). Так например, при $n \approx 1$ техническая ширина линии стремится к бесконечности, что позволяет сделать вывод о нестационарном характере фликкерных шумов с неограниченным ростом низкочастотных компонент. Это, в свою очередь, предполагает использование выражений (11) и (12) в пределах ограни-



ченного времени наблюдения и только в случае строгого соблюдения неравенства показателя n относительно единицы. С другой стороны, практика показывает, что реальные фликкерные процессы в квантовых устройствах имеют более выраженный нестационарный характер, чем это следует из зависимостей $\Delta\Omega(t)$ при $n \approx 1$. В этой связи представляет интерес сравнить, как влияет учет амплитудных флуктуаций на ширину спектральной линии в варианте с $n \approx 2$, путем сопоставления выражений (10) с (12) и (13). Нетрудно обнаружить, что отношение этих ширин равно

$$2^{-1/2} (\tau_1^2 + \tau_2^2) \tau_1^{-2},$$

т. е. в зависимости от соотношения эффективных времен поперечной и продольной релаксации учет амплитудных флуктуаций либо сужает, либо уширяет спектральную линию колебаний в соответствующее число раз. Подобную неоднозначность можно объяснить тем, что спектр колебаний, обладающий только флуктуациями амплитуды колебаний, как следует из работы [8], формирует монохроматическую линию мощности $R_0^2/2$, причем амплитудные флуктуации не «размывают» спектральную линию колебаний, а добавляют лишь пьедестал, форма которого совпадает с формой спектра амплитудных флуктуаций. При этом удельный вес вклада амплитудных и частотных флуктуаций в результирующую ширину линии определяется абсолютным значением амплитуды колебаний, величина которой напрямую зависит от соотношения констант продольной и поперечной релаксации. Из выражения (4) несложно установить, что при одинаковых темпах

накачки и коэффициентах передачи цепи обратной связи амплитуда колебаний тем больше, чем больше отношение τ_1/τ_2 . Таким образом, в случае, когда $\tau_1 \gg \tau_2$, учет амплитудных флуктуаций позволяет повысить степень монохроматичности спектральной линии автоколебаний и сужает ее в $2^{1/2}$ раз. При балансе же времен поперечной и продольной релаксации амплитуда колебаний меньше, чем в предыдущем случае, что немедленно приводит к уменьшению вклада амплитудных флуктуаций в динамику поведения спектральной линии и соответствующему ее уширению. В обоих случаях техническая ширина линии радикальным образом зависит от постоянных A_ϕ и n , значения которых можно определить только экспериментально, что представляет самостоятельный интерес для исследований долговременной стабильности квантовых устройств с оптической накачкой. Для кремниевых фотодетекторов экспериментальное значение постоянной A_ϕ имеет порядок величины 10^{-13} Гц [9]. Подстановка этого значения в формулу для технической ширины линии при $n \approx 2$ дает величину, близкую к оценкам аллановской девиации частоты за времена измерения в несколько сотен секунд при работе рубидиевого самогенерирующего магнитометра с рабочей частотой 10^4 Гц [10]. Полученные выражения для ширины линии самогенерирующих магнитометров дают возможность оценить их реальную разрешающую способность и спрогнозировать варианты улучшения этого параметра путем оптимизации режима ограничения автоколебаний в цепи обратной связи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Александров, Е.Б.** Современные радиооптические методы квантовой магнитометрии [Текст] / Е.Б. Александров, А.К. Вершовский // УФН. – 2009. – Т. 179. – № 6. – С. 605–637.
2. **Knappe, S.** Microfabricated atomic clocks and magnetometers [Text] / S. Knappe, P.D.D. Schwindt, V. Gerginov [et al.] // J. of Optics A: Pure and Applied Optics. – 2006. – Vol. 8. – P. S318–S322.
3. **Schwindt, P.D.D.** Self-oscillating Rb magnetometer using nonlinear magneto-optic rotation [Text] / P.D.D. Schwindt, L. Hollberg, J. Kitching // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76. – № 12. – P. 126103 (4p.).
4. **Риле, Ф.** Стандарты частоты. Принципы и приложения [Текст] / Ф. Риле: Пер. с англ. – М.: Физматлит, 2009. – 512 с.
5. **Житников, Р.А.** Влияние естественных и технических шумов на ширину линии спинового генератора с оптической накачкой [Текст] / Р.А. Житников, П.А. Ключкин, В.В. Семенов,

Г.В. Фомин // ЖТФ. –1973. – Т. XLIII. – № 9. – С. 1965–1972.

6. **Вершовский, А.К.** Оптимизация фактора качества магнитного МХ резонанса в условиях оптической накачки [Текст] / А.К.Вершовский, А.С. Пазгалев // ЖТФ. – 2008. – Т. 78. – Вып. 5. – С. 116–124.

7. **Семенов, В.В.** Оптимизация сигнала магнитного резонанса в условиях неразрешенного радиочастотного спектра щелочных атомов [Текст] / В.В. Семенов // ЖПС. – 1997. – Т. 64. – № 1. – С. 71–75.

8. **Малахов, А.Н.** Флуктуации в автоколебательных системах [Текст] / А.Н. Малахов. –М:

Наука, 1968. – 660 с.

9. **Житников, Р.А.** Влияние технических шумов на работу системы из двух спиновых генераторов с оптической накачкой атомов ^{133}Cs и ^3He , помещенных в одну ячейку [Текст] / Р.А. Житников, В.В. Семенов, П.А. Ключкин // ЖТФ. – 1974. – Т. XLIV. – С. 873–875.

10. **Александров, Е.Б.** Экспериментальная демонстрация разрешающей способности квантового магнитометра с оптической накачкой [Текст] / Е.Б. Александров, М.В. Балабас, А.К. Вершовский, А.С. Пазгалев // ЖТФ. – 2004. – Т. 74. – Вып. 6. – С. 118–122.

ЕРМАК Сергей Викторович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ЗИМНИЦКИЙ Павел Валерьевич — аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

СМОЛИН Роман Владимирович — аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yarosvet@bk.ru

СЕМЕНОВ Владимир Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

УДК 537.533.2

В.Б. Бондаренко, Н.М. Гнучев, С.Н. Давыдов

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПОЛЕВОЙ ЭМИССИИ ТЕСТОВОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА

V.B. Bondarenko, N.M. Gnuchev, S.N. Davydov

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

ENERGY DISTRIBUTION OF FIELD-EMITTED ELECTRONS FROM TEST METAL SAMPLE

Аналитически исследовано влияние температуры и электрического поля на характер энергетического распределения электронов при полевой эмиссии из металлического острия. Выявленные изменения распределения могут служить метрологическим стандартом при настройке спектрометров с дисперсионными энергоанализаторами высокого разрешения.

ПОЛЕВАЯ ЭМИССИЯ. АНАЛИЗАТОРЫ. ТЕСТОВЫЕ ОБРАЗЦЫ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ.

An analytical investigation of the influence of temperature and electric field rise on the energy distribution of the field-emitted electrons from metal tip has been made. Changes detected in the distribution may serve as a metrological standard for the adjustment of spectrometers with high-resolution dispersive energy analyzers.

FIELD EMISSION. ANALYZERS. TEST SAMPLES. ELECTRON ENERGY DISTRIBUTION. TEMPERATURE EFFECTS.

В настоящее время хорошо известна способность наноструктурированных плоских образцов, в основном из нанопористого углерода, эмитировать в холодном состоянии электроны при напряженностях тянущего поля 500 – 1500 В/мм [1 – 4]. Поскольку эти напряженности на порядки величин меньше значений, характерных для обычной автоэлектронной эмиссии, низковольтная холодная эмиссия создает, с одной стороны, определенные перспективы в вакуумной электронике и микроэлектронике, а с другой стороны, сама по себе заслуживает обстоятельного исследования как интересное физическое явление.

Одним из наиболее непосредственных методов изучения физической природы низковольтной полевой эмиссии является анализ энергетических спектров эмитированных электронов.

С учетом того, что естественный тепловой разброс энергии электронов в твердом теле при комнатной температуре составляет порядка $kT \approx 25$ мэВ (k – постоянная Больцмана, T – температура), абсолютное разрешение спектрометра по энергии ΔE не должно превышать 50 – 100 мэВ. Поверхность образцов нанопористого углерода не всегда гладкая, поэтому зазор между ней и первым (приемным) электродом спектрометра

составляет около миллиметра. Если среднее значение напряженности поля равно 1 кВ/мм, то во входную диафрагму спектрометра электроны влетят с энергией $E = 1$ кэВ. В итоге его разрешающая способность должна составить $E/\Delta E = 1 - 2 \cdot 10^4$.

На основе электростатического энергоанализатора с плоскостью симметрии [5] был сконструирован и изготовлен спектрометр [6], в котором, благодаря сменным диафрагмам и большой дисперсии анализатора, указанная разрешающая способность достижима. В спектрах некоторых образцов нанопористого углерода наблюдалось два-три пика, причем они отстояли друг от друга на сотни миллиэлектронвольт. Чтобы проверить, не является ли наличие нескольких пиков следствием недостаточной наладки нового спектрометра для проведения тонких экспериментов, необходимо получить кривые энергетического распределения электронов для какого-либо тестового образца. В роли такого объекта может выступить острие из вольфрама, легко изготавливаемое в лабораторных условиях.

В тестовом эксперименте предусматривается выявление изменений формы пика энергетического распределения автоэлектронов при различных внешних воздействиях на образец (температура, тянущее электрическое поле) и сравнение этих изменений с заранее известными. Для получения эталонных данных было выполнено предварительное теоретическое исследование влияния указанных факторов на форму и положение пика энергетического распределения электронов.

В качестве исходной модели металла был выбран потенциальный «ящик» с резкими стенками конечной высоты, в котором имеется квазинепрерывный спектр электронных состояний, заполненный до уровня Ферми E_F . Глубина потенциального ящика $U_0 = E_F + A$, где A – работа выхода электрона.

Для того чтобы оценить естественную ширину и форму пика энергетического распределения электронов, эмитируемых из вольфрамового острия, выразим плотность тока через потенциальный барьер на

поверхности образца в квазиклассическом приближении:

$$j = \frac{e}{m} \int p_{\perp} \cdot D(p_{\perp}) dn(p, \theta), \quad (1)$$

где $p_{\perp} = p \cos \theta$ – составляющая импульса электрона, перпендикулярная поверхности; m – масса электрона; $D(p_{\perp})$ – прозрачность потенциального барьера.

При параболическом законе дисперсии $E(p) = p^2 / 2m$ дифференциал количества электронов в единице объема имеет вид:

$$dn(p, \theta) = f(p) \frac{p^2 dp \cdot \sin \theta d\theta}{2 \cdot \pi^2 \hbar^3}, \quad (2)$$

где

$$f(p) = \left(\exp \frac{p^2 / 2m - E_F}{kT} + 1 \right)^{-1} \quad (3)$$

– функция Ферми – Дирака.

Прозрачность барьера оценивается квазиклассически [7]:

$$D(p_{\perp}) \approx \exp \left(- \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_R^{r_0} \sqrt{U(r) - \frac{p_{\perp}^2}{2m}} dr \right), \quad (4)$$

где R – радиус полусферической вершины вольфрамового острия; r_0 – расстояние от центра указанной вершины до точки прохождения сквозь барьер.

Для линейной асимптотики распределения электростатического потенциала вблизи сферической поверхности при поданном внешнем напряжении V , т. е.

$$U(r) \approx U_0 + eV \left(1 - \frac{r}{R} \right), \quad (5)$$

интеграл в выражении (4) вычисляется аналитически [7]. Таким образом,

$$D(p_{\perp}) = \exp \left[- \frac{4\sqrt{2m} \cdot R}{3\hbar eV} \left(E_F + A - \frac{p_{\perp}^2}{2m} \right)^{3/2} \right]. \quad (6)$$

После подстановки дифференциала (2) и формулы (6) в выражение (1) и интегрирования по возможным направлениям падения электрона на полусферическую границу раздела, которые определяются углом θ , для плотности эмиссионного тока формально имеем:

$$j = \int j_E dE, \quad (7)$$

где

$$j_E = \frac{em}{3\pi^2\hbar^3} \cdot \left(\frac{3\hbar eV}{4\sqrt{2m} \cdot R} \right)^{2/3} \times$$

$$\times \left[\Gamma\left(\frac{2}{3}, \alpha(1-\beta)^{3/2}\right) - \Gamma\left(\frac{2}{3}, \alpha\right) \right] \times$$

$$\times \left(\exp \frac{E - E_F}{kT} + 1 \right)^{-1},$$

$$\alpha = \frac{4\sqrt{2m}R}{3\hbar eV} (E_F + A)^{3/2}, \quad \beta = \frac{E}{E_F + A};$$

$$\Gamma\left(\frac{2}{3}, z\right) = \int_z^\infty t^{-1/3} \exp(-t) dt$$

– неполная гамма-функция аргумента $2/3$.

Вид и место расположения спектра $j_E = j_E(E)$ на оси энергий определенным образом зависит от таких параметров, как

температура T образца, радиус острия R и приложенное поле E .

На рис. 1 показано, как должен меняться спектр при повышении температуры от 300 до 1500 К. В расчетах было принято, что работа выхода исследуемого образца острия $A = 4,54$ эВ, что соответствует работе выхода вольфрама. В рамках используемой модели наблюдаются следующие изменения спектра эмитируемых электронов. При фиксированном значении приложенного поля в указанном температурном диапазоне абсолютное значение тока растет приблизительно на два порядка за счет перераспределения электронов в сторону больших энергий. Изменение функции Ферми – Дирака приводит к тому, что распределение эмитирующих электронов

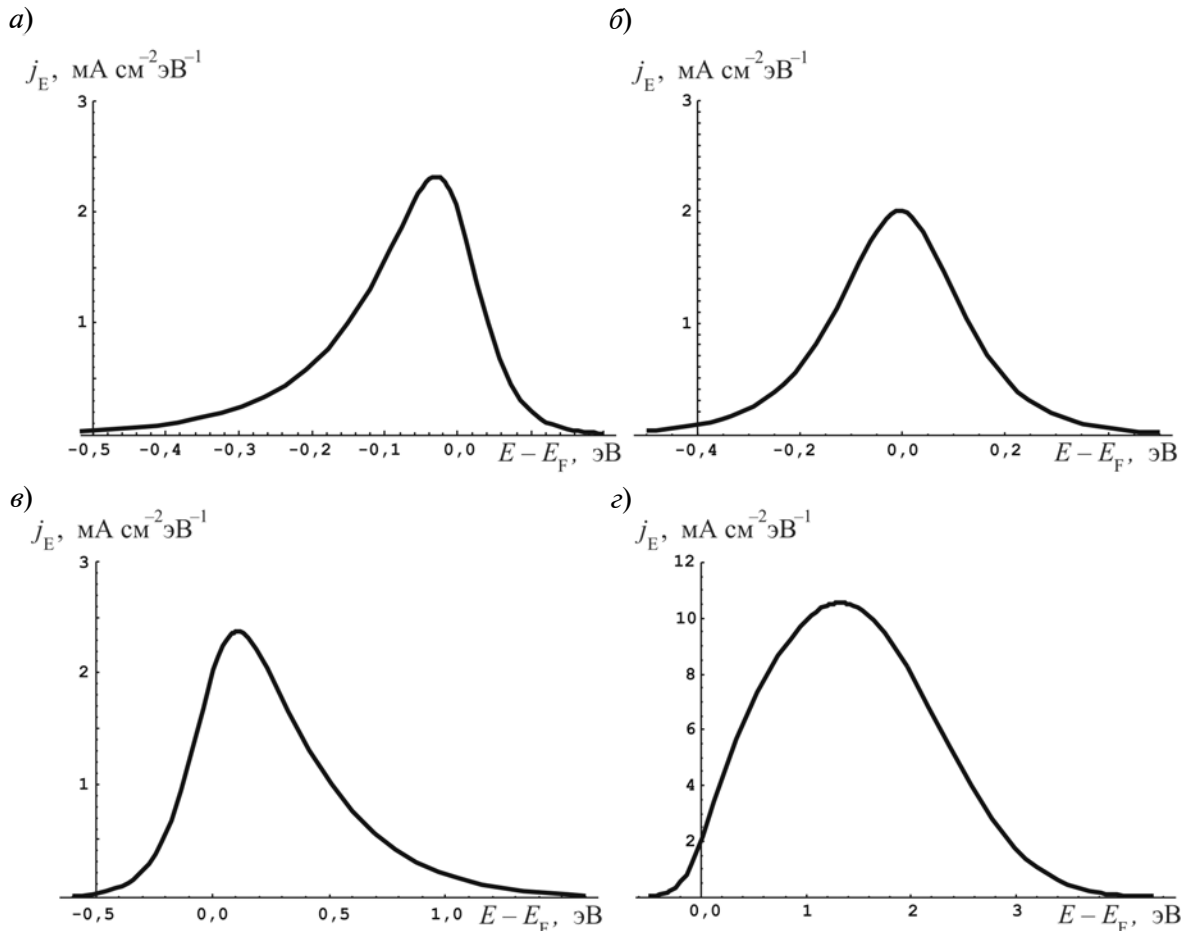


Рис. 1. Расчетные спектральные распределения плотности автоэмиссионного тока вольфрамового острия ($R = 0,25 \text{ мкм}$) при различных температурах T , К: 300 (а), 600 (б), 1000 (в), 1500 (г); напряжение $V = 600 \text{ В}$, энергия электронов отсчитывалась от дна потенциального ящика

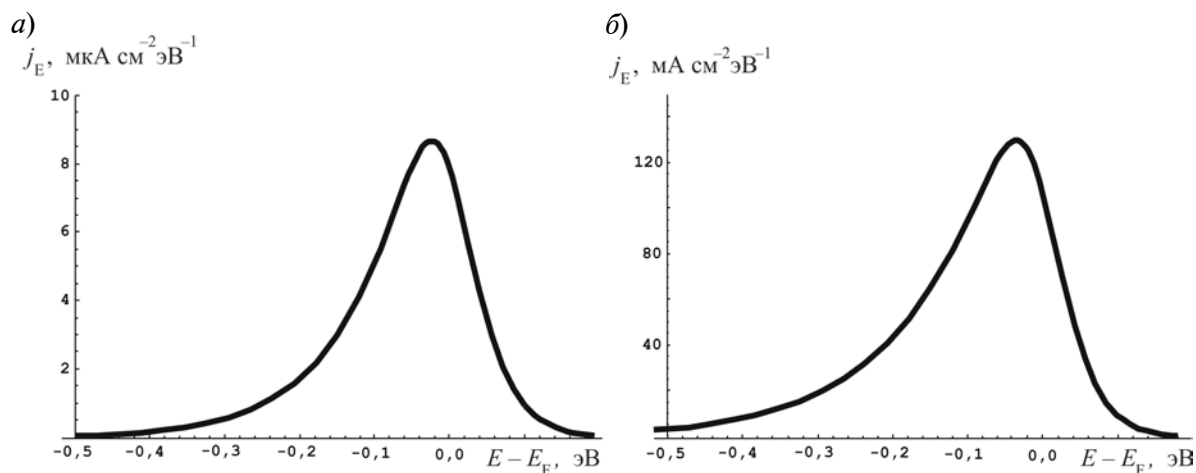


Рис. 2. Расчетные спектральные распределения плотности автоэмиссионного тока вольфрамового острия ($R = 0,25$ мкм) при различных значениях тянущего напряжения V , В: 500 (а) и 700 (б); температура $T = 300$ К

уширяется, а его максимум сдвигается от уровня Ферми в сторону больших энергий на 1,5 эВ. Интересно появление при 1500 К более протяженной выпуклости на восходящем участке спектральной функции тока, связанной с конкуренцией двух факторов: с ростом энергии E значение функции Ферми – Дирака $f(p)$ падает, но одновременно растет прозрачность барьера $D(p_{\perp})$.

При увеличении прикладываемого к острию напряжения от 500 до 700 В (рис. 2) за счет увеличения прозрачности барьера интенсивность тока возрастает на четыре порядка. В выбранной модели увеличение тянущего потенциала пропорционально радиусу острия не приводит к каким-либо изменениям вида спектра и интенсивности пика эмиссии.

Анализ полученных результатов приводит к заключению, что острийные металлические автоэммиттеры вполне применимы

в спектроскопии полевой эмиссии электронов из плоских нанокуглеродных структур в качестве тестовых объектов. Выявленные изменения формы энергетического распределения электронов полевой эмиссии из вольфрамового острия при увеличении температуры и тянущего электрического поля вполне могут служить метрологическим стандартом при настройке электронных спектрометров с высоким разрешением и дисперсией, а также средством изучения их аппаратной функции.

Области применения таких спектрометров не ограничиваются анализом энергетических распределений автоэлектронной эмиссии, поэтому настройка дисперсионных спектрометров с помощью тестовых измерений с использованием острийных металлических эмиттеров позволит получать данные, отражающие физическую природу объектов с наименьшими искажениями и погрешностями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бондаренко, В.Б. Эмиссионные характеристики порошков из нанопористого углерода [Текст] / В.Б. Бондаренко, П.Г. Габдуллин, Н.М. Гнучев, С.Н. Давыдов, А.Е. Кравчик // ЖТФ. – 2004. – Т. 74. – № 10. – С. 113–116.
2. Бондаренко, В.Б. Эмиссионная способность углеродных наноструктур, полученных из карбидов [Текст] / В.Б. Бондаренко, П.Г. Габдуллин, Н.М. Гнучев, С.Н. Давыдов //

Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2008. – № 3 (59). – С. 164–169.

3. Фурсей, Г.Н. Низкопороговая автоэлектронная эмиссия из углеродных нанокластеров [Текст] / Г.Н. Фурсей, В.И. Петрик, Д.В. Новиков // ЖТФ. – 2009. – Т. 79. – Вып. 7. – С. 122–126.

4. Архипов, А.В. Роль наночастиц в полевой эмиссии электронов из углеродных материалов



[Текст] / А.В. Архипов, Н.М. Гнучев, С.И. Крель
// Научно-технические ведомости СПбГПУ.
Физико-математические науки. — 2012. — № 4(158).
— С. 98–103.

5. **Davydov, S.N.** High-resolution electron energy analyser for angle-resolved spectroscopy [Text] / S.N. Davydov, Yu.A. Kudinov, Yu.K. Golikov // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. — 1995. — Vol. 72. — P. 317–321.

6. **Davydov, S.N.** Apparatus for investigating physical nature of nanoporous carbon structure field emission [Text] / S.N. Davydov, P.G. Gabdullin, M.A. Ryumin // Book of Abs. of 9-th Biennial International workshop «Fullerenes and Atomic Clusters». — Spb.: Ioffe Institute. — 2009. — P. 6–10.

7. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика [Текст] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2006. — 736 с.

БОНДАРЕНКО Вячеслав Борисович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

phys-el@spbstu.ru

ГНУЧЕВ Николай Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

nmg@rphf.spbstu.ru

ДАВЫДОВ Сергей Николаевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

phys-el@spbstu.ru

УДК.621.373.826

О.Л. Головков, Г.А. Купцова, В.А. Степанов

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ YAG:Nd-ЛАЗЕРА В РЕЖИМЕ ОДНОВРЕМЕННОЙ ГЕНЕРАЦИИ ДВУХ ДЛИН ВОЛН

O.L. Golovkov¹, G.A. Kuptsova², V.A. Stepanov³

^{1,2}Ryazan State Instrument-making Enterprise
32 Seminarskaya St., Ryazan, 390000, Russia.

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

SPECTRAL FEATURES OF YAG:Nd LASER EMISSION IN REGIME OF SIMULTANEOUS GENERATION OF TWO WAVELENGTHS

Экспериментально показано и теоретически обосновано уширение и смещение в коротковолновую область спектра излучения на длине волны 1064,15 нм YAG : Nd³⁺-лазера в режиме одновременной генерации двух длин волн: 1064,15 и 1064,50 нм.

ДЛИНА ВОЛНЫ. ЛАЗЕР НА YAG:Nd. СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ. ЛАЗЕРНЫЕ МОДЫ.

The broadening and the shift to the short-wave range of an emission spectrum at a wavelength of 1064.15 nm of YAG : Nd³⁺ laser have been obtained experimentally and substantiated theoretically. The laser worked in regime of simultaneous generation of 2 wavelengths: 1064.15 and 1064.50 nm.

WAVELENGTH. YAG : Nd LASER. SPECTRUM OF GENERATIONS. LASER MODES.

Режим одновременной генерации на длинах волн 1064,15 и 1061,50 нм можно использовать для создания источников терагерцового излучения. Известно, что при комнатной температуре одновременная генерация на указанных длинах волн лазером на иттрий-алюминиевом гранате, активированном неодимом (далее — YAG-лазером), генерирующим множество продольных мод, возможна при выполнении следующих условий [1]:

кристалл YAG должен обладать двулучепреломлением;

ориентация данного кристалла должна обеспечивать максимальное двулучепреломление для плоскости поляризации, генерируемой лазером;

плоскость поляризации накачки должна быть ортогональна вектору поляризации излучения, который задается ориентацией окна Брюстера.

Системы уравнений [2, 3], описываю-

щие генерацию YAG-лазера, имеют ограничения, не позволяющие точно решить задачу нахождения модового состава генерации с двух энергетических подуровней мультиплета $^4F_{3/2}$, имеющего три близких контура усиления.

Данная статья посвящена определению системы уравнений, описывающих генерацию YAG-лазера с двух энергетических подуровней мультиплета $^4F_{3/2}$, имеющего три близких контура усиления, а также сравнению полученных результатов расчета с экспериментальными данными.

Теоретическая часть

Для описания многомодовой генерации гранатового лазера с учетом генерации с двух подуровней мультиплета $^4F_{3/2}$ удобно использовать систему уравнений Танга — Статца — Демарса (Tang — Statz — DeMars) [2]:

$$\frac{dm_k}{d\tau} = Gm_k \left[L_k^{(1)}(n_0 + n_k) + \right.$$



$$\begin{aligned}
 & + (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})(n'_0 + n'_k) - 1 - \beta_k \Big]; \\
 \frac{dn_0}{d\tau} &= A - n_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right) - \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m n_m; \\
 \frac{dn_k}{d\tau} &= -n_k \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right) - \frac{1}{2} L_k^{(1)} m_k n_0; \\
 \frac{dn'_0}{d\tau} &= A' - n'_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m \right) - \\
 & - \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m n'_m; \\
 \frac{dn'_k}{d\tau} &= -n'_k \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m \right) - \\
 & - \frac{1}{2} (L_k^{(2)} + L_k^{(3)}) m_k n'_0,
 \end{aligned} \quad (1)$$

где β_k – потери k -й моды; n_0 , n_k – пространственно-однородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем A (11507 см⁻¹); n'_0 , n'_k – та же инверсия и ее решетки, но на переходе с верхним рабочим подуровнем B (11423 см⁻¹); $L_k^{(i)}$ – лоренцевы формы линий усиления i -й компоненты, нормированные к сечению перехода σ_i , равные:

$$\begin{aligned}
 L_k^{(1)} &= \left[1 + ((p-k)\Delta_0)^2 \right]^{-1}; \\
 L_k^{(2)} &= \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \left[1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_2)^2 \right]^{-1}; \\
 L_k^{(3)} &= \frac{\sigma_3}{\sigma_1} \left[1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_3)^2 \right]^{-1}; \\
 \Delta_2 &= \frac{\omega_0^{(2)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_{\perp}}; \quad \Delta_3 = \frac{\omega_0^{(3)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_{\perp}},
 \end{aligned} \quad (2)$$

где $\omega_0^{(1)}$ – центр сильной линии усиления на длине волны $\lambda = 1064,15$ нм; $\omega_0^{(2)}$, $\omega_0^{(3)}$ – центры линий усиления на длинах волн 1061,5 и 1064,4 нм, соответственно; Δ_0 – межмодовый интервал, задаваемый длиной резонатора; A , A' – параметры накачки на подуровни A и B , соответственно.

Поскольку «время жизни» на мультиплете ${}^4F_{3/2}$ составляет $2,5 \cdot 10^{-4}$ с, а время кросс-релаксации между подуровнями мультиплета ${}^4F_{3/2} - 10^{-7}$ с, можно утверждать, что как только произойдет обеднение населенности какого-либо из подуровней, сразу же восстановятся населенности подуровней в соответствии с распределением

Больцмана. В связи с этим не обоснованы предположения, что $A/A' = 3$ [2] и что между инверсиями подуровней существует кросс-релаксация w_{AB} и w_{BA} [3].

В результате решения системы уравнений (1), учитывающей постоянное распределение инверсии по подуровням в соответствии с законом Больцмана, получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}
 n'_0 &= \frac{1}{1+w} \left(A + A' - (1+\beta_k) \sum_{m=1}^M m_m \right); \\
 n_0 &= \frac{w}{1+w} \left(A + A' - (1+\beta_k) \sum_{m=1}^M m_m \right); \\
 n'_k &= \frac{F_1 \left(\frac{1+\beta_k - (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})}{L_k^{(1)}} - n_0 \right)}{F_2 + F_1 \frac{L_k^{(2)} + L_k^{(3)}}{L_k^{(1)}}}; \\
 n_0 &= \frac{(1+\beta_k) - (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})(n'_0 + n'_k)}{L_k^{(1)}} - n_k; \\
 m_k &= \frac{n_k \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right)}{-0,5 L_k^{(1)} n_0},
 \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned}
 F_1 &= n'_0 (L_k^{(2)} + L_k^{(3)}) \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m^{(1)} \right); \\
 F_2 &= n_0 L_k^{(1)} \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) (m_m^{(2)} + m_m^{(3)}) \right); \\
 w &= \frac{n_0}{n'_0} = \exp \left(\frac{E_B - E_A}{k_B T} \right)
 \end{aligned}$$

(E_A , E_B – энергии подуровней A и B , k_B – постоянная Больцмана).

В связи с тем, что генерация двух длин волн YAG-лазера при температуре 300 К может осуществляться только при наличии двулучепреломления и использовании внутрирезонаторных поляризующих элементов (окно Брюстера) [1], нами выдвинуто предположение, что потери на внутрирезонаторном поляризующем элементе могут быть разными для разных длин волн.

С учетом межмодового интервала $\Delta_0 = 0,05$ для удобства расчетов положим, что мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,15 нм, имеет номер 70, и тогда мода, соответствующая

щая максимуму усиления на длине волны 1064,40 нм, будет иметь номер 56, а мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1061,50 нм, — номер 222.

На рис. 1 приведены результаты расчетов зависимости модового состава генерации излучения YAG-лазера от уровня потерь β_k на длине волны 1064,15 нм (при значениях $\beta_k = 0,150, 0,225$ и $0,250$). При этом уровень потерь излучения на длине волны 1061,50 нм $\beta_k = 0,150$; длина резонатора — 30 мм, что соответствует межмодовому интервалу $\Delta_0 = 0,05$; параметр накачки $A = 10$, температура кристалла — 300 К.

Из данных рис. 1 видно, что при росте разницы внутрирезонаторных потерь между длинами волн 1064,15 и 1061,50 нм до значения 0,075 происходит перескок генерации с длины волны 1064,15 на 1061,50 нм. Кроме того, из данных рис. 1, а видно, что

длина волны максимальной моды генерации сдвинута и соответствует значению 1064,23 нм, что не противоречит общеизвестным данным [4]. Из рис. 1, б видно, что при одновременной генерации двух длин волн максимальная мода генерации на длине волны 1064,15 нм сдвинулась до величины 1064,18 нм.

В реальных условиях перескока не происходит, а наблюдается одновременная генерация двух длин волн. Это обусловлено тем, что генерация осуществляется по всей длине кристалла граната и влияние двулучепреломления для разных сечений этого кристалла — различное. В связи с этим разные зоны кристалла генерируют либо на длине волны 1064,15 нм, либо на 1061,50 нм. Следовательно, следует ожидать, что ширина спектра излучения на длине волны 1064,15 нм при одноволновом излучении

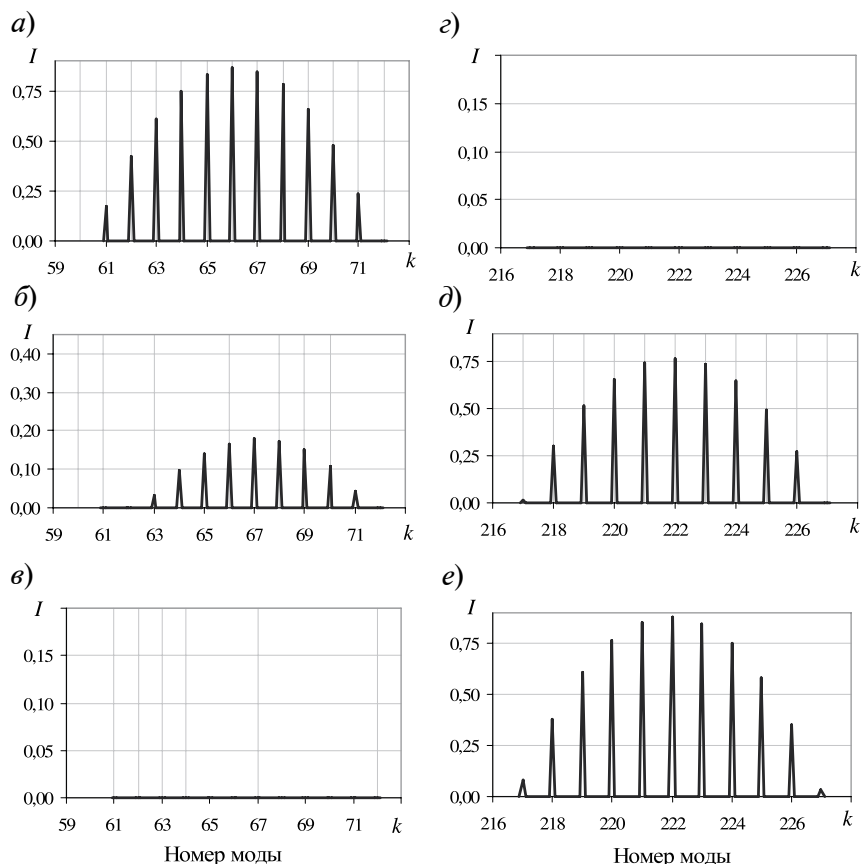


Рис. 1. Расчетные модовые составы лазерного излучения на длинах волн 1064,15 нм (а – в) и 1061,50 нм (г – е) при разных уровнях потерь β_k на 1064,15 нм и постоянном значении уровня потерь ($\beta_k = 0,150$) на 1061,50 нм. Значения β_k на длине волны 1064,15 нм: 0,150 (а, г); 0,225 (б, д); 0,250 (в, е).
 $T = 300$ К, параметр накачки $A = 10$



будет меньше, чем при излучении двух длин волн.

В результате проведенных расчетов была также получена зависимость температуры, при которой происходит перескок длины волны генерации с 1061,50 на 1064,15 нм, от длины резонатора (рис. 2). Для расчетов использовались следующие параметры: потери $\beta_k = 0,150$ на обеих длинах волн (1064,15 и 1061,50 нм), параметр накачки $A = 10$.

Данный эффект установлен впервые и требует дальнейших исследований.

Экспериментальная часть

Для анализа структуры спектра генерации YAG-лазером двух длин волн (1064,15 и 1061,50 нм) использовался анализатор спектра лазерного излучения LM-5, имеющий точность измерения 0,05 нм. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 3.

Для эксперимента использовались активные элементы, вырезанные из монокристалла $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG) вдоль кристаллографической оси [001], в виде цилиндра диаметром 4 мм и длиной 10 мм, активированного ионами неодима концентрацией 1 ат.%. На входной торец активного элемента было нанесено селективное зеркало с коэффициентом отражения более 99 % на длине волны 1064 нм и высокой прозрачностью на длине волны 808 нм. Выходной торец активного элемента просветлили. Линейный резонатор лазера длиной 30 мм создавался селективным зеркалом, нанесенным на торец активного элемента, и сферическим зеркалом радиусом 200 мм с коэффициентом отражения 84 % на длине волны 1064 нм. Генерация осуществлялась на основной поперечной моде TM_{00} . Линейно поляризо-

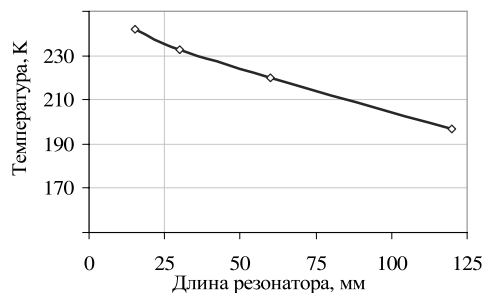


Рис. 2. Расчетная зависимость от длины резонатора температуры перескока длины волны генерации излучения YAG: Nd³⁺-лазером со значения 1061,50 на 1064,15 нм

ванное излучение трех лазерных диодов на длине волны 808 нм суммарной мощностью 8,5 Вт фокусировалось на торец активного элемента зоной накачки 0,5×0,5 мм.

На рис. 4 приведены экспериментальные результаты по измерению спектров излучения YAG-лазера в нормальных условиях, при мощности лазерной накачки 8,5 Вт.

Анализ полученных спектров генерации YAG-лазера показал следующее:

при генерации на одной длине волны 1064,15 нм (см. рис. 4, б) часть ионов неодима генерирует на длине волны 1064,23 нм, что соответствует общеизвестному влиянию слабого перехода на спектр излучения сильной линии усиления;

при генерации на двух длинах волн (см. рис. 4, а) наблюдается уширение и смещение спектра генерации на длине волны 1064,15 нм в длинноволновую область спектра. Такое поведение спектра генерации подтверждает теоретические предсказания (см. рис. 1).

Таким образом, в статье теоретически описано и экспериментально доказано

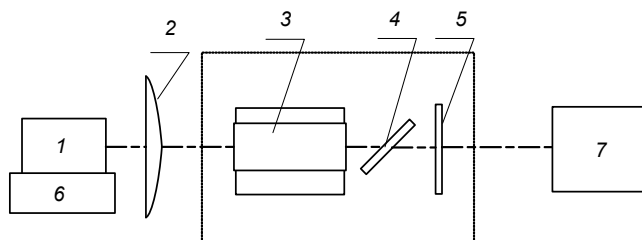


Рис. 3. Схема экспериментальной установки:

1 – полупроводниковые лазеры, 2 – линза фокусирующая, 3 – YAG:Nd³⁺-кристалл, 4 – окно Брюстера, 5 – выходное зеркало, 6 – термоэлектрический модуль с датчиком температуры, 7 – анализатор спектра лазерного излучения LM-5

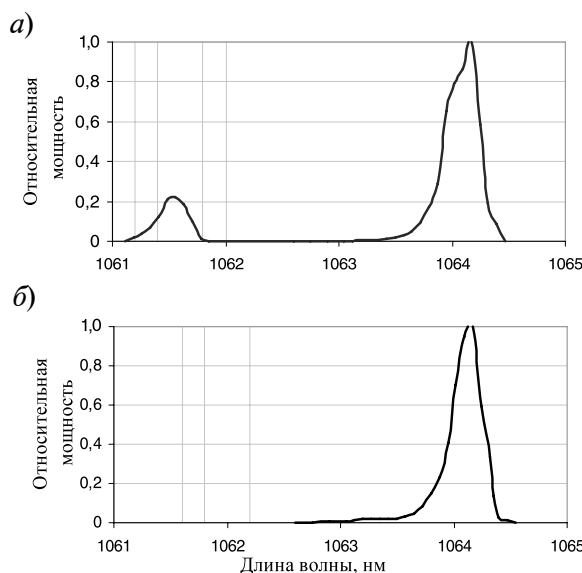


Рис. 4. Экспериментальные спектры генерации излучения YAG-лазером при его работе в разных режимах: *а* – одновременная генерация двух длин волн (1064,15 и 1061,50 нм); *б* – генерация одной длины волны (1064,15 нм)

влияние селективных потерь на генерацию YAG-лазером двух длин волн: 1064,15 и 1061,50 нм. Установлено, что в режиме одновременной генерации двух длин волн

(1064,15 и 1061,50 нм) происходит уширение и смещение в коротковолновую область спектра излучения на длине волны 1064,15 нм указанного лазера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Головков, О.Л. Непрерывная генерация двух длин волн 1064,15 и 1061,5 нм Nd:YAG-лазером [Текст] / О.Л. Головков, Г.А. Купцова, В.А. Степанов // Физика лазерных процессов и применение. Сб. научн. тр. Междунар. научн. семинара (Россия – Китай). – Рязань: РГУ им. С.А. Есенина, 2012. – С. 60–64.
2. Ханин, Я.И. Основы динамики лазеров [Текст] / Я.И. Ханин. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-

мат. лит.-ры, 1999. – 360 с.

3. Иевлев, И.В. Непрерывная двухволновая генерация в микрочип-Nd : YAG-лазерах [Текст] / И.В. Иевлев, И.В. Корюкин, Ю.С. Лебедева, П.А. Хандохин // Квантовая электроника. – 2011. – Т. 41 – С. 715 – 720.

4. Каминский, А.А. Лазерные кристаллы [Текст] / А.А. Каминский. – М.: Наука, 1975. – 256 с.

ГОЛОВКОВ Олег Леонидович – кандидат физико-математических наук, докторант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета им. С.А. Есенина, начальник бюро ОАО «Государственный Рязанский приборный завод».

390000, г. Рязань, Семинарская ул., 32
golovkow@mail.ru

КУПЦОВА Галина Александровна – аспирантка кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета им. С.А. Есенина.

390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета им. С.А. Есенина.

390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46

УДК 535.41

*В.М. Петров, А.В. Хоменко,
Я.А. Криницкий, М.А. Гарсиа*

АНАЛИЗ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ОПТИЧЕСКОГО ГОЛОГРАФИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕРОМЕТРА НА ОТРАЖАТЕЛЬНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

*V.M. Petrov¹, A.V. Khomenko²,
Ya.A. Krinitsky³, M.A. Garcia⁴*

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

^{2, 4} Ensenada Center for Scientific Research and Higher Education,
Carretera Ensenads-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja California, Mexico.

SENSITIVITY ANALYSIS OF AN OPTICAL HOLOGRAPHIC INTERFEROMETER BASED ON REFLECTIVE DYNAMIC GRATINGS

Статья посвящена исследованию дифракционных решеток в кристаллах селенита, которые позволяют создавать высокочувствительные адаптивные голографические интерферометры. Приведены результаты исследования дифракционной эффективности решеток, а также чувствительности интерферометра на их основе в зависимости от различных факторов, таких как геометрические размеры кристалла и его ориентация. Даются практические рекомендации по оптимизации параметров интерферометра.

ДИФРАКЦИОННАЯ РЕШЕТКА. КРИСТАЛЛ СИЛЕНИТА. ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ АДАПТИВНЫЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР. ДИФРАКЦИОННАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ИНТЕРФЕРОМЕТРА.

The article is related to investigation of diffraction gratings in sillenite crystals which are suitable for creating high-sensitive adaptive holographic interferometers. The article presents the results of study of the diffraction gratings efficiency and also the sensitivity of the interferometer based thereon, depending on various factors, such as crystal geometry and orientation.

DIFFRACTION GRATINGS. SILLENITE CRYSTALS. HIGH-SENSITIVE ADAPTIVE HOLOGRAPHIC INTERFEROMETERS. DIFFRACTION EFFICIENCY. INTERFEROMETER SENSITIVITY.

Адаптивные голографические интерферометры на основе отражательных динамических решеток уже несколько десятков лет успешно используются для исследования колебаний поверхности с амплитудой

$10^{-8} - 10^{-9}$ м [1, 2]. Основным элементом таких интерферометров являются фоторефрактивные кристаллы, в которых и создается голографическая решетка. Не претендуя на полноту, приведем здесь только некоторые

из них: BaTiO_3 [3 – 5], InP [6], GaAs [7, 8], силлениты [9, 10], GaP [11]. Отметим, что кристаллы группы силленитов ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$) выгодно отличаются от других фоторефрактивных кристаллов относительно низкой ценой; они могут быть выращены до больших размеров и высокого оптического качества, они не требуют специальных мер предосторожности при работе. Силлениты имеют короткое время записи решетки, что обеспечивает частоту отсечки 1 – 2 кГц. Это позволяет в значительной мере подавлять внешние шумы.

Рассматриваемые здесь интерферометры успешно использовались для направленного детектирования ультразвуковых волн, возникающих под действием лазерного импульса [6, 7, 10], для измерения малых периодических колебаний поверхности и слабых фазомодулированных оптических сигналов [4, 5, 9, 12].

Несколько лет назад при помощи адаптивных голографических интерферометров были экспериментально исследованы такие явления, как давление света, создаваемое слабым (не более 1 мВт/мм²) пучком света, и взаимодействие Казимира между макроробъектами [4, 12]. Напомним, что характерная амплитуда колебания поверхности в этих случаях составляет доли нанометра. Такая чувствительность позволяет использовать адаптивные голографические интерферометры как для создания и исследования микро- и наноразмерных устройств, так и для исследования новых физических явлений [13, 14].

Очевидно, что для надежного обеспечения высокой чувствительности требуется чрезвычайно точная настройка интерферометра. Первый этап настройки голографического интерферометра состоит в линеаризации выхода. Отметим, что эта задача уже успешно решена [3, 5]. Второй важный этап – это оптимизация условий записи отражательной голографической решетки с учетом длины кристалла, оптической активности и поглощения света фоторефрактивным кристаллом. Оптимизация условий записи может производиться исходя из трех критериев: величины дифракционной эффективности решетки, отношения сигнал/шум

на выходе интерферометра или амплитуды первой гармоники электрического сигнала на выходе фотоприемника.

Обычно голографические решетки, в том числе и динамические, характеризуются дифракционной эффективностью – отношением интенсивности света, попадающего в первый порядок дифракции, к мощности падающего на решетку (т. е. считывающего) света. Однако для использования такой решетки в интерферометре простое достижение максимальной дифракционной эффективности еще не гарантирует эффективную работу интерферометра. Именно решению данной задачи и посвящена настоящая работа.

Численный анализ и экспериментальные результаты

Известно, что отношение сигнал/шум для интерферометра с малой амплитудой фазовой модуляции может быть представлено как [15]:

$$\text{SNR} = Q \frac{\Delta I}{\sqrt{I_{av}}},$$

где $Q = \sqrt{\frac{\eta}{4h\nu\Delta f}}$; ΔI – амплитуда первой гармоники сигнала (или амплитуда модуляции интенсивности света) на выходе интерферометра; I_{av} – средняя интенсивность света, измеренная после анализатора; η – квантовая эффективность фотоприемника, $h\nu$ – энергия фотона, Δf – полоса регистрации.

Отметим, что I_{av} зависит от дифракционной эффективности решетки G , поляризации входного луча и ориентации анализатора.

В качестве следующего шага введем относительную чувствительность интерферометра ξ , которая не зависит от параметров фотоприемника и которая показывает, насколько чувствительность интерферометра отличается от теоретического предела [5]:

$$\xi = \sqrt{\frac{2}{I_{av}I_{out}} \frac{\Delta I}{\Delta\varphi}},$$

где I_{out} – мощность света на выходе лазера; $\Delta\varphi$ – амплитуда фазовой модуляции, которая создает модуляцию интенсивности ΔI .

Таким образом, для того, чтобы опреде-

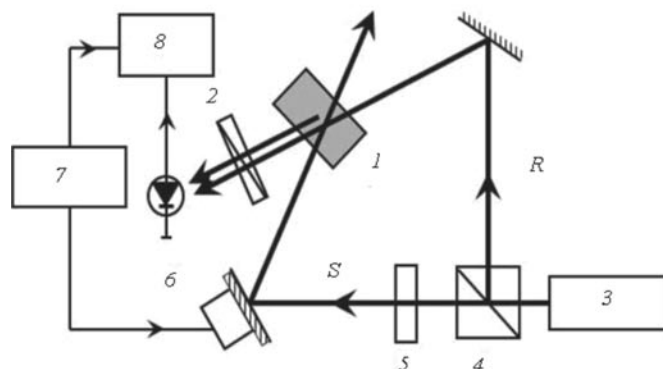


Рис. 1. Схема интерферометра:
1 – фоторефрактивный кристалл, 2 – анализатор, 3 – лазер на Nd:YAG,
4 – светоделитель, 5 – четвертьволновая пластина, 6 – зеркало на пьезопреобразователе,
7 – синхрогенератор, 8 – фазовый синхронный детектор

лечь ξ , надо вычислить ΔI и I_{av} . Для вычисления можно использовать известные уравнения двухволнового взаимодействия для векторных стационарных амплитуд S и R взаимодействующих волн. Процедура решения уравнений подробно описана в работе [5].

Теперь обратимся к эксперименту (рис. 1). Мы использовали отражательную геометрию записи решетки. Кристалл 1 освещался с противоположных сторон сигнальным (S) и опорным (R) пучками. Для этого мы использовали вторую гармонику Nd:YAG лазера ($\lambda = 532$ нм). Интенсивность пучков составляла примерно 20 мВт/мм². Полный угол между записывающими пучками составлял примерно 170°. Четвертьволновая

пластина была установлена в S -пучок. Анализатор 2 был установлен перед фотоприемником, что создавало двухволновое взаимодействие между прошедшей частью R -пучка и продифрагировавшей частью S -пучка. Опорный пучок имел вертикальную поляризацию, а поляризация сигнального пучка изменялась при помощи четвертьволновой пластины 5, которая создавала фазовый сдвиг между вертикальной и горизонтальной компонентами. Отражательная решетка записывалась за счет фоторефрактивного эффекта интерференционной картиной, которая создавалась параллельными компонентами R - и S -пучков. Обе компоненты S -пучка (вертикальная и горизонтальная) отражаются от фоторефрактивной решетки.

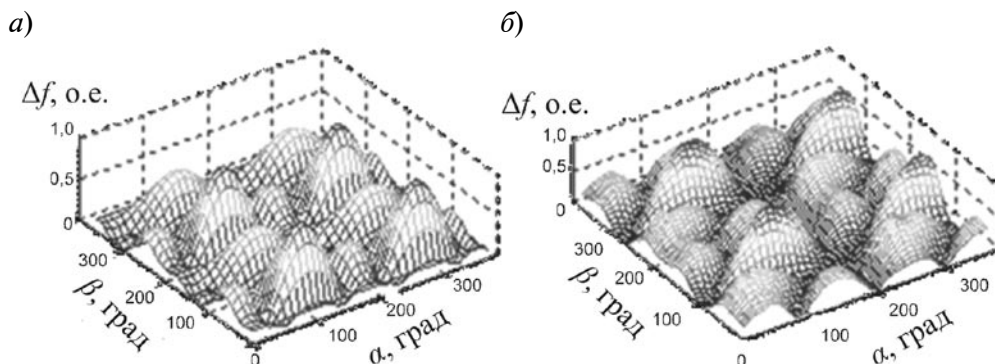


Рис. 2. Результаты измерения (а) и вычислений (б) уровня сигнала первой гармоники монокристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ в зависимости от ориентаций четвертьволновой пластины (угол α) и анализатора (угол β).
Длина образца $L = 5,0$ мм, свет распространялся вдоль кристаллографической оси [001]

Компонента поляризации S -пучка, которая ортогональна поляризации R -пучка, имеет фазовый сдвиг $\pi/2$, что приводит к линейаризации выхода.

Нами были исследованы образцы кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ со значениями длины 1,2, 3,0, 5,0 и 12,0 мм вдоль направления распространения света и образцы кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$, длиной 5,0 мм. Ориентация образцов была такова, что свет в них распространялся вдоль кристаллографических осей [001], [112], [111].

На рис. 2, a показаны экспериментальные результаты измерения ΔI в зависимости от углов ориентации четвертьволновой пластины α и ориентации анализатора β . Каждый угол отсчитывался от вертикальной оси. Кроме проведенных измерений, нами были

выполнены вычисления той же самой зависимости по методике, описанной в работе [5]. Амплитуда первой гармоники вычислялась как функция входной поляризации R - и S -пучков, угла анализатора, толщины образца L вдоль направления распространения света и оптической активности кристалла ρ . На рис. 2, b показаны результаты вычисления для кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$. Зависимость, представленная на рис. 2, является типичной. Аналогичные результаты были получены для всех типов кристаллов и их ориентаций. Измеренные и вычисленные зависимости имеют характерный набор периодически расположенных максимумов. Установлено что имеется удовлетворительное согласие теории и эксперимента: величина ΔI достигает своего максимума при угле чет-

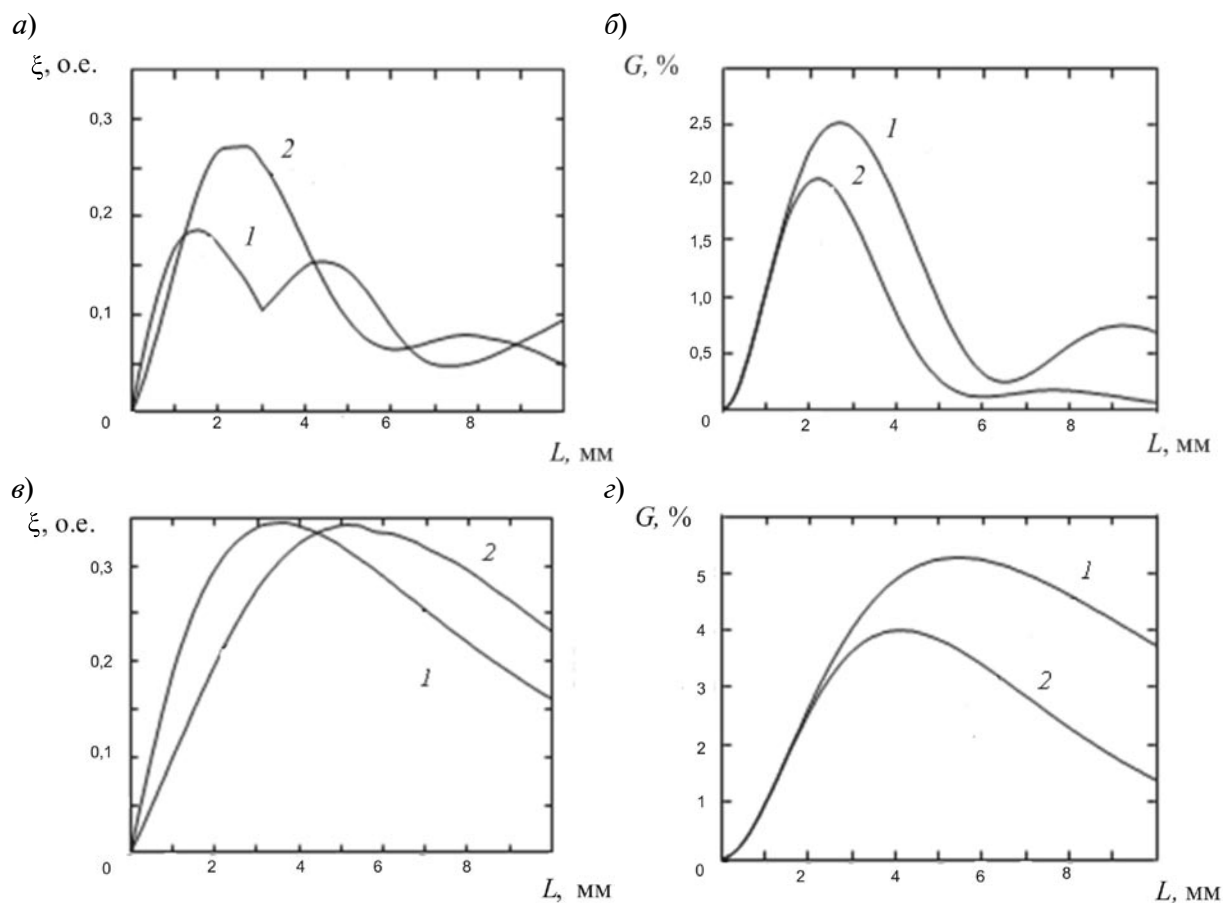


Рис. 3. Расчетные зависимости относительной чувствительности интерферометра (a, b) и дифракционной эффективности решетки (b, c) от длины образцов $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (a, b) и $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (b, c); свет распространялся вдоль их кристаллографических осей [001]; $N_A = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 1, 2 – линейная поляризация лазерного излучения вдоль направлений [100] и [110] соответственно



вертьволновой пластинки, равном примерно 130° , и угле анализатора, примерно равном 90° (здесь и далее углы отсчитываются относительно вертикали). Аналогичные зависимости, полученные для других кристаллов и других ориентаций, также имеют совпадение с точностью примерно 10° . Отсюда мы делаем вывод, что наша численная модель правильно описывает эксперимент и может быть использована для дальнейшего решения задачи.

На следующем этапе нами были вычислены зависимости амплитуды первой гармоники сигнала ΔI , относительной чувствительности интерферометра ξ , и дифракционной эффективности решетки G в зависимости от длины кристалла для всех указанных ориентаций. Наиболее информативные из них приведены на рис. 3, а, б.

Зависимости величин ξ и G от L для кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ были рассчитаны для относительно малых значений концентрации мелких ловушечных уровней N_A [2]. Аналогичные зависимости для соединения $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ представлены на рис. 3, в, г. Результаты вычислений для $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ оказались подобными результатам вычислений для $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, и в статье не приводятся.

Из представленных на рис. 3 результатов видно, что для кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ наибольшее значение чувствительности интерферометра $\xi \approx 0,27$ достигается на длине $L \approx 2,6$ мм (кривая 2). Достижимая в этом случае величина дифракционной эффективности решетки $G \approx 2,0$ % (кривая 2 на рис. 3, б) не является максимальной. Абсолютное максимальное значение $G \approx 2,5$ % достигается при угле поворота входной поляризации $+45^\circ$ и при $L \approx 3,0$ мм. Однако чувствительность ξ в этом случае не превышает значения 0,11.

Обсуждение результатов

Наиболее интересным результатом данной работы следует считать то, что оптимальная длина кристалла, обеспечивающая максимальную дифракционную эффективность решетки, в общем случае не совпадает с оптимальной длиной, обеспечивающей максимальную относительную чувствительность интерферометра. Для практических применений это означает, что выбор длины кристалла должен основываться либо на требуемой чувствительности интерферометра, либо на требуемой дифракционной эффективности решетки. Необходимо учитывать, что в некоторых случаях эти требования могут вступать в противоречия. Так например, если увеличить дифракционную эффективность решетки в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (ориентация $[100]$) с использованием входной поляризации, повернутой на 45° , то относительная чувствительность интерферометра уменьшается в 2,2 раза. При этом значение G увеличивается не более, чем на 30 % (см. рис. 3, а, б).

Для построения интерферометра с максимально возможной относительной чувствительностью можно рекомендовать кристалл $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ с ориентацией, в которой свет распространяется вдоль оси $[001]$, и длиной кристалла примерно 2,5 – 3,0 мм. Однако эта ориентация является чувствительной к ориентации входной поляризации. Другой привлекательный случай – использовать ориентацию $[111]$, которая не чувствительна к ориентации поляризации, однако, относительная чувствительность будет примерно в 6 раз ниже, чем у интерферометра с ориентацией кристалла, у которой свет распространяется вдоль оси $[001]$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hall, T.J. Detector of an optical-fiber acoustic sensor using dynamic holographic interferometry [Text] / T.J. Hall, M.A. Fiddy, M.S. Ner // Opt. Lett. – 1980. – Vol. 5. – P. 485–487.
2. Stepanov, S.I. Application of photorefractive crystals [Text] / S.I. Stepanov // Rep. Prog. Phys. – 1994. – Vol. 57. – P. 39–116.
3. Rossomakhin, I.M. Linear adaptive inter-

ferometer via diffusion recording in cubic photorefractive crystals [Text] / I.M. Rossomakhin, S.I. Stepanov // Opt. Com. – 1991. – Vol. 86. – P. 199–204.

4. Petrov, V.M. Optical detection of the Casimir force between the macroscopic objects [Text] / V.M. Petrov, M.P. Petrov, V.V. Bryksin [et al.] // Opt. Lett. – 2006. – Vol. 31. – P. 3167–3169.

5. **Khomenko, A.V.** Highly sensitive adaptive interferometer based on reflection photorefractive grating in BaTiO₃:Co [Text] / A.V. Khomenko, V.M. Petrov // Journal of Holography and Speckle. — 2009. — Vol. 5. — P. 238–242.

6. **Delaye, P.** Detection of ultrasonic motion of a scattered surface using photorefractive InP:Fe under an applied dc field [Text] / P. Delaye, A. Blouin, D. Drolet [et al.] // J. Opt. Soc. Am. B. — 1997. — Vol. 14. — P. 1723–1734.

7. **Blouin, A.** Detection of ultrasonic motion of a scattering surface by two-wave mixing in a photorefractive GaAs crystal [Text] / A. Blouin, J.-P. Monchalain // Appl. Phys. Lett. — 1994. — Vol. 65. — P. 932–934.

8. **Campagne, B.** Compact and fast response ultrasonic detection device based on two-wave mixing in a gallium arsenide photorefractive crystal [Text] / B. Campagne, A. Blouin, L. Pujot, J.-P. Monchalain // Rev. Sci. Instrum. — 2001. — Vol. 72. — P. 2478–2482.

9. **Petrov, V.M.** Enhancing of the sensitivity of an adaptive holographic interferometer using the non-Bragg diffraction [Text] / V.M. Petrov, C. Denz, J. Petter, T. Tshudi // Opt. Lett. — 1997. — Vol. 22. — P. 1902–1904.

10. **Stepanov, S.I.** Directional detection of laser-generated ultrasound with an adaptive two-wave mixing photorefractive configuration [Text] / S.I. Stepanov, V.M. Petrov, P. Rodriguez, R. Lopez // Opt. Comm. — 2001. — Vol. 187. — P. 249–255.

11. **Kamshilin, A.A.** Fast adaptive interferometer with a photorefractive GaP crystal [Text] / A.A. Kamshilin, V.V. Prokofiev // Opt. Lett. — 2002. — Vol. 27. — P. 1711–1723.

12. **Petrov, V.** Precise sub-nanometer control of the position of a macro-object by light pressure [Text] / V. Petrov, J. Hahn, J. Petter [et al.] // Opt. Lett. — 2005. — Vol. 30. — P. 3138–3140.

13. **Decca, R.S.** Casimir force between a micro-fabricated elliptical cylinder and plate [Text] / R.S. Decca, E. Fischbach, G.L. Klimchitskaya [et al.] // Physical Review A. — 2011. — Vol. 84. — P. 042502.

14. **Bordag, M.** Advances in the Casimir effect [Text]: International series of monographs on physics / M. Bordag, G.L. Klimchitskaya, U. Mohideen, V.M. Mostepanenko. — Oxford: University Press, 2009. — 752 p.

15. **Wagner, J.W.** Theoretical noise-limited sensitivity of classical interferometry [Text] / J.W. Wagner, J.B. Spiecer // J. Opt. Soc. Am. B. — 1987. — Vol. 4. — P. 1316–1326.

ПЕТРОВ Виктор Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ХОМЕНКО Анатолий Васильевич — научный сотрудник департамента прикладной оптики Центра научных исследований и высшего образования г. Энсенда, Мексика.

Carretera Ensenada-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja California, Mexico

КРИНИЦКИЙ Яков Андреевич — аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
jackobian@inbox.ru

ГАРСИЯ САРАТЕ Мария Алехандро — аспирант департамента прикладной оптики Центра научных исследований и высшего образования г. Энсенда, Мексика.

Carretera Ensenada-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860 Ensenada, Baja California, Mexico

УДК 621.373.826

*А.П. Погода, А.А. Ермолаев, В.Ф. Лебедев,
С.Н. Сметанин, А.С. Борейшо*

СПЕКТРАЛЬНАЯ СЕЛЕКТИВНОСТЬ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ РЕШЕТОК КОЭФФИЦИЕНТА УСИЛЕНИЯ В ЛАЗЕРЕ С ПЕТЛЕВЫМ РЕЗОНАТОРОМ

*A.P. Pogoda¹, A.A. Ermolaev², V.F. Lebedev³,
S.N. Smetanin⁴, A.S. Boreysho⁵*

^{1, 2, 3, 5} Baltic State Technical University,

1 1st Krasnoarmeyskaya St., St. Petersburg, 190005, Russia.

⁴ A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Sciences,
38 Vavilov St., Moscow, 119991, Russia.

SPECTRAL SELECTIVITY OF HOLOGRAPHIC GAIN GRATINGS IN THE MULTILoop CAVITY LASER

Приведено качественное объяснение и количественная оценка спектральной селективности голографических решеток коэффициента усиления в мощном твердотельном лазере с реализацией обращения волнового фронта (ОВФ) в петлевом резонаторе.

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЕ ЛАЗЕРЫ. ДИОДНАЯ НАКАЧКА. ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОЕ СМЕШЕНИЕ. ОБРАЩЕНИЕ ВОЛНОВОГО ФРОНТА. ШИРИНА ПОЛОСЫ ГЕНЕРАЦИИ.

The qualitative and quantitative analyses of the spectral selectivity of holographic gain gratings in high-power solid-state laser with phase conjugation (PC) in the multiloop cavity have been given.

SOLID-STATE LASERS. DIODE-PUMPING. FOUR-WAVE MIXING. PHASE CONJUGATION. BANDWIDTH.

Узкополосные лазеры находят широкое применение в лидарных комплексах наземного и воздушного базирования. При этом твердотельные лазеры с диодной накачкой являются наиболее удобными. Однако для получения узкополосной генерации, необходимой для данных приложений, требуется создание сложных оптических систем, в которых маломощное узкополосное излучение усиливается в дополнительных квантрах. Поэтому необходима разработка альтернативных схем твердотельных лазеров с узкой полосой генерации и высокой энергией в импульсе, в частности лазеров с петлевым резонатором.

Данное исследование посвящено качественному объяснению и количественной оценке спектральной селективности голо-

графических решеток коэффициента усиления в мощном твердотельном лазере с реализацией обращения волнового фронта (ОВФ) в петлевом резонаторе.

Обратная связь организуется посредством ОВФ-зеркала, которое формируется в результате четырехволнового смешения (ЧВС) в активной среде. В оптической схеме лазера использован только один квантрон на основе цилиндрического Nd:YAG-кристалла с поперечной накачкой матрицами лазерных диодов, имеющими суммарную пиковую мощность до 13,9 кВт. Длина кристалла составляет 110 мм при диаметре поперечного сечения 6,3 мм. Таким образом, квантрон используется одновременно как для развития генерации, так и в качестве усилителя, что является несомнен-

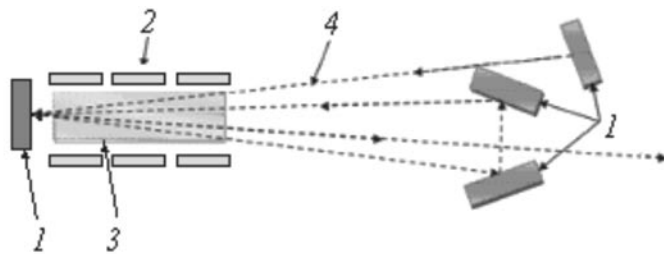


Рис. 1. Схема голографического твердотельного лазера:

1 – зеркала резонатора, 2 – каналы матриц накачки,
3 – Nd:YAG-кристалл, 4 – траектория хода лучей в резонаторе

ным преимуществом схемы перед известными аналогами. В целях повышения эффективности обращения волнового фронта (ОВФ) в лазере с недостаточно мощной полупроводниковой накачкой применена многопроходная схема резонатора (рис. 1). Габаритные размеры такой схемы составляют 70×3 см, поэтому углы схождения пучков можно считать малыми [1].

Дифракционная эффективность решеток коэффициента усиления в многопетлевом резонаторе

В данном резонаторе излучение разбивается из спонтанной люминесценции, образующей внутрирезонаторные пучки. В результате их самопересечения и интерференции формируются решетки коэффициента усиления, обеспечивающие обратную связь. В нашем случае в активном элементе происходит трехкратное пересечение внутрирезонаторного пучка излучения с его частью, распространяющейся в направлении генерации. В случае самостарта многопетлевого резонатора число решеток равно числу сочетаний пар волн, входящих в среду, а именно

$$(N^2 - N)/2,$$

где $N = 8$, поэтому число решеток равно 28.

Четыре из них – встречные решетки, которые не дают вклада в четырехволновую генерацию, т. е. число рабочих решеток равно 24.

Дифракционную эффективность каждой из этих двадцати четырех решеток усиления можно вычислить, если использовать следующее соотношение для решетки с номером i [2]:

$$\eta_i \approx G(b_i L V_i)^2, \quad (1)$$

где $G = \exp(\alpha L)$ – усиление за проход среды (α – коэффициент усиления среды); L – длина среды; i – номер решетки (от 1 до 24);

$$V_i = \frac{2\sqrt{I_{1i}I_{2i}}}{I_{1i} + I_{2i}} \quad (2)$$

– контраст интерференции волн, записывающих i -ю решетку (I_{1i} , I_{2i} – интенсивности волн, записывающих i -ю решетку);

$$b_i \approx \frac{\alpha}{4} e^{-\sigma_i \tau_i} \quad (3)$$

– коэффициент дифракционной связи на i -й решетке [3].

В выражении (3)

$$\sigma_i = U_s^{-1} \int (I_{1i} + I_{2i} + I_{3i} + I_{4i}) dt; \quad (4)$$

$$\tau_i = U_s^{-1} \int 2\sqrt{I_{1i}I_{2i}} dt = U_s^{-1} \int (I_{1i} + I_{2i}) dt, \quad (5)$$

где I_{3i} , I_{4i} – интенсивности волн, участвующих в процессе считывания i -й решетки; U_s – плотность энергии насыщения усиления.

Отметим, что поскольку в выражение (1) введен контраст интерференции (2), то коэффициент b_i описывает идеализированную четырехволновую связь при $V_i = 1$, которая имела бы место при равных интенсивностях записывающих волн

$$\bar{I}_{1i} = \bar{I}_{2i} (I_{1i} + I_{2i}) / 2,$$

поэтому в формуле (5) мы имеем соотношение

$$2\sqrt{\bar{I}_{1i}\bar{I}_{2i}} = (I_{1i} + I_{2i}).$$

Проведем оценку, во сколько раз изменится интенсивность за обход резонатора при дифракции на каждой решетке. Обо-

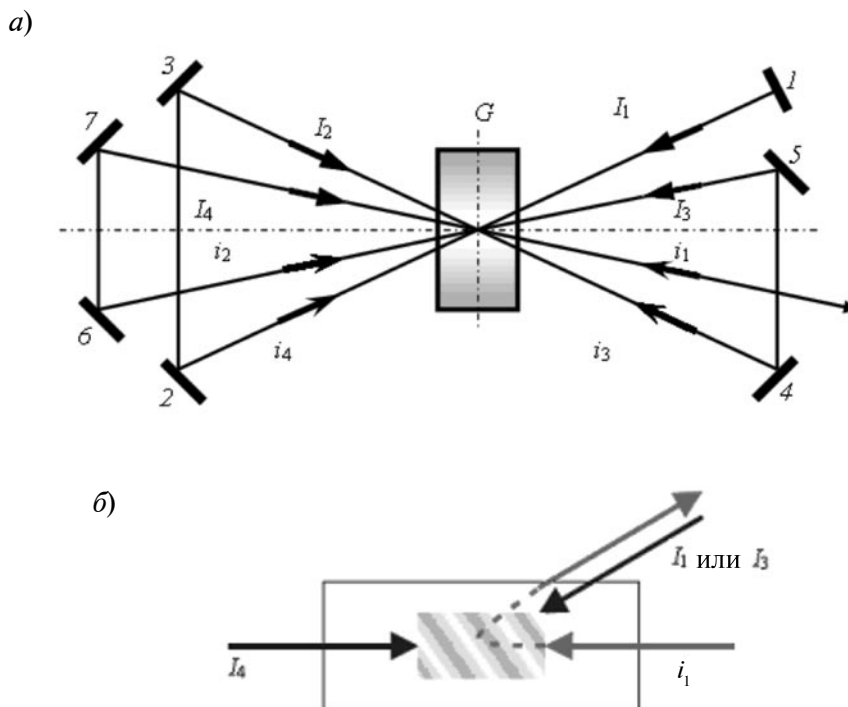


Рис. 2. Эквивалентные схемы хода лучей в многопетлевом резонаторе (а) и в отражающей решетке 1 (б), где показана геометрия решетки, осуществляющей спектральную селективность; I_1, I_3, I_4 – интенсивности пучков, записывающих решетки, i_1 – дифрагирующий пучок, G – коэффициент усиления

значим как g_i изменение интенсивности за обход резонатора при дифракции на i -й решетке.

Проанализируем четырехволновую генерацию на всех 24 решетках, используя схему на рис. 2, а. Чтобы уменьшить линейные параметры установки, в эксперименте зеркала 2, 3, 6, 7 заменены одним зеркалом. Конфигурация записанных решеток при этом остается прежней. Рассмотрим ход лучей в данной эквивалентной схеме, взяв для примера решетку 1 (рис. 2, б).

Волна с интенсивностью i_4 дифрагирует с дифракционной эффективностью η_{21} в волну i_1 , распространяясь сначала в сторону зеркала 7, затем зеркала 6. Далее волна проходит среду с усилением в G раз, отражается от зеркал 5 и 4, опять проходит среду с усилением в G раз и, отражаясь от зеркал 3 и 2, в итоге возвращается в саму себя. Таким образом, произошел полный обход резонатора, в котором один раз излучение дифрагировало (эффективность η_i) и два раза усиливалось (коэффициент уси-

ния G^2). Тогда изменение интенсивности за полный обход резонатора составит $g_1 = \eta_1 G^2$ раз. На рис. 2 интенсивности

$$I_1 = i_1 G^4, I_2 = i_1 G^5, I_3 = i_1 G^6, I_4 = i_1 G^7;$$

$$i_2 = i_1 G, i_3 = i_1 G^2, i_4 = i_1 G^3.$$

Согласно приведенным формулам, а также выражениям (1), (2) имеем следующее равенство:

$$g_1 = \eta_1 G^2 = G \left(b_1 L \frac{2\sqrt{G^3}}{1 + G^3} \right)^2 G^2 \approx 4b_1^2 L^2 \quad (6)$$

при $G \gg 1$.

Аналогичный расчет для всех остальных решеток даст обобщенное выражение следующего вида:

$$g_i \approx 4b_i^2 L^2. \quad (7)$$

Таким образом, если бы все коэффициенты четырехволновой связи b_i были равны, то тогда бы все 24 решетки имели одинаковый вклад в генерацию. Однако, согласно выражениям (3) – (5), коэффициент b_i за-

висит от суммарной интенсивности волн, участвующих в записи и считывании i -й решетки, а эти интенсивности оказываются различными в схеме на рис. 2.

Для самовозбуждения генерации в момент времени t при слабом насыщении усиления ($G \approx \text{const}$, $\sigma_i \approx 0$) коэффициент b_i определяется выражением

$$b_i \approx \frac{\alpha}{4} U_s^{-1} I_{2i} t, \quad (8)$$

где I_{2i} — наибольшее из двух значений интенсивности пары записывающих волн I_{li} и I_{2i} .

Наибольшую суммарную интенсивность записывающих волн будут иметь решетки 1, 2 и 3, так как в их записи участвует записывающий пучок с наибольшей интенсивностью

$$I_{2i}^{\max} = I_4 = i_1 G^7,$$

где i_1 — интенсивность затравочного излучения.

Таким образом, можно считать, что на генерацию влияют только эти три решетки усиления.

В результате рассеянные на трех данных решетках усиления пучки ОВФ-излучения складываются, определяя повышение обратной связи в резонаторе. Формируются три независимых интерференционных картины, которые создают решетки коэффициента усиления во всей области пересечения пучков.

Внутрирезонаторные пучки, дифрагируя на образовавшихся решетках, формируют фазово-сопряженный пучок, встречный к пучку, распространяющемуся в направлении генерации. Следуя по резонатору в обратном направлении, сопряженный пучок проходит все источники aberrаций в обратном направлении, в результате чего пучок освобождается от внутрирезонаторных искажений. Эффективность исправления искажений проверялась путем введения в резонатор матовой пластинки. Несмотря на внесение серьезных искажений в волновой фронт внутрирезонаторного пучка, профиль пучка генерации оставался близким к дифракционному пределу ($M^2 = 1,3$). Другими словами, полупрозрачное зеркало, которое обычно обеспечивает обратную связь

в резонаторе, замещается ОВФ-зеркалом на решетках коэффициента усиления.

Описание динамики развития и спектральной селективности голограмм

Ширина спектральной линии усиления в кристалле Nd:YAG составляет величину около $\Delta\nu = 120$ ГГц ($\Delta\lambda = 400$ пм). Соответствующая этому значению длина когерентности лучей оказывается много меньше длины активного элемента $L = 2,3$ мм. Очевидно, что и начальный размер голографических решеток, записанных лучами спонтанной люминесценции, имеет тот же порядок величины. Таким образом, в начале процесса развития лазерной генерации весь объем кристалла заполнен множеством голографических решеток коэффициента усиления, не связанных друг с другом. Контур полосы усиления симметричен относительно центральной частоты. В процессе дифракции луча на образовавшейся решетке, происходит неравномерное усиление различных частотных компонент контура линии. Решетки, создаваемые компонентами большей интенсивности, т. е. близкими к центральной частоте, имеют большую дифракционную эффективность. За счет этого ширина контура полосы усиления после дифракции на решетке уменьшается. Сужение ширины полосы усиления приводит к увеличению длины когерентности. Таким образом, при каждом следующем обходе резонатора возрастает толщина образующихся динамических голограмм. Максимально достижимой толщиной решеток коэффициента усиления следует считать длину кристалла. В нашем случае она составляет 110 мм. Отметим при этом, что такой длины могут достигать лишь отражающие решетки, так как вектор их нормали в приближении малых углов схождения пучков параллелен оси кристалла. Иными словами, имеется всего две решетки, которые вносят заметный вклад в спектральную селективность.

В качестве теоретического критерия степени объемности голограммы используют параметр Клейна. Оценим указанный параметр для предполагаемой толщины решетки в случае, когда она достигает полной



длины кристалла. Он вычисляется согласно выражению

$$Q = 2\pi\lambda T / (n\Lambda^2),$$

где λ — длина волны излучения; T , n , Λ — соответственно толщина, средний показатель преломления и пространственный период голограммы.

Период решетки вычисляется из условия Вульфа — Брэгга:

$$2\Lambda \sin\theta = k\lambda,$$

где Λ — постоянная решетки; $k = 1, 2, 3, \dots, n$ — порядок дифракции; θ — угол между направлением распространения волны и плоскостью решетки, который можно считать прямым ($\theta = \pi/2 - \alpha$, $\alpha = 0,006$ рад).

При $T = 11$ см величина параметра Клейна составляет $Q = 3 \cdot 10^6$. Таким образом, можно говорить о высокой спектральной селективности при развитии голограммы до полной толщины кристалла.

Оценим спектральную селективность данной голограммы [4]. По условию Вульфа — Брэгга для решетки в среде выполняется соотношение:

$$2\Lambda \cos\alpha = \lambda.$$

Поскольку мы имеем дело с толстой голограммой, формируется только один дифракционный порядок. Тогда, поскольку значение $\cos\alpha$ близко к единице, спектральная селективность выражается отношением

$$\delta\lambda / \lambda = \Lambda / T,$$

где $\Lambda = \lambda / 2n$, откуда получим, что ширина полосы генерации $\delta\lambda = \lambda^2 / 2nT$.

Для кристалла, использованного в данной работе, в предположении, что область пересечения пучков и, соответственно, толщина решетки распространяется на весь кристалл, расстояние между плоскостями решетки

$$\Lambda = \lambda / 2n = 0,29 \text{ мкм},$$

а число штрихов — порядка $3,5 \cdot 10^5$. Ширина полосы генерации при этом

$$\delta\lambda = \lambda^2 / 2nT = 0,0026 \text{ нм}.$$

Для экспериментальной проверки полученного значения проведено измерение ширины полосы генерации лазера в режиме свободной генерации с помощью эталона Фабри — Перо с интервалом свободной

дисперсии $\Delta\lambda = 0,028$ нм. Излучение лазера преобразовывалось нелинейным кристаллом во вторую гармонику. Данное преобразование увеличивает ширину полосы генерации на полувысоте в $\sqrt{2}$ раз. Анализ изображения интерференционных колец (рис. 3, а) приводит к следующим выводам. Узкие кольца порождаются первым мощным импульсом цуга длительностью 200 нс (рис. 3, б), для которого ширина линии генерации составляет величину $\delta\lambda = 2$ пм ($\Delta\nu = 1,9$ ГГц). Длина волны первого импульса несколько различна для разных цугов, что выражается в стохастическом изменении радиуса тонких колец. Для второго и последующих импульсов цуга, вследствие меньшей интенсивности, эффективность образуемых ими голографических решеток ниже, поэтому ширина полосы генерации сильно расплывается, создавая широкие неяркие кольца в рассматриваемом изображении. Таким образом, излучение лазера нельзя в полной мере охарактеризовать приведенной выше шириной линии, однако очевидно, что в каждом импульсе генерации присутствует компонента, доминирующая над уровнем остальных импульсов с шириной полосы порядка 2 ГГц. Значение последней объясняется наличием спектральной селективности решеток коэффициента усиления, причем при увеличении энергии накачки, ввиду роста эффективности решеток, контраст первого и последующих импульсов увеличивается. Следовательно, мы наблюдаем совпадение измеренной ширины полосы генерации с рассчитанной спектральной селективностью решеток коэффициента усиления (с точностью до порядка величины).

Экспериментальная зависимость ширины полосы генерации от толщины голограммы

Для экспериментальной проверки обратной зависимости ширины полосы от длины кристалла проведен опыт по изменению длины активного элемента лазера. Конструктивные особенности квантрона, использованного в данной работе, позволили, не меняя геометрии схемы, уменьшать активную длину среды. Поперечная накачка производилась шестью матрицами лазер-

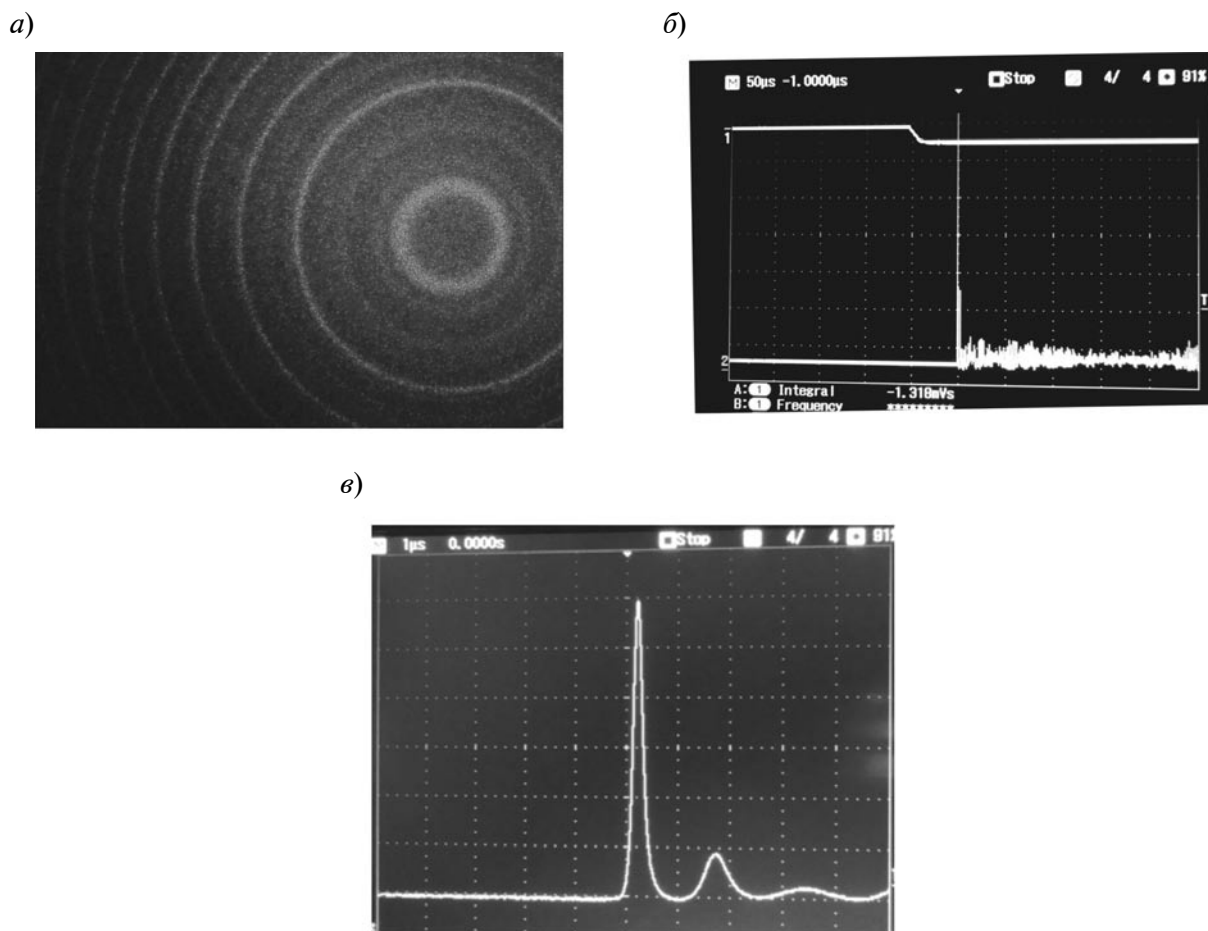


Рис. 3. Характеристики импульса в режиме свободной генерации лазера: *а* — интерферограмма эталона Фабри — Перо; *б, в* — осциллограммы; импульс накачки длительностью 300 мкс (*б*, верхняя кривая), полный импульс генерации (*б*, нижняя кривая), начальный фрагмент полного импульса (*в*)

ных диодов, расположенными с противоположных сторон кристалла. Таким образом, имелось три независимых, последовательно расположенных канала накачки.

Изменять длину области инверсной населенности кристалла можно путем последовательного отключения каналов. Таким образом, при накачке одной парой матриц эффективная длина равна 3,5 см, двумя парами матриц — 7,0 см, а всеми тремя парами — 10,5 см. Расшифровка интерферограмм в режиме свободной генерации затруднена из-за невозможности обеспечить яркость излучения, достаточную для измерения, при малой длительности импульса накачки. Увеличение длительности приводит к росту яркости колец, создаваемых пиками свобод-

ной генерации, и затиранию колец доминирующего пика. Однако реализация режима пассивной модуляции добротности, реализованного путем помещения пассивного лазерного затвора $\text{Cr}^{4+}:\text{YAG}$ в область пересечения пучков, делает возможным получение моноимпульса, который создает одну систему колец интерферограммы. Сравнение толщины колец интерферограмм в режимах свободной генерации и пассивной модуляции добротности показывает, что ширина полосы генерации во втором случае — меньше не более чем на 15 %, чем в первом, поэтому данный фактор не оказывает существенного влияния на характер зависимости ширины полосы от длины кристалла.

На графике (рис. 4) представлены экс-

периментальные данные, полученные при трех значениях длины области инверсии населенностей, а также теоретические кривые, выражающие зависимость ширины полосы от рабочей толщины отражающей решетки коэффициента усиления. В работе [5] путем численного моделирования показано, что ширина полосы генерации соответствует времени кругового обхода дифрагирующего луча внутри усиливающей среды, т. е. толщину голограммы можно считать равной удвоенной длине кристалла. Теоретическая кривая 1 соответствует толщине голограммы, равной длине кристалла, а кривая 2 — удвоенной толщине.

Экспериментальные данные (рис. 4, а) подтверждают наличие тенденции обратной зависимости ширины полосы от длины голограммы, однако имеются некоторые количественные расхождения.

Теоретическая кривая предсказывает более сильное уменьшение ширины полосы с ростом толщины голограммы, чем наблюдаемое в эксперименте. Данный градиент падения может быть обеспечен в случае четырех проходов излучения внутри голограммы. Такое количество проходов может объясняться множественностью голограмм, возникающих внутри петлевого резонатора. Возможно, что обе отражательные голограммы, участвующие в сужении полосы, можно рассматривать как комплексную голограмму. Этому случаю соответствует кривая 3, для которой толщина голограммы равна четырем длинам

кристалла. Эта кривая с точностью до постоянной величины наиболее точно описывает экспериментальные значения. Возможное объяснение отличия на константу — систематическая погрешность эталона. Следует также учитывать, что предел разрешающей способности эталона Фабри — Перо, использованного в эксперименте (порядка 1 пм), и использование эталона с большим разрешением, возможно, приведет к регистрации меньших значений ширины полосы и уточнению характера зависимости.

Интересно также и расхождение теории с экспериментом в случае создания инверсии населенностей одной парой матриц: экспериментальное значение ширины полосы меньше, чем соответствующая точка теоретической кривой 2. Следовательно, можно предположить, что помимо спектральной селективности решеток коэффициента усиления, существует другой механизм сужения полосы генерации. В статье [6] приведены данные, согласно которым генерация аналогичного по схеме резонатора твердотельного лазера на кристалле Nd:YAG с ламповой накачкой, когда реализуются более высокие значения коэффициента усиления, имеет длину когерентности порядка 15 м, что эквивалентно ширине полосы генерации 20 МГц. Это указывает на то, что помимо спектральной селективности решеток коэффициента усиления в качестве толстых голограмм, на ширину полосы генерации влияют механизмы иной

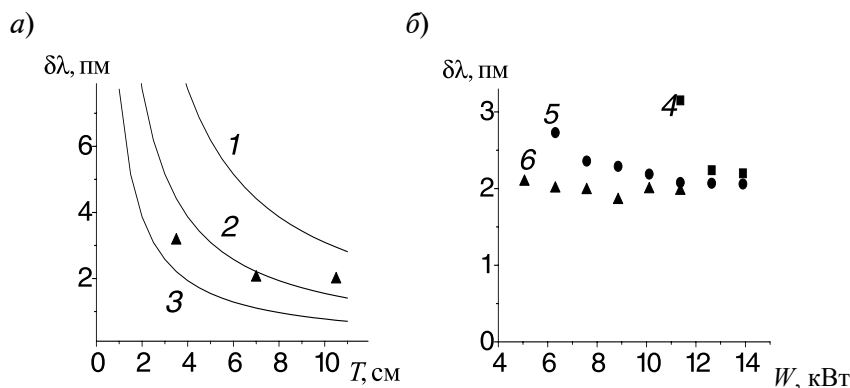


Рис. 4. Экспериментальные (символы) и теоретические (линии) зависимости ширины полосы генерации от длины кристалла (а) и мощности накачки (б): 1 — 3 — одно-, двух- и четырехкратные проходы, соответственно; 4 — 6 — использованы одна, две и три пары матриц

природы. Поскольку решетка коэффициента усиления неравномерно усиливает различные компоненты частотного колокола, ширина полосы сужается, несмотря на невозможность дальнейшего увеличения толщины голограммы. Этот процесс тем эффективнее, чем выше интенсивность записывающих решетки пучков. На рис. 4, б приведена зависимость ширины полосы генерации от тока накачки в случае одной, двух и трех пар матриц. Во всех режимах видно сужение ширины полосы генерации при увеличении мощности накачки.

Процесс неравномерного усиления различных частотных компонент можно рассматривать как увеличение пассивных потерь в резонаторе при отклонении частоты от средней, что позволяет провести параллель с работой пассивного затвора. Как в случае пассивной модуляции добротности, реализованной с помощью затвора, так и в случае самомодуляции добротности решетками коэффициента усиления, должен наблюдаться аналогичный многопиковый режим генерации.

В результате можно заключить, что, по-видимому, спектральная селективность решеток коэффициента усиления обусловлена двумя параметрами. С одной стороны, голограмму можно рассматривать как брэгговскую решетку, где селективность пропорциональна количеству тонких голограмм, т. е. обратно пропорциональна длине активного элемента. В этом случае ширина полосы генерации определяется только геометрическими параметрами решетки и не зависит от интенсивности записывающих пучков.

С другой стороны, голограмму можно рассматривать как пассивный затвор, который изменяет ширину полосы генерации за счет большего усиления центральных частотных компонент голограммами большей дифракционной эффективности. Это оказывает наиболее существенный вклад в селективность при больших интенсивностях записывающих пучков. Критерием заметного воздействия голограммы как пассивного затвора может служить самомодуляция добротности резонатора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pogoda, A.P.** High power Nd:YAG laser with self-pumped phase-conjugate loop cavity and repetitive pulsed diode-matrix side-pumping [Text] / A.P. Pogoda, T.B. Lebedeva, M.R. Yusupov [et al.] // Proc. of SPIE. — 2012. — Vol. 8677. — 86770Z (7 p.).
2. **Басиев, Т.Т.** Управление фазовой синхронизацией многоканальной голографической неодимовой лазерной системы с помощью пассивного лазерного затвора [Текст] / Т.Т. Басиев, А.В. Гаврилов, С.Н. Сметанин, А.В. Федин // Доклады Академии наук. — 2010. — Т. 430. — № 3. — С. 321–325.
3. **Damzen, M.J.** Bragg-selectivity of a volume gain grating [Text] / M.J. Damzen, Y. Matsumoto, G.J. Gross, R.P.M. Green // Optics Communications. — 1996. — Vol. 123. — P. 182–188.
4. **Petrov, M.P.** Spectral and electric field multiplexing of volume holograms and the potential of these techniques for holographic memory [Text] / M.P. Petrov, A.V. Shamray, V.M. Petrov // Optical Memory & Neural Networks. — 1998. — Vol. 7. — № 1. — P. 19–35.
5. **Minasian, A.** Spectral filtering of gain gratings and spectral evolution of holographic laser oscillators [Text] / A. Minasian, G.J. Crofts, M.J. Damzen // IEEE J. of Quantum Electronics. — 2000. — Vol. 36. — № 7. — P. 802–809.
6. **Басиев, Т.Т.** Одномодовый ИАГ:Nd-лазер с самонакачивающимся фазово-сопряженным петлевым резонатором [Текст] / Т.Т. Басиев, А.В. Федин, А.В. Гаврилов [и др.] // Квантовая электроника. — 1999. — Vol. 27. — № 5. — С. 145–148.

ПОГОДА Анастасия Павловна — ассистент кафедры И1 «Лазерная техника» Балтийского государственного технического университета «ВОЕНМЕХ».

190005, г. Санкт-Петербург, Красноармейская ул., 1

Pogoda@lsystems.ru

ЕРМОЛАЕВ Андрей Александрович — студент кафедры И1 «Лазерная техника» Балтийского государственного технического университета «ВОЕНМЕХ».

190005, г. Санкт-Петербург, Красноармейская ул., 1

Kenny-bgtu@list.ru

ЛЕБЕДЕВ Вячеслав Федорович — доцент кафедры И1 «Лазерная техника» Балтийского государственного технического университета «ВОЕНМЕХ».

190005, г. Санкт-Петербург, Красноармейская ул., 1

lebedevvf@mail.ru

СМЕТАНИН Сергей Николаевич — старший научный сотрудник Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН, доцент кафедры лазерной физики и технологии Ковровской государственной технологической академии им. В.А. Дегтярева.

601903, г. Ковров, ул. Кирова, 73

ssmetanin@bk.ru

БОРЕЙШО Анатолий Сергеевич — заведующий кафедрой И1 «Лазерная техника» Балтийского государственного технического университета «ВОЕНМЕХ».

190005, г. Санкт-Петербург, Красноармейская ул., 1

boreysho@lsystems.ru

УДК 535.37

В.В. Трегулов

УЛУЧШЕНИЕ И СТАБИЛИЗАЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

V.V. Tregulov

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

IMPROVEMENT AND STABILIZATION OF OPTICAL CHARACTERISTICS OF THE POROUS SILICON

Предложен способ стабилизации оптических характеристик пористого кремния, изготовленного методом анодного электрохимического окисления. Проведен анализ спектров фотолюминесценции и комбинационного рассеяния света пленок пористого кремния. Установлено, что наилучшие оптические характеристики достигаются при изготовлении образцов в электролите, содержащем водный раствор KMnO_4 , и в отсутствие освещения кремниевой пластины.

ПОРИСТЫЙ КРЕМНИЙ. ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ. КОМБИНАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА. РЕКОМБИНАЦИЯ. КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ.

The procedure for stabilization of optical characteristics of porous silicon made by electrochemical anodic oxidation has been presented. The photoluminescence spectra and Raman scattering of porous silicon films were analyzed. The best optical performance was found to achieve by making samples in electrolyte containing an aqueous solution of KMnO_4 and without illumination of a silicon wafer.

POROUS SILICON. PHOTOLUMINESCENCE. RAMAN SCATTERING. RECOMBINATION. QUANTUM SIZE EFFECT.

В настоящее время пористый кремний (*por-Si*) относится к перспективным материалам оптоэлектроники. На его основе можно изготавливать светоизлучающие диоды видимого и ближнего инфракрасного диапазона; его пленки можно использовать для генерации второй и третьей гармоник лазерного излучения. Применение антиотражающих слоев *por-Si* при изготовлении фотоэлектрических преобразователей солнечной энергии позволяет значительно увеличить их эффективность. Однако *por-Si* обладает существенным недостатком, который сдерживает его практическое приме-

нение, — это нестабильность оптических и электрофизических характеристик.

В данной работе исследовано влияние технологии изготовления *por-Si* на спектры фотолюминесценции (ФЛ) и комбинационного рассеяния света (КРС), и в результате предложен способ стабилизации его оптических характеристик.

Состояние проблемы и постановка задачи

Нестабильность фотолюминесценции *por-Si* объясняется образованием центров безызлучательной рекомбинации на поверхности кремниевых кристаллитов. Длительное



пребывание образцов на воздухе приводит к кислородной пассивации кристаллитов, и в результате они окружаются аморфным окисным слоем [1].

В целях стабилизации и повышения интенсивности ФЛ предпринимались многочисленные попытки пассивации кремниевых кристаллитов галогенами [2], а также за счет внедрения в матрицу *por-Si* различных металлов: золота, серебра, меди, алюминия, индия, железа [2]. В ряде случаев отмечалось их положительное влияние на стабильность оптических характеристик *por-Si*.

В работе [3] исследовали ФЛ *por-Si*, изготовленного методом электрохимического анодного окисления при добавлении соляной кислоты в стандартный электролит на основе этанола и плавиковой кислоты. Интенсивность ФЛ образца *por-Si*, изготовленного таким способом, превосходила на два порядка сигналы ФЛ образцов, полученных без добавления соляной кислоты. Кроме того, спектр ФЛ был стабилен в течение длительного времени. По мнению авторов [3], присутствие в электролите ионов хлора снижает концентрацию центров безызлучательной рекомбинации в *por-Si* за счет образования устойчивых связей Si—O.

В работе [2] исследованы спектры ФЛ образцов *por-Si*, изготовленных методом электрохимического анодного окисления кремниевой пластины в электролите стандартного состава с добавкой хлорного железа. Изготовленный таким образом *por-Si* отличался более интенсивной и стабильной ФЛ в течение длительного времени, по сравнению с ФЛ образцов, полученных без указанной добавки. Усиление интенсивности ФЛ авторы статьи [2] объясняют тем, что ионы Fe^{3+} являются сильным окислителем по отношению к кремнию и их присутствие в электролите добавляет химическое травление кремния к электрохимическому. В результате скорость травления увеличивается, кристаллиты становятся более мелкими, повышается локализация в них экситонов и, как следствие, возрастает излучательная рекомбинация. Стабилизация ФЛ в работе [2] объясняется заменой нестабильных связей Si—H более прочными:

Si—Fe и Si—O—Fe.

В данной работе показана возможность стабилизации ФЛ *por-Si*, изготовленного методом электрохимического анодного окисления, за счет введения в электролит водного раствора перманганата калия $KMnO_4$. Это химическое соединение является сильным окислителем по отношению к кремнию.

Технология изготовления образцов

Пленки *por-Si* формировались методом анодного электрохимического окисления на поверхности монокристаллической кремниевой пластины с проводимостью *p*-типа, удельным сопротивлением 1 Ом·см и ориентацией (100). Использовался электролит состава HF (48 %) + C_2H_5OH + водный раствор $KMnO_4$ с концентрацией 0,04 М (содержание компонентов 0,5 : 0,5 : 1,0). Выращивание пленки *por-Si* производилось в гальваностатическом режиме в течение одного часа при плотности тока 12,5 мА/см². Было изготовлено две группы образцов (по 10 образцов в каждой группе).

Первая группа была изготовлена без освещения поверхности кремниевой пластины в ходе электрохимического травления, вторая — при освещении галогенной лампой мощностью 100 Вт.

Была также изготовлена третья группа образцов (10 штук) в электролите стандартного состава HF (48 %) + C_2H_5OH , содержание компонентов 1 : 1, без добавления раствора $KMnO_4$. Плотность тока и длительность электрохимического процесса были такими же, как и для первых двух групп образцов. Поверхность кремниевой пластины в процессе роста пленки *por-Si* освещалась галогенной лампой мощностью 100 Вт.

После изготовления все образцы промывались в водном растворе плавиковой кислоты HF (20 %), затем в дистиллированной воде и высушивались на воздухе при температуре 90 °С (в сушильном шкафу).

Изготовленные таким образом пленки *por-Si* для всех групп образцов имели приблизительно одинаковую толщину: 25 ± 3 мкм. Толщина измерялась с помощью микроскопа на сколе образцов.

Воспроизводимость спектров ФЛ образцов в пределах каждой группы была приемлемой (разброс интенсивности ФЛ не превышал 4 %). В связи с этим в данной статье описываются результаты исследования типичных представителей из каждой группы. Номера образцов (№№ 1, 2, 3) соответствуют номерам своей группы (первой, второй и третьей).

Необходимость получения пленки *por-Si* достаточно большой толщины вызвана следующими соображениями. Для исследования спектров КРС использовался аргоновый лазер с длиной волны 488 нм. Поскольку такое излучение поглощается пористым кремнием достаточно слабо, в рассеяние света должна давать вклад монокристаллическая подложка. Чтобы этого избежать, регистрация спектров КРС проводилась на достаточно толстых пленках.

Исследование спектров фотолюминесценции

Для возбуждения ФЛ *por-Si* использовалось излучение азотного лазера мощностью 0,5 мВт с длиной волны 337 нм. Спектры ФЛ были получены на спектрометре USB-4000-VIS-NIR.

Регистрация спектров ФЛ производилась в одинаковых условиях, через сутки после изготовления образцов, а затем через один, два и шесть месяцев.

Все образцы обладали ФЛ в видимой области спектра. Важно отметить, что ФЛ в видимой области спектра наблюдалась для образцов № 1 и № 2, изготовленных без освещения поверхности кремниевой пластины и при ее освещении в электролите с добавкой перманганата калия. В то же время образец *por-Si*, полученный без этой добавки и без освещения, не обладал ФЛ в видимой области спектра.

На рис. 1 представлены спектры ФЛ исследуемых образцов, измеренные через сутки после изготовления. Видно, что наиболее высокая интенсивность ФЛ наблюдается у образца № 1, а самая низкая — у образца № 3.

Для образца № 1 длина волны, соответствующая максимуму полосы ФЛ ($\lambda_{\max}$), составила 691 нм. Интенсивность спектрального пика ($I_{\max}$) составила $3,11 \cdot 10^4$ о.е.

и была наибольшей среди всех образцов. В течение шести месяцев после изготовления изменение величины $\lambda_{\max}$ составило не более 1 нм, а интенсивности $I_{\max}$ — не более 4 %. Указанные изменения не превышали погрешности измерений, поэтому можно считать ФЛ образца № 1 стабильной.

Для образца № 2 в течение двух месяцев после изготовления значение $\lambda_{\max}$ возросло с 632 до 644 нм, тогда как значение $I_{\max}$ за указанный период снизилось на 5 %. В ходе дальнейших наблюдений изменения величин $\lambda_{\max}$ и $I_{\max}$ не превышали погрешности измерений. Таким образом, спектр ФЛ образца № 2 стабилизировался через два месяца после изготовления.

Для образца № 3 в течение шести месяцев после изготовления величина $\lambda_{\max}$ изменилась с 636 до 650 нм. Изменение значения $I_{\max}$ за указанный период составило 69 %. Следовательно, спектр ФЛ образца № 3 нельзя считать стабильным.

Исследование спектров комбинационного рассеяния света

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) широко используется в настоящее время для изучения свойств *por-Si*. Данный метод дает информацию о микроструктуре *por-Si* и характерных размерах кремниевых кристаллитов.

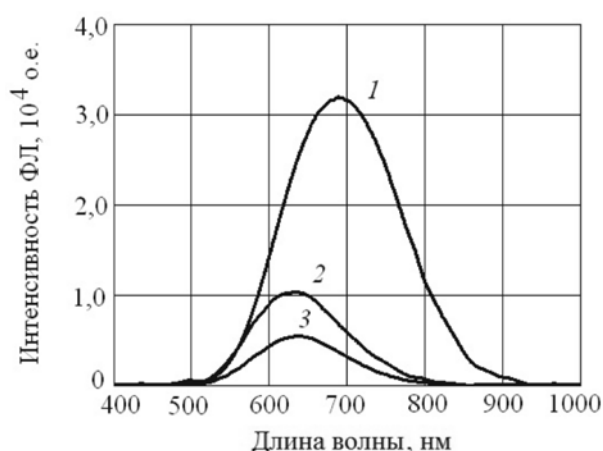


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции образцов № 1, № 2, № 3 (1 – 3), полученные через сутки после изготовления



При измерении КРС структуры возбуждались аргоновым лазером на длине волны 488 нм, а спектр регистрировался спектрометром U-1000 (Jobin Ivon), оборудованным микрофотометрической приставкой; это позволяло проводить измерения при диаметре лазерного пятна 4 мкм на поверхности образца. Для ослабления влияния подложки измерения проводились на поперечном срезе образца. Спектры КРС образцов снимались сразу после изготовления.

На рис. 2, б – г представлены спектры КРС образцов *por*-Si в диапазоне частот 400 – 600 см⁻¹. На рис. 2, а для сравнения показан спектр КРС монокристаллического кремния, который использовался в качестве подложки для выращивания слоев *por*-Si всех образцов.

Асимметричность линии КРС *por*-Si, ее сдвиг в низкочастотную область относительно частоты 520 см⁻¹, а также ее уширение, по сравнению со спектром монокристаллического кремния, объясняются эффектом пространственного ограничения фононов, который проявляется в ансамблях кремниевых кристаллитов размером в несколько нанометров [4]. Спектраль-

ная линия с частотой 520 см⁻¹ находится в области фундаментального оптического колебания кремния и определяется рассеянием на *LO*-фононе [4]. Она является линией первого порядка спектра КРС для кремния.

В спектрах КРС всех образцов *por*-Si присутствует линия с максимумом на частоте 480 см⁻¹. Согласно данным работы [5], эта линия определяется химическими связями Si–O–SiR или Si–SiR, где R – один из радикалов: H_n, OH или какой-либо другой.

Для определения размеров кремниевых кристаллитов проводилось моделирование спектральной линии КРС первого порядка вблизи частоты 520 см⁻¹ в соответствии с выражением [6]:

$$I(\nu) = \int_0^{q_0} \frac{|C(q)|^2 4\pi q^2 dq}{[\nu - \nu(q)]^2 + [\Gamma_0/2]^2}, \quad (1)$$

где Γ_0 – полуширина пика КРС монокристаллического кремния; $q_0 = 2\pi/a_0$ (a_0 – постоянная решетки монокристаллического кремния; $a_0 = 0,357$ нм); ν – текущее значение частоты; $\nu(q)$ – выражение, описывающее дисперсию фононов;

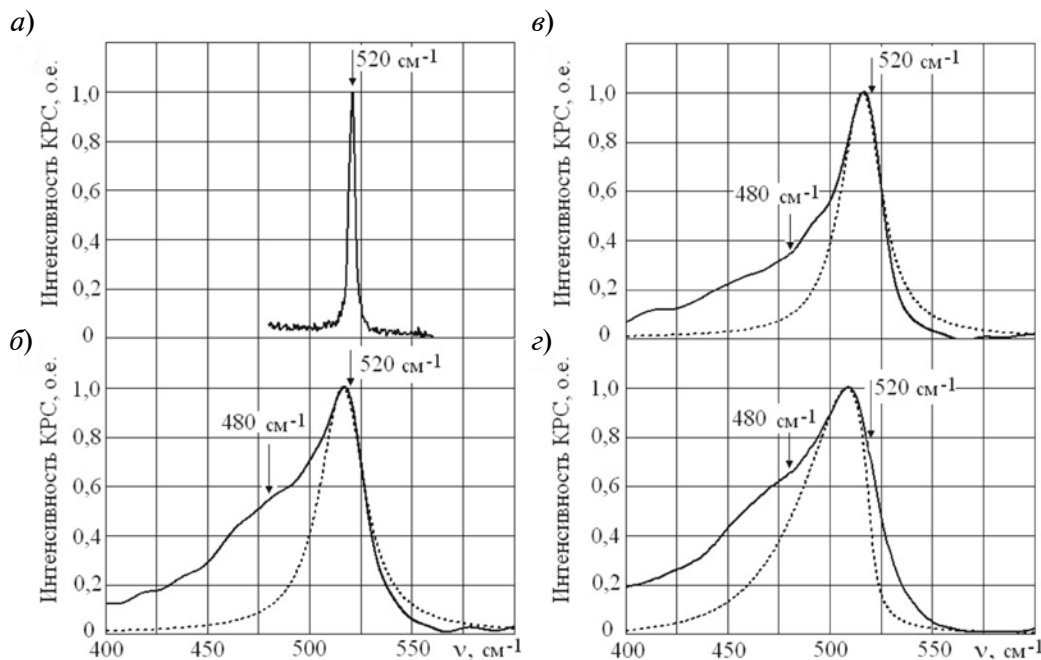


Рис. 2. Экспериментальные спектры комбинационного рассеяния света (сплошные линии): а – исходный монокристаллический кремний; б – г – образцы № 1, № 2, № 3 соответственно. Пунктиром показаны результаты моделирования спектров

$$|C(q)|^2 = \exp\left(-\frac{q^2 L^2}{16\pi^2}\right) \quad (2)$$

(L – диаметр кремниевого кристаллита [6]).

Выражение для дисперсии фононов имеет следующий вид [6]:

$$\nu(q) = \nu_0 - 120\left(\frac{q}{q_0}\right)^2, \quad (3)$$

где ν_0 – частота, соответствующая максимуму спектральной линии КРС первого порядка для монокристаллического кремния; $\nu_0 = 520 \text{ см}^{-1}$.

Результаты моделирования спектра КРС в диапазоне частот $400 - 600 \text{ см}^{-1}$ показаны на рис. 2, б – з пунктирной линией. Наблюдаемое расхождение между экспериментальными кривыми и результатом моделирования в области низких частот объясняется, в основном, присутствием в спектре линии 480 см^{-1} .

Значения диаметров L кремниевых кристаллитов в пленочных образцах *por-Si* приведены в таблице. Там же указаны значения $\lambda_{\max}$, определенные из спектров ФЛ, которые получены сразу после изготовления образцов.

Из данных таблицы и рис. 2 видно, что наименьшее значение L имеет образец № 3. При этом его спектр КРС имеет наибольшее уширение, а максимум КРС наиболее сильно сдвинут в область низких частот относительно линии 520 см^{-1} . Для образцов № 1 и № 2 сдвиг спектрального максимума КРС значительно меньше, при этом величина L больше. Такое поведение спектров КРС исследуемых образцов *por-Si* соответствует модели пространственного ограничения фононов в ансамблях кремниевых кристаллитов.

Значения параметров, найденных из спектров ФЛ и КРС

Образец	$\lambda_{\max}$, нм	L , нм
№ 1	691	7,0
№ 2	632	6,5
№ 3	636	2,8

Обозначения: $\lambda_{\max}$ – длина волны максимума в спектре ФЛ, L – размер кремниевого кристаллита по данным КРС.

Обсуждение результатов эксперимента

Из представленных экспериментальных данных видно, что пленки *por-Si*, изготовленные методом анодного электрохимического окисления в электролите, содержащем перманганат калия, отличаются более интенсивной и стабильной ФЛ по сравнению с образцами, полученными в стандартном электролите без добавок. Этот результат можно объяснить следующим образом.

В кислотной среде перманганат-ион MnO_4^- является сильным окислителем [7], следовательно добавление KMnO_4 в электролит приводит к ускорению окисления кремния. В итоге даже при отсутствии освещения поверхности кремниевой пластины в процессе роста *por-Si* кристаллиты становятся достаточно мелкими для того, чтобы наблюдалась ФЛ в видимой области спектра. Под действием света окислительная способность перманганата калия снижается, так как он превращается в диоксид марганца [7]. При этом концентрация центров излучательной рекомбинации будет меньше, чем в *por-Si*, изготовленном без освещения поверхности кремниевой пластины.

Стабилизация спектров ФЛ образцов № 1 и № 2 может быть объяснена эффектом пассивации поверхности кремниевых кристаллитов за счет замены связей Si-H на более стабильные связи Si-Mn и Si-O-Mn . Замена связей также должна способствовать росту количества центров излучательной рекомбинации.

Более низкую интенсивность ФЛ образца № 2, по сравнению с таковой для образца № 1, можно объяснить снижением химической активности окислительных процессов с участием перманганата калия при освещении.

Деградация спектров ФЛ образца № 3 объясняется снижением концентрации центров излучательной рекомбинации за счет разрыва связей Si-H и заменой их более стабильными связями Si-O [8].

В настоящее время большинство исследователей объясняют ФЛ образцов *por-Si* в видимой области спектра квантовым размерным эффектом в кремниевых кристал-



литах. При этом снижение размера кристаллитов приводит к сдвигу спектров ФЛ в коротковолновую область. Как видно из таблицы, такой корреляции в нашем случае не наблюдается. В случае корреляции образцы № 2 и № 3 должны иметь близкие значения L , а для образца № 1 значение L должно быть меньше. Например, в работе [9] приводятся следующие данные: спектры ФЛ *por*-Si со значениями $\lambda_{\max}$ в диапазоне 677 – 774 нм соответствуют размерам кристаллитов 3,1 – 3,7 нм.

Наблюдаемое несоответствие между величинами L и $\lambda_{\max}$ для образцов № 2 и № 3 можно объяснить снижением окислительной способности перманганата калия в ходе формирования пленки *por*-Si образца № 2. В результате начинают образовываться кристаллиты большего диаметра. Вблизи поверхности пленка *por*-Si содержит кристаллиты с малыми значениями L . Именно эта область дает основной вклад в ФЛ. С удалением от поверхности значение L возрастает. В спектры КРС образцов № 2 и № 3 основной вклад дают кристаллиты

большого диаметра. Как уже отмечалось, снижение окислительной способности KMnO_4 при изготовлении образца № 2 обусловлено влиянием освещения: под его воздействием протекают химические реакции между компонентами электролита, препятствующие образованию иона MnO_4^- .

В работе [10] называется еще одна причина увеличения размера кристаллитов в процессе роста пленки *por*-Si – ухудшение обмена электролита между порами и электролитической ячейкой. Этот механизм начинает проявляться с ростом глубины пор и актуален для пленок *por*-Si большой толщины.

Таким образом, добавление водного раствора перманганата калия в стандартный электролит, состоящий из плавиковой кислоты и этанола, при анодном электрохимическом методе формирования способствует стабилизации ФЛ пленок *por*-Si. При этом образцы, изготовленные без освещения кремниевой пластины, имеют более высокую интенсивность и стабильность ФЛ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шелонин, Е.А. Влияние термических отжигов и химических воздействий на фотолюминесценцию пористого кремния [Текст] / Е.А. Шелонин, М.В. Найденова, А.М. Хорт // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32. – № 4. – С. 494–496.
2. Шевченко, О.Ю. Оптические свойства нанопористого кремния, пассивированного железом [Текст] / О.Ю. Шевченко, Д.Н. Горячев, Л.В. Беляков, О.М. Сресели // Физика и техника полупроводников. – 2010. – Т. 44. – № 5. – С. 669–673.
3. Белогорохов, А.И. Оптические свойства слоев пористого кремния, полученных с использованием электролита $\text{HCl} : \text{HF} : \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ [Текст] / А.И. Белогорохов, Л.И. Белогорохова // Физика и техника полупроводников. – 1999. – Т. 33. – № 2. – С. 198–204.
4. Образцов, А.Н. Поглощение света и фотолюминесценция пористого кремния [Текст] / А.Н. Образцов, В.А. Караванский, Х. Окуши, Х. Ватанабе // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32. – № 8. – С. 1001–1005.
5. Salcedo, W.J. Influence of laser excitation on Raman and photoluminescence spectra and FTIR study of porous silicon layers [Text] / W.J. Salcedo, F.R. Fernandez, J.C. Rubim // Brazilian Journal of Physics. – 1999. – Vol. 29. – № 4. – P. 751–755.
6. Yang, M. Study of the Raman peak shift and the linewidth of light-emitting porous silicon [Text] / M. Yang, D. Huang, P. Hao // J. Appl. Phys. – 1994. – Vol. 75. – № 1. – P. 651–653.
7. Лидин, Р.А. Химические свойства неорганических веществ [Текст] / Р.А. Лидин, В.А. Молочко, Л.Л. Андреева. – М.: КолосС, 2006. – 480 с.
8. Филиппов, В.В. Спектры фотолюминесценции и фотовозбуждения пористого кремния, подвергнутого анодному окислению и травлению [Текст] / В.В. Филиппов, В.П. Бондаренко, П.П. Першукевич // Физика и техника полупроводников. – 1997. – Т. 31. – № 9. – С. 1135–1141.
9. Решина, И.И. Комбинационное рассеяние и люминесценция пористого кремния [Текст] / И.И. Решина, Е.Г. Гук // Физика и техника полупроводников. – 1993. – Т. 27. – № 5. – С. 728–735.
10. Буллах, Б.М. Взаимосвязь морфологии пористого кремния с особенностями спектров

комбинационного рассеяния света [Текст] / // Физика и техника полупроводников. — 2002.
Б.М. Буллах, Б.Р. Джумаев, Н.Е. Корсунская — Т. 36. — № 5. — С. 587–592.

ТРЕГУЛОВ Вадим Викторович — кандидат технических наук, доцент кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина.

390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46
trww@yandex.ru



УДК 538.975: 620.22 - 022.53

*Н.В. Андреева, В.А. Санина,
С.Б. Вахрушев, А.В. Филимонов, А.Э. Фотиади*

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ
ДЛЯ АНАЛИЗА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ
МАНГАНИТА ТЕРБИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО ВИСМУТОМ,
ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

*N.V. Andreeva¹, V.A. Sanina²,
S.B. Vakhrushev³, A.V. Filimonov⁴, A.E. Fotiadi⁵*

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

^{2, 3} Ioffe Physical Technical Institute,
26 Polytekhnicheskaya, St. Petersburg, 194021, Russia.

**USING ATOMIC-FORCE MICROSCOPY TECHNIQUES FOR AN ANALYSIS
OF FERROELECTRIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF BISMUTH-DOPED
TERBIUM MANGANITE AT LOW TEMPERATURES**

В работе представлены данные экспериментального исследования сегнетоэлектрических и магнитных свойств смешанного мультиферроика $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ по методикам магнитно-силовой микроскопии и атомно-силовой микроскопии пьезоотклика в диапазоне температур 4 – 30 К. Показано существование локального магнитного и сегнетоэлектрического упорядочения в кристалле $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ при низких температурах. Проведенный анализ распределения ферромагнитных кластеров и полярных нанодоменов на поверхности кристалла $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ выявил отсутствие корреляции между ними при температурах 4 – 30 К.

СМЕШАННЫЕ МУЛЬТИФЕРРОИКИ. МАНГАНИТ ТЕРБИЯ. ВИСМУТ. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПЬЕЗООТКЛИКА. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ МАГНИТНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ.

Magnetic and ferroelectric properties of the doped single crystal $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ have been investigated using magnetic force microscopy and piezoresponse force microscopy in the temperature range of 4 – 30 K. Local magnetic and ferroelectric ordering in the $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ crystal was observed at low temperatures. An absence of correlation in distribution of ferromagnetic clusters and polar nanodomain areas was found in the temperature range of 4 – 30 K.

MULTIFERROICS. MANGANITE OF TERBIUM. BISMUTH. LOW TEMPERATURE PIEZORESPONSE FORCE MICROSCOPY. LOW TEMPERATURE MAGNETIC FORCE MICROSCOPY.

В настоящее время исследования мультиферроиков — материалов, в которых наблюдается сосуществование магнетизма и сегнетоэлектричества, являются перспективными с точки зрения их практического применения. К возможным областям ис-

пользования подобных материалов можно отнести создание магнитоэлектрических запоминающих устройств, в которых считывание информации основано на чувствительном изменении намагниченности в переменном электрическом поле и мо-

жет быть очень быстрым, а также электрооптических устройств с переключением в магнитном поле, в которых обращение поляризации магнитным полем исключает необходимость применения тонких пластинок и сильных электрических полей.

В мультиферроиках типа манганитов $RMnO_3$ (где $R = Tb, Eu, Gd$) температуры сегнетоэлектрического и магнитного упорядочения близки между собой и наблюдается сильная связь между электрическими и магнитными свойствами. Так, в $TbMnO_3$ сегнетоэлектрическое (СЭ) и магнитное упорядочения возникают при температурах 30 и 40 К, соответственно [1]. Существенным недостатком соединений данного типа, препятствующим их практическому применению, являются низкие температуры СЭ и магнитного упорядочения. В ряде работ [2, 3] были проведены исследования магнитоэлектрических свойств соединения $TbMnO_3$, допированного висмутом, с целью получения мультиферроика, у которого температуры магнитного и СЭ упорядочения окажутся близкими, но более высокими, чем в исходном $TbMnO_3$. В работах [2–5] были проведены исследования температурных зависимостей сопротивления, емкости, индуктивности, магнитного момента и диэлектрической проницаемости смешанного мультиферроика $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$. На основании полученных данных была построена следующая модель поведения указанного соединения. При росте кристалла формируются квазидвумерные слои, содержащие легирующие ионы, ионы марганца разной валентности, а также легкие носители заряда (электроны). При низких температурах ионы марганца и электроны сосредоточены в этих слоях. Основным объемом монокристалла не содержит мобильных носителей заряда и является диэлектриком. При температуре 180 К происходит фазовый переход: возникает перераспределение электронов и ионов марганца и формируется новое состояние кристалла с периодическим чередованием слоев, содержащих ионы Mn^{3+} и Mn^{4+} , и, как следствие, возникает зарядовое СЭ. Данное сегнетоэлектрическое состояние сопровождается значительными диэлектрической проницаемости

($\epsilon \approx 10^4 - 10^5$) и ферромагнитной ориентацией спинов спаренных ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} . Это состояние управляется магнитным полем, оно сдвигает температуру фазового перехода в область более высоких температур и индуцирует новый фазовый переход при $T \approx 441$ К.

Цель настоящей работы – исследование магнитных и СЭ свойств кристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ методами магнитно-силовой микроскопии и атомно-силовой микроскопии пьезоотклика при низких (8 – 30 К) температурах.

Материалы и методы

Монокристалл $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ был выращен методом спонтанной кристаллизации. Размеры исследуемого образца составили $2,0 \times 1,0 \times 0,5$ мм. Для интерпретации полученных результатов были определены направления кристаллографических осей в образце методом дифрактометрии на дифрактометре SuperNova (Oxford Diffraction, Великобритания). Направление осей в монокристалле показано на рис. 1.

Определение магнитной и СЭ структур соединения $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ проводилось на криогенном атомно-силовом микроскопе AttoAFM-I (AttocubeSystems, Германия), который позволяет измерять топографию, магнитные и электрические свойства поверхности образцов в диапазоне температур от 4 до 285 К.

Для исследований в режимах магнитно-силовой микроскопии и силовой микроскопии пьезоотклика поверхность кристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ была тщательно подготовлена. Подготовка заключалась в обеспечении «идеально» гладкого рельефа путем полировки и удаления приповерхностного слоя адсорбата с помощью специальной про-

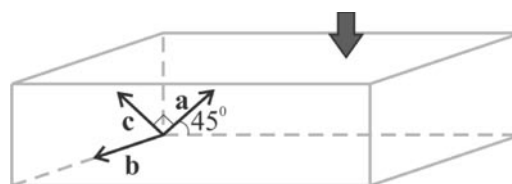


Рис. 1. Направление кристаллографических осей в образце.
Стрелкой показана исследуемая поверхность



цедуры очистки. Полировка включала две стадии: грубая обработка — когда образец полировался мелкой наждачной бумагой, и окончательная — когда образец полировался абразивной алмазной пастой с размером крупинок 0,5 мкм. Степень шероховатости поверхности подготовленного образца составляла 15 нм. Высокие требования к отсутствию выраженного рельефа поверхности образца были обусловлены методикой магнитных измерений и направлены на исключение артефактов при измерении магнитных свойств, а также обеспечение однозначной интерпретации получаемых результатов. Поверхностный адсорбат удалялся путем кипячения образца в толуоле и промывки его дистиллированной водой. Наличие адсорбата на поверхности образца недопустимо, так как может приводить к снижению чувствительности измерений его магнитных свойств методами АСМ (вплоть до полной ее потери), а также к искажению результатов измерений СЭ свойств. Степень подготовки поверхности образца контролировалась путем топографических измерений.

Для магнитных измерений были выбраны зонды MAGT (Applied NanoStructures Inc., США) из поликристаллического кремния, покрытые слоем кобальта. Общий радиус закругления иглы используемых зондов составлял 40 нм, резонансная частота — 62 кГц, жесткость — 3 Н/м.

Для исследования магнитных свойств поверхности монокристалла $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ была модифицирована стандартная методика магнитно-силовой микроскопии, подразумевающая получение данных о рельефе поверхности образца на первом проходе сканирования в колебательном режиме. Данное условие обеспечивает максимальную сохранность магнитного покрытия зонда. Модификация методики магнитных измерений была обусловлена следующими причинами. Согласно стандартной методике, высота линии второго прохода задается относительно линии первого прохода. Для повышения чувствительности магнитных измерений необходимо обеспечить как можно меньшую высоту линии второго прохода над поверхностью образца. При

регистрации топографии в колебательном режиме высота линии первого прохода, как правило, варьируется от 50 до 200 нм. При измерении рельефа поверхности в контактном режиме высота линии первого прохода равна нулю, а это позволяет минимизировать высоту линии второго прохода и значительно повысить разрешение при регистрации магнитных свойств.

Для измерений поверхностного пьезоотклика кристалла $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ методом атомно-силовой микроскопии пьезоотклика [6] использовался тот же тип зондов, что и для получения данных по методике магнитно-силовой микроскопии. Суть такой методики состоит в измерении локального механического отклика от поверхности образца под действием переменного электрического поля зонда атомно-силового микроскопа. При наличии пьезоотклика от поверхности локальное приложение электрического поля приведет к расширению или сужению области образца под зондом. Величина локального пьезоэлектрического отклика образца определяется величиной отклонения зонда на частоте прикладываемого электрического поля. Фаза пьезоэлектрического отклика от поверхности зависит от направления поляризации образца под зондом. Для доменов, ориентированных перпендикулярно поверхности, с вектором поляризации, направленным вниз, колебания области под зондом будут находиться в фазе с приложенным напряжением, и фаза ϕ будет равна нулю. Для доменов, ориентированных также перпендикулярно поверхности, но с вектором поляризации, направленным вверх, колебания области под зондом будут находиться в противофазе к приложенному напряжению, и фаза ϕ будет равна 180° .

С целью повышения чувствительности была также модифицирована стандартная методика силовой микроскопии пьезоотклика. Необходимость в увеличении чувствительности методики была обусловлена малым значением поляризации у монокристалла TbMnO_3 (величина поляризации при $T \approx 10$ К — около $8 \cdot 10^{-4}$ Кл·м $^{-2}$ [7]), по сравнению с известными для классических сегнетоэлектриков (например, у титаната

бария BaTiO_3 величина поляризации составляет примерно $2,6 \cdot 10^{-2}$ Кл·м⁻²). Чувствительность метода атомно-силовой микроскопии пьезоотклика была нами повышена за счет использования режима локального контактного резонанса. Для этого частота прикладываемого к зонду переменного электрического поля выбиралась в соответствии с локальным резонансом контакта зонд-образец. Соблюдение данного условия обеспечило повышение чувствительности методики измерений пьезоотклика в число раз, равное добротности зонда. Поскольку добротность зонда в воздухе лежит в пределах 100 — 500 (в зависимости от материала и геометрии самого зонда), использование режима контактного резонанса позволило повысить чувствительность метода как минимум в 100 раз.

Экспериментальные результаты

Полученные нами данные по магнитным свойствам поверхности монокристалла $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ представлены на рис. 2.

Анализ распределения магнитного отклика от поверхности кристалла $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ показывает наличие локальных областей с повышенной намагниченностью. Следует отметить, что отсутствие сходства между рельефом и отображением магнитных свойств монокристалла подтверждает достоверность выявленной при измерении магнитной структуры образца.

Был проведен автокорреляционный анализ магнитно-силового изображения

поверхности. Форма пространственной автокорреляционной функции для распределения магнитных свойств по поверхности соответствовала изотропному распределению магнитных областей, что свидетельствует об отсутствии дальнего порядка в распределении магнитных свойств. Из симметричности пика автокорреляционной функции был сделан вывод об отсутствии выделенного направления ориентации магнитных доменов в плоскости образца в нулевом внешнем магнитном поле. Вычисленная длина автокорреляции по срезу автокорреляционной функции составила 750 нм, что свидетельствует о локальном магнитном упорядочении на поверхности исследуемого образца. Отсутствие корреляции при анализе рельефа поверхности кристалла говорит о том, что магнитный отклик от поверхности не определяется структурными особенностями топографии.

Таким образом, исследование поверхности смешанного мультиферроика $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ методами МСМ показало наличие локального магнитного упорядочения при отсутствии дальнего порядка магнитной структуры. Определенный с помощью автокорреляционного анализа размер магнитных доменов составил 750 нм.

Следует отметить, что размер магнитных доменов на поверхности образца может отличаться от размера доменов его объемной магнитной структуры [8]. Отличия могут быть обусловлены как особенностями методики исследования магнитного отклика

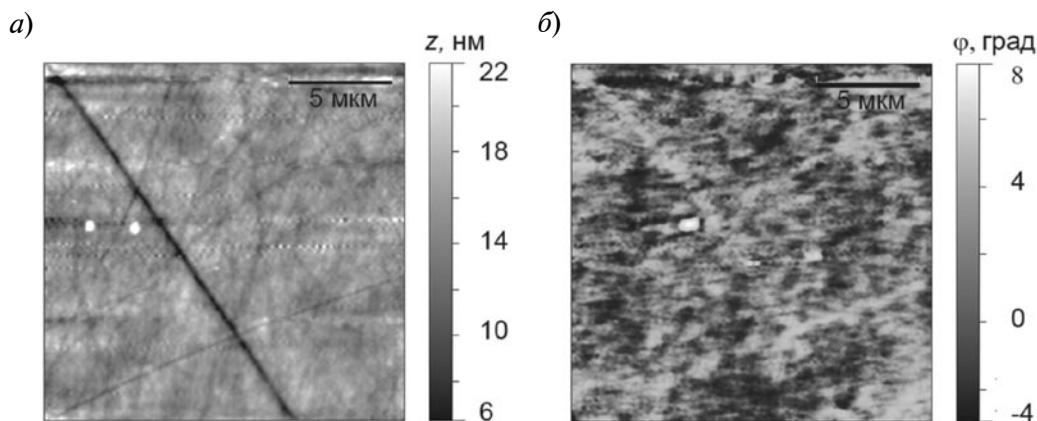


Рис. 2. Изображения рельефа (а) и магнитного отклика (б) от поверхности $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$

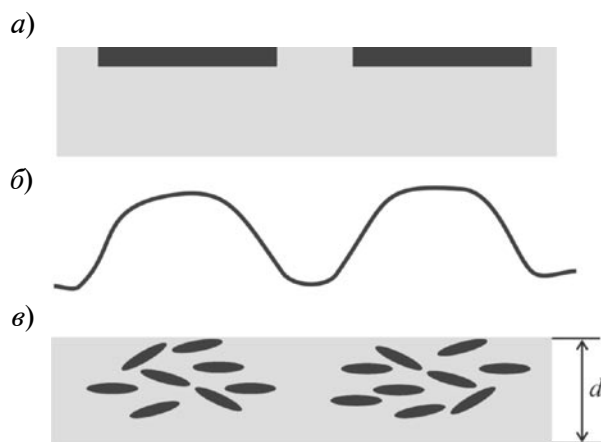


Рис. 3. Схема предлагаемой интерпретации полученных результатов: распределение магнитных свойств (а) и профиль намагниченности (б) поверхности по данным МСМ; в — распределение магнитных доменов в объеме образца (d — толщина слоя). МСМ-методика оказывается нечувствительной к объемному распределению доменов, поэтому размеры доменов на поверхности и в объеме образца различны

поверхности с помощью МСМ, так и особенностями процессов формирования самой поверхности образца [9]. Необходимо учитывать тот факт, что зондовые методы исследования поверхности всегда показывают распределение свойств в некотором приповерхностном слое (рис. 3). Глубина сканируемого слоя d определяется многими факторами: свойствами образца, характеристиками зонда (в данном случае речь идет о намагниченности образца и зонда), ре-

жимом сканирования. Так, возможно, что обнаруженные на поверхности магнитные домены могут иметь тонкую подструктуру, наличие которой объясняется регистрацией магнитного отклика со слоя определенной глубины (см. рис. 3). Если по объему слоя изотропно распределены более мелкие домены, то возможны ситуации, когда особенности магнитной объемной структуры не разрешаются методом магнитно-силовой микроскопии, разрешение которой ограничивается радиусом закругления иглы зонда и в нашем случае составляет 90 нм. Поэтому результаты, полученные с помощью зондовых методов, необходимо дополнять другими методами, например, порошковой дифракции нейтронов [10] и магнитного резонансного рассеяния синхротронного излучения на монокристаллах данного образца.

По результатам измерений в режиме силовой микроскопии пьезоотклика было установлено, что в температурном диапазоне до 30 К существуют полярные области, обладающие слабым пьезоэлектрическим откликом. Результаты исследования распределения полярных областей на поверхности $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ представлены на рис. 4.

Согласно полученным экспериментальным данным, полярные области на поверхности $\text{Tb}_{0,95}\text{Bi}_{0,05}\text{MnO}_3$ имеют полоскообразную структуру, толщина полос составляет порядка 250 нм, длина может достигать нескольких микрон. На некоторых участ-

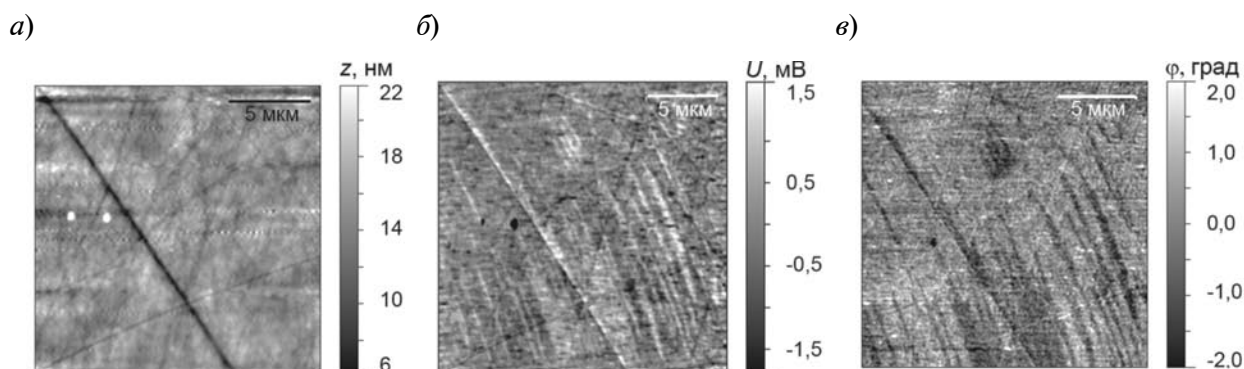


Рис. 4. Результаты измерений топографии (а), распределения амплитуды (б) и фазы (в) пьезоэлектрического отклика от поверхности монокристалла при $T = 4 - 30$ К. Светлые (б) и темные (в) наклонные слои соответствуют поляризованным областям

ках поверхности наблюдалось слияние нескольких полярных областей в одну, из-за чего создавался эффект утолщения ряда полос.

По результатам анализа корреляции распределения магнитных свойств с распределением полярных областей на поверхности монокристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ не было выявлено какой-либо связи между магнитными и поляризованными областями при низких температурах.

Анализ полученных результатов

Согласно результатам исследования магнитных свойств монокристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$, полученным по методике магнитно-силовой микроскопии, на поверхности кристалла в диапазоне температур 4 – 30 К существует локальное магнитное упорядочение при отсутствии дальнего порядка магнитной структуры.

Мы предполагаем, что основной вклад в распределение магнитных свойств по поверхности монокристалла дают изолированные ферромагнитные области (кластеры). Механизм формирования ферромагнитных кластеров можно объяснить следующим образом. Появление больших по размеру ионов висмута в позициях тербия в кристаллической решетке $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ приводит к ее локальным искажениям, что изменяет валентное состояние ближайших ионов марганца, т. е. приводит к появлению ионов Mn^{4+} . Обменное взаимодействие между ионами Mn^{3+} и Mn^{4+} , известное как двойной обмен, и приводит к возникновению ферромагнетизма. Этот механизм предполагает наличие туннелирования электрона с орбитали e иона Mn^{3+} на пустую орбиталь e^g иона Mn^{4+} через промежуточный лиганд. Из-за сильного внутриатомного взаимодействия (правило Хунда) прыжки электрона возможны только в случае, если спины у пары соседних ионов $Mn^{3+} - Mn^{4+}$ параллельны, что благоприятствует появлению ферромагнетизма. Появление таких пар ионов и свободных носителей из-за локальных нарушений кристаллической структуры в окружении ионов тербия приводит к фор-

мированию ферромагнитных кластеров.

Таким образом, малое по концентрации замещение тербия на висмут в соединении $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ подавляет внутренне присущий тербию дальний порядок, и происходит трансформация этого порядка в коррелированное локальное упорядочение, наблюдаемое на распределении магнитных свойств по поверхности образца в диапазоне температур 4 – 30 К.

Существование полярных нанобластей на поверхности монокристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ свидетельствует о сегнетоэлектрическом упорядочении в данном соединении в диапазоне температур 4 – 30 К. Экспериментально наблюдаемое упорядочение в $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ соответствует такому упорядочению в исходном нелегированном кристалле. Этот факт свидетельствует об эквивалентности дальнего сегнетоэлектрического порядка в монокристаллах $TbMnO_3$ и $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$. Следовательно, основной объем соединения $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ действительно занят исходным нелегированным кристаллом. Малая доля объема кристалла, модифицированная легированием, не проявляется на фоне дальнего сегнетоэлектрического упорядочения исходного кристалла.

Таким образом, исследование смешанного мультиферроика $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ по методике магнитно-силовой микроскопии и атомно-силовой микроскопии пьезоотклика в диапазоне температур 4 – 30 К показало существование локального магнитного и дальнего сегнетоэлектрического типов упорядочения. Сравнение распределения ферромагнитных кластеров на поверхности кристалла $Tb_{0,95}Bi_{0,05}MnO_3$ с распределением полярных нанобластей выявило отсутствие корреляции между ними при низких температурах.

Низкотемпературные исследования сегнетоэлектрических и магнитных свойств смешанного мультиферроика манганита тербия, легированного висмутом, по методикам атомно-силовой микроскопии проведены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России. Контракт № 11.519.11.3033 от 12 марта 2012 г.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Hur, N.** Electric polarization reversal and memory in a multiferroic material induced by magnetic fields [Text] / N. Hur, S. Park, P.A. Sharma [et al.] // *Nature*. – 2004. – Vol. 429. – P. 392–395.
2. **Golovenchits, E.I.** Dielectric and magnetic properties of the multiferroic $\text{Tb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{MnO}_3$: Electric dipole glass and self-organization of charge carriers [Text] / E.I. Golovenchits, V.A. Sanina // *JETP Lett.* – 2005. – Vol. 81. – № 10. – P. 509–513.
3. **Golovenchits, E.I.** Magnetic-field-induced phase transition in $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_{3+\delta}$ multiferroic [Text] / E.I. Golovenchits, V.A. Sanina // *JETP Lett.* – 2006. – Vol. 86. – № 4. – P. 190–194.
4. **Санина, В.А.** Магнитные свойства, магнитосопротивление и фазовые переходы, индуцированные магнитным полем, в мультиферроиках $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$ и $\text{Eu}_{0.8}\text{Ce}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$ [Текст] / В.А. Санина, Е.И. Головенчиц, В.Г. Залесский // *ФТТ*. – 2008. – Т. 50. – Вып. 5. – С. 883–889.
5. **Санина, В.А.** Фазовое расслоение с зарядовой самоорганизацией в манганитах-мультиферроиках $\text{Tb}_{0.95}\text{Bi}_{0.05}\text{MnO}_3$, $\text{Gd}_{0.75}\text{Ce}_{0.25}\text{Mn}_2\text{O}_5$ и $\text{Eu}_{0.8}\text{Ce}_{0.2}\text{Mn}_2\text{O}_5$ [Текст] / В.А. Санина, Е.И. Головенчиц, В.Г. Залесский // *ФТТ*. – 2008. – Т. 50. – Вып. 5. – С. 874–883.
6. **Андреева, Н.В.** Исследование поверхностного пьезоотклика керамики титаната стронция методами силовой микроскопии пьезоотклика при низких температурах [Текст] / Н.В. Андреева, С.А. Плясцов, А.В. Филимонов // *Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки*. – 2012. – № 1 (141). – С. 7–12.
7. **Kimura, T.** Magnetic control of ferroelectric polarization [Text] / T. Kimura, T. Goto, H. Shintani [et al.] // *Nature*. – 2003. – Vol. 426. – P. 55–59.
8. **Антропова, Т.В.** Структура магнитных нанокластеров в железосодержащих щелочно-боросиликатных стеклах [Текст] / Т.В. Антропова, И.Н. Анфимова, И.В. Голосовский [и др.] // *ФТТ*. – 2012. – Т. 54. – Вып. 10. – С. 1977–1982.
9. **Wurz, M.C.** Investigation of the crystallization of NiFe81/19 depending on the annealing temperature [Text] / M.C. Wurz, A. Shaganov, L. Rissing, A. Filimonov, S. Vakhrushev // *Magnetic Materials, Processes and Devices*. – 2012. – Vol. 50. – № 10. – P. 147–156.
10. **Борисов, С.А.** Критическое рассеяние нейтронов в одноосном релаксоре $\text{Sr}_{0.6}\text{Ba}_{0.4}\text{Nb}_2\text{O}_6$ [Текст] / С.А. Борисов, Н.М. Окунева, С.Б. Вахрушев [и др.] // *ФТТ*. – 2013. – Т. 54. – Вып. 10. – С. 295–302.

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

САНИНА Виктория Александровна – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории магнетизма и сегнетоэлектричества Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

ВАХРУШЕВ Сергей Борисович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией нейтронных исследований Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

УДК 537.634.2

*Е.Ю. Королева, А.А. Набережнов,
В.И. Нижанковский, Н.И. Поречная*

МАГНИТОСТРИКЦИЯ И НАМАГНИЧЕННОСТЬ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ СТЕКОЛ

*Е.Yu. Koroleva^{1,2}, A.A. Naberezhnov^{1,2,3},
V.I. Nizhankovskii³, N.I. Porechnaya⁴*

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

^{1,2} Ioffe Physical Technical Institute,
26 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia.

^{2,3} International Laboratory of High Magnetic Fields and Low Temperatures,
Gajowicka 95, 53-421 Wroclaw, Poland.

MAGNETOSTRICTION AND MAGNETIZATION OF FERRIFEROUS GLASSES

Определены полевые зависимости коэффициентов продольной, поперечной и объемной магнитострикции для железосодержащих щелочноборосиликатных стекол, содержащих в порах внедренный сегнетоэлектрик KNO_3 . Получена полевая зависимость намагниченности исходного магнитного непористого стекла, на базе которого изготавливались образцы, и определена величина коэрцитивного поля.

МАГНИТОСТРИКЦИЯ. НАМАГНИЧЕННОСТЬ. НАНОКОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ.

The field dependencies of transverse, longitudinal and volume magnetostrictions for ferriferous alkali boron silicate glasses with KNO_3 ferroelectric embedded into the pores have been determined. The magnetization dependence on applied magnetic field for initial nonporous ferriferous glasses was obtained and the coercive force was determined.

MAGNETOSTRICTION. MAGNETIZATION. NANOCOMPOSITE MATERIALS.

В последние годы пристальное внимание уделяется созданию новых многофункциональных материалов, в первую очередь мультиферроиков, сочетающих в себе сегнетоэлектрическое и магнитное упорядочения. Такие материалы актуальны, в первую очередь, для спинтроники, и в настоящее время создан ряд двумерных (2D) и трехмерных (3D) структур на основе либо чередующихся тонких пленок с сегнетоэлектрическим и магнитным упорядочениями, либо 3D-столбчатых структур, в которых переключение поляризации используется для управления спиновым состоянием в магнитной системе [1 – 3]; разработаны

сегнетоэлектрические транзисторы с колоссальным магнитосопротивлением [4]. В работах [5 – 7] описано переключение магнитной системы в модельном мультиферроике BiFeO_3 под воздействием электрического поля. В подобных структурах взаимодействие между подсистемами осуществляется, в основном, благодаря стрикционным явлениям на границе раздела; таким образом, увеличение этого интерфейса становится приоритетной задачей. Один из способов ее решения – создание нанокompозитных материалов с одновременно существующими, пространственно разделенными сегнетоэлектрической и маг-



нитной подсистемами; их основой служат пористые матрицы, обладающие высокой сквозной пористостью. Средний диаметр пор можно контролировать и варьировать в широких пределах от единиц до сотен нанометров, а само распределение пор по диаметрам оказывается достаточно узким (до 10 – 15 %). Недавно были получены железосодержащие пористые стекла [8], и показано, что внутри каркаса матрицы образуются наночастицы магнетита [9]. Наличие явно выраженных магнитных свойств у этих матриц было установлено в работе [10]. Пустые поры этих матриц предполагается заполнять сегнетоэлектриком, что открывает возможность детально исследовать взаимодействие пространственно разделенных сегнетоэлектрической и магнитной подсистем через упругие деформации самой матрицы при приложении внешнего магнитного и/или электрического полей. Следует отметить, что данные наноконпозиции аналогичны разрабатываемым в настоящее время пленочным (горизонтальным) многослойным гетероструктурам, в которых чередуются слои сегнетоэлектрика и ферритмагнетика, или вертикальных наноструктур из несмешиваемых фаз (например, шпинели и перовскита [11]), в которых колонки (стержни) одной фазы внедряются в матрицу другой. В наноконпозиционных материалах на основе пористых стекол обеспечивается большое отношение интерфейса к объему, т. е. именно тот параметр, который необходим для взаимодействия через упругие напряжения, причем на характерном масштабе единиц и десятков нанометров при соответствующем выборе среднего диаметра пор. Для определения величины ожидаемых упругих деформаций каркаса магнитной матрицы при приложении внешнего магнитного поля в данной работе и были проведены измерения магнитострикции для микропористых (со средним диаметром пор 5 ± 2 нм и пористостью около 15 % [9]) стекол, приготовленных одностадийным травлением из исходных стекол, имевших состав $60\% \text{SiO}_2 \cdot 15\% \text{B}_2\text{O}_3 \cdot 5\% \text{Na}_2\text{O} \cdot 20\% \text{Fe}_2\text{O}_3$ [8] и любезно предоставленных для исследования

сотрудниками Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН (ИХС РАН).

Объекты исследования и методика измерений

Полученные из ИХС РАН микропористые стекла были заполнены нитратом калия KNO_3 из расплава под давлением, заполнение составляло примерно 60 % от общего порового пространства. Ранее было показано [12], что при определенных условиях нитрат калия в условиях ограниченной геометрии находится в сегнетоэлектрической фазе вплоть до самых низких температур, поэтому именно этот материал и был выбран для заполнения. Из приготовленных образцов для исследования магнитострикции была выбрана плоскопараллельная пластина размером $4,8 \times 4,8 \times 0,54$ мм. Она была тщательно высушена и очищена от остатков нитрата калия на поверхности. Исследования проводились в Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур (г. Вроцлав, Польша). Относительные удлинения образцов измерялись на емкостном dilatометре при частоте 1 кГц в специально сконструированной ячейке [13], при температуре 4,2 К, по методике, описанной в статье [13], с применением магнитных полей до 14 Тл, создаваемых сверхпроводящим магнитом Oxford Instruments (скорость изменения поля составляла 0,5 Тл/мин). Измерения намагниченности образца исходного магнитного непористого стекла были проведены на вибрационном магнитометре также при температуре 4,2 К. Стабильность температуры при проведении измерений в обоих случаях была не хуже 0,01 К.

Результаты и их обсуждение

Полученные результаты измерения относительного удлинения образца от величины приложенного магнитного поля для двух его направлений (перпендикулярно плоскости пластины и вдоль нее), а также рассчитанное изменение объема образца представлены на рис. 1. Целесообразно сопоставить эти результаты с полученными данными по намагниченности образца. Хо-

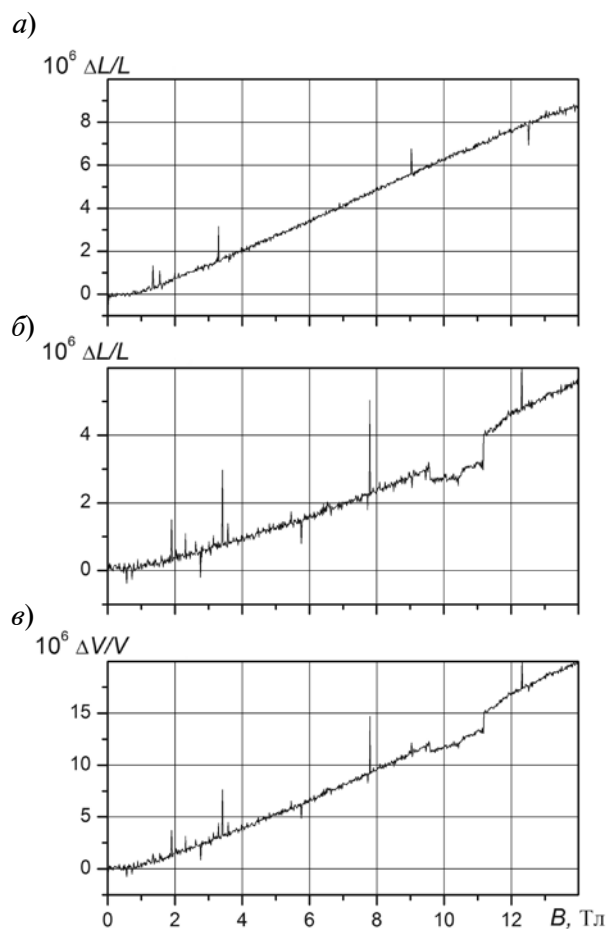


Рис. 1. Экспериментальные величины коэффициента продольной (а) и поперечной (б) магнитострикции, а также коэффициент объемной магнитострикции (в), рассчитанный по данным (а, б), как функции от магнитной индукции приложенного поля для микропористого железосодержащего стекла с нитратом калия, внедренным в поры

рошо видно, что при значениях магнитной индукции до 2 Тл (малые поля), где еще не происходит полной намагниченности образца (рис. 2), наблюдается область нелинейного роста относительного удлинения (см. рис. 1), однако в полях, превышающих 2 Тл, т. е. когда намагниченность практически достигает насыщения, значения коэффициентов продольной, поперечной и объемной магнитострикции растут линейно. Поскольку исходное распределение магнитных частиц в скелете матрицы является случайным и изотропным, то не ожидалось разницы между коэффициентами

поперечной и продольной магнитострикции, однако в эксперименте такая разница наблюдалась. Наиболее логично объяснить этот экспериментальный факт появлением некоторой анизотропии в процессе травления. Напомним, что сквозное травление для получения пористых матриц проводилось на тонких плоских пластинах; при этом процесс активно развивался перпендикулярно поверхности, а не вдоль узких торцов образца.

Полученные значения коэффициентов линейной ($8,8 \cdot 10^{-6}$ и $5,6 \cdot 10^{-6}$) и объемной ($2,0 \cdot 10^{-5}$) магнитострикций сравнимы с коэффициентами линейной магнитострикции для большинства материалов (они находятся в пределах $(2 - 9) \cdot 10^{-5}$). Полученная информация о величинах коэффициентов магнитострикции и об их полевой зависимости позволяет провести оценку диапазона необходимых магнитных полей для изучения влияния магнитного поля на сегнетоэлектрическую подсистему в подобных магнитных нанокompозитных материалах. Ранее в работе [9] было показано, что в подобных стеклах существуют частицы магнетита с характерным размером 15 – 17 нм. Если учесть, что сферические частицы магнетита размером около 130 нм уже являются однодоменными (см. работу [14]), а методом компьютерного моделирования [15] было показано, что наночастицы

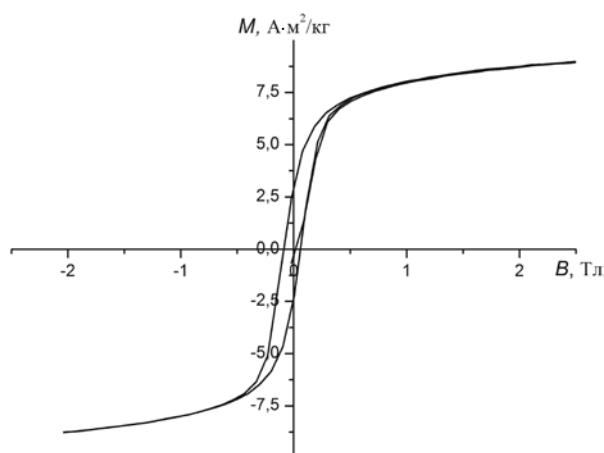


Рис. 2. Зависимость намагниченности от индукции приложенного магнитного поля для исходного непористого стекла



магнетита размером меньше 24 нм обладают суперпарамагнитными свойствами, то полевая зависимость намагниченности (см. рис. 2) не вызывает удивления, так как она характерна для ансамбля «независимых» суперпарамагнитных частиц. Из приведенных кривых было получено значение коэрцитивного поля ($H_c = 69,25$ кА/м = 870 Э), которое хорошо совпадает с величиной, полученной ранее из исследования магнитного отклика методом магнитно-силовой микроскопии [10].

Итак, в работе впервые получены полевые зависимости коэффициентов магнитострикции при 4,2 К в магнитных полях с индукцией до 14 Тл для нанокompозитно-

го материала на основе железосодержащего пористого стекла, содержащего в порах сегнетоэлектрик — нитрат калия.

Полученная разница для коэффициентов продольной и поперечной (относительно направления приложенного поля) магнитострикции связана, скорее всего, с появлением анизотропии магнитных свойств в процессе приготовления пористых стекол.

Исследована полевая зависимость намагниченности исходного непористого магнитного стекла в магнитных полях с индукцией до 14 Тл при температуре 4,2 К и определено значение коэрцитивного поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ и РФФИ (грант 12-02-00230).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Garcia, V.** Ferroelectric control of spin polarization [Text] / V. Garcia, M. Bibes, L. Bocher [et al.] // Science. — 2010. — Vol. 357. — P. 1106–1110.
2. **Niranjan, M.K.** Magnetoelectric effect at the $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{BaTiO}_3$ (001) interface: a first-principles study [Text] / M.K. Niranjan, J.P. Velev, C.-G. Duan [et al.] // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 78. — P. 104405 (8 p.).
3. **Duan, C.-G.** Predicted magnetoelectric effect in Fe/BaTiO_3 multilayers: Ferroelectric control of magnetism [Text] / C.-G. Duan, S.S. Jaswal, E.Y. Tsymsal // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 97. — P. 047201 (4 p.).
4. **Zhao, T.** Colossal magnetoresistive manganese-based ferroelectric field-effect transistor on Si [Text] / T. Zhao, S.B. Ogale, S.R. Shinde [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2004. — Vol. 84. — № 5. — P. 750–752.
5. **Benatmane, N.** Voltage-dependent ferromagnetic resonance in epitaxial multiferroic nanocomposites [Text] / N. Benatmane, S.P. Crane, F. Zavaliche [et al.] // Appl. Phys. Lett. — 2010. — Vol. 96. — P. 082503 (3 p.).
6. **He, Q.** Electrically controllable spontaneous magnetism in nanoscale mixed phase multiferroics [Text] / Q. He, Y.-H. Chu, J.T. Heron [et al.] // Nature Commun. — 2011. — Vol. 2. — P. 225 (4 p.).
7. **Baek, S.H.** Ferroelastic switching for nanoscale non-volatile magneto-electric devices [Text] / S.H. Baek, H.W. Jang, C.M. Folkman [et al.] // Natur. Mater. — 2010. — Vol. 9. — P. 309–314.
8. **Столяр, С.В.** Новые двухфазные железосодержащие натриево-боросиликатные стекла для получения нанопористых материалов с магнитными свойствами [Текст] / С.В. Столяр, И.Н. Анфимова, И.А. Дроздова, Т.В. Антропова // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. — 2011. — Т. 9. — № 2. — С. 433–440.
9. **Antropova, T.V.** Structure of magnetic nanoclusters in ferriferrous alkali borosilicate glasses [Text] / T.V. Antropova, I.N. Anfimova, I.V. Golosovsky [et al.] // Physics of the Solid State. — 2012. — Vol. 54. — № 10. — P. 2106–2111.
10. **Поречная, Н.И.** Топография и магнитный отклик железосодержащего стекла по данным магнитно-силовой микроскопии [Текст] / Н.И. Поречная, С.А. Плясов, А.А. Набережнов, А.В. Филимонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2010. — № 4 (109). — С. 113–117.
11. **Zheng, H.** Multiferroic $\text{BaTiO}_3\text{-CoFe}_2\text{O}_4$ nanostructures [Text] / H. Zheng, J. Wang, S.E. Lofland [et al.] // Science. — 2004. — Vol. 303. — P. 661–663.
12. **Naberezhnov, A.** Dielectric response and crystal structure of nanocomposites KNO_3 -porous glasses [Text] / A. Naberezhnov, E. Koroleva, A. Sysoeva, S. Vakhrushev [et al.] // Abstracts of 6th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications. — 2010. — Spain, Madrid, September, 7–10. — 126 p.
13. **Nizhankovskii, V.I.** Magnetostriction of terbium molybdate in high magnetic field [Text] / V.I. Nizhankovskii // Europ. Phys. J. — B. — 2009. — Vol. 71. — P. 55–57.
14. **Brown, W.F.** Magnetic interactions of superparamagnetic particles [Text] / W.F. Brown // J. Appl. Phys. — 1967. — Vol. 38. — № 3. — P. 1017–1018.
15. **Лютюев, А.А.** Моделирование магнитных

свойств наночастиц оксидов железа для систем очистки [Электронный ресурс] / А.А. Лютоев, Ю.Г. Смирнов // VI Междунар. сем. «Компьютерное моделирование электромагнитных

процессов в физических, химических и технических системах». — Воронеж, 30.06—01.07. 2012. — Режим доступа: <http://www.vorstu.ru/conferences/82/89/557/>

КОРОЛЕВА Екатерина Юрьевна — кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич — кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru

НИЖАНКОВСКИЙ Виктор Игнатьевич — доктор физико-математических наук, профессор Международной лаборатории сильных магнитных полей и низких температур.

53-421, г. Вроцлав, Польша, Гайовицка ул., 95
nizhan@alpha.ml.pan.wroc.pl

ПОРЕЧНАЯ Надежда Ивановна — аспирантка кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

УДК 577.322.7, 543.429.23

*А.П. Якимов, С.О. Федечкин,
К.Б. Нериновский, К.А. Шабалин, С.Л. Смирнов*

СТРУКТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ДОМЕНА 6 ВИЛЛИНА В ОТСУТСТВИЕ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ

*A.P. Yakimov¹, S.O. Fedechkin²,
K.B. Nerinovskiy³, K.A. Shabalin⁴, S.L. Smirnov⁵*

^{1,3,4} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Polytechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

^{1,2,4} B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute,
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Russia.

³ St. Petersburg State University,
7-9 Universitetskaya Emb., St. Petersburg, 199034, Russia.

^{2,5} Chemistry Department, Western Washington University,
516 High St., Bellingham, WA 98225, USA.

STRUCTURAL STABILITY OF THE VILLIN DOMAIN 6 IN THE ABSENCE OF CALCIUM IONS

Методами гетероядерной ЯМР-спектроскопии исследован вопрос о структурной стабильности домена 6 актинсвязывающего белка виллина в отсутствие ионов кальция. Показано наличие стабильной структуры и выдвинуто предположение об отличии данной трехмерной структуры домена от таковой в присутствии ионов кальция.

ВИЛЛИН. ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА. ГЕЛЬЗОЛИН-ПОДОБНЫЕ БЕЛКИ. ИОНЫ КАЛЬЦИЯ. ЯМР.

Using methods of solution heteronuclear NMR spectroscopy we investigate the structural stability of domain 6 of actin-binding protein Villin (V6) in the absence of calcium ions. We have demonstrated calcium-free V6 to have a stable tertiary structure that was markedly different from the previously reported solution structure of the calcium-bound domain.

VILLIN. 3D-STRUCTURE. GELSOLIN-LIKE DOMAINS. CALCIUM IONS. NMR.

Виллин — актинсвязывающий белок (95 кД), образующий нековалентные сшивки между филаментами актина; он входит в состав семейства гельзолиновых белков [1]. Белки семейства гельзолина регулируют длину филаментов актина посредством

разрыва нековалентно связанных актиновых филаментов. Большинство белков семейства гельзолина включает шесть гомологичных гельзолиновых повторов (домены G1 — G6). Каждый такой домен (~14 кД) состоит приблизительно из 110 аминокислот.

кислотных остатков. Белок виллин также включает шесть таких фрагментов, обозначаемых V1 – V6, которые формируют *N*-концевое гельзолиновое ядро белка. Последовательность гельзолинового ядра виллина гомологична гельзолину на 45 % [2], что подразумевает значительное сходство третичной структуры и объясняет способность виллина разрывать филаменты актина при высоких уровнях концентрации ионов кальция. В отличие от гельзолина, виллин при низких уровнях содержания этих ионов может образовывать нековалентные сшивки между филаментами актина, собирая их тем самым в пучки. Данное функциональное свойство виллина объясняется наличием в последовательности виллина *C*-концевого фрагмента из приблизительно 110 остатков, большая часть которого (приблизительно 70 остатков) образует домен *C*-концевой головки (НР-домен, от англ. headpiece). Именно эта способность виллина – образовывать пучки *F*-актина при низких уровнях содержания кальция и разрывать филаменты при возрастании указанного уровня, отличает его от других представителей гельзолинового семейства и делает белок особенно важным компонентом регуляции размера микровиллы в эпителиальных тканях. Грам-отрицательная бактерия *Shigella flexneri* – один из самых опасных возбудителей дизентерии и шигеллиоза, особенно активно распространяющаяся в очагах гуманитарных катастроф [3], использует способность виллина разрывать актиновые филаменты для инициации процесса дезинтеграции структуры микроворсинок желудка и последующего внедрения этих бактерий в организм млекопитающих [4]. По мере более полного понимания структурно-динамических свойств и механизмов функциональной регуляции виллин сможет служить мишенью для разработки перспективных лекарственных препаратов.

Постановка задачи

Сведения о функциональных особенностях виллина во многом основаны на его сравнительном анализе с гельзолином, структура и функциональные свойства которого регулируются уровнем ионов каль-

ция. Третичная структура гельзолина была определена для неактивного, изолированного белка в отсутствие ионов кальция, а также для *C*- и *N*-концевых фрагментов при наличии кальция и актина. В случае субмикромольных концентраций кальция в растворе полипептид гельзолина свернут в компактную неактивную структуру, в которой короткая *C*-концевая спираль домена G6 помещена внутрь домена G2, предотвращая тем самым взаимодействие домена G2 с *F*-актином (рис. 1). При наличии кальция *C*-концевая спираль (показана серым цветом) домена G6 гельзолина (G6 показан черным цветом) формирует контакт-«защелку» с доменом G2, а длинная спираль (показана черным цветом) домена G6 имеет изогнутую конформацию. Сайт связывания кальция домена G6 обозначен значком $\oplus$, а сайт связывания *F*-актина домена G2 – черным треугольником. В таком неактивном состоянии длинная α -спираль домена G6 гельзолина имеет необычную изогнутую конформацию. Связывание иона кальция доменом G6 ведет к структурным изменениям последнего: распрямлению изогнутой длинной спирали, высвобождению *C*-концевой короткой спирали от взаимодействия с доменом G2 и конформационному переключению всей молекулы гельзолина из закрытого неактивного в раскрытое активное состояние (см. рис. 1).

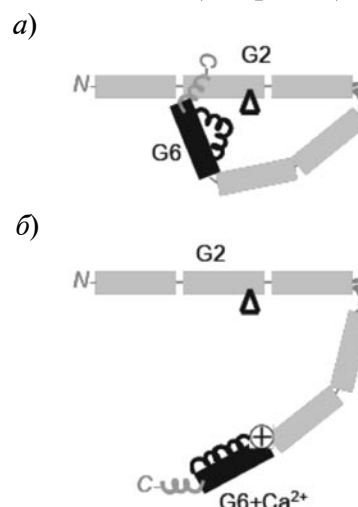


Рис. 1. Диаграмма конформаций гельзолина в отсутствие (а) и при наличии (б) ионов кальция (см. пояснения в тексте)



В противоположность гельзолину виллин имеет меньше известных сайтов связывания кальция [5] и требует более высокой концентрации ионов последнего, порядка 200 мМ, для активирования своей способности разрывать филаменты актина. Такой уровень концентрации кальция не типичен для биологических клеток, но может встречаться в апоптотических клетках. Фосфорилирование определенных остатков тирозина может понижать уровень кальция, необходимый для активирования виллина как белка, разрывающего *F*-актин. Кристаллическая структура виллина до сих пор не определена, и имеющиеся структурные данные для виллина намного более ограничены, по сравнению с таковыми для гельзолина. Гидродинамические и спектроскопические данные показывают, что виллин претерпевает значительные конформационные изменения, вызванные кальцием, с увеличением общей длины молекулы с 84 до 123 Å [6]. Факторы, влияющие на такие изменения, еще не выяснены до конца, но предполагается, что домен C-концевой головки ослабляет контакт с гельзолиновым ядром и отдалается от него. Структура домена V1, определенная в растворе [7], демонстрирует основные черты доменов гельзолинового семейства: ядро из пяти β-нитей, расположенное между длинной и двумя короткими α-спиралями. Третичная структура изолированного домена НР была определена и в кристалле, и в растворе. Домен состоит из нескольких α-спиралей, соединенных короткими линкерными последовательностями, и содержит особый сайт связывания *F*-актина, функциональность которого не зависит от уровня кальция. Последние структурно-функциональные данные показывают, что домен V6, возможно, является частью актинсвязывающего фрагмента виллина, который можно отнести к неопisanному ранее типу «структурированный домен — гибкий линкер» (данные готовятся к печати).

Цель данной работы — определение структурной стабильности домена 6 виллина (V6) в растворе в отсутствие ионов кальция.

Предположение о возможной нестабильности структуры домена V6 в отсутствие ионов кальция было высказано в работе [8], где методом ЯМР изучалась динамика остова C-концевого фрагмента виллина V6-НР (домен 6, соединенный линкерной последовательностью с доменом НР). В присутствии ионов кальция (5 мМ) фрагмент V6-НР формирует мономер со свернутыми доменами V6 и НР, соединенными неструктурированной линкерной последовательностью. При отсутствии в растворе ионов кальция в ¹⁵N-HSQC-спектре фрагмента V6-НР обнаруживается уменьшение общего количества пиков, увеличение количества пиков в диапазоне 7,9 — 8,6 ppm протонного (¹H) измерения и сохранение позиций большинства пиков, соответствующих НР-домену. Данное наблюдение позволило авторам статьи предположить, что домен V6 может не обладать структурной стабильностью в растворе, лишенном ионов кальция, либо ввиду свойств самого домена, либо в результате влияния линкерной последовательности, соединяющей его с доменом НР [8].

В работе [9] методами рентгеноструктурного анализа была определена кристаллическая структура домена 6 виллина в составе комплекса *F*-актина и фрагментов V4 — V5 — V6 в условиях низкого содержания кальция. Согласно полученным данным установлено, что дифракция происходит только на домене V6, а для доменов V4, V5 и *F*-актина дифракционная картина не позволяет сделать однозначного заключения. Главной особенностью кристаллической структуры V6 при низком содержании кальция является распрямленная конформация длинной спирали домена, а это находится в прямом противоречии с изогнутой длинной спиралью домена 6 гельзолина (G6), наблюдаемой в сходных условиях. Определенная недавно третичная структура домена V6 в растворе, содержащем ионы кальция, (PDB 2LLF, BMRB 18046), имеет длинную спираль в распрямленной конформации, в полном соответствии с конформацией длинной спирали гельзолина в кристаллах с высоким уровнем кальция. Таким образом, на данный момент остается

ся неясным, совпадает ли механизм регуляции ионами кальция перехода в активную форму домена V6, включающий изменение конформации длинной спирали (распрямление), с таковым у домена 6 гельзолина или они существенно различны.

Главная задача данной работы состояла в определении структурной стабильности изолированного домена V6 в растворе, свободном от ионов кальция. Установление экспериментальных условий для сохранения такой стабильности открывает новые возможности и для определения третичной структуры домена V6 в растворе, свободном от ионов кальция, и для изучения механизмов активации белка виллина, основанных на описании конформации длинной спирали домена V6 (распрямленная или изогнутая) — потенциально ключевого регуляторного элемента белка. Если же удастся установить, что домен V6 не обладает устойчивой третичной структурой в растворе без ионов кальция (согласно гипотезе, выдвинутой в работе [8]), то это может означать принципиальное различие механизмов структурно-функциональной регуляции ионами кальция доменов 6 виллина и гельзолина.

Использованные методы

Экспрессионная плазмида для фрагмента V6 была получена путем введения стоп-кодона в плазмиду, кодирующую фрагмент виллина V6-HP [8], с помощью протокола QuikChange (Agilent Technologies, Co., USA). Нарботка фрагмента V6 с примерно 98 %-м обогащением изотопами ^{15}N проводилась в индуцибельной системе экспрессии генов *E. coli* согласно методам, описанным ранее [8]. Получение очищенного препарата рекомбинантного фрагмента V6 проводилось за счет последовательной очистки на хроматографических колонках гель-фильтрации Sephadex-G50 и Superdex-S75. Получение образцов белка, не содержащего ионов кальция, производилось добавлением 20-кратного (по отношению к белку) избытка этилендиаминтетрауксусной кислоты и ее последующим удалением при помощи центрифужных концентраторов. Методы ЯМР-спектроскопии высокого разрешения

были использованы для записи двухмерных (^{15}N -HSQC) и трехмерных (^{15}N -edited NOESY, $\tau_{\text{mix}} = 80$ мс) спектров. Данные ЯМР для домена V6 в присутствии 5 мМ CaCl_2 были записаны на системе Varian Inova, 720 МГц. Данные для V6 в отсутствие ионов кальция были записаны на ЯМР-системе Varian DirectDrive, 700 МГц. Эксперименты проводились в растворе, содержащем 10 % D_2O , 20 мМ PIPES-D18 (pH = 6,8) и температуре 25 °С. Для обработки данных ЯМР использовался пакет программ NMRPipe, для визуализации спектров ЯМР — программа NMRView.

Результаты и их обсуждение

Анализ ^{15}N -HSQC-ЯМР-спектров домена V6 в отсутствие и при наличии ионов кальция (рис. 2) показывает, что оба полипептида структурированы. Спектры для образцов V6, не содержащих кальций, записанные многократно на протяжении месяца, оказались идентичными друг другу, что подтверждает структурную стабильность белкового фрагмента в растворе, свободном от ионов кальция. Количество ^{15}N -HSQC-пиков близко для двух форм V6 : 118 (с кальцием) и 110 (без кальция). Несущественная разница в указанных количествах может объясняться выбранными методическими причинами: величинами уровней отсечения шума. Количество пиков в спектрах ^{15}N -HSQC для V6 соответствует наличию единственной конформации данного полипептида, состоящего из 107 аминокислотных остатков (шести пролинов). При этом расположение данных пиков уникально для каждого спектра (см. рис. 2, а, б), что может указывать на значительные различия в третичной структуре фрагмента V6 в присутствии и в отсутствие ионов кальция. Количество ^{15}N -HSQC-пиков в диапазоне 7,9 — 8,6 ppm для ^1H -измерения позволяет оценить потенциальное число неструктурированных аминокислотных остатков. Для обоих образцов V6 (содержащих и не содержащих кальций) это потенциальное число одинаково и равно 37 пикам. Таким образом, можно полагать, что доля неструктурированной полипептидной цепи для V6 в от-

сутствие ионов кальция примерно равна соответствующему параметру в его присутствии. ЯМР-спектры с данными 3D NOESY (рис. 3) содержат примерно равное количество пиков для образцов V6 в присутствии и в отсутствие кальция. Незначительная

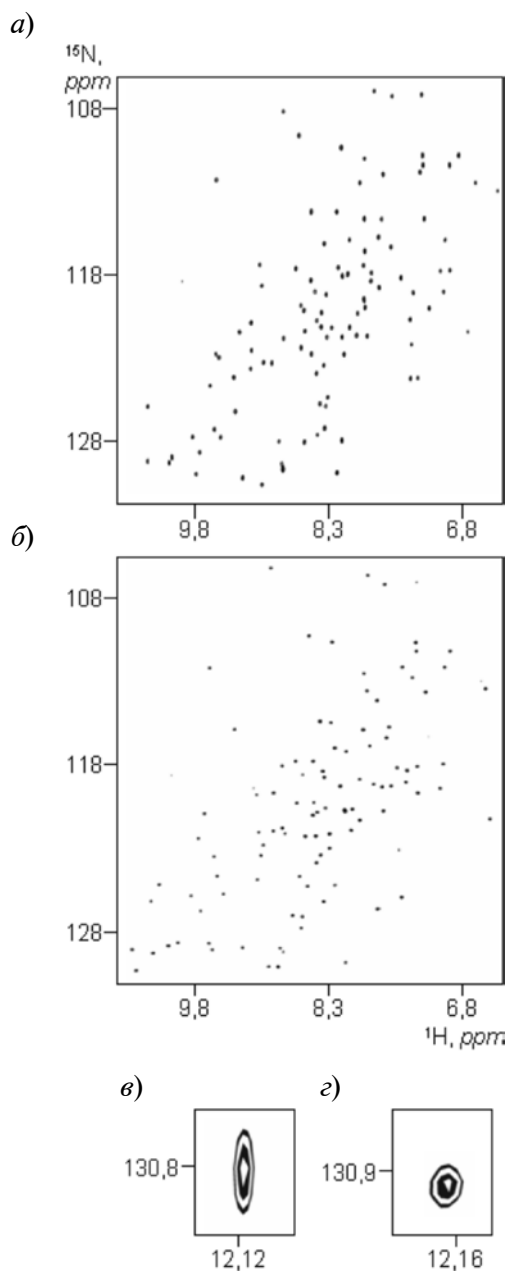


Рис. 2. Спектры ^{15}N -HSQC домена V6 в отсутствие (а) и при наличии (б) ионов кальция; отдельно представлены фрагменты спектров: пик HN-группы 43Trp в отсутствие (в) и при наличии (г) ионов кальция (размер области — $0,10 \times 0,35 \text{ ppm}$)

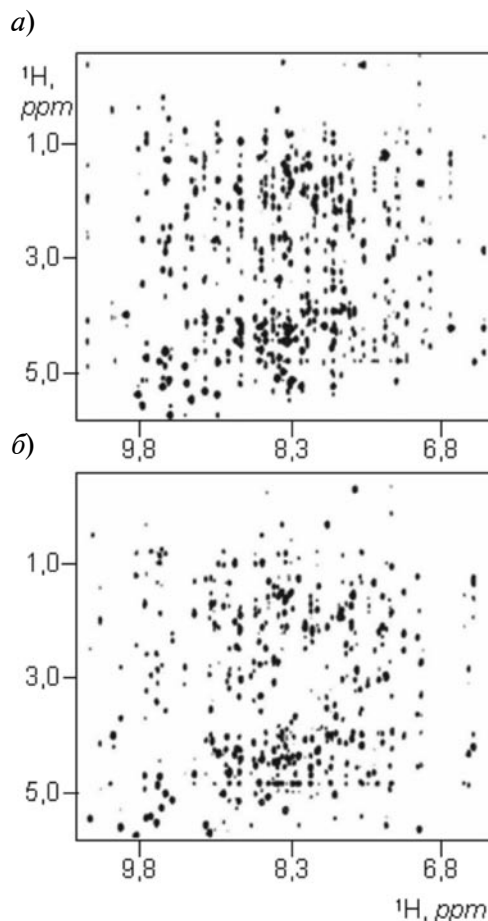


Рис. 3. Спектры 3D NOESY (^{15}N -edited) домена V6 виллина при наличии (а) и в отсутствие ионов кальция (б). Проекция всех ^{15}N -срезов показаны на плоскости $^1\text{H} - ^1\text{H}$

разница между данными величинами (примерно 12 %), как и в случае со спектрами ^{15}N -HSQC, объясняется разной чувствительностью результатов подсчета пиков к выбору уровня отсечения шума. Общая близость количества NOESY-пиков для двух образцов V6 (содержащих и не содержащих кальций) свидетельствует о сходных значениях плотности упаковки полипептидной цепи в двух случаях. Поскольку домен V6 в присутствии ионов кальция образует однодоменную пространственную структуру (PDB 2LLF), можно заключить, что домен V6 в отсутствие ионов кальция также имеет однодоменную пространственную структуру. Дополнительное подтверждение данному заключению обеспечивает

очень близкое положение пиков ^{15}N -HSQC для боковой цепи аминокислоты ^{43}Trp в образцах V6 с кальцием (BMRB 18046, рис. 2, *г*) и без него (рис. 2, *в*). В обоих случаях данный пик располагается на значительном удалении от остальных сигналов (примерно 12,2 ppm в ^1H -измерении), что позволяет использовать его соотношение в спектре образца с кальцием (BMRB 18046) для спектра образца без кальция (рис. 2, *в*). Разница величин химических сдвигов для этого пика в растворах, содержащих ионы кальция и не содержащих таких ионов, оказывается незначительной.

В заключение следует представить основной вывод: в растворе, свободном от ионов кальция, изолированный домен 6 виллина формирует устойчивую однодоменную пространственную структуру. Такая структура, по всей видимости, существенно отличается от пространственной структуры доме-

на V6 при наличии ионов кальция. Таким образом, получает обоснование работа по определению пространственной структуры домена V6 в растворе в отсутствие ионов кальция и по описанию в ней конформации длинной α -спирали (изогнутая или распрямленная) — ключевого элемента регуляции виллина.

Работа была выполнена с использованием оборудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ» на базе ФГБОУ ВПО «СПбГПУ» при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках соглашения № 14.В37.21.1230. ЯМР-данные для образца V6 в присутствии ионов кальция были зарегистрированы с использованием оборудования, предоставленного National High Magnetic Field Laboratory, Florida State University, Tallahassee, FL, USA и обеспеченного финансовой поддержкой по договору с National Science Foundation Cooperative Agreement No. DMR-0654118 между штатом Флорида и U.S. Department of Energy. Данная работа была также поддержана грантом, предоставленным M.J. Murdock Charitable Trust (США).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bretscher, A.** Villin is a major protein of the microvillus cytoskeleton which binds both G and F actin in a calcium-dependent manner [Text] / A. Bretscher, K. Weber // *Cell*. — 1980. — Vol. 20. — P. 839–847.
2. **Finidori, J.** *In vivo* analysis of functional domains from villin and gelsolin [Text] / J. Finidori, E. Friederich, D.J. Kwiatkowski, D. Louvard // *J. Cell. Biol.* — 1992. — Vol. 116. — P. 1145–1155.
3. **Savel'ev, V.N.** Characteristics of dysentery-causing strains isolated from patients and carriers in Republic of South Ossetia during period of humanitarian disaster [Text] / V.N. Savel'ev, B.V. Babenyshev, A.A. Zaitsev [et al.] // *Zh. Mikrobiol. Epidemiol. Immunobiol.* — 2009. — Vol. 6. — P. 57–59.
4. **Athman, R.** *Shigella flexneri* infection is dependent on villin in the mouse intestine and in primary cultures of intestinal epithelial cells [Text] / R. Athman, M.I. Fernandez, P. Gounon [et al.] // *Cell. Microbiol.* — 2005. — Vol. 7. — P. 1109–1116.
5. **Hesterberg, L.K.** Demonstration of three distinct calcium-binding sites in villin, a modulator of actin assembly [Text] / L.K. Hesterberg, K. Weber // *J. Biol. Chem.* — 1983. — Vol. 258. — P. 365–369.
6. **Hesterberg, L.K.** Ligand-induced conformational changes in villin, a calcium-controlled actin-modulating protein [Text] / L.K. Hesterberg, K. Weber // *J. Biol. Chem.* — 1983. — Vol. 258. — P. 359–364.
7. **Markus, M.A.** Refined structure of villin 14T and a detailed comparison with other actin-severing domains [Text] / M.A. Markus, P. Matsudaira, G. Wagner // *Protein. Sci.* — 1997. — Vol. 6. — P. 1197–1209.
8. **Smirnov, S.L.** The isolated sixth gelsolin repeat and headpiece domain of villin bundle F-actin in the presence of calcium and are linked by a 40-residue unstructured sequence [Text] / S.L. Smirnov, N.G. Isern, Z.G. Jiang [et al.] // *Biochemistry*. — 2007. — Vol. 46. — P. 7488–7496.
9. **Wang, H.** Helix straightening as an activation mechanism in the gelsolin superfamily of actin regulatory proteins [Text] / H. Wang, S. Chumnarnsilpa, A. Loonchanta [et al.] // *J. Biol. Chem.* — 2009. — Vol. 284. — P. 21265–21269.

ЯКИМОВ Александр Павлович — младший научный сотрудник лаборатории биофизики макромолекул Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова, сотрудник НИИ «НаноБио» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yaleks@nanobio.spbstu.ru



ФЕДЕЧКИН Станислав Олегович — студент-магистрант факультета химии Западного университета штата Вашингтон, США.

516 High St., Bellingham, WA 98225, USA_

fedetcs@gmail.com

НЕРИНОВСКИЙ Кирилл Борисович — программист физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета, сотрудник НИИ «НаноБио» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

nerinovski@yandex.ru

ШАБАЛИН Константин Александрович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

kostya@omrb.pnpi.spb.ru

СМИРНОВ Сергей Львович — кандидат биологических наук, доцент факультета химии Западного университета штата Вашингтон, США.

516 High St., Bellingham, WA 98225, USA_

smirnov@chem.wvu.edu

УДК 577.3

Д.В. Лебедев, М.Л. Соколова, Я.В. Федорова, Г.Е. Побегалов,
Д.Б. Червякова, С.Б. Ланда, М.А. Ходорковский

НАДМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СТРУКТУРЫ, ОБРАЗУЕМЫЕ *IN VITRO* БЕЛКОМ TIP49A

D.V. Lebedev¹, M.L. Sokolova², Ya.V. Fedorova³, G.E. Pobegalov⁴,
D.B. Chervyakova⁵, S.B. Landa⁶, M.A. Khodorkovskiy⁷

^{1, 5, 6} B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute,
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Russia

^{2, 3, 4, 7} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

SUPRAMOLECULAR STRUCTURES FORMED BY TIP49A PROTEIN *IN VITRO*

Белки TIP49A входят в ряд комплексов, ремодулирующих хроматин человека, и легко олигомеризуются *in vitro* с образованием различных агрегатов размером в десятки и сотни нанометров. В работе показано, что неспецифическая агрегация белка может быть значительно ослаблена в присутствии детергента Triton-X100 в концентрациях 0,05–0,10 %. Кроме того, добавление детергента разрушает уже имеющиеся агрегаты, что позволяет выделить олигомерные формы белка, вероятно обладающие биологической активностью. Представленные данные малоуглового рентгеновского рассеяния и динамического светорассеяния позволяют предположить, что агрегация белков TIP49A, наблюдаемая *in vitro*, носит обратимый характер; при этом в результате олигомеризации этот белок может образовывать два различных типа устойчивых филаментных структур.

БЕЛКИ СЕМЕЙСТВА TIP49. МАЛОУГЛОВОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ. СВЕТО-РАССЕЯНИЕ.

Tip49a, a human protein isolated with several chromatin-remodulating complexes, is readily oligomerized *in vitro* forming polydisperse aggregates of the size of tens and hundreds of nanometers. In this work we show that the non-specific aggregation of the protein can be effectively countered by 0.05–0.10 % concentrations of a detergent Triton-X100. We also show that addition of the detergent destroys aggregates formed already that allows us to isolate oligomeric forms of the protein which may have biological significance. When combined, the results of small angle X-ray scattering and dynamic light scattering experiments suggest that TIP49A aggregation observed *in vitro* is reversible with the protein oligomerization in two different types of stable filamentous structures.

TIP49 PROTEINS. SMALL ANGLE X-RAY SCATTERING. LIGHT SCATTERING.

TIP49A представляет собой ядерный белок эукариот, который выделяется в составе комплексов ремодуляции хроматина (INO80, Tip54 и др.). Предполагается, что этот белок участвует в ремодуляции хроматина в процессе репарации, в регуляции транскрипции и в процессе деления клеток. *In vitro* белок проявляет слабую АТФазную

и геликазную активность, при этом связь структуры и функции не установлена [1, 2]. Согласно структуре, полученной методом рентгеновской кристаллографии, мономер белка состоит из трех доменов: D1 и D3, формирующих модуль связывания и гидролиза АТФ, и ДНК-связывающего домена D2 [1, 4].



Белок TIR49A легко олигомеризуется в растворе. На основании данных рентгеновской кристаллографии можно предположить образование целого ряда олигомерных состояний белка от тримера до додекамера, часть из которых наблюдалась экспериментально [3]. Роль этих состояний во взаимодействии данного фермента с молекулой ДНК на настоящий момент не установлена. Можно предположить, что связывание белка с ДНК модулируется присоединением АТФ к белку, которое в свою очередь обусловлено подвижностью шарниров в области аминокислотных остатков 366 и 383.

In vitro белки Tir49 имеют сильную склонность к неспецифической агрегации, что значительно затрудняет исследование функциональных олигомерных комплексов этих белков. В настоящей работе исследованы олигомерные состояния и агрегация белка TIR49A дикого типа и мутантных белков Y366A и G383A.

Методики исследования

Рекомбинантные белки TIR49A дикого типа, а также точечные мутанты Y366A и G383A были экспрессированы в культуру клеток бактерии *E.coli* с использованием вектора pET3a-TIR49a, несущего ген белка TIR49a крысы с 6his-flag тэгами на N-конце белка. Вектор был получен от М.Ю. Григорьева, сотрудника Лаборатории молекулярной биологии эукариот университета г. Тулузы, Франция. Индукция синтеза белка осуществлялась добавлением реагента ИПТГ до концентрации 0,25 мМ в культуру клеток *E.coli* Rosetta (объем 600 мл). Клетки осаждали центрифугированием (приблизительно по 1,5 г клеточного осадка) и лизировали с помощью лизоцима. Растворимую часть клеточного лизата подвергали хроматографической очистке на Ni-NTA-агарозе согласно протоколу производителя (QIAGEN).

Очищенный белок переводили диализом в буфер 20 мМ Tris-HCl мМ, pH = 7,4 при 4 °C, содержащий 50 мМ KCl и (за исключением образцов, свободных от магния) 5 мМ MgCl₂. Для проверки качества очистки белка проводили электрофорез в полиакриламидном геле в денатурирующих усло-

виях. Выход белка из одного выделения составлял около 1 мг. Для экспериментов по динамическому светорассеянию белок подвергался дополнительной стадии хроматографии (гель-фильтрации) для разделения олигомеров белков по размерам. Непосредственно перед измерением часть образцов инкубировалась в буфере, содержащем 0,05 % детергента (Triton-X100) при комнатной температуре в течение 20 мин. Измерения производилось на приборе Malvern Zetasizer Nano (Malvern Instruments Ltd, Англия) в стандартной конфигурации.

Измерение спектров малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) белка TIR49A в растворе проводились на станции BM-29 источника синхротронного излучения ESRF (г. Гренобль, Франция) в диапазоне амплитуд векторов рассеяния от 0,04 до 3 нм⁻¹ при температуре 20 °C. Белок добавлялся в количестве, необходимом для получения конечной концентрации от 0,5 до 4,5 мг/мл, к 20 мМ Tris-HCl буферу (pH = 7,4 при 4 °C).

В соответствующих образцах к буферному раствору добавлялся хлорид магния (до 5 мМ) и двунитевая ДНК фага λ. С целью уменьшения степени агрегации белка в часть образцов с концентрацией белка около 1 мг/мл был добавлен Triton-X100 (0,05 %) с последующим увеличением концентрации белка путем центрифугирования на диализной мембране с молекулярным весом отсечки 10 кДа. Данные МУРР корректировались на фоновые спектры, полученные на соответствующих буферных растворах.

Питательная среда LB для выращивания клеток готовилась из готовой смеси фирмы Amresco. Реактивы для приготовления буферов, проведения электрофорезов и других процедур (Tris, ЭДТА, натрия додецилсульфат, акриламид, бисакриламид, β-меркаптоэтанол, изопропил-β-D-1-тиогалактопиранозид (ИПТГ), фенилметилсульфонилфторид (ФМСФ), имидазол, АТФ, АТФ_γS) были приобретены в фирме Sigma-Aldrich, США. Остальные реактивы (HCl, ксиленицианол, бромфеноловый синий, глицин, уксусная кислота, глицерин, изопропанол, NaH₂PO₄ и др.)

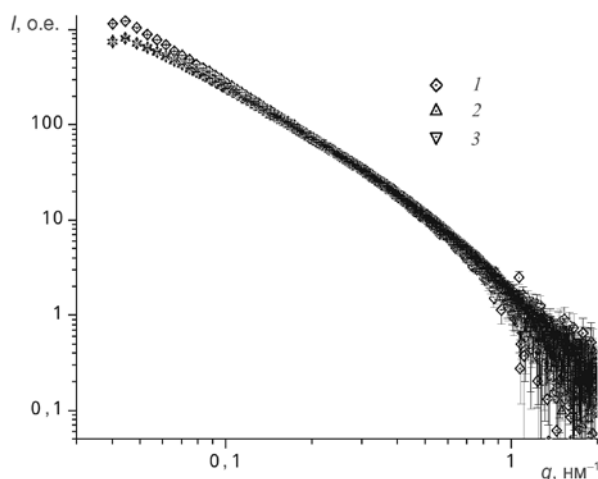


Рис. 1. Спектры малоуглового рентгеновского рассеяния белка TIR49A при различных концентрациях, мг/мл: 0,5 (3), 1,5 (2), 4,5 (1)

приобретались в российских компаниях. Лизоцим, белковый маркер и дитиотрейтол (ДТТ) приобрели в компании Fermentas (США). Хроматографический носитель — агарозу Ni-NTA Superflow получили из компании QIAGEN (США).

Результаты и их обсуждение

Анализ данных малоуглового рентгеновского рассеяния показал высокую склонность белка к агрегации (рис. 1), что выражалось в росте интенсивности в малых углах рассеяния и отсутствии области

Гинье в диапазоне векторов рассеяния до $0,04 \text{ nm}^{-1}$. Это указывает на образование аморфных полидисперсных агрегатов размером 25 нм и более. Для сравнения отметим, что максимальный диаметр гексамера белка, наблюдаемого в электронной микроскопии, составляет менее 12 нм [3]. Понижение концентрации белка с 4,5 до 0,5 мг/мл привело лишь к незначительному уменьшению агрегации и изменению спектров рассеяния (см. рис. 1). Аналогичные результаты были получены для мутантных белков Y366A и G383A.

Высокая склонность белка к агрегации подтверждается данными динамического светорассеяния (ДСР). В то же время анализ данных ДСР для мутантного белка Y366A (рис. 2, а) показал присутствие двух фракций частиц со средними размерами $15,5 \pm 2,3$ и 59 ± 17 нм. Массовая доля фракции с гидродинамическим диаметром 15 нм составляла около 70 %, что соответствует примерно 7 %-му вкладу в интенсивность рассеяния.

Следует отметить, что интенсивности рассеяния в малые углы для МУРР и интенсивности ДСР имеют одинаковую зависимость от размера рассеивающей частицы и пропорциональны квадрату ее объема, поэтому даже сравнительно небольшое количество крупных агрегатов может вносить основной вклад в спектры рассеяния.

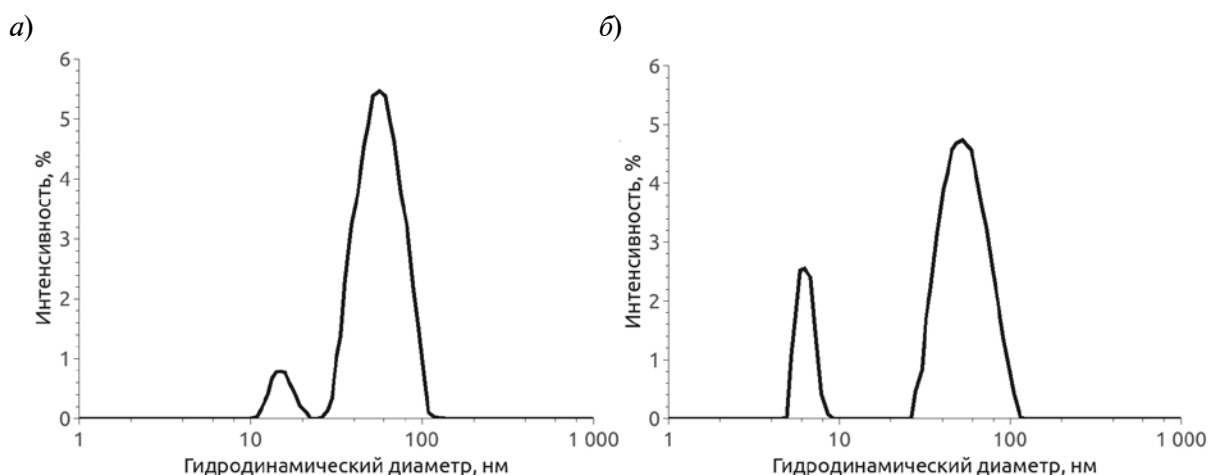


Рис. 2. Динамическое светорассеяние белка TIR49A Y366A в отсутствие детергента (а) и после инкубации с 0,05 % Triton-X100 (б)

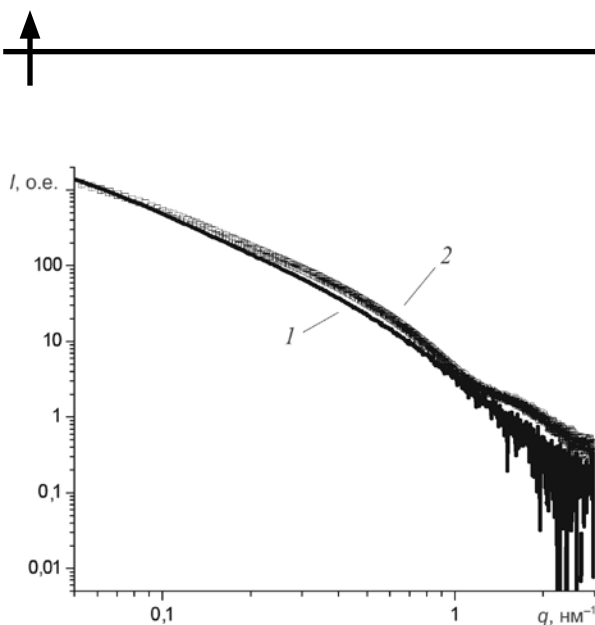


Рис. 3. Спектры малоуглового рентгеновского рассеяния белка TIR49A, полученные в отсутствие детергента (1) и с применением методики концентрации этого белка в присутствии детергента Triton-X100 (2)

Инкубация белка в присутствии 0,05 % детергента привела к почти полному исчезновению крупных полидисперсных агрегатов белка и полному исчезновению фракции с размером агрегатов 15 нм (рис. 2, б).

Основная масса белка (более 98 %) имела олигомерную форму с гидродинамическим диаметром $6,4 \pm 0,7$ нм, что соответствует молекулярной массе 260 ± 80 кДа, близкой к массе пента- или гексамера белка. Полидисперсные агрегаты (52 ± 17 нм) составляли только 1,6 % общей массы белка, при этом их вклад в рассеяние составлял чуть более 80 %.

Спектры малоуглового рентгеновского рассеяния белка TIR49A в присутствии детергента также показывают значительный вклад белковых агрегатов, однако при этом наблюдается заметное увеличение интенсивности малоуглового рассеяния в больших углах, что указывает на увеличение доли частиц небольшого размера (мономеров либо олигомеров белка) в растворе (рис. 3).

Поскольку по данным ДСР средний размер агрегатов в присутствии Triton-X100 менялся незначительно, мы использовали это наблюдение для интерпретации спектра МУРР белка, обработанного детергентом, в виде линейной комбинации спектра мало-

углового рассеяния в отсутствие детергента, и гауссовой функции, соответствующей области Гинье спектра монодисперсных частиц:

$$I_t(q) = aI_1(q) + I_0 \exp\left(-\frac{R_g^2 q^2}{3}\right), \quad (1)$$

где R_g — радиус гирации частицы; I_1 , I_t — интенсивности рассеяния до и после добавления детергента, соответственно.

Для модели вытянутых частиц (филаментов) использовалась аналогичная формула:

$$I_t(q) = a \cdot I_1(q) + I_{c0} \exp\left(-\frac{R_c^2 q^2}{2}\right), \quad (2)$$

где R_c — поперечный радиус гирации.

Коэффициенты a , I_0 (либо I_{c0}) и радиус гирации R_g (R_c) находились путем регрессии экспериментальных данных по формулам (1) или (2) методом наименьших квадратов в диапазоне малых углов, где и применимо приближение Гинье.

Как видно из рис. 4, спектры рассеяния мутантного белка Y366A в диапазоне амплитуд вектора рассеяния $0,05 - 0,25$ нм⁻¹ могут быть описаны функцией (1). Результаты МУРР согласуются с данными ДСР и

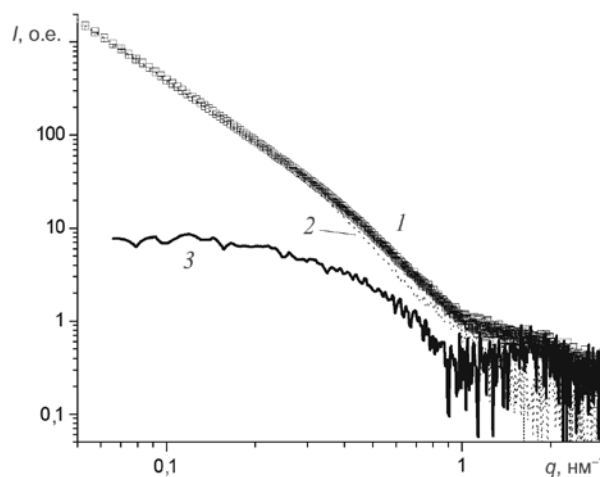


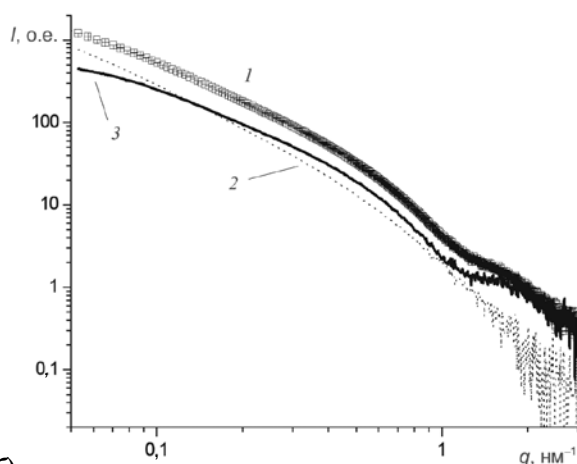
Рис. 4. Спектр малоуглового рентгеновского рассеяния мутантного белка TIR49A Y366A (1); представлен в виде суммы интенсивностей рассеяния белком в агрегированном состоянии (2) и монодисперсными частицами (3) с радиусами инерции 4,7 нм.

Регрессия по формуле (1) в диапазоне $0,05 - 0,25$ нм⁻¹, $\chi^2 = 3,66$

указывают на присутствие частиц с радиусом инерции $4,7 \pm 0,4$ нм, что близко к расчетным значениям для пента- и гексамера белка ($5,1 - 5,4$ нм).

Обработка спектров малоуглового рассеяния белка дикого типа, аналогичная проведенной для мутанта G383A, дает значения радиуса гирации более 10 нм, что значительно больше, чем у известных олигомерных форм белка. Анализ данных

а)



б)

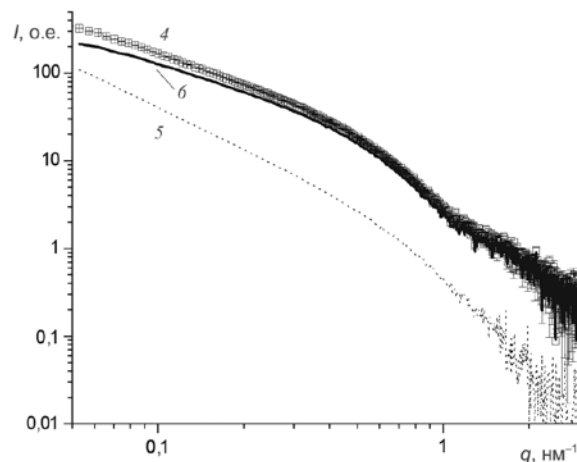


Рис. 5. Спектры малоуглового рентгеновского рассеяния (I , 4) белка TIR49A дикого типа в отсутствие магния (а) и комплекса этого белка с двухнитевой ДНК (б). Оба спектра представлены в виде суммы интенсивностей рассеяния объектами в агрегированном состоянии (2, 5) и монодисперсными филаментами (3, 6) с различными поперечными радиусами инерции, нм: 4,7 (а), 1, 6 (б).

Регрессии проведены по формуле (2) в диапазоне $0,08 - 0,20$ нм⁻¹; $\chi^2 = 4,29$ (а) и $0,95$ (б)

МУРР показал, что, в отличие от мутантного белка Y366A, для этих белков агрегация в присутствии детергента в значительной степени зависит от содержания магния. Данные, полученные в отсутствие магния, хорошо описываются с использованием формулы (2) в диапазоне векторов рассеяния от $0,08$ до $0,2$ нм⁻¹. Результат регрессии данных для белка дикого типа приведен на рис. 5, а и дает поперечный радиус инерции $4,7 \pm 0,2$ нм. Подобная модель для мутанта G383A дает поперечный радиус гирации филамента $5,0 \pm 0,2$ нм. Анализ спектров, полученных в присутствии двунитевой ДНК, дает соответствующие параметры $R_g = 1,6 \pm 0,7$ нм для белка дикого типа (рис. 5, б) и $4,3 \pm 0,3$ нм для мутантного белка G383A.

Наши данные указывают на то, что агрегация белка TIR49A *in vitro* является обратимой. Аморфные агрегаты размером в несколько десятков нанометров стабилизируются магнием и разрушаются при добавлении 0,05 % детергента Triton-X100. По данным МУРР основной олигомерной формой белка дикого типа вероятнее всего являются филаменты с радиусом инерции, приблизительно соответствующим поперечному радиусу инерции белкового гексамера. Таким образом, наблюдаемые результаты могут указывать на образование непрерывных филаментов белка в конформации, близкой к наблюдаемой в гексамере, либо линейных структур из отдельных гексамеров.

Мутантный белок Y366A не образует филаментов в присутствии детергента. Однако в экспериментах по ДСР видна полидисперсная фракция белка с гидродинамическим диаметром около 15 нм, которая полностью исчезает после добавления 0,05 % Triton-X100. Можно предположить, что эта фракция также соответствует филаментным структурам длиной в 20 – 30 нм, которые менее стабильны, чем у дикого типа. Возможно, что за счет изменения конформационной подвижности этот белок не в состоянии образовывать непрерывный филамент, а формируемые вместо него линейные агрегаты разрушаются детергентом.



Взаимодействие белка дикого типа с ДНК приводит к значительному уменьшению толщины филамента, поперечный радиус инерции которого падает приблизительно до 2 нм. Такое изменение структуры филамента должно быть связано со значительными конформационными изменениями в мономере, возможно, в области, отвечающей за связывание АТФ, поскольку данный эффект не наблюдается в мутантном белке G383A.

Вопрос о функциональной роли белка TIP49A и ее молекулярных механизмах на настоящий момент остается открытым. Постулируемая геликазная активность этого фермента, основанная на принципе структурного сходства, по всей вероятности, может осуществляться гексамерной формой белка. В то же время для фермента, суб-

стратом которого является линейный полимер (ДНК), образование филаментов и их структурная реорганизация при взаимодействии с субстратом может указывать на другие механизмы участия TIP49A в процессе ремодуляции хроматина.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (ГК No. 11.519.11.2002 и Стипендия Президента РФ № СП-5651.2013.4) и РФФИ (грант № 12-02-12053 офи_м) с использованием оборудования ЦКП «Аналитический центр нанобиотехнологий ГОУ СПбГПУ» на базе ФГБОУ ВПО СПбГПУ. Также мы благодарим Европейский центр синхротронного излучения (ESRF, г. Гренобль, Франция) за предоставленную возможность использования синхротронного излучения, и персонально Анрию Мак-Карти за помощь в проведении эксперимента на станции BM29.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Matias, P.M.** Crystal structure of the human AAA+ protein RuvBL1 [Text] / P.M. Matias, S. Gorynia, P. Donner, M.A. Carrondo // J. Biol. Chem. — 2006. — Vol. 281. — № 50. — P. 38918–38929.
2. **Huen, J.** Rvb1-Rvb2: essential ATP-dependent helicases for critical complexes [Text] / J. Huen, Y. Kakiyama, F. Uguw [et al.] // Biochem. Cell Biol. — 2010. — Vol. 88. — № 1. — P. 29–40.
3. **Niewiarowski, A.** Oligomeric assembly and interactions within the human RuvB-like RuvBL1 and RuvBL2 complexes [Text] / A. Niewiarowski, A.S. Bradley, J. Gor [et al.] // Biochem. J. — 2010. — Vol. 429. — № 1. — P. 113–125.
4. **Petukhov, M.** Large-scale conformational flexibility determines the properties of AAA+ TIP49 ATPases [Text] / M. Petukhov, A. Dagkessamanskaja, M. Bommer [et al.] // Structure. — 2012. — Vol. 20. — № 8. — P. 1321–1331.

ЛЕБЕДЕВ Дмитрий Витальевич — старший научный сотрудник НИЦ «Курчатовский институт» Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща
dtry@omrb.pnpi.spb.ru

СОКОЛОВА Мария Леонидовна — студентка Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ФЕДОРОВА Яна Витальевна — студентка Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kedrovka126@rambler.ru

ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич — аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

ЧЕРВЯКОВА Дарья Борисовна — научный сотрудник НИЦ «Курчатовский институт» Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща
darya.dcd@gmail.com

ЛАНДА Сергей Борисович — старший научный сотрудник НИЦ «Курчатовский институт» Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща
sergey.landa@gmail.com

ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, директор НИК «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

УДК 539.126.3

*Д.А. Иванищев, А.Е. Иванов,
Д.О. Котов, А.С. Сафонов*

РОЖДЕНИЕ ЛЕГКИХ НЕЙТРАЛЬНЫХ МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРОТОНОВ ПРИ ЭНЕРГИИ 500 ГэВ

*D.A. Ivanishchev¹, A.E. Ivanov²,
D.O. Kotov³, A.S. Safonov⁴*

^{1, 2} B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute,
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Russia.

^{3, 4} St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

LIGHT MESONS PRODUCTION IN PROTON-PROTON COLLISIONS AT 500 GeV

В статье представлены результаты измерения инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, ω -, K_s^0 и ϕ -мезонов и их относительных выходов к нейтральным пионам в столкновениях протонов при энергии 500 ГэВ. Произведено сравнение результатов измерений с расчетами, выполненными в рамках квантовой хромодинамики.

СТОЛКНОВЕНИЯ ПРОТОНОВ. МЕЗОНЫ. РОЖДЕНИЕ. ЛЕГКИЕ КВАРКИ. АНАЛИЗ.

The result of invariant differential cross sections measurement of π^0 -, ω -, K_s^0 and ϕ -mesons in proton-proton collisions at 500 GeV is presented. The experimental results are compared with QCD calculations.

PROTON COLLISIONS. MESONS. PRODUCTION. LIGHT QUARKS. ANALYSIS.

Рождение адронов в области поперечных импульсов $p_T > 2$ ГэВ/с в столкновениях ультрарелятивистских ядер при энергиях ускорителя РНПС, в основном происходит в результате фрагментации жестко рассеянных партонов [1]. С увеличением поперечного импульса характерный масштаб расстояний жестких процессов уменьшается, и в области больших поперечных импульсов такие процессы можно считать точечными. При отсутствии коллективных эффектов в области больших поперечных импульсов взаимодействия ядер можно представить как суперпо-

зицию нуклон-нуклонных взаимодействий. Однако наличие коллективных эффектов меняет данное представление. Базовые знания о свойствах частиц, рождающихся в элементарных нуклон-нуклонных столкновениях, и механизмах их рождения необходимы для изучения коллективных эффектов. Результаты измерений свойств адронов в протонных столкновениях используются для проверки и подстройки теоретических расчетов в рамках квантовой хромодинамики (КХД) и построения универсальной масштабной инвариантности [2].

В данной работе представлены результаты измерения инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, K_s^- , ω - и ϕ -мезонов и их относительных выходов в столкновениях протонов при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ в каналах распада $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$, $\omega \rightarrow \pi^0\pi^+\pi^-$, $K_s^- \rightarrow \pi^0\pi^-$ и $\phi \rightarrow K^+K^-$ в области быстрот $|y| < 0,35$. Произведено сравнение результатов измерений с расчетами, выполненными в рамках КХД.

Методика измерений

Результаты, представленные в данной работе, основаны на выборке экспериментальных данных с общей интегральной светимостью 8 пбарн^{-1} , накопленных экспериментальной установкой PHENIX [3] в 2009 году. Восстановление треков заряженных частиц и измерение их поперечных импульсов проводилось с помощью дрейфовых камер (DC) и первого слоя палочных камер (PC1). Поперечный импульс частицы определяется через измерение угла изгиба трека заряженной частицы в аксиальном магнитном поле центрального магнита, с учетом того, что частица вылетает из вершины столкновения [4]. Измерение энергии и импульса фотонов осуществляется посредством электромагнитного калориметра ECal [3].

В связи с высокой частотой протонных столкновений (до 1 МГц) использовалось несколько специализированных триггеров, позволяющих увеличить статистическую значимость редких событий. Триггер является частью системы сбора данных экспериментальной установки PHENIX. Основной функцией триггера является отбор в реальном времени столкновений по интересующим параметрам. Использовались триггеры первого уровня (МВ-триггер) и фотонный [3]. Первый из указанных включался, если срабатывал, как минимум, один кварцевый черенковский счетчик в каждом из пучковых счетчиков BBC и координата точки z столкновения ядер не превышала по модулю 30 см. Эффективность триггера первого уровня составляет $91,0 \pm 1,1 \%$ от полного сечения неупругого ($p + p$)-взаимодействия, равного $32,5 \pm 3,2$ мбарн при энергии 500 ГэВ. Фотонный триггер организован на

основе электромагнитного калориметра и срабатывает при регистрации γ -кластера с энергией, превышающей 3,7 ГэВ.

Инвариантное дифференциальное сечение рождения мезона в каждом интервале по поперечному импульсу вычисляется как

$$\frac{1}{2\pi p_T} \frac{d^2\sigma}{dp_T dy} = \frac{1}{2\pi p_T} \frac{1}{L \text{Br}} \frac{1}{\epsilon(p_T) \epsilon_{BBC}} \frac{N(\Delta p_T)}{\Delta p_T \Delta y},$$

где p_T — поперечный импульс мезона; Δp_T — интервал по поперечному импульсу; y — быстрота; $N(\Delta p_T)$ — число мезонов, зарегистрированных экспериментальной установкой (выход мезонов); L — интегральная светимость, полученная с использованием триггера первого уровня; $\epsilon(p_T)$ — функция коррекции, учитывающая геометрический акцептанс, разрешение, эффективность работы детекторных подсистем экспериментальной установки PHENIX; Br — вероятность распада мезона по исследуемому каналу; ϵ_{BBC} — эффективность триггера первого уровня.

При анализе данных, накопленных с помощью фотонного триггера, эффективность фотонного триггера учитывалась как множитель в функции $\epsilon(p_T)$.

Определение выходов мезонов и расчет функций коррекций осуществлялся аналогично методикам, описанным в работах [3 – 6]. Анализировались выборки данных, накопленные с применением γ -триггера (для π^0 -мезонов в области $p_T < 4$ ГэВ/с и K_s^- , ω -мезонов) и без него (для π^0 -мезонов в области $p_T > 4$ ГэВ/с и ϕ -мезонов). Кандидаты в нейтральные мезоны были восстановлены из пар кластеров, зарегистрированных электромагнитным калориметром, с энергией $E_\gamma > 0,2$ ГэВ, в предположении, что они соответствуют фотонам, пришедшим из вершины столкновения. Отбирались пары фотонов, энергии фотонов которых $E1$ и $E2$ удовлетворяли неравенству

$$\frac{|E2 - E1|}{E1 + E2} < 0,8.$$

Положения и значения ширины пиков, соответствующих распаду $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$, в спектре восстановленной инвариантной массы пары фотонов были измерены и параметризованы как функция поперечного им-



пульса пары фотонов $p_T^{\gamma\gamma}$. Ширина пиков, в основном, определяется энергетическим разрешением электромагнитного калориметра. Ширина уменьшается с 12 до 9 МэВ/с² в области поперечных импульсов пары фотонов

$$1 < p_T^{\gamma\gamma} \text{ (ГэВ/с)} < 4,$$

затем в области поперечных импульсов $p_T^{\gamma\gamma} > 4$ ГэВ/с ширина монотонно возрастает. Для дальнейшего анализа характеристик частиц, в распаде которых имеется π^0 -мезон, были выбраны пары фотонов с $p_T^{\gamma\gamma} > 1$ ГэВ/с и значением инвариантной массы, находящейся в пределах двух стандартных отклонений от измеренного положения пика. Всем фотонным парам, которые удовлетворяют указанным выше критериям, была присвоена табличная масса нейтрального пиона, а энергии фотонов пары были масштабированы на отношение значения табличной массы к измеренному значению массы пары фотонов.

Восстановление пиков от распада $K_s^- \rightarrow \pi^0 \pi^0$ было выполнено комбинированием отобранных пар фотонов в пределах одного события. Комбинации, использовавшие одни и те же кластеры электромагнитного калориметра более одного раза, были откинута.

Для определения основных характеристик $\omega \rightarrow \pi^0 \pi^+ \pi^-$, отобранные пары фотонов были объединены со всеми парами разнозаряженных частиц в том же событии. Заряженные частицы, которые использовались в анализе, должны были иметь поперечные импульсы в диапазоне

$$0,2 < p_T \text{ (ГэВ/с)} < 8,$$

и им были присвоены массы заряженных пионов. Заряженные частицы с поперечным импульсом меньше 0,2 ГэВ/с не попадают до центральных спектрометров экспериментальной установки PHENIX из-за того, что их угол изгиба в аксиальном поле центрального магнита имеет большое значение. Частицы, которые зарегистрированы с импульсом больше 8 ГэВ/с, в своей основе являются вторичными частицами, рождающимися из распадов долгоживущих частиц. Их импульс рассчитывается некор-

ректно из-за того, что они рождаются не в вершине столкновения ядер и их истинный импульс меньше зарегистрированного.

Восстановление распада $\phi \rightarrow K^+ K^-$ было выполнено при помощи объединения в пары всех разнозаряженных адронов в диапазоне поперечных импульсов

$$0,3 < p_T \text{ (ГэВ/с)} < 8,0.$$

Каждому треку присваивалась масса заряженного каона.

Примеры спектров восстановленной инвариантной массы $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$, $\omega \rightarrow \pi^0 \pi^+ \pi^-$, $K_s^- \rightarrow \pi^0 \pi^0$ и $\phi \rightarrow K^+ K^-$ для различных интервалов по поперечному импульсу показаны на рис. 1. Значения ширины пиков ω -, K_s^- и ϕ -мезонов составляют около 17, 15 и 13 МэВ/с² и имеют слабо выраженную зависимость от поперечного импульса.

Для определения выходов π^0 -, ω -, K_s^- и ϕ -мезонов спектры восстановленной инвариантной массы пар фотонов, триплета пионов, пар нейтральных пионов и пар разнозаряженных каонов около каждого пика были аппроксимированы функцией, которая учитывает форму сигнала и фона.

Для описания формы сигнала использовались свертка функции Брейта–Вигнера и Гауссовой функции. Первая функция описывает естественную форму измеренного резонанса, а вторая учитывает вклад разрешения детектора. В зависимости от исследуемого канала распада может преобладать первое или второе распределение, например, Гауссова функция играет большую роль в таких распадах, как $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$, $\omega \rightarrow \pi^0 \pi^+ \pi^-$ и $K_s^- \rightarrow \pi^0 \pi^0$, а функция Брейта–Вигнера — в распаде $\phi \rightarrow K^+ K^-$. Фоновая подложка аппроксимировалась полиномом второй степени.

Систематическая ошибка, связанная с измерением выходов мезонов, вносит основной вклад в общую систематическую неопределенность измерений. Методика ее оценки подробно описана в работе [7]. Она заключается в использовании различных критериев отбора для определения выходов легких мезонов и последующем сравнении полученного набора результатов. Величины данной неопределенности представлены в таблице.

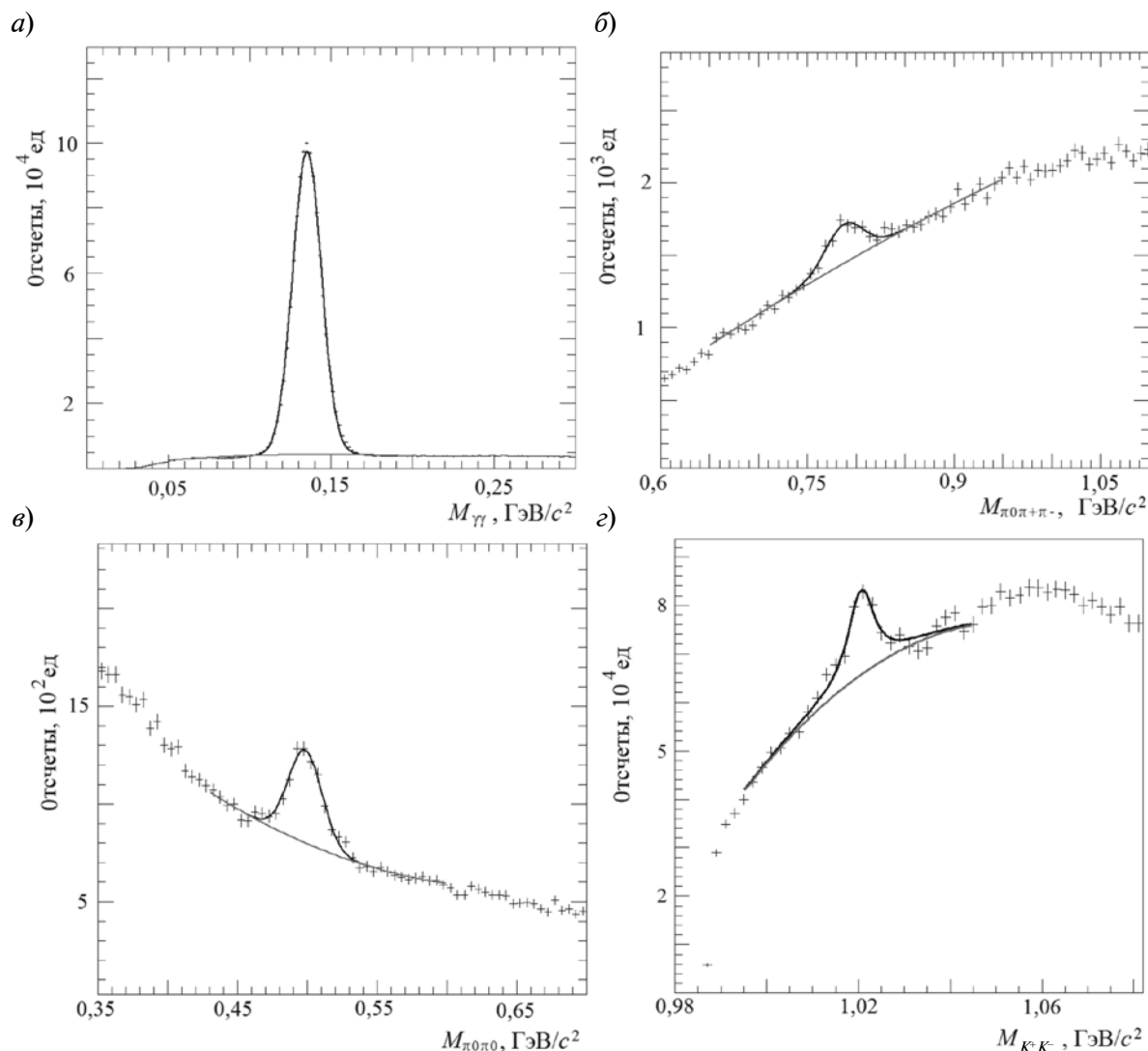


Рис. 1. Спектры инвариантной массы $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ (а), $\omega \rightarrow \pi^0\pi^+\pi^-$ (б), $K_s^0 \rightarrow \pi^0\pi^0$ (в) и $\phi \rightarrow K^+K^-$ (г).

Спектры восстановлены в интервалах по поперечному импульсу, ГэВ/с:

5 – 6 (а), 6 – 7 (б, в) и 2,7 – 3,2 (г).

Сплошные линии – результаты аппроксимации фоновой подложки полиномом второй степени, а сигнала – сверткой функции Брейта–Вигнера с Гауссовой функцией

Для определения функций коррекций проводились модельные расчеты методом Монте-Карло взаимодействия продуктов распада исследуемых мезонов с экспериментальной установкой PHENIX. Мезоны равномерно генерировались в области быстрот $|y| < 0,5$ и в полном азимутальном угле. Выбранные диапазоны распределений поперечного импульса и количество мезонов позволяют обеспечить статистическую точность порядка 1 – 3 % для всех проводимых исследований. Для расчета

эффективности регистрации мезонов к сгенерированным спектрам была применена нормировка, позволяющая получить совпадение с измеренными спектрами частиц. Эта процедура повторялась многократно. Для описания кинематики трехчастотного распада ω -мезона использовались экспериментально измеренные распределения плотности фазового пространства [7]. Полученные в ходе модельного расчета положения и ширины пиков π^0 -, K_s^0 -, ω - и ϕ -мезонов в спектрах инвариантных

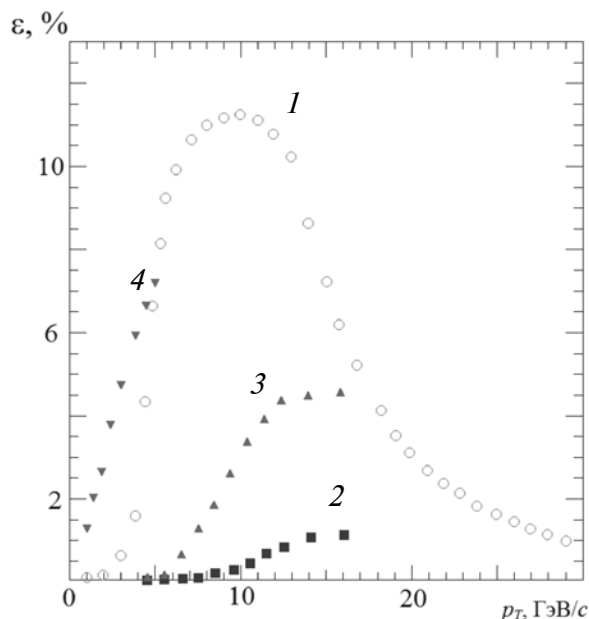


Рис. 2. Функции коррекции, рассчитанные для каналов распада $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ (1), $\omega \rightarrow \pi^0\pi^+\pi^-$ (2), $K_s \rightarrow \pi^0\pi^0$ (3) и $\phi \rightarrow K^+K^-$ (4)

масс $\gamma\gamma$, $\pi^0\pi^+\pi^-$, $\pi^0\pi^0$ и K^+K^- согласуются со значениями, найденными из экспериментальных данных, для всего диапазона поперечных импульсов. При анализе экспериментальных данных и выполнении

модельного расчета использовался один и тот же программный код.

Функции коррекции, вычисленные для $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$, $\omega \rightarrow \pi^0\pi^+\pi^-$, $K_s \rightarrow \pi^0\pi^0$ и $\phi \rightarrow K^+K^-$ показаны на рис. 2. При построении всех кривых учтены геометрия детектора, кинематика распадов частиц, работа детекторных подсистем (включая идентификацию частиц) и критерии отбора частиц. При вычислении функций коррекций для π^0 -, ω -, K_s -мезонов также учтена эффективность фотонного триггера. Функции коррекции сильно зависят от поперечного импульса частицы и быстро уменьшаются в области малых поперечных импульсов для всех типов частиц, описанных в данной статье. Уменьшение значений функции коррекции для $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ в области $p_T > 12$ ГэВ/с обусловлено ограниченным пространственным разрешением электромагнитного калориметра. С ростом поперечного импульса нейтральных пионов уменьшается угол разлета фотонов их распада. Пара фотонов от распадов таких пионов регистрируется электромагнитным калориметром как γ -квант с энергией, равной сумме энергий двух фотонов, и разделить два γ -кванта не представляется возможным.

Систематические ошибки измерения (в процентах) инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, ω -, K_s - и ϕ -мезонов

Измеряемая величина	$\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$	$\omega \rightarrow \pi^0\pi^+\pi^-$	$K_s \rightarrow \pi^0\pi^0$	$\phi \rightarrow K^+K^-$	Тип
Геометрия калориметра	4	4	8	—	В
Геометрия DC	—	2	—	3	В
Пространств. разрешение	1 – 25	—	—	—	В
Энергетическое разрешение	3 – 11	2 – 5	4 – 5	—	В
Энергетическая шкала	2 – 7	3 – 6	4	0,5 – 5	В
Отбор π^0 -мезонов	—	3	6 – 12	—	В
Эффективность γ -триггера	3 – 10	4 – 10	3 – 11	—	В
Выход (модельный расчет)	1	2	2	3	В
Конверсия γ -квантов	1,5	3	6	—	С
Вероятность распада	—	0,8	0,2	—	С
МВ-триггер	10				С
Выход (данные эксперимента)	2 – 5	7 – 17	9 – 18	12 – 26	А
Суммарная ошибка	12 – 29	16 – 23	18 – 27	16 – 29	—

Для оценки систематических ошибок, связанных с точностью расчета функций коррекций, варьировались как критерии отбора частиц, так и энергетическое, пространственное и импульсное разрешения калориметра и трековой системы экспериментальной установки PHENIX. Результаты систематических ошибок сведены в таблице. Неопределенности разбиты на три типа: А — не зависящие от поперечного импульса; В — зависящие от поперечного импульса, но форма зависимости неизвестна; С — связанные с неопределенностью нормировки спектров.

Для построения относительных выходов ω -, K_s - и ϕ -мезонов к нейтральным пионам (ω/π^0 , K_s/π^0 и ϕ/π^0) инвариантное дифференциальное сечение рождения π^0 -мезонов было аппроксимировано следующей функциональной зависимостью [8]:

$$f(p_T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{p_T - t}{w}}} \frac{A}{\left(1 + \frac{p_T}{p_0}\right)^m} + \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{p_T - t}{w}}}\right) \frac{B}{p_T^n},$$

где A , B , p_0 , m , n , t , w — свободные параметры.

Были получены следующие значения параметров: $A = 139,5$ мбарн·ГэВ⁻²с³; $B = 17,2$ мбарн·ГэВ⁻²с³; $p_0 = 1,7$ ГэВ/с; $m = 10,1$; $n = 7,4$; $t = 5,1$ ГэВ/с; $w = 0,002$ ГэВ/с.

Относительные выходы были рассчитаны как отношение инвариантных дифференциальных сечений рождения ω -, K_s - и ϕ -мезонов к результату аппроксимации.

Результаты измерений

Результаты измерения инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, ω -, K_s - и ϕ -мезонов в столкновениях протонов при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ показаны на рис. 3. Измерения выполнены в области быстрот $|\eta| < 0,35$ в диапазоне поперечных импульсов от 1 до 30 ГэВ/с. В области больших поперечных импульсов диапазон измерений ограничен размером выборки накопленных экспериментальных данных, а в области малых поперечных импульсов — аксептансом экспериментальной установки PHENIX. Сплошными кривыми на рисунке обозначены результаты КХД-расчета

инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, и K_s -мезонов, произведенного во втором порядке приближения теории возмущений, для масштабов факторизации $\mu = p_T/2$, p_T и $2p_T$. При расчете использовались функции фрагментации и функции распределения партонов в сталкивающихся нуклонах, опубликованные в работах [9, 10]. Результаты расчета хорошо описывают экспериментальные данные.

На рис. 4 представлены зависимости относительных выходов ω/π^0 , K_s/π^0 и ϕ/π^0 от поперечного импульса. Измерения произведены в $(p + p)$ -столкновениях при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ. В области поперечных импульсов больше 3 ГэВ/с относительные выходы практически не зависят от поперечного импульса. Аппроксимация относительных выходов константой в области поперечных импульсов $p_T > 3$ ГэВ/с дает следующие значения: $\omega/\pi^0 = 0,79 \pm$

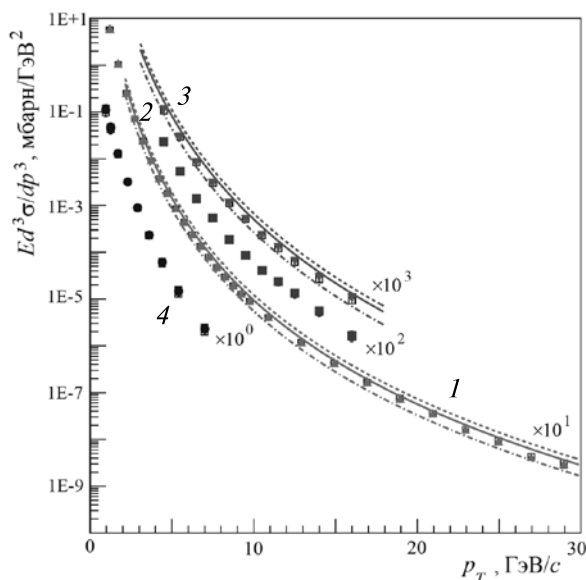


Рис. 3. Инвариантные дифференциальные сечения рождения π^0 - (1), ω - (2), K_s - (3) и ϕ - (4) мезонов в столкновениях протонов при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ.

Вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений. Линии — результаты КХД-расчета инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 - и K_s -мезонов, выполненных для масштабов факторизации $\mu = p_T/2$ (точка-пунктир), p_T (сплошная) и $2p_T$ (пунктир). Систематическая ошибка определения эффективности триггера первого уровня, равная 10 %, не показана



$\pm 0,03$ (стат.) $\pm 0,08$ (сист.); $K_s/\pi^0 = 0,45 \pm \pm 0,01$ (стат.) $\pm 0,05$ (сист.); $\phi/\pi^0 = 0,20 \pm \pm 0,02$ (стат.) $\pm 0,04$ (сист.). В пределах ошибок измерений полученные значения совпадают со значениями относительных выходов, измеренных ранее при более низких энергиях [8]. Также на рис. 4. Показаны результаты КХД-расчетов относительных выходов ω/π^0 и ϕ/π^0 , выполненных с помощью программы моделирования процессов столкновения элементарных частиц PYTHIA [11]. Результаты расчетов не достаточно точно описывают экспериментальные данные, что свидетельствует о несоответствии параметров модели экспериментальным наблюдениям.

В настоящей статье представлены результаты измерения инвариантных дифференциальных сечений рождения π^0 -, ω -, K_s - и ϕ -мезонов и их относительных выходов к нейтральным пионам ω/π^0 , K_s/π^0 и ϕ/π^0 в столкновениях протонов при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ. Измерения охватывают широкую область поперечных импульсов от 1 до 30 ГэВ/с в области быстрот $|y| < 0,35$. Относительные выходы ω -, K_s - и ϕ -мезонов к нейтральным пионам в области поперечных импульсов больше 3 ГэВ/с имеют следующие значения: $\omega/\pi^0 = 0,79 \pm 0,03$ (стат.) $\pm \pm 0,08$ (сист.); $K_s/\pi^0 = 0,45 \pm 0,01$ (стат.) $\pm \pm 0,05$ (сист.); $\phi/\pi^0 = 0,20 \pm 0,02$ (стат.) $\pm \pm 0,04$ (сист.). Полученные значения совпадают со значениями относительных выходов, измеренных при более низких энергиях в лабораториях FNAL, CERN и BNL. Расчеты, выполненные в рамках квантовой хромодинамики, описывают представленные в работе экспериментальные данные.

Результаты, полученные в настоящей статье, вносят важный вклад в проверку квантовохромодинамических предсказаний рождения частиц в ядро-ядерных взаимодействиях при высоких энергиях. Систематическое измерение выходов легких векторных

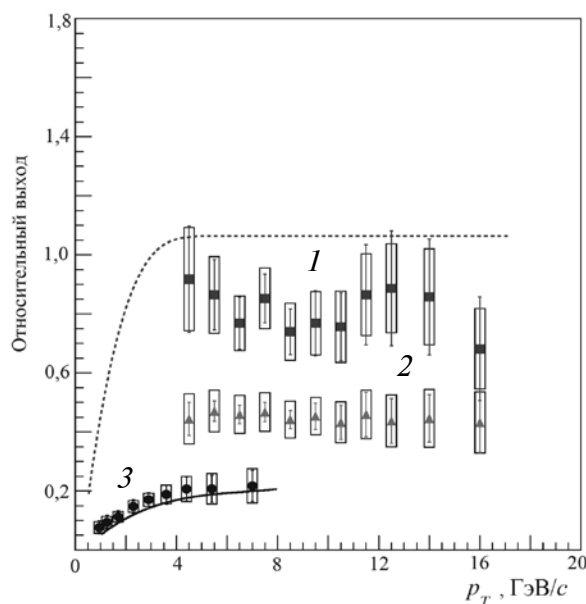


Рис. 4. Зависимости относительных выходов ω/π^0 (1), K_s/π^0 (2) и ϕ/π^0 (3) от поперечного импульса, измеренные в $(p + p)$ -столкновениях при энергии $\sqrt{S} = 500$ ГэВ.

Вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений. Линии — результаты КХД-расчетов относительных выходов ω/π^0 (пунктир) и ϕ/π^0 (сплошная), выполненных с помощью программы моделирования процессов столкновения элементарных частиц PYTHIA

мезонов в протон-протонных взаимодействиях при энергии 500 ГэВ также может обнаружить универсальную масштабную инвариантность, которая была отмечена при систематическом изучении рождения мезонов в протон-протонных взаимодействиях при более низких энергиях. Основываясь на статистическом распределении Тсалисса [2], будет возможно с высокой точностью предсказывать выходы частиц в ядро-ядерных взаимодействиях при высоких энергиях. Полученные результаты послужат заделом для подобного исследования.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 12-02-31362 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Adcox, K. Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration [Text] / K. Adcox, Y. Berdnikov, V. Sam-

sonov [et al.] // Nucl. Phys. A. — 2005. — Vol. 757. — P. 184–283.

2. Бердников, Я.А. Дифференциальные сечения рождения π , K , η , ω , η' , ϕ -мезонов в $p + p$

взаимодействиях при энергии $\sqrt{s} = 200$ ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2008. — № 6(67). — С. 65–70.

3. **Бердников, Я.А.** Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 3(129). — С. 134–139.

4. **Бердников, Я.А.** Рождение ϕ -мезонов в столкновениях ядер меди при энергии 200 ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, Д.О. Котов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. — 2009. — № 4(88). — С. 57–62.

5. **Бердников, А.Я.** Подавление выхода короткоживущих нейтральных каонов в центральных столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ [Текст] / А.Я. Бердников, Д.А. Иванищев, В.М. Самсонов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 2(122). — С. 111–116.

6. **Бердников, Я.А.** Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер меди при энергии 200 ГэВ [Текст] / Я.А. Бердни-

ков, Д.А. Иванищев, В.М. Самсонов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2011. — № 2(122). — С. 116 – 121.

7. **Adare, A.** Production of ω mesons in $p + p$, $d + Au$, $Cu + Cu$, and $Au + Au$ collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV [Text] / A. Adare, D. Ivanishchev, V. Samsonov [et al.] // Phys. Rev. C. — 2011. — Vol. 84. — P. 044902 (1–11).

8. **Бердников, Я.А.** Отношение выходов легких мезонов в $(p + p)$ -столкновениях при энергии $\sqrt{s} = 200$ ГэВ [Текст] / Я.А. Бердников, Д.А. Иванищев, В.М. Самсонов [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2008. — № 6(67). — С. 70–73.

9. **Florian, D.** Global analysis of fragmentation functions for pions and kaons and their uncertainties [Text] / D. Florian, R. Sassot // Phys. Rev. D. — 2007. — Vol. 75. — P. 114010 (1–29).

10. **Pumplin, J.** New generation of parton distributions with uncertainties from global QCD analysis [Text] / J. Pumplin, D. Robert, S.J. Huston [et al.] // JHEP. — 2002. — Vol. 2002. — P. 0207:012.

11. **Sjostrand, T.** PYTHIA 6.2 physics and manual [Text] / T. Sjostrand, L. Lonnblad, S. Mrenna // Preprint arXiv:hep-ph/0108264. — 2001. — P. 1–425.

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 роща, ФГБУ «ПИЯФ»
ivanishchev@gmail.com

ИВАНОВ Алексей Евгеньевич — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник лаборатории физики элементарных частиц отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ФГБУ «ПИЯФ»
ivanovae@pnpi.spb.ru

КОТОВ Дмитрий Олегович — кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dm_kotov@phmf.spbstu.ru

САФОНОВ Алексей Сергеевич — аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

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*

ИЗМЕРЕНИЕ ВЫХОДОВ ЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩИХ ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ, В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 ГэВ

*A.Ya. Berdnikov¹, A.V. Golovin², D.A. Ivanishchev³,
D.O. Kotov⁴, V.G. Ryabov⁵, Yu.G. Ryabov⁶*

^{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

THE YIELDS MEASUREMENT OF PARTICLES CONTAINING HEAVY QUARKS IN Au+Au COLLISIONS AT 200 GeV

Представлены результаты измерения спектров рождения электронов от полулептонных распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, во взаимодействиях ядер золота при энергии 200 ГэВ для различных центральностей столкновений. Описана методика вычисления «коктейля» — теоретически рассчитанного спектра инвариантной массы диэлектронных пар от известных источников фонового излучения.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. МЕЗОНЫ. ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ. АНАЛИЗ.

Electron spectra from semileptonic decays of particles containing heavy quarks have been presented for different centralities of Au + Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV. The method for calculating ‘cocktail’ spectra has also been presented and discussed.

QUARK-GLUON PLASMA. MESONS. HEAVY QUARKS. ANALYSIS.

В настоящее время свойства ядерной материи в условиях высоких температур и/или барионных плотностей определены только из расчетов квантовой хромодинамики на решетке, предсказывающих фазовый переход из обычной ядерной материи в состояние кварк-глюонной плазмы (КГП) при температуре $T \approx 170$ МэВ $\approx 10^{12}$ К для различного числа ароматов кварков, учитываемых в расчете. Температура фазового перехода соответствует плотности энергии $\varepsilon \approx 1$ ГэВ/фм³, $T \approx 170$ МэВ, что приблизительно на порядок больше величины плотности энергии в нормальной ядерной материи (примерно 0,15 ГэВ/фм³). Единственным способом, которым в лабораторных условиях могут быть достигнуты условия, необходимые для фазового перехода, является изучение центральных

столкновений тяжелых ядер. При этом кварк-глюонная плазма, образующаяся в ограниченном микрообъеме, будет расширяться и охлаждаться независимо от ее природы и свойств. Как результат, в какой-то момент произойдет фазовый переход взаимодействующей системы из состояния плазмы в состояние обычной, но очень горячей и плотной ядерной материи. Изучение этих фундаментальных явлений на всех стадиях процесса возможно через детектирование различных частиц, излучаемых из области взаимодействия.

В течение последних десяти лет основной прогресс в данной области исследований связан с запуском в эксплуатацию в 2000 г. и успешной работой первого в мире коллайдера тяжелых ионов — RHIC [1]. Комплекс позволяет накапливать, ускорять и сталки-

вать пучки любых ионов в любой комбинации, начиная с протонов и заканчивая ядрами золота. Эксперимент ФЕНИКС [2, 3] является одной из двух основных установок на коллайдере RHIC, предназначенной для измерения характеристик фотонов, лептонов и адронов, вылетающих из области взаимодействия тяжелых ионов.

Тяжелые адроны, содержащие тяжелые кварки (b и c), являются важным инструментом для систематического изучения свойств среды, образующейся в центральных столкновениях ультрарелятивистских тяжелых ядер. Механизм взаимодействия со средой для тяжелых кварков должен отличаться от случая легких кварков в силу существенной разности масс. В частности, практически все теоретические модели предсказывают, что степень подавления выхода частиц, содержащих в своем составе тяжелые кварки, должна быть меньшей по сравнению с легкими адронами. Сложность описания результатов связана с невозможностью в рамках имеющейся экспериментальной установки разделения вкладов от c - и b -кварков в суммарный измеренный спектр электронов. При этом теоретически предсказанные свойства частиц, содержащих c - или b -кварки, существенно различаются. В силу ряда обстоятельств (конструкции 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 полупертоновых распадов частиц, содержащих тяжелые кварки. Данная работа посвящена изучению рождения подобных электронов в столкновениях ядер золота при энергии взаимодействия 200 ГэВ. Все результаты, представленные в настоящей статье, получены в эксперименте ФЕНИКС [3] на коллайдере RHIC.

Измерение инвариантных спектров рождения нефотонных электронов в столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ

Измерения инвариантных спектров можно разбить на несколько этапов. На первом из них мы измеряем инклюзивный спектр рождения электронов в столкновениях ядер

золота. На втором этапе необходимо выделить из инклюзивного спектра электронов так называемые нефотонные электроны, т. е. электроны от полупертоновых распадов частиц, содержащих тяжелые кварки. Для этого необходимо оценить фоновый вклад фотонных электронов (они образуются в результате Далиц-распадов и конверсии, в основном, на материале пучковой трубы) и вклад нефотонного фона, причем оба вклада — от полупертоновых распадов K -мезонов ($K \rightarrow e\nu$) и диэлектронных распадов легких мезонов ($\omega, \phi, \rho \rightarrow e^+e^-$). Решение данной задачи предполагает разработку уникальных методик анализа экспериментальных данных, в частности тщательного расчета так называемого «коктейля» — спектра электронов от диэлектронных распадов легких мезонов и полупертоновых распадов K -мезонов, учитывающего как уже полученные данные измерений сечений рождения частиц, так и расчетные параметры. Далее необходимо оценить эффективность регистрации электронов в экспериментальной установке и соответствующих систематических неопределенностей при использовании большого числа детекторных подсистем. В случае столкновений ядер золота также необходимо учитывать потерю в эффективности восстановления частиц вследствие высокой множественности вторичных частиц.

Задача по измерению инклюзивных выходов является нетривиальной, так как электроны представляют собой мизерную часть от всех рождающихся в столкновениях заряженных частиц — в основном, пионов. Решение этой задачи требует очень тщательной калибровки детекторов, участвующих в идентификации электронов (трековые детекторы (дрейфовые камеры) [4, 5], калориметр [6], черенковский детектор кругового действия [7]), оптимизации критериев отбора частиц и разработки уникальных методик анализа экспериментальных данных. Задача включает в себя следующие этапы:

анализ качества экспериментальных данных; определение средних характеристик детекторных подсистем, таких как эффективность, энергетическое, импульсное и пространственное разрешения, активная площадь; отбор данных, с одинаковыми характеристиками детекторных подсистем;

оптимизация критериев отбора электронов, зарегистрированных в различных детекторных подсистемах;

измерение выходов частиц, не поправленных на эффективность их регистрации в экспериментальной установке;

определение эффективности регистрации электронов на основе Монте-Карло-моделирования взаимодействия частиц с экспериментальной установкой;

восстановление инклюзивных спектров рождения адронов по поперечному импульсу;

оценка систематических неопределенностей измерений.

Для регистрации электронов используются дрейфовая камера (DC) [4, 5], первый и третий слои падовых камер (PC1, PC3) [4], электромагнитный калориметр (EMC) [6] и детектор черенковского света RICH [7]. Анализ качества данных производился после окончания всех процедур, связанных с

калибровкой детекторных подсистем. Методика анализа качества экспериментальных данных основана на сравнении характеристик детекторов, определенных для каждого отдельного сегмента данных, с референсными значениями. Сами референсные значения получаются из анализа одного сегмента данных, отобранного специалистами, обеспечивающими экспертную поддержку детекторных подсистем. В результате контроля качества удается отобрать данные, обладающие однородным (во времени) поведением детекторов, участвующих в анализе. Как правило, подобный анализ уменьшает статистическую обеспеченность измерений на 10 – 30 %. Тем не менее, данная процедура является совершенно необходимой и позволяет минимизировать систематические ошибки измерений, связанные с неопределенностью эффективности регистрации частиц в экспериментальной установке.

Условия отбора частиц оптимизируют-

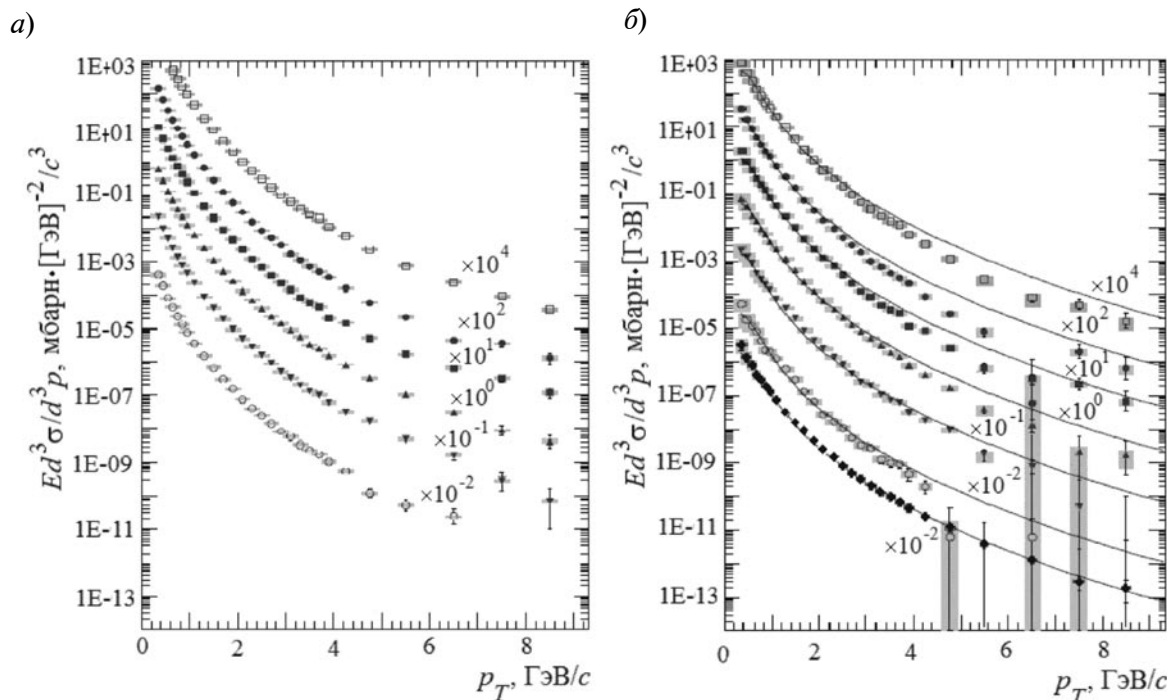


Рис. 1. Инклюзивные (а) и от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки (б), инвариантные спектры рождения электронов по поперечному импульсу, измеренные в столкновениях ядер золота при различных центральных столкновениях, %: 0 – 92 (□); 0 – 10 (●); 10 – 20 (■); 20 – 40 (▲); 40 – 60 (▼); 60 – 92 (○); спектр рождения в протонных столкновениях при той же энергии (◆).

Сплошные линии – аппроксимация спектра рождения в протонных столкновениях, умноженная на соответствующее число парных неупругих нуклон-нуклонных столкновений. Вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений

ся таким образом, чтобы максимально подавить комбинаторный и коррелированный фоны (физический и аппаратный), сопровождающие измерения выходов частиц, при сохранении максимальной доли полезного сигнала. Критерии отбора частиц, использованные в физическом анализе, зависят от множественности рождающихся частиц, вероятности выхода изучаемой частицы.

В качестве основного инструмента для расчета эффективности регистрации электронов используется программа PISA (Phenix Integrated Simulation Application) [8], созданная на базе пакета GEANT 3.21 [9]. Программа PISA специально разработана для корректного описания геометрии, разрешения, эффективности и материалов экспериментальной установки ФЕНИКС. Входными параметрами для PISA являются характеристики начальных частиц, такие как координаты точки рождения, полный импульс, заряд, масса, каналы распада и т. п. Выборка частиц создается с помощью Монте-Карло-генератора частиц Exodus. В задачи программы PISA входит моделирование распада частиц и их взаимодействия с экспериментальной установкой ФЕНИКС, моделирование откликов детекторов на уровне отдельных каналов электроники. На выходе программного пакета PISA получаются файлы, аналогичные по структуре файлам с экспериментальными данными, что позволяет использовать при модельном расчете те же коды и алгоритмы, что и при экспериментальном анализе. При вычислении инвариантных спектров рождения использовалась функция коррекции, рассчитанная ранее в работе [10].

Инклюзивные спектры рождения электронов в столкновениях ядер золота для различных центральных столкновений [11] представлены на рис. 1, а. Спектры состоят из трех компонент по признаку их происхождения:

во-первых, электроны, образованные от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки (искомый спектр);

во-вторых, электроны, образующиеся в результате Далиц-распадов и конверсий, в основном, на материале пучковой трубы (фотонные электроны);

в-третьих, электроны от полулептонных распадов K -мезонов ($K \rightarrow e\nu$) и диэлектронных распадов легких мезонов ($\omega, \phi, \rho \rightarrow e^+e^-$).

Вклад каждой из компонент фона оценивался с помощью расчета методом Монте-Карло взаимодействия 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 модельного расчета. Результаты расчета вклада фона в инклюзивный спектр представлены в работе [10].

Результаты

На рис. 1, б приведен результирующий спектр электронов после вычитания рассчитанных фонов. Данные показаны для различных центральных столкновений [11].

Результаты, представленные в настоящей статье, позволят детально изучить явление подавления 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.B37.21.1300.

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. **Aphcetchche, L.** PHENIX calorimeter [Text] / L. Aphcetchche, T.C. Awes, J. Banning [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. — 2003. — Vol. 499. — P. 521–536.
7. **Akiba, Y.** PHENIX central arm particle ID detectors [Text] / Y. Akib, M. Aizawa, R. Begay [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, M. Hansroul [et al.] // Preprint CERN. — 1978. — Vol. CERN-DD-78-2-REV. — P. 1–220.
10. **Бердников, А.Я.** Выход электронов от полупериферических распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, в протон-протонных столкновениях при энергии 200 ГэВ [Текст] / А.Я. Бердников, А.В. Головин, Д.А. Иванищев [и др.] // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2013. — № 1(165). — С. 159–163.
11. **Adcox, K.** Centrality dependence of charged particle multiplicity in Au-Au Collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 130$ GeV [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 86. — P. 3500–3505.
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.

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
algol61@mail.ru

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 роща
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 роща
riabovvg@mail.pnpi.spb.ru

РЯБОВ Юрий Германович — кандидат 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 роща
riabovvg@mail.pnpi.spb.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*

ИЗМЕРЕНИЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ПОТОКА ЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩИХ ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ, В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ЗОЛОТА 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.

ELLIPTIC FLOW MEASUREMENT OF PARTICLES CONTAINING HEAVY QUARKS IN Au+Au COLLISIONS AT 200 GeV

Представлены результаты измерения величины эллиптического потока для частиц, содержащих тяжелые кварки, в столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ. Обсуждаются попытки теоретического описания ненулевой величины эллиптического потока для частиц, содержащих тяжелые кварки.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА. ЭЛЛИПТИЧЕСКИЙ ПОТОК. ТЯЖЕЛЫЕ КВАРКИ. АНАЛИЗ.

Elliptic flow results measured in Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 200$ GeV for heavy flavour electrons have been presented for different centralities of interaction. Few theoretical approaches to explain non-zero value of elliptic flow for heavy quarks have been discussed.

QUARK-GLUON PLASMA. ELLIPTIC FLOW. HEAVY QUARKS. ANALYSIS.

Экспериментальные результаты, полученные на релятивистском коллайдере тяжелых ионов RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider) к настоящему времени, указывают на образование плотной и горячей партонной материи в центральных столкновениях ядер золота при энергии 200 ГэВ [1, 2]. Подавление выходов легких адронов в области больших поперечных импульсов p_T указывает на то, что партоны, проходя через плотную среду, теряют в ней часть своей энергии, а наличие эллиптического потока (v_2) говорит о том, что коллективное движение партонов развивается на самых ранних стадиях взаимодействия. Данное наблюдение находится в согласии с расчетами гидро-

динамических моделей. Сравнение величины v_2 с теоретическими предсказаниями говорит о том, что вещество, полученное на коллайдере RHIC, представляет собой практически идеальную жидкость, которая обладает предельно малым отношением вязкости к плотности энтропии [3].

Дальнейшее развитие научных исследований в данной области может быть связано с измерением выходов частиц, содержащих в себе тяжелые кварки (c или b). Согласно эффекту «мертвого конуса» [4] считается, что величина энергетических потерь тяжелых кварков должна быть меньше, чем для легких. В связи с этим ожидается уменьшение как степени подавления выходов



частиц, содержащих тяжелые кварки, так и эллиптических потоков тяжелых кварков по сравнению с легкими.

В настоящей статье представлены результаты измерений эллиптического потока для электронов от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, во взаимодействиях ядер золота при энергии 200 ГэВ. Увеличение объема данных более чем в 10 раз, по сравнению с ранее доступными результатами [5], позволило значительно увеличить диапазон измерения величины эллиптического потока v_2 по поперечному импульсу p_T . Все измерения выполнены на экспериментальной установке ФЕНИКС [6], расположенной на коллайдере RHIC [7].

Методика измерений

Изучение процессов рождения тяжелых кварков можно проводить через прямые измерения выходов D - и B -мезонов в каналах распада ($K + \pi$) и ($J/\psi + K$) соответственно. К сожалению, данный подход невозможно использовать в эксперименте ФЕНИКС, который не способен определять координаты точки распада долгоживущих D - и B -мезонов. Процессы рождения тяжелых кварков изучаются путем измерения выходов лептонов от полуплептонных распадов частиц, содержащих в себе указанные кварки. Вероятности этих распадов достаточно велики (составляют около 10 %), что позволяет проводить высокоточные измерения выходов лептонов. Нужно отметить, что при изучении взаимодействий тяжелых ядер подобный подход выигрывает перед прямым измерением выходов D - и B -мезонов, при использовании которого неизбежно требовалось бы работать с высокими уровнями комбинаторных фонов.

Состав и основные характеристики установки ФЕНИКС описаны в работе [6]. Треки заряженных частиц восстанавливаются с помощью дрейфовых и палочковых камер. Характерное импульсное разрешение детектора составляет (в процентах)

$$\delta p/p = 0,7 + 1,1(p/p_0),$$

где $p_0 = 1,0$ ГэВ/с.

Для идентификации электронов (или позитронов) используется черенковский

детектор кругового действия (RICH) и электромагнитный калориметр (ЕМС). Для эффективной регистрации электронов необходимо разделять электроны и адроны на уровне 10^{-4} в области поперечных импульсов $0,2 < p_T$ (ГэВ/с) < 4 .

Основной вклад в идентификацию электронов вносит RICH в области импульсов ниже порога черенковского излучения для π -мезонов, составляющего около 4 ГэВ/с в рабочем газе детектора (углекислый газ). Конструкция подсистемы RICH состоит из 48 панелей композитных зеркал, образующих две пересекающиеся сферические поверхности с общей площадью, равной 20 м² [8]. Сферические зеркала фокусируют черенковский свет на два массива фотумножителей (1280 штук, HAMAMATSU H3171S), расположенных за пределами активного объема центральных спектрометров.

Сравнение энергий и импульсов электронов, измеренных в ЕМС и центральной трековой системе, позволяет подавить около 90 % всех адронов в области поперечных импульсов $p_T > 1$ ГэВ/с.

На рис. 1 схематически представлено взаимодействие двух тяжелых ядер. Первоначальная область перекрытия ядер при ненулевом прицельном параметре имеет эллиптическую форму. В процессе термализации рожденного вещества из-за про-

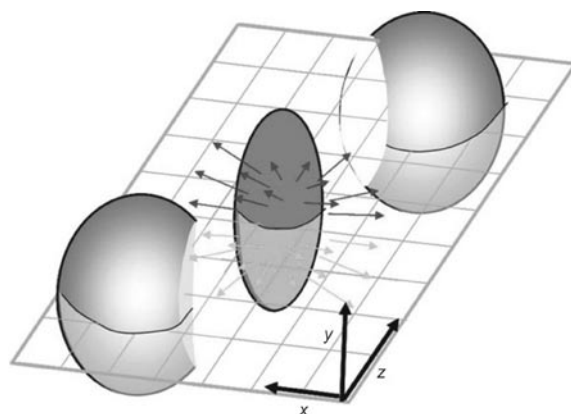


Рис. 1. Схематичное изображение нецентрального взаимодействия двух тяжелых ядер. Область перекрытия (в центре) обладает миндалевидной формой, в которой формируются градиенты давления

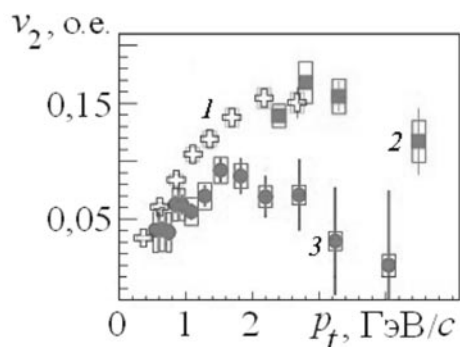


Рис. 2. Зависимость величины эллиптического потока v_2 от поперечного импульса p_T заряженных (1) и нейтральных (2) π -мезонов, а также электронов от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки (3)

странственной анизотропии системы создаются градиенты давления: максимального вдоль меньшей оси эллипса и минимального вдоль его большей оси. В результате азимутальное импульсное распределение частиц становится анизотропным. Количество эллиптический поток v_2 характеризуется вторым коэффициентом в разложении в ряд Фурье распределения частиц по азимутальному углу относительно плоскости реакции.

Величина эллиптического потока v_2 для частиц, содержащих тяжелые кварки, вычисляется путем измерения инклюзивного эллиптического потока v_2 для всех электронов, вылетающих из области взаимодействия ядер, и последующего вычитания из полученного значения v_2 теоретически рассчитанных фоновых вкладов от Далиц-распадов, конверсий на материале пучковой трубы, полуперонных распадов K -мезонов и диэлектронных распадов легких мезонов.

Результаты

На рис. 2 представлена зависимость величины v_2 от поперечного импульса p_T , полученная для заряженных и нейтральных π -мезонов и электронов от полуперонных распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, в центральных взаимодействиях ядер золота при энергии 200 ГэВ.

Тяжелые кварки также участвуют в коллективном движении и обладают ненулевой

величиной эллиптического потока в области малых поперечных импульсов. Величина эллиптического потока для тяжелых кварков оказалась сопоставима с потоком для частиц, которые состоят из легких.

В работе [9] показано, что возможно количественное описание большой величины эллиптического потока v_2 для электронов от распадов частиц, содержащих тяжелые кварки, при помощи модифицированного уравнения Ланжевена. Согласно предложенной модели, тяжелые нерелятивистские кварки находятся в тепловой среде, в которой их перемещения описываются как некоррелированные акты упругого рассеяния. Основным параметром модели является коэффициент диффузии тяжелых кварков. Еще одна модель, основанная на уравнении Ланжевена [10], вводит связь между упругим рассеянием тяжелых кварков и возбужденными состояниями D - и B -мезонов в партонной среде. На присутствие этих состояний указывают расчеты квантовой хромодинамики (КХД) на решетке. На рис. 3 представлены теоретические описания наблюдаемых результатов.

Расчеты, представленные авторами [11], указывают на возможность описать ненулевую величину эллиптического потока, наблюдаемую для тяжелых кварков, через процесс диссоциации D - и B -мезонов в партонной среде. При этом энергетические потери тяжелых кварков в результате этой

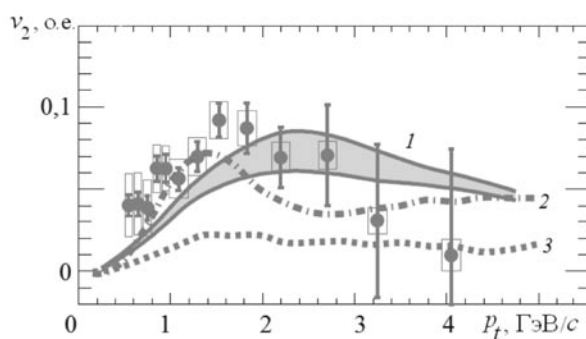


Рис. 3. Результаты расчетов зависимости от поперечного импульса эллиптического потока v_2 для частиц, содержащих тяжелые кварки, во взаимодействиях ядер золота при энергии 200 ГэВ.

Использованы модели из работ [10] (1) и [9] (2, 3)



диссоциации становятся чувствительными как ко времени формирования партонной материи, так и к динамике расширения горячего партонного вещества в целом.

Сложности в данной области связаны, в частности, и с тем, что все измерения эксперимента ФЕНИКС представляют собой смесь электронов от распадов D - и B -мезонов. Известно, что масса c -кварка меньше массы b -кварка и, следовательно, стоит ожидать различного поведения для этих двух типов элементарных частиц. Разделить вклады от c - и b -кварков можно, если использовать различные времена жизни D - и B -мезонов и измерять координату точки распада. Для этого в эксперимент ФЕНИКС была имплементирована новая детекторная подсистема VTX [12], с которой уже начинают поступать первые результаты.

В настоящей статье представлены результаты измерения величины эллиптического потока для частиц, содержащих

тяжелые кварки, во взаимодействиях ядер золота при энергии 200 ГэВ.

Для частиц, содержащих в своем составе тяжелые c - и b -кварки, обнаружена ненулевая величина эллиптического потока v_2 , которая количественно согласуется с поведением величины v_2 для частиц, состоящих из легких кварков. Теоретические модели, базирующиеся на уравнении Ланжевена, позволяют описать наблюдаемую зависимость величины эллиптического потока от поперечного импульса частиц, варьируя значение параметра модели — коэффициента диффузии тяжелых кварков.

Существенное улучшение точности измерений ожидается в результате имплементации дополнительной детекторной подсистемы VTX, которая позволит определять координату вершины распада долгоживущих D - и B -мезонов.

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.1300.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Adcox, K.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Phys. A. — 2005. — Vol. 757. — P. 184–283.
2. **Adcox, K.** Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 130$ GeV [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 88. — P. 022301–022307.
3. **Kovtun, P.K.** Viscosity in strongly interacting quantum field theories from black hole physics [Text] / P.K. Kovtun, D.T. Son, A.O. Starinets // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 94. — P. 111601–111610.
4. **Dokshitzer, Y.L.** Heavy quark colorimetry of QCD matter. [Text] / Y.L. Dokshitzer, D.E. Kharzeev // Phys. Lett. B. — 2001. — Vol. 519. — P. 119–134.
5. **Adler, S.S.** Centrality dependence of charm production from single electrons in Au+Au collisions at 200 GeV [Text] // S.S. Adler, V. Riabov, Y. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 94. — P. 082301–082305.
6. **Adcox, K.** PHENIX detector overview [Text] / K. Adcox, V. Riabov, Y. Berdnikov [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 469–479.
7. **Baym, G.** RHIC: From dreams to beams in two decades [Text] / G. Baym // Nucl. Phys. A. — 2002. — Vol. 698. — P. 23–32.
8. **Aizawa, M.** PHENIX central arm particle I.D. detectors [Text] / M. Aizawa, Y. Akiba, R. Begay [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. — 2003. — Vol. 499. — P. 508–520.
9. **Moore, G.D.** How much do heavy quarks thermalize in a heavy ion collision? [Text] / G.D. Moore, D. Teaney // Phys. Rev. C. — 2005. — Vol. 71. — P. 064904–064938.
10. **Rapp, R.** Heavy-quark probes of the quark-gluon plasma and interpretation of recent data taken at the BNL Relativistic Heavy Ion Collider [Text] / R. Rapp, H. Hees, V. Greco // Phys. Rev. C. — 2006. — Vol. 73. — P. 034913–034917.
11. **Adil, A.** Collisional dissociation of heavy mesons in dense QCD matter [Text] / A. Adil, I. Vitev // Phys. Lett. B. — 2007. — Vol. 649. — P. 139–146.
12. **Akiba, Y.** Status and performance of new silicon stripixel detector for the PHENIX experiment at RHIC: Beta source, cosmic-rays and proton beam at 120 GeV [Text] / Y. Akiba, R. Noucier, K. Boyle [et al.] // J. of instrumentation. — 2009. — Vol. 4. — P. 04011–04024.

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 роща
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 роща
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 роща
yuriy.riabov@gmail.com

УДК 519.854

В.И. Хохлюк

ПРОЦЕДУРЫ РАЗБИЕНИЯ СМЕШАННОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

V.I. Khokhlyuk

Sobolev Institute of Mathematics,
4 Acad. Koptug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia.

PARTITIONING PROCEDURES FOR A MIXED OPTIMIZATION PROBLEM

Для смешанной задачи оптимизации доказываются теорема о разбиении этой задачи и две леммы. Эти утверждения составляют теоретическую основу для вычислительных процедур разбиения, детально описанных в работе.

СМЕШАННАЯ ЗАДАЧА. ЦЕЛОЧИСЛЕННАЯ ЗАДАЧА. ОПТИМИЗАЦИЯ. ДВОЙСТВЕННОСТЬ. МНОГОГРАННЫЙ КОНУС. ПРОЦЕДУРЫ РАЗБИЕНИЯ.

Some partitioning theorem and two lemmas are proved for a mixed optimization problem. These are a theoretical background for calculating partitioning procedures which are detailed in this paper.

MIXED PROBLEM. INTEGER PROBLEM. OPTIMIZATION. DUALITY. POLYHEDRAL CONE. PARTITIONING PROCEDURES.

В настоящее время численное решение практических смешанных задач оптимизации является актуальной проблемой. Как правило, в машинных кодах реализуется метод ветвей и границ. Вычислительную эффективность этих кодов можно значительно повысить путем построения сечений. Эта работа посвящена именно такому повышению эффективности.

Сначала излагается постановка задачи и доказываются эквивалентность двух задач оптимизации. Затем формулируется и доказывается теорема о разбиении смешанной целочисленной задачи оптимизации. В доказательстве этой теоремы показывается, в какой формулировке используется теорема Минковского – Фаркаша. Также обсуждается возможное применение теоремы о разбиении при решении практических задач.

Дается доказательство двух лемм, в частности на основании леммы 2 формулируется критерий оптимальности.

Теорема о разбиении смешанной задачи оптимизации и две леммы служат теоретической основой для двух вычислительных процедур разбиения. Эти процедуры детально описаны и обоснованы.

Теорема о разбиении смешанной задачи оптимизации

Рассмотрим смешанную задачу оптимизации:

$$\begin{aligned} \max \{ cx + f(y) \mid Ax + F(y) \leq b, x \geq 0, \\ x \in \mathbf{R}^p, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q, p \in \mathbf{N}, q \in \mathbf{N} \}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь A – действительная матрица $m \times p$; b – m -столбец, c – p -строка,

состоящие из действительных чисел; $f(y)$ — действительнoзначная функция, которая может быть нелинейной; $F(y)$ — вектор-столбец с действительнoзначными компонентами (они также могут быть нелинейными). Функция $f(y)$ и вектор-столбец $F(y)$ определены на произвольном множестве S [1, 3, 4, 8].

Здесь и в дальнейшем используются общепринятые обозначения. В частности, будем записывать вектор-столбец в строку без знака транспонирования, вертикальная черта при записи задачи оптимизации с использованием фигурных скобок читается и понимается как «при условиях», а вертикальная черта в записи множества — как «для которых».

Переменная, принимающая все значения из некоторого интервала действительных чисел, называется непрерывной. Переменная, принимающая значения из некоторого дискретного множества, называется дискретной. Примерами дискретных переменных могут служить:

целочисленная переменная, принимающая значения из множества $\mathbf{Z}^1$; неотрицательная целочисленная переменная, принимающая значения из множества $\mathbf{Z}_+^1$; двоичная переменная, принимающая либо значение 0, либо значение 1.

Задача, в которой присутствуют как непрерывные, так и дискретные переменные, называется смешанной. Простейшим примером смешанной задачи является смешанная целочисленная линейная задача оптимизации, в которой

$$f(y) = dy, F(y) = By, y \in \mathbf{Z}_+^q.$$

Рассмотрим следующие множества: в $\mathbf{R}^m$ определим выпуклый многогранный конус

$$C = \{u \mid uA \geq 0, u \geq 0\};$$

в $\mathbf{R}^m$ — выпуклый многогранник

$$P = \{u \mid uA \geq c, u \geq 0\};$$

в $\mathbf{R}^{m+1}$ — выпуклый многогранный конус

$$C_0 = \{(u_0, u) \mid -u_0c + uA \geq 0, (u_0, u) \geq 0\}.$$

Введем непрерывную переменную x_0 и сформулируем новую смешанную задачу оптимизации:

$$\max\{x_0 \mid x_0 - cx - f(y) \leq 0, Ax + F(y) \leq b, x \geq 0, x \in \mathbf{R}^p, y \in S \subseteq \mathbf{R}^q\}. \quad (2)$$

Утверждение. Задачи (1) и (2) эквивалентны в следующем смысле.

Вектор (x_0^, x^*, y^*) есть оптимальное решение задачи (2) тогда и только тогда, когда $x_0^* = cx^* + f(y^*)$ и вектор (x^*, y^*) является оптимальным решением задачи (1).*

Достаточность. Если допустимое решение (x_0^*, x^*, y^*) задачи (2) не является оптимальным, то существует допустимое решение (x'_0, x', y') задачи (2) с большим значением x'_0 целевой функции, то есть

$$cx' + f(y') \geq x'_0 > x_0^* = cx^* + f(y^*),$$

а это приводит к противоречию с тем, что (x^*, y^*) есть оптимальное решение задачи (1).

Необходимость. Если $x_0^* < cx^* + f(y^*)$, то существует допустимое решение задачи (2) с большим значением целевой функции, например,

$$(x_0^* + (1/2)(cx^* + f(y^*) - x_0^*), x^*, y^*),$$

а это приводит к противоречию с тем, что вектор (x_0^*, x^*, y^*) является оптимальным решением задачи (2).

Если же допустимое решение (x^*, y^*) задачи (1) не является оптимальным, то существует допустимое решение (x', y') задачи (1) с большим значением целевой функции, то есть

$$x'_0 = cx' + f(y') > cx^* + f(y^*) = x_0^*,$$

а это снова приводит к противоречию с тем, что вектор (x_0^*, x^*, y^*) есть оптимальное решение задачи (2).

Утверждение, т. е. эквивалентность задач (1) и (2), доказано.

Каждой точке $(u_0, u) \in C_0$ сопоставим область в множестве $\mathbf{R}^{q+1}$, определенную как

$$\{(x_0, y) \mid u_0x_0 + uF(y) - u_0f(y) \leq ub, y \in S\}.$$

Обозначим через G множество из $\mathbf{R}^{q+1}$, определенное как

$$G = \bigcap_{(u_0, u) \in C_0} \{(x_0, y) \mid u_0x_0 + uF(y) - u_0f(y) \leq ub, y \in S\}.$$



Множество G может быть пустым.

Поскольку C_0 — это заостренный выпуклый многогранный конус, то он является выпуклой оболочкой конечного числа всех своих крайних лучей. Из этого следует существование H точек (u_0^h, u^h) , $h = 1, 2, \dots, H$, таких, что

$$G = \bigcap_{h=1}^H \{(x_0, y) \mid u_0^h x_0 + u^h F(y) - u_0^h f(y) \leq u^h b, y \in S\}, H \in \mathbb{N}. \quad (3)$$

Теорема о разбиении. Для смешанной задачи оптимизации (1) справедливы следующие утверждения.

1. Задача (1) недопустима тогда и только тогда, когда задача оптимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\} \quad (4)$$

недопустима, то есть тогда и только тогда, когда множество G пусто.

2. Задача (1) допустима, но не имеет оптимального решения тогда и только тогда, когда задача (4) допустима, но не имеет оптимального решения.

3. Если (x^*, y^*) — оптимальное решение задачи (1) и $x_0^* = cx^* + f(y^*)$, то (x_0^*, y^*) — оптимальное решение задачи (4) и x^* — оптимальное решение линейной задачи оптимизации

$$\max\{cx \mid Ax \leq b - F(y^*), x \geq 0\}. \quad (5)$$

4. Если (x_0^*, y^*) — оптимальное решение задачи (4), то задача (5) допустима и оптимальное значение целевой функции этой задачи равно $x_0^* - f(y^*)$. Если x^* — оптимальное решение задачи (5), то (x^*, y^*) — оптимальное решение задачи (1) с оптимальным значением x_0^* целевой функции.

Доказательство. Сначала сформулируем теорему Минковского — Фаркаша, а затем дадим формулировку этой же теоремы в используемых нами обозначениях. Дело в том, что теорема Минковского — Фаркаша имеет несколько эквивалентных формулировок [2], поэтому каждый раз требуется уточнение, какая именно формулировка имеется в виду.

Теорема Минковского — Фаркаша о совместности системы линейных неравенств ([2, с. 42]): система линейных неравенств

$$Ax \leq b, x \geq 0$$

совместна тогда и только тогда, когда для любой точки u из конуса

$$C = \{u \mid uA \geq 0, u \geq 0\}$$

выполняется неравенство

$$ub \geq 0.$$

Эта формулировка — суть аналог теоремы Кронекера — Капелли о совместности системы линейных уравнений.

Теорема Минковского — Фаркаша в требуемой нам формулировке. Пусть x'_0 — произвольное число и y' — произвольная точка из множества S .

Тогда система линейных неравенств

$$-cx \leq -x'_0 + f(y'),$$

$$Ax \leq b - F(y'),$$

$$x \geq 0$$

совместна тогда и только тогда, когда для любой точки (u_0, u) из конуса

$$C_0 = \{(u_0, u) \mid -u_0 c + uA \geq 0, (u_0, u) \geq 0\}$$

выполняется неравенство

$$u_0(-x'_0 + f(y')) + u(b - F(y')) \geq 0.$$

Последнее неравенство в приведенной формулировке теоремы Минковского — Фаркаша и неравенство, определяющее множество G , эквивалентны, и оба выполняются для любой точки $(u_0, u) \in C_0$.

Из теоремы Минковского — Фаркаша (в последней формулировке) следует, что система линейных неравенств

$$-cx \leq -x'_0 + f(y'),$$

$$Ax \leq b - F(y'),$$

$$x \geq 0$$

совместна тогда и только тогда, когда

$$u_0 x'_0 + uF(y') - u_0 f(y') \leq ub$$

для любой точки $(u_0, u) \in C_0$.

Следовательно, если вектор (x'_0, x', y') — допустимое решение задачи (2), то (x'_0, y') — допустимое решение задачи (4). Наоборот, если вектор (x'_0, y') является допустимым решением задачи (4), то существует вектор $x' \in \mathbb{R}_+^p$ такой, что (x'_0, x', y') — допустимое решение задачи (2).

Из этого следует доказательство утверждения

дений 1 и 2 теоремы, так как задачи (1) и (2) эквивалентны.

Более того, отсюда также следует, что если вектор (x^*, y^*) является оптимальным решением задачи (1) и $x_0^* = cx^* + f(y^*)$, то (x_0^*, y^*) — оптимальное решение задачи (4).

Наконец, если вектор (x_0^*, y^*) есть оптимальное решение задачи (4), то существует вектор $x^* \in \mathbf{R}_+^p$ такой, что (x_0^*, x^*, y^*) — оптимальное решение задачи (2). Тогда $x_0^* = cx^* + f(y^*)$, и поскольку $cx + f(y^*) \leq x_0^*$ для любого допустимого решения (x, y^*) задачи (1) (y^* зафиксировано), отсюда следует, что x^* — оптимальное решение задачи (5).

Теорема доказана.

Данная теорема о разбиении смешанной задачи оптимизации не налагает каких-либо дополнительных условий на функцию $f(y)$, вектор-функцию $F(y)$ и на множество S , на котором определены $f(y)$ и $F(y)$.

На практике, однако, $f(y)$, $F(y)$ и S должны иметь такие свойства, чтобы задача (4) могла бы быть решена существующими методами. Другими словами, необходимо каждый раз анализировать, недопустима ли задача (4) или допустима, не находя при этом оптимального решения или находя ее оптимальное решение, если такое существует.

Если эти условия выполняются, то теорема о разбиении утверждает, что задача (1) может быть решена двухшаговой процедурой. Первый шаг включает решение задачи (4) и приводит к заключению, что задача (1) недопустима либо что она допустима, без нахождения оптимального решения, или к оптимальному значению целевой функции задачи (1) и к оптимальному вектору y^* из S . В последнем случае требуется второй шаг: вычисление оптимального вектора $x^* \in \mathbf{R}_+^p$, который находится решением линейной задачи оптимизации (5).

Решение задачи (4) можно рассмотреть более детально. Даже если процедура пригодна для решения задач такого типа, то прямое решение задачи (4) требует предварительного вычисления системы неравенств, определяющей множество G . Согласно выражению (3), теоретически это возможно осуществить, если найти все крайние направления конуса C_0 , но сделать

это практически невозможно из-за громоздких вычислений, требующих значительных усилий.

Однако поскольку оптимальное решение задачи (4) нас интересует больше, чем само множество G , будет достаточно вычислить только те ограничения множества G , которые определяют оптимальное решение. Далее будет получена эффективная процедура для вычисления таких ограничений.

Две леммы

В этом разделе делаем следующие предположения:

множество S является замкнутым и ограниченным;

функция $f(y)$ и компоненты столбца $F(y)$ — непрерывные функции на некотором множестве $\bar{S} \subseteq \mathbf{R}^q$, содержащем S .

Эти предположения выполняются в большинстве приложений и исключают осложнения, которые вызываются отсутствием оптимального решения для допустимой задачи.

Может случиться, что множество S не ограничено в формулировке задачи (1). В этом случае можно добавить настолько большие границы для изменения компонент столбца y , что либо существующее оптимальное решение заведомо находится в пределах добавленных границ, либо значения компонент вне этих границ не имеют реального смысла.

Лемма 1. Если задача (4) допустима и множество S является замкнутым и ограниченным, то переменная x_0 не имеет верхней границы на множестве G тогда и только тогда, когда многогранник P пуст.

Достаточность. По предположению существует хотя бы одна точка $(x'_0, y') \in G$. Если многогранник P пуст, то $u_0 = 0$ для любой точки $(u_0, u) \in C_0$. Следовательно, множество G имеет вид

$$G = \bigcap_{u \in C} \{(x_0, y) \mid uF(y) \leq ub, y \in S\}.$$

Отсюда следует, что $(x_0, y') \in G$ для любого значения x_0 .

Необходимость. Если многогранник P не пуст, то существует, по крайней мере, одна точка $(1, u') \in C_0$. Следовательно, для



любого допустимого решения (x_0, y) задачи (4), учитывая условия, наложенные на $f(y)$, $F(y)$ и S , имеем:

$$x_0 \leq \max_{y \in S} \{u'b - u'F(y) + f(y)\} < +\infty.$$

Лемма 1 доказана.

Пусть Q — некоторое подмножество из конуса C_0 , $Q \neq \emptyset$, $Q \subset C_0$. Через $G(Q)$ обозначим множество из $\mathbf{R}^{q+1}$, определенное как

$$G(Q) = \bigcap_{(u_0, u) \in Q} \{(x_0, y) \mid u_0 x_0 + uF(y) - u_0 f(y) \leq ub, y \in S\}.$$

Рассмотрим задачу оптимизации:

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q)\}. \quad (6)$$

Если задача (6) недопустима, то и задача (4) недопустима, так как $G \subseteq G(Q)$. С другой стороны, если вектор (x_0^*, y^*) является оптимальным решением задачи (6), то нужно ответить на два вопроса: будет ли (x_0^*, y^*) также оптимальным решением (4) и, если нет, то какое «лучшее» подмножество Q из C_0 может быть получено. Далее будут даны ответы на эти два вопроса.

Лемма 2. Если вектор (x_0^*, y^*) является оптимальным решением задачи (6), то он также будет оптимальным решением задачи (4) тогда и только тогда, когда

$$\min\{u(b - F(y^*)) \mid u \in P\} = x_0^* - f(y^*). \quad (7)$$

Доказательство. Поскольку максимальное значение переменной x_0 на множестве $G(Q)$ предполагается конечным, из рассуждений, аналогичных приведенным при доказательстве леммы 1, следует, что множество Q содержит по крайней мере одну точку (u_0, u) , для которой $u_0 > 0$. Следовательно, многогранник P не пуст, то есть линейная задача оптимизации

$$\min\{u(b - F(y^*)) \mid u \in P\} \quad (8)$$

допустима.

Заметим сначала, что оптимальное решение (x_0^*, y^*) задачи (6) является также оптимальным решением задачи (4) тогда и только тогда, когда $(x_0^*, y^*) \in G$. Это очевидно. Поскольку $G \subseteq G(Q)$, имеем:

$$\begin{aligned} \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q)\} &\geq \\ &\geq \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\}. \end{aligned}$$

По определению множества G точка (x_0^*, y^*) принадлежит G тогда и только тогда, когда

$$u_0(-x_0^* + f(y^*)) + u(b - F(y^*)) \geq 0$$

для любой точки $(u_0, u) \in C_0$. Это выполняется тогда и только тогда, когда $u(b - F(y^*)) \geq 0$ для любой точки $u \in C$ и

$$u(b - F(y^*)) \geq x_0^* - f(y^*)$$

для любой точки $u \in P$, то есть тогда и только тогда, когда

$$\min\{u(b - F(y^*)) \mid u \in P\} \geq x_0^* - f(y^*). \quad (9)$$

Из теоремы двойственности следует, что линейная задача оптимизации

$$\max\{cx \mid Ax \leq b - F(y^*), x \geq 0\} \quad (10)$$

имеет конечное оптимальное решение x^* , для которого

$$cx^* = \min\{u(b - F(y^*)) \mid u \in P\}. \quad (11)$$

Поскольку вектор (x^*, y^*) является оптимальным решением задачи (1), из теоремы о разбиении и из того, что $G \subseteq G(Q)$, следует

$$\begin{aligned} cx^* + f(y^*) &\leq \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\} \leq \\ &\leq \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q)\} = x_0^*. \end{aligned} \quad (12)$$

Наконец, приняв во внимание выражения (9), (11) и (12), заменим неравенство (9) на равенство (7).

Лемма 2 доказана.

Если линейная задача оптимизации (8) имеет конечное оптимальное решение, то по крайней мере одна из вершин многогранника P содержится в множестве оптимальных решений. Хорошо известно, что в этом случае симплекс-метод приводит к оптимальной вершине u^* многогранника P .

Согласно лемме 2, если

$$u^*(b - F(y^*)) = x_0^* - f(y^*),$$

то оптимальное решение (x_0^*, y^*) задачи (4) найдено. Кроме того, симплекс-метод дает в то же время оптимальное решение x^* двойственной линейной задачи оптимизации (10), а из теоремы следует, что (x^*, y^*) — оптимальное решение задачи (1).

Если

$$u^*(b - F(y^*)) < x_0^* - f(y^*), \quad (13)$$

то точка $(1, u^*)$ из C_0 не принадлежит Q . В этом случае формируем новое подмножество Q' из C_0 добавлением точки $(1, u^*)$ к Q .

Если линейная задача оптимизации (8) не имеет конечного оптимального решения, то симплекс-метод приводит к вершине u многогранника P и к направляющему вектору v одного из его крайних лучей, которое дает крайнее направление одного из крайних лучей конуса C_0 , так что значение целевой функции $u(b - F(y^*))$ стремится к $-\infty$ вдоль луча

$$\{u \mid u = \bar{u} + \lambda \bar{v}, \lambda \geq 0\}.$$

Кроме того, имеем неравенство

$$\bar{v}(b - F(y^*)) < 0, \quad (14)$$

из которого следует, что точка $(0, \bar{v})$ из C_0 не принадлежит Q . В этом случае формируем новое подмножество Q' из C_0 добавлением точки $(0, \bar{v})$ к Q .

В любом случае пусть (x'_0, y') будет оптимальным решением задачи оптимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q')\}.$$

Тогда в первом случае имеем

$$\bar{u}(b - F(y')) \geq x'_0 - f(y'),$$

а во втором случае —

$$\bar{v}(b - F(y')) \geq 0.$$

Отсюда, учитывая неравенства (13) и (14), получаем, что

$$(x'_0, y') \neq (x_0^*, y^*).$$

К тому же, поскольку $Q' \supset Q$, имеем $G(Q') \subset G(Q)$. Следовательно,

$$x'_0 \leq x_0^*.$$

В случае если линейная задача оптимизации (8) не имеет конечного решения, то может случиться, что вышеупомянутая вершина u удовлетворяет неравенству (13). Тогда обе точки $(1, u)$ и $(0, v)$ не принадлежат Q и новое подмножество Q' из C_0 может быть получено добавлением обеих точек к Q . Также важно отметить, что система ограничений для множества $G(Q')$ получается добавлением к системе ограни-

чений для $G(Q)$ либо неравенства

$$\bar{v}F(y) \leq \bar{v}b,$$

либо двух неравенств:

$$\bar{v}F(y) \leq \bar{v}b,$$

$$x_0 + \bar{u}F(y) - f(y) \leq \bar{u}b.$$

Теперь все готово, чтобы описать конечную итерационную процедуру для решения смешанной задачи оптимизации (1).

Вычислительная процедура 1

Процедура начинается с данного конечного подмножества $Q^0 \subset C_0$. Обозначим через v счетчик итераций. Присваиваем v значение 0 [1].

Итерация 0. Если множество $G(Q^0)$ пусто, то процедура завершается: задача (1) недопустима.

Если $u_0 > 0$ по крайней мере для одной точки $(u_0, u) \in Q^0$, то переходим на шаг 1 итерации 1.

Если же $u_0 = 0$ для любой точки $(u_0, u) \in Q^0$, то полагаем $x_0^0 = +\infty$; в качестве y^0 выбираем y в произвольной точке $(x_0, y) \in G(Q^0)$ и переходим на шаг 2 итерации 1.

Итерация v . Шаг 1. Если v -я итерация выполнена, то решаем задачу оптимизации

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G(Q^v)\}. \quad (15)$$

Если задача (15) недопустима, то процедура завершается: задача (1) недопустима.

Если (x_0^v, y^v) найдено как оптимальное решение задачи (8), то переходим на шаг 2 этой итерации.

Шаг 2. Решаем линейную задачу оптимизации

$$\min\{u(b - F(y^v)) \mid uA \geq c, u \geq 0\}. \quad (16)$$

Если задача (16) недопустима, то задача (1) либо недопустима, либо не имеет конечного оптимального решения (с этой ситуацией можно столкнуться только на первой итерации).

Если задача (16) имеет конечное оптимальное решение u^v и

$$u^v(b - F(y^v)) = x_0^v - f(y^v), \quad (17)$$

то процедура завершается. В этом случае, если x^v есть оптимальное решение задачи,



двойственной к задаче (16), то (x^v, y^v) есть оптимальное решение задачи (1) и x_0^v есть оптимальное значение целевой функции этой задачи.

Затем, если

$$u^v(b - F(y^v)) < x_0^v - f(y^v), \quad (18)$$

то формируем множество

$$Q^{v+1} = Q^v \cup \{(1, u^v)\}, \quad (19)$$

присваиваем счетчику итераций v значение $v + 1$ и переходим на шаг 1 итерации v .

Если значение целевой функции задачи (16) стремится к $-\infty$ вдоль луча

$$\{u \mid u = u^v + \lambda v^v, \lambda \geq 0\},$$

где u^v — вершина многогранника P , v^v — направление крайнего луча конуса C , то для

$$u^v(b - F(y^v)) \geq x_0^v - f(y^v) \quad (20)$$

формируем множество

$$Q^{v+1} = Q^v \cup \{(0, v^v)\}. \quad (21)$$

Однако если неравенство (20) не выполняется, то есть если

$$u^v(b - F(y^v)) < x_0^v - f(y^v), \quad (22)$$

то формируем множество

$$Q^{v+1} = Q^v \cup \{(1, u^v), (0, v^v)\}. \quad (23)$$

В каждом из случаев присваиваем счетчику итераций v значение $v + 1$ и переходим на шаг 1 итерации v .

Данная процедура завершается за конечное число итераций одним из трех результатов:

задача (1) недопустима;

задача (1) допустима, но не имеет оптимального решения;

оптимальное решение задачи (1) получено.

Эта процедура является конечной, так как на каждой итерации, в которой она не завершается, предшествующее подмножество Q^v доопределяется направляющим вектором, по крайней мере, одного из крайних лучей многогранного конуса C_0 , который еще не принадлежит Q^v . Следовательно, за конечное число шагов либо процедура завершится, либо система ограничений, определяющих множество G , будет получе-

на; и, согласно доказанной выше теореме, процедура остановится после следующей итерации.

Правила завершения процедуры обоснованы следующим образом.

1. $G(Q^v) \supset G$ и пункт 1 теоремы: задача (1) недопустима.

2. Лемма 1 и пункт 2 теоремы: задача (1) допустима, но не имеет оптимального решения.

3. Лемма 2 и пункт 4 теоремы: оптимальное решение задачи (1) получено.

Поскольку $G(Q^v) \supset G(Q^{v+1}) \supset G$, последовательность $\{x_0^v\}$ не возрастает и

$$\max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\} \leq x_0^v \quad (24)$$

для любого $v \geq 0$.

Если задача (16) имеет оптимальное решение u^v , то двойственная к ней задача

$$\max\{cx \mid Ax \leq b - F(y^v), x \geq 0\} \quad (25)$$

имеет оптимальное решение x^v , для которого выполняется равенство

$$u^v(b - F(y^v)) = cx^v. \quad (26)$$

Поскольку (x^v, y^v) — допустимое решение задачи (1), то из пункта 3 теоремы следует:

$$\begin{aligned} u^v(b - F(y^v)) + f(y^v) &\leq \\ &\leq \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Таким образом, в конце каждой итерации имеем верхнюю и нижнюю границы для максимального значения x_0 на множестве G , а также для максимального значения целевой функции задачи (1):

$$\begin{aligned} \max_{k \leq v} \{u^k(b - F(y^k)) + f(y^k)\} &\leq \\ &\leq \max\{x_0 \mid (x_0, y) \in G\} \leq x_0^v. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь

$$u^k(b - F(y^k)) = -\infty,$$

если задача (16) на k -й итерации не имеет конечного оптимального решения; иначе это оптимальное значение целевой функции этой задачи.

Выбор начального множества Q^0 во многом зависит от существующей задачи, которая должна быть решена. В любом случае процедура может начинаться с множества Q^0 , содержащего только начало координат

из $\mathbf{R}^{m+1}$, которое всегда принадлежит конусу C_0 . Затем переходим на шаг 2 итерации 1. При этом $x_0^0 = +\infty$, а $y^0 \in S$ — произвольная точка.

Модификация вычислительной процедуры 1

Часто на практике намного удобнее решать задачу

$$\max\{cx \mid Ax \leq b - F(y^v), x \geq 0\}, \quad (29)$$

двойственную к задаче (16), чем саму эту задачу. В этом разделе описан эффективный способ получения полной информации для представления вычислительной процедуры 1 с помощью решения задачи (29) вместо задачи (16) [1].

Сначала заметим, что задача (29) может быть недопустима, так как у задачи (16) может быть бесконечное оптимальное решение. Чтобы избежать «недопустимости», заменим выпуклый многогранник P на ограниченный выпуклый многогранник

$$P(M) = \{u \mid uA \geq c, ue \leq M, u \geq 0\}. \quad (30)$$

Здесь через e обозначен вектор-столбец, все компоненты которого равны единице, а число M настолько велико, что все вершины многогранника P (если он не пустой) содержатся в области

$$\{u \mid ue \leq M, u \geq 0\}. \quad (31)$$

Тогда задача (29) заменяется задачей

$$\begin{aligned} \max\{cx - Mz_0 \mid Ax - ez_0 \leq b - F(y^v), \\ x \geq 0, z_0 \geq 0\}, \end{aligned} \quad (32)$$

которая всегда допустима.

Если число M достаточно большое (см. далее), то справедливы следующие утверждения:

задача (16) недопустима тогда и только тогда, когда задача (32) имеет бесконечное оптимальное решение;

если (x^v, z_0^v) есть оптимальное решение, найденное для задачи (32), и $z_0^v = 0$, то (x^v, y^v) есть допустимое решение задачи (1).

Для оптимального решения $u^v(M)$, найденного в то же время для двойственной задачи

$$\begin{aligned} \min\{u(b - F(y^v)) \mid uA \geq c, \\ ue \leq M, u \geq 0\}, \end{aligned} \quad (33)$$

имеем соотношение

$$u^v(M)(b - F(y^v)) = cx^v. \quad (34)$$

Так как $u^v(M)$ также является допустимым решением задачи (16), то из равенства (34) и теоремы двойственности для линейной задачи оптимизации следует, что оно также является оптимальным решением задачи (16). Тогда, опираясь на лемму 2 и теорему, находим, что (x^v, y^v) есть оптимальное решение задачи (1) тогда и только тогда, когда

$$cx^v + f(y^v) = x_0^v. \quad (35)$$

Если $z_0^v = 0$, но соотношение (7) не выполняется, или если $z_0^v > 0$, то рассмотрим оптимальное решение $u^v(M)$ более подробно.

Хорошо известно, что компоненты $u^v(M)$ равны компонентам « d -строки» (известной также как « $(z_j - c_j)$ -строка») в оптимальной симплекс-таблице, соответствующим исходным слабым переменным. Из определения d -строки следует, что это линейная вектор-функция от M , то есть

$$d^v(M) = d^{1,v} + Md^{2,v}, \quad (36)$$

где $d^{2,v} \geq 0$ (другими словами, число M предполагается по возможности малым, см. далее).

Отсюда следует, что $u^v(M)$ — также линейная вектор-функция от M :

$$u^v(M) = u^{1,v} + Mu^{2,v}. \quad (37)$$

Векторы $d^{1,v}$ и $d^{2,v}$, а следовательно и векторы $u^{1,v}$ и $u^{2,v}$, получены заменой целевой функции $cx - Mz_0$ в оптимальной симплекс-таблице на cx и $-z_0$ соответственно и затем пересчетом d -строки. Будем обращаться к $d^{1,v}$ и $d^{2,v}$ как к M -компонентам d -строки; аналогично, $u^{1,v}$ и $u^{2,v}$ — суть M -компоненты оптимального решения двойственной задачи. Для любой заданной оптимальной симплекс-таблицы M -компоненты не зависят от M .

Благодаря конструкции многогранника $P(M)$, любая вершина P есть вершина из $P(M)$. Более того, как было доказано, любая вершина из $P(M)$ имеет вид

$$u(M) = \bar{u} + \lambda \bar{v}, \quad (38)$$

где $\bar{u}$ — вершина из P ; $\bar{v}$ есть либо нуль,



либо направляющий вектор крайнего луча из C ; λ — некоторое неотрицательное число.

Обратно, если $\bar{v}$ есть такой направляющий вектор, то найдется, по крайней мере, одна вершина $\bar{u}$ из P такая, что

$$u(M) = \bar{u} + \frac{M - \bar{u}e}{\bar{v}e} \bar{v} \quad (39)$$

есть вершина из $P(M)$. Следовательно, вершина (37) из $P(M)$ может быть записана в виде

$$u^v(M) = u^v + \lambda^v v^v, \quad (40)$$

где u^v — вершина из P , v^v — направление крайнего луча из C .

Единственная проблема состоит в вычислении u^v и v^v из M -компонент $u^{1,v}$ и $u^{2,v}$ из $u^v(M)$.

Очевидно, что

$$v^v = u^{2,v}. \quad (41)$$

Если $u^{2,v} = 0$, то

$$u^v = u^{1,v}, \quad (42)$$

и если $u^{2,v} \neq 0$, то u^v есть такая точка на луче

$$\{u \mid u = u^{1,v} + \lambda u^{2,v}, \lambda \geq 0\}, \quad (43)$$

которая также принадлежит P и соответствует наименьшему значению M , для которого вышеизложенное справедливо.

Общеизвестным свойством d -строки оптимальной симплекс-таблицы задачи (32) является то, что это минимальное значение $M(M_{\min})$, для которого

$$d^v(M) = d^{1,v} + M d^{2,v} \geq 0.$$

Следовательно,

$$M_{\min} = \max_j \left\{ -\frac{d_j^{1,v}}{d_j^{2,v}} \mid d_j^{2,v} > 0 \right\}. \quad (44)$$

По теореме двойственности также имеем соотношение

$$u^v(b - F(y^v)) = cx^v - M_{\min} z_0^v.$$

В итоге получаем следующую модификацию вычислительной процедуры 1.

Вычислительная процедура 2. Эта процедура также начинается с данного конечного подмножества $Q^0 \subset C_0$. Более того, подхо-

дящее значение M должно быть известно (см. далее). Обозначаем через v счетчик итераций. Присваиваем v значение 0.

Итерация 0. Эта итерация такая же, как в процедуре 1.

Итерация v . Шаг 1. Этот шаг такой же, как в процедуре 1.

Шаг 2. Решаем линейную задачу оптимизации

$$\max\{cx - Mz_0 \mid Ax - ez_0 \leq b - F(y^v), x \geq 0, z_0 \geq 0\}. \quad (45)$$

Если задача (45) имеет бесконечное оптимальное решение, то задача (1) либо недопустима, либо не имеет конечного решения (с этой ситуацией можно столкнуться лишь на итерации 1).

Если задача (45) имеет конечное оптимальное решение (x^v, z_0^v) , то имеют место два случая:

1. Если $z_0^v = 0$ и

$$cx^v + f(y^v) = x_0^v,$$

то (x^v, y^v) есть оптимальное решение задачи (1) с оптимальным значением x_0^v целевой функции.

2. Если $z_0^v = 0$, но

$$cx^v + f(y^v) < x_0^v,$$

или если $z_0^v > 0$, то определим M -компоненты $d^{1,v}$ и $d^{2,v}$ d -строки в оптимальной симплекс-таблице и M -компоненты $u^{1,v}$ и $u^{2,v}$ оптимального решения двойственной задачи.

Если $u^{2,v} = 0$, то пусть

$$u^v = u^{1,v} \text{ и } v^v = 0. \quad (46)$$

Если $u^{2,v} \neq 0$, то вычислим

$$M_{\min} = \max_j \left\{ -\frac{d_j^{1,v}}{d_j^{2,v}} \mid d_j^{2,v} > 0 \right\}, \quad (47)$$

и пусть

$$u^v = u^{1,v} + M_{\min} u^{2,v}, \quad (48)$$

$$v^v = u^{2,v}. \quad (49)$$

Тогда, если

$$cx^v - M_{\min} z_0^v < x_0^v - f(y^v),$$

то формируем множество

$$Q^{v+1} = Q^v \cup \{(1, u^v), (0, v^v)\}, \quad (50)$$

и если

$$cx^v - M_{\min} z_0^v \geq x_0^v - f(y^v),$$

то формируем множество

$$Q^{v+1} = Q^v \cup \{(0, v^v)\}. \quad (51)$$

Наконец, заменяем счетчик итераций v на $v + 1$ и выполняем шаг 1 итерации v .

В заключение следует отметить, что подробности о теореме и двух леммах можно найти, например, в работах [1, 8]. Следует обратить внимание читателя на то, что в

тексте работы [1] были использованы другие обозначения и другая терминология, а также имеются некоторые неточности. Изложение обоснованной вычислительной процедуры — это необходимый шаг в создании кода, решающего практические задачи на ЭВМ.

Для численного решения специальной линейной задачи оптимизации, которая возникает в вычислительных процедурах 1 и 2, можно использовать прямой метод, детально описанный в работах [5 – 7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Benders, J.F.** Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems [Текст] / J.F. Benders // Numer. Math. — 1962. — Vol. 4. — № 3. — Р. 238–252.
2. **Зоркальцев, В.И.** Системы линейных неравенств [Текст]: Учеб. пос. / В.И. Зоркальцев, М.А. Киселева. — Иркутск: ИГУ, 2007. — 99 с.
3. **Ларин, Р.М.** Методы оптимизации. Примеры и задачи [Текст]: Учеб. пос. / Р.М. Ларин, А.В. Плясунов, А.В. Пяткин. — Новосибирск: НГУ, 2003. — 74 с.
4. **Хохлюк, В.И.** Параллельные алгоритмы целочисленной оптимизации [Текст] / В.И. Хохлюк. — М.: Радио и связь, 1987. — 224 с.
5. **Хохлюк, В.И.** Прямой метод целочисленной оптимизации [Текст] / В.И. Хохлюк. — Новосибирск: Препринт СО РАН; ИМ, 2002. — № 106. — 39 с.
6. **Хохлюк, В.И.** Процедура прямого метода для системы неравенств [Текст] / В.И. Хохлюк // Труды ИСА РАН. Динамика неоднородных систем. — 2008. — Т. 32(2). — С. 198–206.
7. **Хохлюк, В.И.** Процедура прямого метода для системы уравнений [Текст] / В.И. Хохлюк // Труды ИСА РАН. Динамика неоднородных систем. — 2008. — Т. 32 (2). — С. 207–215.
8. **Ху, Т.** Целочисленное программирование и потоки в сетях [Текст] / Т. Ху: Пер. с англ. — М.: Мир, 1974. — 519 с.

ХОХЛЮК Виталий Иванович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, доцент кафедры математической экономики Новосибирского государственного университета.

630090, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4
vit@academ.org

УДК 532.5.013.4.536.25+519.6

Д.А. Фоминский, А.Н. Шарифулин

**ЧИСЛЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ СУЩЕСТВОВАНИЯ
АНОМАЛЬНОГО КОНВЕКТИВНОГО ТЕЧЕНИЯ
В НАКЛОНЯЕМОМ ЦИЛИНДРЕ**

D.A. Fominskiy, A.N. Sharifulin

Perm National Research Polytechnic University,
29 Komsomolsky Av., Perm, 614990, Russia.

**NUMERICAL DETERMINATION OF THE BORDERS FOR EXISTENCE
OF ANOMALOUS CONVECTIVE FLOW IN A CYLINDER TILTED**

Статья посвящена изучению бифуркаций стационарных режимов конвекции в замкнутой наклоняемой цилиндрической полости при гармоническом распределении температуры на стенках. Методом сеток получены бифуркационные диаграммы и кривые для трех значений числа Прандтля, соответствующих воздуху, воде и трансформаторному маслу.

КОНВЕКЦИЯ. БИФУРКАЦИЯ. АНОМАЛЬНОЕ ТЕЧЕНИЕ. ЦИЛИНДРИЧЕСКАЯ ПОЛОСТЬ.

The article is devoted to study of bifurcations of stationary modes of convection in a closed, tilted cylindrical cavity at harmonic temperature distribution on boundary. Using finite difference method the bifurcation diagrams and curves for three values of Prandtl number corresponded to air, water and transformer oil were obtained.

CONVECTION. BIFURCATION. ANOMALOUS FLOW. CYLINDRICAL CAVITY.

Интерес к бифуркациям стационарных режимов конвекции в замкнутой наклоняемой полости связан с надеждой, что через понимание закономерностей их бифуркаций в лабораторных моделях будет достигнуто понимание механизмов зарождения сложных конвективных явлений в атмосфере и мантии Земли. Наклон полости используется для лабораторного моделирования, например внезапного зарождения тропических циклонов [1] и парадоксального переноса загрязнений воздуха из расположенного на уровне моря города в горные районы с дорогой недвижимостью [2].

Стационарные надкритические режимы конвекции в замкнутой полости часто имеют форму валов, т. е. вихрей с горизонтальной осью. В них частицы жидкости движутся вдоль плоских линий тока вокруг точки пересечения этой плоскости с осью вихря. Поэтому такие режимы можно назвать квазидвумерными. Это обстоятельство позволяет авторам работы надеяться, что исследование плоских двумерных течений, т. е. бесконечно вытянутых горизонтальных вихрей в абстрактном бесконечном цилиндре при гармоническом распределении температуры на стенке, поможет в понимании

закономерностей бифуркаций стационарных режимов конвекции в полостях лабораторных экспериментов.

Поясним, что наклон при малых докритических значениях числа Рэлея приводит к формированию горизонтального вихря, причем с таким направлением циркуляции, что воздух около более нагретой вертикальной стенки полости движется вверх. Это вихрь с нормальным вращением. Однако при значениях числа Рэлея, превышающих критическое значение, наряду с таким нормальным вихрем возможен и вихрь с обратным направлением циркуляции, т. е. аномальный. В таком вихре жидкость вдоль нагретой стенки движется вниз. Существование аномального горизонтального вихря в цилиндрической полости при малых отклонениях направления подогрева от вертикального было обнаружено в работе [3]. Произвольные отклонения были рассмотрены в статье [4] для значения числа Прандтля $Pr = 1$.

Исследованию конвекции в горизонтальном цилиндре круглого сечения при гармоническом распределении температуры на стенке посвящена работа [5]. Такая конвекция представляет интерес в связи с возможностью исключить влияние геометрии полости и проследить за структурой конвективного движения при изменении ориентации нагрева по отношению к направлению силы тяжести.

Цель настоящей работы – определить теоретическую зависимость от числа Рэлея критического угла наклона, до достижения которого возможно существование аномального вихря, для значений числа Прандтля $Pr = 7$ и 14 .

В связи с целью исследования было использовано численное решение полных уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска, для указанных значений числа Прандтля.

Постановка задачи

Рассмотрим полость, имеющую форму бесконечного кругового цилиндра (рис. 1). Полость окружена массивом, температуропроводность которого много больше температуропроводности χ для жидкости. Коэф-

фициент линейного расширения жидкости β и ее кинематическая вязкость ν постоянны. Здесь введены обозначения: γ – единичный вектор, связанный с постоянным градиентом температуры ∇T_0 , который устанавливается в полости (в отсутствие движения жидкости) соотношением

$$\nabla T_0 = \gamma \frac{\Theta}{R}$$

От равновесного направления подогрева γ отсчитываются все угловые координаты, $\mathbf{n}$ – единичный вектор, указывающий направление вверх и связанный с ускорением свободного падения соотношением $\mathbf{g} = -g\mathbf{n}$.

Вектор $\mathbf{g}$ составляет угол α с равновесным направлением подогрева γ .

Введены декартова (x, y, z) и цилиндрическая (r, θ, z) системы координат, связанные между собой соотношениями: $x = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta$, $z = z$.

Введем масштабные множители: Θ – характерная разность температур; R – радиус цилиндра; ν – коэффициент кинематической вязкости.

Будем искать плоские решения задачи. В этом случае векторные поля завихренности и функции тока будут иметь отличными от нуля только z -компоненты:

$$\Phi = (0, 0, \phi), \Psi = (0, 0, \psi). \quad (1)$$

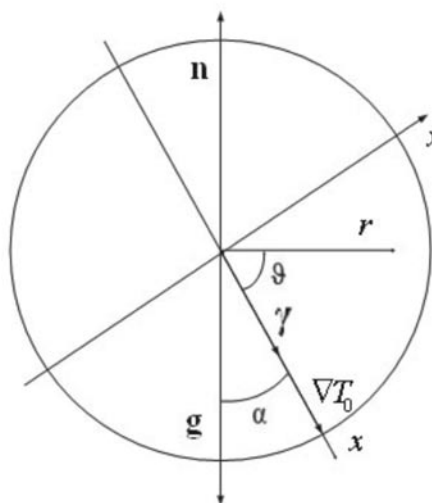


Рис. 1. Геометрия задачи о свободной тепловой конвекции в цилиндрической полости (см. обозначения в тексте)



Тогда уравнения тепловой конвекции в безразмерной форме запишутся в виде [6]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \text{rot}_z(\mathbf{v} \times \boldsymbol{\varphi}) = -\text{rot}_z(\nabla \times \boldsymbol{\varphi}) + \text{Gr}(\nabla T \times \mathbf{n})_z; \quad (2)$$

$$\text{rot}_z(\nabla \times \boldsymbol{\psi}) - \boldsymbol{\varphi} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v} T) = \frac{1}{\text{Pr}} \Delta T. \quad (4)$$

Безразмерные критерии подобия – число Грасгофа Gr и число Прандтля Pr имеют вид:

$$\text{Gr} = \frac{g\beta\Theta R^3}{\nu^2}, \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}. \quad (5)$$

Скорость течения связана с полем функции тока следующим образом:

$$\mathbf{v} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta}, -\frac{\partial \psi}{\partial r}, 0 \right). \quad (6)$$

Компоненты единичного вектора $\mathbf{n}$, задающего направление вверх, в цилиндрической системе координат имеют вид (см. рис. 1):

$$\mathbf{n} = (\cos(\alpha - \vartheta), \sin(\alpha - \vartheta), 0). \quad (7)$$

Из условия непротекания через границу полости ($v_r = 0$) и прилипания на ней ($v_\vartheta = 0$) получаем из соотношения (6) граничные условия для функций тока:

$$\text{при } r = 1 \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial r} = 0. \quad (8)$$

Будем полагать, что массив вокруг полости имеет коэффициент теплопроводности много больший, чем у жидкости. Тогда граничное условие для температуры можно записать в виде:

$$\text{при } r = 1 \quad T = \cos(\vartheta - \alpha). \quad (9)$$

Метод решения

Решение задачи получалось методом сеток. Использовался итерационный метод решения стационарных уравнений, полученных из уравнений (2) – (4):

$$\frac{1}{r} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\partial \varphi}{\partial \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \Delta \varphi + \text{Gr} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \sin(\alpha - \vartheta) - \frac{\partial T}{\partial \vartheta} \frac{\cos(\alpha - \vartheta)}{r} \right); \quad (10)$$

$$\Delta \psi + \varphi = 0; \quad (11)$$

$$\frac{1}{r} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\partial T}{\partial \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{1}{\text{Pr}} \Delta T, \quad (12)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2}$ – оператор Лапласа.

Введем сетку с постоянными шагами Δr и $\Delta \vartheta^*$ по радиальной и угловой координатам, соответственно:

$$\begin{aligned} r_i &= (i - 1)\Delta r, \vartheta_k = (k - 1)\Delta \vartheta^*, \\ i &= 1, 2, \dots, I, k = 1, 2, \dots, K; \\ \Delta r &= 1 / (I - 1), \Delta \vartheta^* = 2\pi / (K - 1), \\ \Delta \vartheta &= 2 \sin(\Delta \vartheta^* / 2). \end{aligned} \quad (13)$$

Конечно-разностный аналог системы (10) – (12) для внутренних узлов сетки, за исключением центрального, запишется в виде:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_i} (\varphi_r \psi_{\vartheta} - \varphi_{\vartheta} \psi_r) &= D\varphi + \\ + \text{Gr} \left(T_r \sin(\alpha - \vartheta_k) - T_{\vartheta} \frac{\cos(\alpha - \vartheta_k)}{r_i} \right); \end{aligned} \quad (14)$$

$$D\psi + \varphi = 0; \quad (15)$$

$$\frac{\text{Pr}}{r_i} (T_r \psi_{\vartheta} - T_{\vartheta} \psi_r) = DT. \quad (16)$$

Здесь и далее использованы обозначения А.А. Самарского [7]:

$$\begin{aligned} f_{i,k} &= f(r_i, \vartheta_k), f_0 = (f_{i+1} - f_{i-1}) / 2\Delta r, \\ f_{\vartheta} &= (f_{k+1} - f_{k-1}) / 2\Delta \vartheta; \\ f_{\vartheta\vartheta} &= (f_{k+1} - 2f + f_{k-1}) / \Delta \vartheta^2, \\ f_{rr} &= (f_{i+1} - 2f + f_{i-1}) / \Delta r^2. \end{aligned} \quad (17)$$

D – конечно-разностный аналог оператора Лапласа:

$$Df = f_{rr} + \frac{1}{r_i} f_r + \frac{1}{r_i^2} f_{\vartheta\vartheta}.$$

Выделяя в каждом из уравнений (14) – (16) значения в центре шаблона, получаем выражение для вычисления сеточных функций в центральном узле шаблона:

$$f_{i,k} = \frac{af_{i-1,k} + bf_{i+1,k} + cf_{i,k-1} + df_{i,k+1} + e}{2 / \Delta r^2 + 2 / (r_i \Delta \vartheta^2)}, \quad (18)$$

где f – одна из сеточных функций: φ , T или ψ .

Коэффициенты a, b, c, d для равенств (14) определяются соотношениями:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_i \Delta r} + \frac{1}{2r_i \Delta r} \Psi_9^0; \\ b &= \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_i \Delta r} - \frac{1}{2r_i \Delta r} \Psi_9^0; \\ c &= \frac{1}{(r_i \Delta \vartheta)^2} - \frac{1}{2r_i \Delta \vartheta} \Psi_r^0; \\ d &= \frac{1}{(r_i \Delta \vartheta)^2} + \frac{1}{2r_i \Delta \vartheta} \Psi_r^0. \end{aligned}$$

Последние слагаемые в аналогичных выражениях для уравнения (16) домножены на число Прандтля, а в соотношениях, аппроксимирующих уравнение (15), они отсутствуют. Коэффициент e для (16) равен нулю, для (15) он равен значению завихренности, а для уравнения (14) определяется соотношениями:

$$e_\varphi = Gr[T_r \sin(\alpha - \vartheta_k) + T_9 \cos(\alpha - \vartheta_k) / r_i]. \quad (20)$$

При получении расчетных формул для центральной точки, уравнения (14) – (16) записывались в инвариантной форме, и к ним применялся метод контрольного объема.

Граничные условия (8) аппроксимировались с использованием формулы Тома для завихренности, и в разностной форме записывались в виде:

$$\psi_{I,k} = 0, \quad \varphi_{I,k} = -\frac{2\psi_{I-1,k}}{\Delta r^2}. \quad (22)$$

Граничное условие для температуры на границе (9) записывалось в виде:

$$T_{I,k} = \cos(\vartheta_k - \alpha). \quad (23)$$

При решении уравнения Пуассона (15) для функции тока ψ использовался метод верхней релаксации с параметром релаксации $\omega = 1,5$, а при решении уравнений (14) и (16) полагали параметр релаксации равным единице.

Разностная схема аппроксимирует дифференциальные уравнения со вторым порядком

$$O(\Delta r^2 + (r \Delta \vartheta)^2).$$

К ее особенностям следует отнести использование нетрадиционного выражения для шага по углу (13) в разност-

ных соотношениях, которые аппроксимируют производные по углу; такое выражение позволяет учесть физические особенности задачи в цилиндрической системе координат [9].

Опишем процедуру решения.

Шаг 1. Задаем начальные условия для цилиндрической полости:

$$\begin{aligned} T_{i,k} &= r_i \cos\left(k \frac{2\pi}{K}\right); \\ \psi_{i,k} &= -\frac{1}{64}(r_i^2 - 1)^2 Gr \sin \alpha; \\ \varphi_{i,k} &= \frac{1}{8}(2r_i^2 - 1)Gr \sin \alpha. \end{aligned}$$

Шаг 2. Вычисляем в центре φ^s, T^s, ψ^s .

Шаг 3. Считая φ^s, T^s, ψ^s и F^s известными во всех узлах сетки, осуществляем одну итерацию для нахождения φ^{s+1}, T^{s+1} во внутренних узлах. Итерационным путем находятся значения φ^{s+1} . Новые граничные значения для φ определяются по формуле Тома (22).

Шаги 2, 3 повторяются до получения установившихся значений.

Использовалась экстраполяция по параметрам Gr и α . При наличии двух состояний параметрами (Gr_1, α_1) и (Gr_2, α_2) , для получения решения с Gr и α , расположенными достаточно близко к этим двум, в качестве начального брались состояние, полученное линейной экстраполяцией во всех узлах сетки из этих двух имеющихся состояний.

Результаты расчетов

Результаты, приведенные на рис. 2, дают представление об интенсивности конвекции и при произвольных направлениях внешнего градиента температуры. Представлены бифуркационные диаграммы, отражающие зависимости экстремального значения функции тока ψ_m от угла α между направлениями единичного вектора $\mathbf{n}$ (вверх) и подогрева γ для нескольких значений числа Грасгофа. Кривая 1 соответствует докритическому (при $\alpha = 0^\circ$) значению числа Грасгофа, поэтому при $\alpha \rightarrow 0^\circ$ имеем $\psi_m \rightarrow 0$. На рис. 2 (на вставках) также приведены линии тока и изотермы для $Gr = 30$ и углов, соответствующих подогреву строго сбоку. Вид-

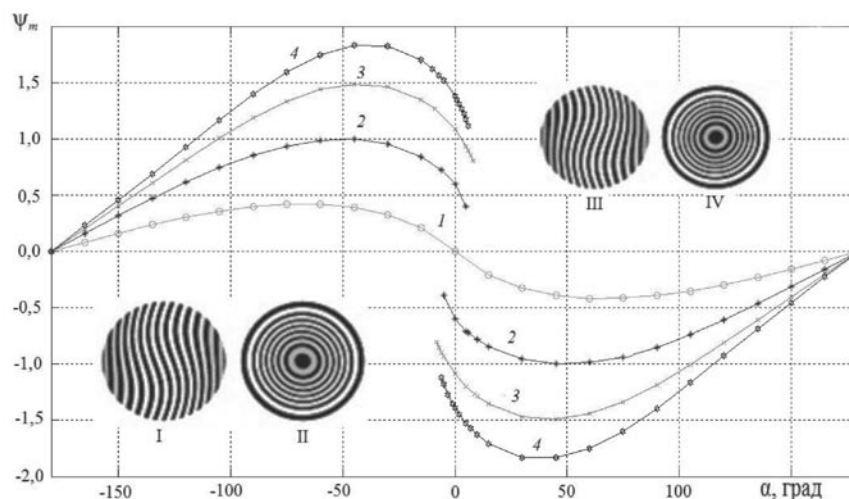


Рис. 2. Бифуркационные диаграммы для $Pr = 7$ и различных значений числа Грасгофа: $Gr = 30$ (1), 65 (2), 100 (3), 200 (4).
На вставках представлены также изотермы (I, III) и функции тока (II, IV) для $Gr = 30$ при двух значениях угла α : -90° (I, II) и $+90^\circ$ (III, IV)

но, что линии тока практически круговые и у наиболее нагретой части стенки жидкость движется вверх. Такое течение естественно назвать нормальным, для него движение частиц жидкости при значениях $-180^\circ < \alpha < 0$ осуществляется против часовой стрелки, а при $0 < \alpha < 180^\circ$ — по часовой стрелке. Течение 1, представленное на рис. 2, является нормальным, так как направление циркуляции осуществляется по часовой стрелке. Неустойчивые участки кривых 2 — 4 не отмечены на рисунке ввиду невозможности расчета этих участков данным методом.

Максимум интенсивности тепловой конвекции при $Gr = 10$ достигается при $\alpha = -90^\circ$ и $\alpha = 90^\circ$ (этот случай не показан на рис. 2). Как видно из рисунка, увеличение числа Грасгофа приводит к их смещению в сторону угла $\alpha = 0$. Функция $\psi_m(\alpha)$ является двоякопериодической.

Напомним, что при подогреве снизу критическое число Рэлея равно $Ra_c = 406,8$ [5]. Поэтому критическое значение числа Грасгофа $Gr_c = Ra_c / Pr$, соответствующее расчету, равно 57,1. Значения же $Gr = 65, 100$ и 200 — надкритические; при $\alpha \rightarrow 0$ им соответствуют конечные значения ψ_m . Кроме того, при этих надкритических значениях числа Gr вблизи угла $\alpha = 0$ имеется неоднозначность. Как видно из рис. 2, для

углов наклона от $-\alpha_c$ до $+\alpha_c$ существует два устойчивых состояния движения, близких по форме, но отличающихся друг от друга как интенсивностью, так и направлением циркуляции. Зависимость критического угла α_c от числа Рэлея принято называть бифуркационной кривой.

На рис. 3 представлены бифуркационные кривые для трех значений числа Прандтля. Все кривые имеют максимум при $Ra = (2 - 3)Ra_c$. С увеличением числа Рэлея присутствует тенденция к насыщению. Максимальное значение критического угла слабо зависит от числа Прандтля, а его асимптотическое значение уменьшается с его увеличением.

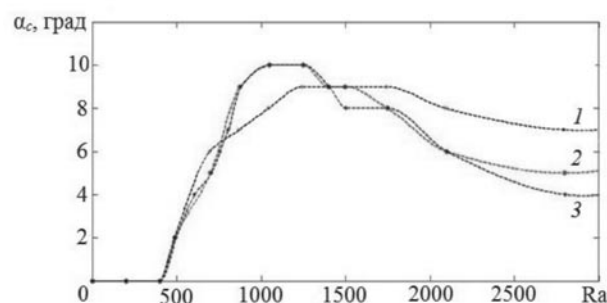


Рис. 3. Бифуркационные кривые для значений числа Прандтля $Pr = 0,7$ (1); 7 (2); 14 (3) (см. пояснения в тексте)

Таким образом, в результате численного исследования получено семейство бифуркационных кривых, отражающее влияние теплофизических свойств на область существования аномального режима конвекции в цилиндрическом горизонтальном канале.

1. Показано, что аномальное конвективное течение может существовать при значительных (до 10ϵ) отклонениях от условий подогрева снизу.

2. При плавном изменении угла наклона переход от нормального течения к аномальному происходит плавно, а от аномально-

го к нормальному скачкообразно. Глубина гистерезиса, наблюдающегося при таких переходах, отражающаяся бифуркационной кривой, максимальна в области двух-трех надкритичностей по числу Рэлея и уменьшается с его увеличением.

3. Проанализировано влияние числа Прандтля на ширину интервала гистерезиса. Показано, что максимальное значение интервала гистерезиса слабо зависит от числа Прандтля. С увеличением числа Рэлея, после достижения своего максимального значения, глубина гистерезиса уменьшается тем быстрее, чем больше число Прандтля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Шарифулин, А.Н.** Лабораторное моделирование нелокального возникновения тропического циклона [Текст] / А.Н. Шарифулин, А.Н. Полуднин, А.С. Кравчук // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2008. — Т. 134. — № 6. — С. 1269–1273.

2. **Princevac, M.H.** A criterion for the generation of turbulent in abatic flows [Text] / M.H. Princevac, J.S. Fernando // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19. — P. 105102.

3. **Шарифулин, А.Н.** Вибрационная конвекция в цилиндрической полости в невесомости при произвольных ориентациях направления подогрева [Текст] / А.Н. Шарифулин // Конвективные течения. — Пермь: Пермск. пед. ин-т, 1981. — С. 22–29.

4. **Никитин, А.И.** О бифуркациях стационарных режимов тепловой конвекции в замкнутой полости, порождаемых особенностью типа

сборки Уитни [Текст] / А.И. Никитин, А.Н. Шарифулин // Процессы тепло- и массопереноса вязкой жидкости. — Свердловск: УНЦ АН СССР, 1986. — С. 32–39.

5. **McHugh, J.P.** The onset of convection in horizontal cylinders [Text] / J.P. McHugh // Quarterly of applied mathematics. — 2000. — Vol. LVIII. — № 3. — P. 425–436.

6. **Чернатынский, В.И.** Численное исследование конвекции в горизонтальном цилиндре кругового сечения [Текст] / В.И. Чернатынский // Гидродинамика. — 1974. — № 7. — С. 65–82.

7. **Самарский, А.А.** Введение в теорию разностных схем [Текст] / А.А. Самарский. — М.: Наука, 1971. — 552 с.

8. **Тарунин, Е.Л.** Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции [Текст] / Е.Л. Тарунин. — Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. — 228 с.

ШАРИФУЛИН Альберт Нургалиевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной физики Пермского национального исследовательского политехнического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
(342) 239-12-83
albert.sharifulin@gmail.ru

ФОМИНСКИЙ Дмитрий Александрович — аспирант кафедры прикладной физики Пермского национального исследовательского политехнического университета.

614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
(342) 239-12-83
ra9fdt@yandex.ru

УДК 521.93:521.933:521.936:521.937:521.938

Д.Г. Кирьян¹, Г.В. Кирьян

О ЧАНДЛЕРОВСКОМ ДВИЖЕНИИ

D.G. Kiryan¹, G.V. Kiryan

¹ Institute of Problems of Mechanical Engineering
61 Bolshoy Av., V.O., St. Petersburg, 199178, Russia.

ON THE CHANDLER WOBBLE

Доказано, что утверждение о существовании «остаточного движения оси вращения Земли в теле Земли» является ошибочной интерпретацией результатов измерений зенитного расстояния (угла) инструментами, в которых репером является отвесная линия или искусственный горизонт. Установлена функциональная связь между отклонением отвесной линии и положением перигея Луны для произвольно выбранной точки на поверхности вращающейся Земли. Это проявляется через колебания вектора гравитационного ускорения в точке наблюдения или в виде периодического уклонения отвесной линии (нормали места). Результаты работы ставят вопрос о необходимости пересмотра некоторых постулатов метрологии, гравиметрии, астрономии, геофизики, спутниковой навигации.

ДВИЖЕНИЕ ЧАНДЛЕРА. ШИРОТА. ГРАВИТАЦИЯ. ЛУНА. GPS. UT1.

In this paper we have proved that the assertion on the existence of residual motion of the Earth rotation axis within the Earth is a result of erroneous interpretation of the zenith distance (angle) measurements with instruments using as a reference the plumb-in line or artificial horizon. The functional relationship between the plumb-in line deviation and the Moon's perigee position has been established for an arbitrary point on the rotating the Earth surface. This relationship manifests itself as variations in the gravitational acceleration vector direction and magnitude at the observation point or, in other words, as periodical deviations of the plumb-in line (local vertical). The results of our work show that it is necessary to revise some postulates of metrology, gravimetry, astronomy, geophysics and satellite navigation.

CHANDLER WOBBLE. LATITUDE. GRAVITATION. MOON. GPS. UT1.

Системные наблюдения за вариацией широты ведутся в течение почти 300 лет, а открытию Чандлера уже более 100 лет. Однако физическую природу вариации широты с периодом Чандлера установить не удалось [8]. Это обстоятельство послужило для нас основанием подойти к решению сложившейся проблемы, отступив от парадигмы, существующей с тех давних времен. Было обращено особое внимание на то, как ставилась задача, какие необходи-

мые и достаточные условия предъявлялись к процессу наблюдений, какие требования предъявлялись к используемым угломерным астрометрическим инструментам, к вопросам сохранения физической сущности при анализе получаемых временных рядов. Данная статья является итогом исследований авторами по данной тематике; первые результаты исследований по проблеме Чандлера были представлены в работах [14, 16, 17].

Наблюдения зенитного расстояния звезд

В астрометрии понятие зенитного расстояния означает угол между отвесной линией (нормалью места) и направлением на звезду. Принято считать, что непостоянство зенитных расстояний звезд впервые было отмечено Дж. Брадлеем (1726 – 1727) и Молине (1727 – 1747) [6, 7]. Целенаправленную регистрацию вариаций зенитного расстояния (изменяемости широт) с помощью хорошего оптического инструмента выполнил в 1840 году Х.И. Петерс в Пулковской обсерватории Петербургской Академии наук. Там же с 1863 по 1875 год аналогичные наблюдения провел М.О. Нюрн, и он первым дал оценку величины периода изменения широты места – 1,2 года. Вопрос придания этим исследованиям международного характера обсуждался на конгрессе Международной геодезической ассоциации в Риме в 1883 году. К практической реализации наблюдений приступили после конгресса Геодезического общества в Зальцбурге (1888). В 1892 году американский астроном Сет Карло Чандлер, обобщив и изучив накопленные к тому времени данные наблюдений, показывает, что в изменениях широт присутствует период, лежащий в диапазоне от 400 до 440 суток [2]. При этом уже считался очевидным тот факт, что наблюдаемое явление обусловлено движением оси вращения Земли в теле Земли. Достаточно быстро ученому сообществу было предложено интерпретировать непостоянство широты места как вариацию зенитного расстояния звезд с периодом Чандлера, вызванную «свободным нутационным движением» оси вращения Земли в теле Земли [1]. Это была первая гипотеза, с помощью которой пытались объяснить физическую природу регулярного изменения зенитного расстояния звезд.

Далее, опираясь на открытие Чандлера и гипотезу о природе «изменяемости широт», не получившую, на наш взгляд, необходимого и достаточного экспериментального подтверждения, на рубеже XIX–XX веков научное сообщество формулирует следующую гипотезу: ось вращения Земли в теле Земли совершает «остаточное движение» с

характерным чандлеровским периодом.

В течение XX столетия предлагались и другие гипотезы, у которых был общий недостаток: они основывались на очевидном, но не на доказанном. Очевидным считалось, что наблюдаемое изменение зенитного расстояния звезд является следствием движения оси вращения Земли относительно тела Земли. В конце XX века ведущие ученые Европы и США, специалисты по теории движения полюсов (оси вращения) Земли, теории вращения Земли, в статье, посвященной 100-летию открытия Чандлера [8], были вынуждены констатировать полное отсутствие позитивных результатов в изучении этого явления.

Нарушение условий необходимого и достаточного

Если рассматривать исследования изменений зенитного расстояния, выполненные в прошедшие годы в рамках национальных и международных программ, то можно еще раз отметить, что этим исследованиям присуще нечто общее: наблюдения и интерпретацию изменений зенитных расстояний звезд исследователи вели и продолжают вести, опираясь на гипотезу, построенную на очевидном. Но и очевидное иногда нуждается в доказательстве, а такого доказательства в данном случае пока не представлено.

Например, для доказательства существования движения оси вращения в теле Земли было бы необходимо и достаточно провести наблюдения за перемещением Северного и Южного полюсов Земли одновременно, то есть провести синхронные наблюдения за изменением зенитного расстояния в двух точках, лежащих на одном меридиане по разные стороны экватора. В результате такого эксперимента исследователь, ясно представляющий физическую суть поставленной задачи, мог бы получить из непосредственных измерений всю необходимую и достаточную информацию о движении оси вращения Земли в теле Земли, то есть доказать очевидность.

Во всех выполненных наблюдательных экспериментах по изучению остаточного



го движения оси вращения Земли условия необходимого и достаточного не были соблюдены, поэтому имеющейся информации для аргументированного вывода о существовании перемещения оси вращения Земли в теле Земли оказывается недостаточно. Случайностью эту ситуацию назвать нельзя, так как в программах всех наблюдательных экспериментов задача изучения непосредственно движения оси вращения Земли отсутствовала. Существование колебательно-вращательного движения оси вращения в теле Земли было постулировано в виде новой сущности — свободной нутации, или остаточного движения. Этого достаточно, чтобы сложившуюся ситуацию характеризовать по совокупности как недоразумение.

Нуль-пункт астрономических инструментов

Отвесная линия — это касательная к силовой линии гравитационного поля в заданной точке. Из этого следует, что пространственное положение нуль-пункта (отвесной линии) астрометрического инструмента определяется мгновенной конфигурацией гравитационного поля и делает этот инструмент гравитазависимым. Поэтому высокая точность измерения угла привела к тому, что астрометрический инструмент обрел дополнительную сущность: он стал высокочувствительным гравиметром, способным регистрировать малые, длиннопериодические возмущения гравитационного поля в точке наблюдения.

Гравитазависимыми астрометрически-

ми инструментами регистрируют также и собственное вращение Земли. Искажённая непостоянством пространственного положения отвесной линии, наблюдательная информация о вариации скорости суточного вращения Земли, как и информация о постулируемом движении оси (полюса) вращения Земли в теле Земли, сегодня попадает в виде соответствующих поправок в систему Мирового времени UT1 и UT2 [5] со всеми вытекающими отсюда последствиями.

Измерение с высокой точностью зенитного расстояния звезды, как и регистрацию момента прохождения звезды через меридиан, в условиях непрерывно меняющегося гравитационного поля гравитазависимыми астрометрическими инструментами можно охарактеризовать только как досадное недоразумение.

Постановка задачи

Тот факт, что период Чандлера обнаруживается в многолетних наблюдениях колебания уровня океана [21], атмосферного давления [15] и гравитационного ускорения Земли [20], позволил нам предположить, что период Чандлера в астрометрии — это следствие непостоянства гравитационного поля в точке измерения зенитного расстояния.

Рассмотрим непостоянство гравитационного поля как задачу о действии гравитационных сил со стороны недеформируемых Земли и Луны на пробную единичную массу, расположенную на поверхности Земли

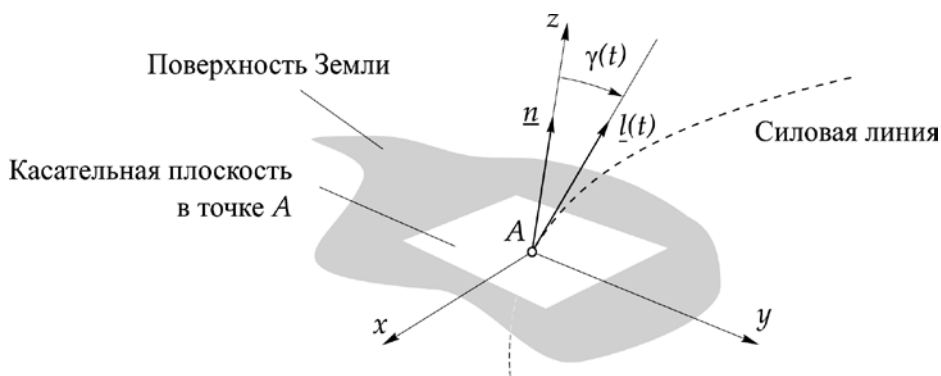


Рис. 1. Угол выхода силовой линии гравитационного поля в точке A на поверхности Земли

в точке A (рис. 1). Введем в рассмотрение ортогональную систему координат $Axuz$ с началом в точке A . Система ориентирована таким образом, что плоскость Axu является касательной в точке A к поверхности Земли. Ось Az направлена в сторону от Земли.

Сила, действующая на пробную массу в точке A , вводится через градиент потенциала $U(t)$ гравитационного поля системы Земля – Луна:

$$\underline{f}(t) = -\nabla U(t). \quad (1)$$

Сила $\underline{f}(t)$, касательная к силовой линии, определяет понятие отвесной линии. Изменение направления силы $\underline{f}(t)$ в системе координат $Axuz$ будем отслеживать через вектор $\underline{l}(t)$, вычисляя угол $\gamma(t)$ между неподвижным единичным вектором $\underline{n}$ (орт оси Az) и вектором $\underline{l}(t)$, по теореме косинусов:

$$\gamma(t) = \arccos(\underline{n} \cdot \underline{l}(t)), \quad (2)$$

где $\underline{l}(t) = -\frac{\underline{f}(t)}{|\underline{f}(t)|}$, $|\underline{l}(t)| = 1$.

Иные физические явления, которые очевидно присутствуют, мы не учитываем, так как в нашей постановке задачи они, как будет показано далее, не имеют принципиального значения. Другими словами, мы предельно упрощаем задачу с целью выявления сути процесса, не отвлекаясь на второстепенные факторы, которые могут играть существенную роль при иных обстоятельствах.

Координаты наблюдателя на поверхности Земли

Введем в рассмотрение две неподвижные ортогональные системы координат $Ox^e y^e z^e$ и $Ox' y' z'$ с общим началом в точке O (рис. 2). Плоскость $Ox^e y^e$ принадлежит эклиптике, а плоскость $Ox' y'$ совпадает с плоскостью экватора Земли. Будем считать, что Земля представляет собой эллипсоид вращения. Oz' является осью собственного вращения Земли и максимального момента инерции. Oz' образует угол ε с осью Oz^e . Оси Ox' и Ox^e совпадают по направлению и параллельны линии весеннего равноденствия Υ .

Координаты точки A на поверхности Земли задаются широтой и долготой. Широта φ_A — это угол между плоскостью $Ox' y'$ (экватор) и направлением на точку A . Долгота λ_A определяется как угол в плоскости $Ox' y'$ между нулевым меридианом и меридианом точки A . Нулевой меридиан и точка A вращаются как одно целое вокруг оси Oz' . Обозначим через R_A расстояние от центра массы Земли O до точки A . Это расстояние является функцией широты и параметров эллипсоида вращения — Земли:

$$R_A = R_A(\varphi_A, e_{\text{terra}}, a_{\text{terra}}). \quad (3)$$

В неподвижной системе координат $Ox^e y^e z^e$ (рис. 3) точка A задается вектором $\underline{r}_A$:

$$\underline{r}_A(t) = R_A \mathbf{P}_x(\varepsilon) \mathbf{P}_z(\lambda(t)) \begin{pmatrix} \cos \varphi_A \cos \lambda_A \\ \cos \varphi_A \sin \lambda_A \\ \sin \varphi_A \end{pmatrix}, \quad (4)$$

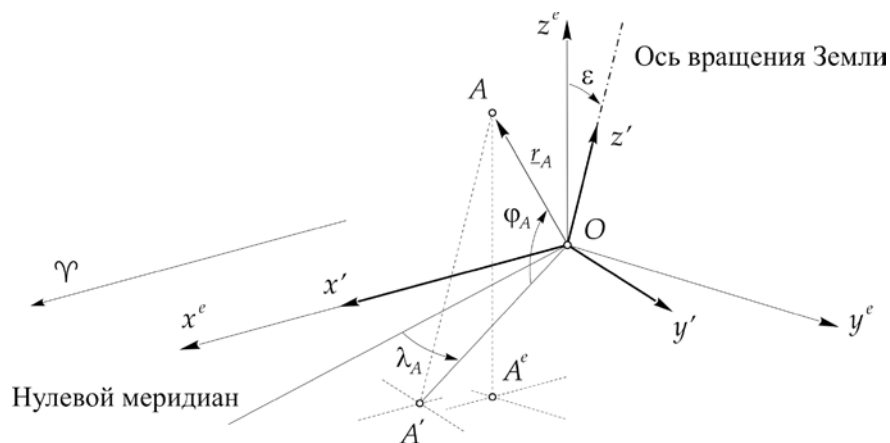


Рис. 2. Координаты наблюдателя (точка A) на поверхности Земли

$$|r_A(t)| = R_A ,$$

где $\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_z$ — матрицы поворота (см. Приложение); A^e — проекция точки A на плоскость эклиптики $Ox^e y^e$; $\lambda(t)$ — угол в плоскости эклиптики $Ox^e y^e$ между осью Ox^e и линией, проходящей через точки O и A . Угол $\lambda(t)$ определяем через долготу Солнца $\lambda_{sun}(t)$ на соответствующую эпоху [11] и выбранный момент времени для регистрации изучаемого физического процесса, например, когда в точке A реализуется событие, именуемое «местной полночью»:

$$\lambda(t) = \lambda_{sun}(t) - \pi . \quad (5)$$

В качестве краткого отступления напомним, что привычное для нас понятие солнечных суток выражается интервалом времени между двумя последовательными верхними кульминациями Солнца и составляет 24 часа. Однако важно помнить о том, что в угловом выражении солнечные сутки больше 2π вследствие орбитального движения Земли вокруг Солнца.

Итак, привычное для нас понятие солнечных суток сформировано двумя вращениями: собственным вращением Земли и годичным движением Земли вокруг Солнца, т. е.

$$\omega(t) = \omega_*(t) + \omega_{год}(t) , \quad (6)$$

где $\omega_*(t)$ — угловая скорость собственного вращения Земли (Земля совершает оборот вокруг своей оси относительно звезд за

время, равное приблизительно 23 ч 56 мин 04 с); $\omega_{год}(t)$ — дополнительная угловая скорость вращения, обеспечивающая привычную для нас череду восходов и заходов, иными словами — солнечные сутки.

Поскольку внутрисуточные измерения широты приводятся к одному моменту времени (например, «местная полночь»), то мы отбрасываем «быструю» компоненту суточного вращения Земли ω_* , и далее в этой статье скорость вращения Земли представлена только добавочной угловой скоростью $\omega_{год}(t)$. Эта дополнительная угловая скорость есть производная по времени от долготы Солнца $\lambda_{sun}(t)$, поэтому выражение (6) принимает следующий вид:

$$\omega(t) = \omega_*(t) + \omega_{год}(t) = \frac{d\lambda_{sun}}{dt} \approx \frac{2\pi}{T_{год}} , \quad (7)$$

где $T_{год} = 365,25$ сут.

Это означает, что мы рассматриваем Землю в движении вокруг Солнца всегда обращенной к Солнцу одной своей стороной. Соответственно и наблюдатель, располагающийся в любой выбранной точке на поверхности Земли, всегда будет сохранять свое положение относительно направления на Солнце. Далее, мы будем считать угловую скорость вращения Земли постоянной, не зависящей от времени.

Особенности временного шага, кратного солнечным суткам

При формировании временного ряда

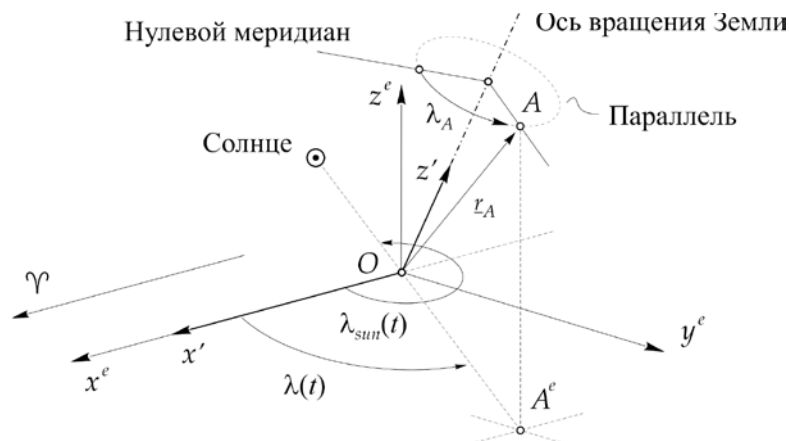


Рис. 3. Реализация события «местная полночь» в точке наблюдения A

измерений широты важную роль играет выбор временного шага. Если сформирован ряд результатов наблюдений с шагом в одни солнечные сутки, то это означает, что собственное вращение Земли (наблюдателя A) вокруг оси относительно звезд дополняется поворотом с угловой скоростью $\omega_{\text{год}}$ вокруг той же оси и в том же направлении.

Таким образом, нами показано существование дополнительного вращения наблюдателя, которое необходимо учитывать при определении периодов внешних возмущений. Если для временного ряда в качестве шага выбрать величину, кратную звездным суткам, то наблюдатель будет оставаться неподвижным относительно звезд. Луч, проведенный из точки A в направлении звезды S , будет совершать только плоскопараллельное перемещение, но отнюдь не вращательное. Если же временной шаг измерения будет равен солнечным суткам или кратен им, то движение наблюдателя относительно звезд будет вращательным с периодом $T_{\text{год}}$ и, как следствие, луч AS будет вращаться вокруг точки A по часовой стрелке. Это наглядно показано на рис. 4.

Из приведенного выше следует, что если мы ищем внешнюю причину наблюдаемого явления на Земле (в нашем случае это вариация широты), то определяющим становится роль выбора временного шага при формировании последовательности из-

мерений. Пересчитав полученные периоды с учетом дополнительного вращения Земли, мы получим периоды внешнего (прямого или опосредованного) воздействия на измерительный прибор.

Орбита Луны

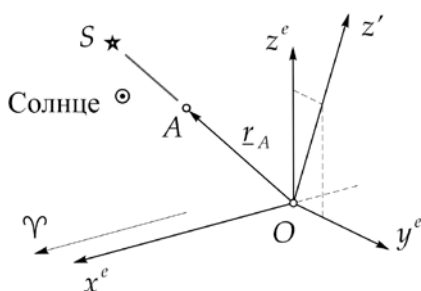
Орбита Луны — сложная незамкнутая пространственная кривая. Движение Луны рассматривается относительно неподвижной точки O , совпадающей с центром массы Земли (рис. 5). Положение Луны в системе координат $Ox^e y^e z^e$ задается комбинацией шести циклически непостоянных элементов орбиты [6]:

$$r_{\text{luna}}(t) = r_{\text{luna}}(i(t), \psi(t), \varphi(t), e(t), a(t), t_*(t)), \quad (8)$$

где $i(t)$ — угол наклона орбиты, определяемый как угол пересечения плоскости эклиптики $Ox^e y^e$ и плоскости кеплеровой траектории Луны; $\psi(t)$ — долгота линии узлов (линия пересечения плоскостей), при этом отсчет угла ведется от оси Ox^e , которая параллельна линии весеннего равноденствия Υ в любой момент времени движения Земли (точка O) вокруг Солнца; $\varphi(t)$ — угол между линией узлов и линией аписид; эллиптичность траектории Луны определяется эксцентриситетом $e(t)$ и большой полуосью $a(t)$; $t_*(t)$ — момент времени прохождения Луной точки перигея.

Например, выражения для $\psi(t)$ и $\varphi(t)$, взятые из работы [6], на эпоху 1900 года выглядят следующим образом:

а)



б)

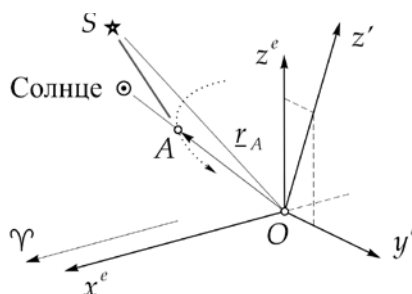
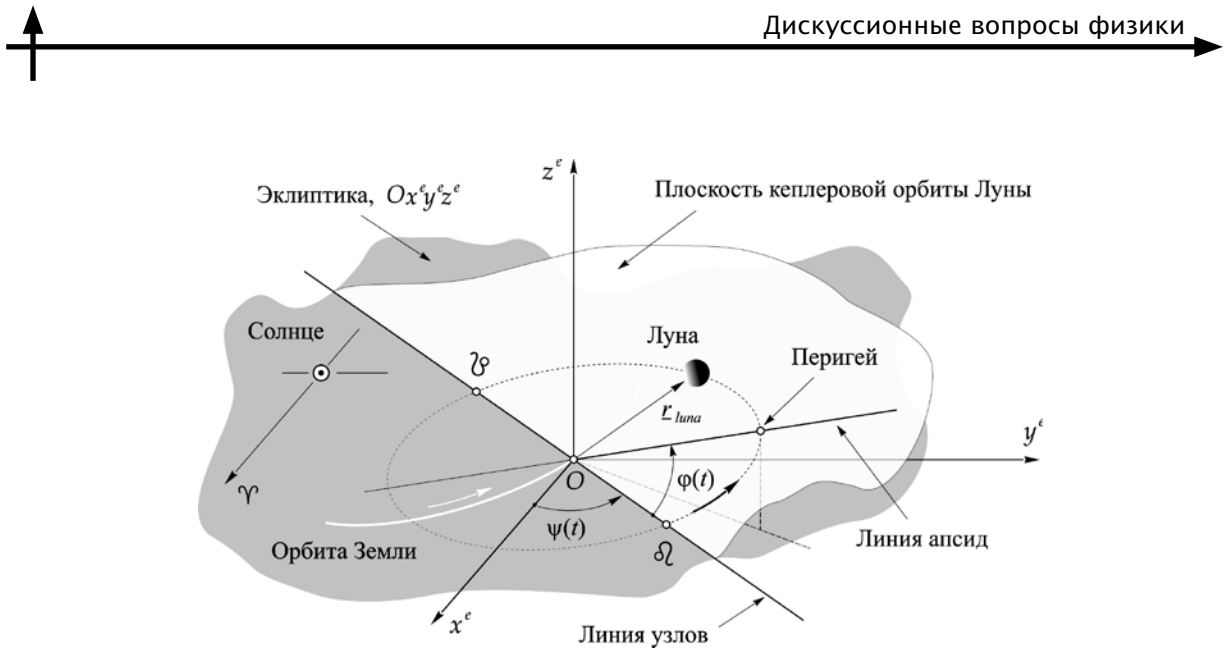


Рис. 4. Влияние шага временной шкалы (а или б) на интерпретацию результатов измерений зенитного расстояния звезды S в точке A :

а — звездные сутки, $r_A(t) = \text{const}$; б — солнечные сутки, $r_A(t) \neq \text{const}$. Oz' — ось собственного вращения Земли; ось Ox^e всегда параллельна линии весеннего равноденствия Υ при движении Земли вокруг Солнца


 Рис. 5. Элементы орбиты Луны в системе координат $Ox^e y^e z^e$

$$\begin{aligned}\psi(t) &= 259^{\circ}10'59'',77 - 1934^{\circ}08'31'',23\tau + \\ &\quad + 07'',48\tau^2 + 0'',0080\tau^3; \\ \varphi(t) &= 075^{\circ}08'46'',61 + 6003^{\circ}10'33'',75\tau - \\ &\quad - 44'',65\tau^2 - 0'',0530\tau^3; \\ \tau(t) &= (2415020 - t) / 36525,\end{aligned}\quad (9)$$

где $\tau(t)$ — время, выраженное в юлианских столетиях как функция текущей юлианской даты t .

Производные этих функций по времени дают нам значения периодов вращения линий узлов и апсид:

$$\begin{aligned}T_{\psi} &= \frac{2\pi}{d\psi/dt} \approx -18,6 \text{ лет}, \\ T_{\varphi} &= \frac{2\pi}{d\varphi/dt} \approx 6 \text{ лет}.\end{aligned}\quad (10)$$

Следовательно, перигей, участвующий в этих двух вращениях относительно точки O , в системе координат $Ox^e y^e z^e$ будет иметь, согласно правилу сложения угловых скоростей, период вращения, равный

$$T_{\text{перигей}} = \frac{T_{\psi} \cdot T_{\varphi}}{T_{\psi} + T_{\varphi}} \approx 8,85 \text{ лет}.\quad (11)$$

Перигейная масса Луны. Установим, как влияет перемещение перигея Луны на направление и величину гравитационного ускорения в точке A поверхности Земли. Гравитационное влияние Луны на Землю заменим эквивалентным гравитационным воздействием некоторой массы, помещен-

ной в перигей Луны. Эту массу определим из величины гравитационного воздействия Луны на неподвижную Землю (точка O) за один цикл $T_{\text{luna}} \approx 28$ сут. В силу осевой симметрии и эксцентриситета, отличного от нуля, результирующая сила гравитационной природы будет направлена к перигею (рис. 6).

Модуль силы $|f_{\Pi}|$ — это интеграл гравитационного воздействия на Землю со стороны Луны за временной отрезок, равный периоду обращения Луны вокруг Земли:

$$\begin{aligned}|f_{\Pi}| &= \frac{1}{2\pi} G M_{\text{terra}}^* M_{\text{luna}} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \alpha}{r(\alpha)^2} d\alpha, \\ M_{\text{terra}}^* &= M_{\text{terra}} + M_{\text{luna}},\end{aligned}\quad (12)$$

где

$$r(\alpha) = \frac{p}{1 + e \cos \alpha}, \quad p = a(1 - e^2), \quad \alpha = \frac{2\pi}{T_{\text{luna}}} t.\quad (13)$$

Здесь $r(\alpha)$ — фокальный радиус Луны как функция угла α , отсчитываемого от направления на перигей против часовой стрелки; p — фокальный параметр; e — эксцентриситет; a — большая полуось.

Интегрируя выражение (12), получаем:

$$|f_{\Pi}| = G M_{\text{terra}}^* M_{\text{luna}} \frac{e}{p^2}.\quad (14)$$

Теперь, зная модуль силы $|f_{\Pi}|$, мы можем записать выражение для некой массы, которая обеспечит необходимое нам сило-

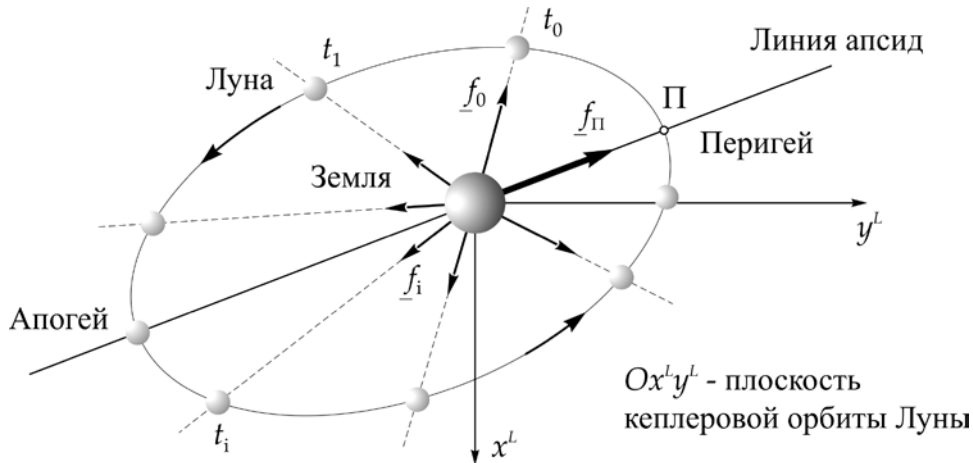


Рис. 6. Гравитационное воздействие f_{Π} Луны на Землю за период ее обращения вокруг Земли по кеплеровой орбите с плоскостью $Ox^L y^L$

вое воздействие гравитационной природы. В дальнейшем эту массу мы будем называть перигейной массой Луны. Из закона о гравитационном взаимодействии двух тел мы получаем выражение для искомой массы:

$$m_{\Pi} = \frac{|f_{\Pi}|}{GM_{\text{terra}}^*} \Pi_{\text{luna}}^2; \Pi_{\text{luna}} = \frac{p}{1+e}, \quad (15)$$

где Π_{luna} – расстояние между фокусом эллипса (точка O) и перигеем. Подставляя выражение (14) в формулу (15), получаем выражение для перигейной массы:

$$m_{\Pi}(e) = M_{\text{luna}} \frac{e}{(1+e)^2}, \quad m_{\Pi}(e)|_{e=0} = 0. \quad (16)$$

Таким образом мы определили перигейную массу Луны как функцию эксцентриситета кеплеровой орбиты Луны. Как уже отмечалось ранее, элементы орбиты Луны имеют циклический характер, поэтому в первом приближении будем считать, что эксцентриситет $e(t)$ является гармонической функцией с периодом, равным времени обращения перигея вокруг центра Земли [6]:

$$e(t) = \bar{e} + \frac{1}{2}(e_{\max} - e_{\min}) \times \sin\left(\frac{2\pi}{T_{\text{перигей}}}t\right), \quad \bar{e} = \text{const.} \quad (17)$$

Введение фиктивной перигейной массы $m_{\Pi}(e)$ позволило исключить «быструю» компоненту движения Луны и рассматри-

вать только движение перигея Луны Π . Положение перигейной массы в неподвижной системе координат $Ox^e y^e z^e$ определяется следующим вектором:

$$\begin{aligned} \underline{r}_{\Pi}(t) = & \overbrace{\Pi_{\text{lune}}(e, a)}^{a(1-e)} \cdot \underline{P}_z(\psi(t)) \times \\ & \times \underline{P}_x(i(t)) \cdot \underline{P}_z(\varphi(t)) \cdot \underline{e}_1. \end{aligned} \quad (18)$$

Отвесная линия и перигей Луны

Определим, как зависит угол $\gamma(t)$ от взаимного расположения перигея Луны Π и наблюдателя A на поверхности вращающейся Земли (рис. 7).

В системе координат $Ox^e y^e z^e$ точка A (наблюдатель) и точка Π (перигейная масса Луны) совершают вращательное движение по своим траекториям вокруг точки O (центр массы Земли) в одну сторону – против часовой стрелки с разными угловыми скоростями. На пробную массу m_A в точке A (рис. 8) действуют две гравитационные силы: со стороны Земли и со стороны перигейной массы Луны. Они следуют выражениям

$$\underline{f}_{\text{terra}}(t) = G m_A M_{\text{terra}} \frac{\underline{r}_A}{|\underline{r}_A|^3}, \quad (19)$$

$$\underline{f}_{\Pi}(t) = G m_A m_{\Pi} \frac{\underline{r}_{\Pi} - \underline{r}_A}{|\underline{r}_{\Pi} - \underline{r}_A|^3},$$

где $\underline{r}_{\Pi}(t)$, $\underline{r}_A(t)$ – векторы перигея Луны и на-

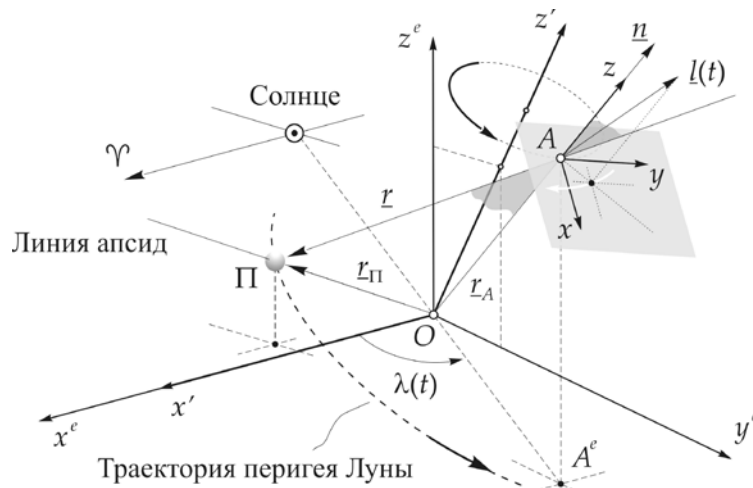


Рис. 7. Траектория перигея Луны П и система координат $Ax y z$ наблюдателя A на поверхности вращающейся Земли в неподвижной системе координат $Ox^e y^e z^e$

блюдателя (см. формулы (18) и (4) соответственно).

Обозначим через $\underline{f}(t)$ сумму сил, действующую в точке A :

$$\underline{f}(t) = \underline{f}_{terra}(t) + \underline{f}_{\Pi}(t); \quad (20)$$

тогда в подвижной системе координат $Ax y z$ (см. рис. 7) сила $\underline{f}(t)$ примет вид

$$\underline{f}_A(t) = \mathbf{P}_A(t) \cdot \underline{f}(t); \quad |\underline{f}_A(t)| = |\underline{f}(t)|, \quad (21)$$

где

$$\mathbf{P}_A(t) = \mathbf{P}_x(-\varepsilon) \cdot \mathbf{P}_z(\lambda(t)) \cdot \mathbf{P}_y\left(\frac{\pi}{2} - \varphi_A\right). \quad (22)$$

Расчеты показали, что в этой системе координат вершина вектора $\underline{l}(t)$ совершает

циклическое движение по часовой стрелке вокруг нормали $\underline{n}$ с периодом $T_{\text{цикл}} \approx 411,8$ сут. Графически этот процесс отображен на рис. 9 и 10.

Период $T_{\text{цикл}} \approx 411,8$ сут во вращающейся системе координат $Ax y z$ есть результат сложения двух вращений: наблюдателя (точка A) вокруг оси Oz' с периодом, равным периоду обращения Земли вокруг Солнца, и вращения перигея Луны вокруг центра массы Земли. Длиннопериодическая составляющая ($T_{\text{перигей}} \approx 8,85$ лет) наблюдаемого процесса (см. рис. 9) определяется только циклическими изменениями эксцентриситета и большой полуоси эллиптической траектории Луны. Некоторое

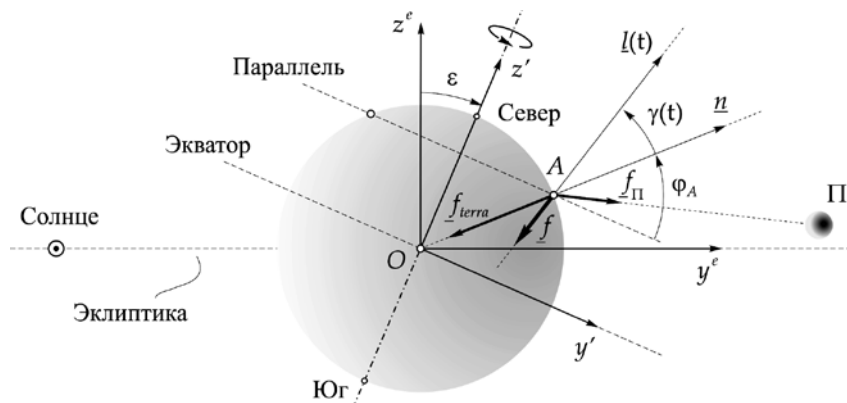


Рис. 8. Гравитационные силы, действующие на пробную массу в точке A в момент времени, когда Солнце, Земля и перигейная масса Луны находятся в плоскости $Oy^e z^e$

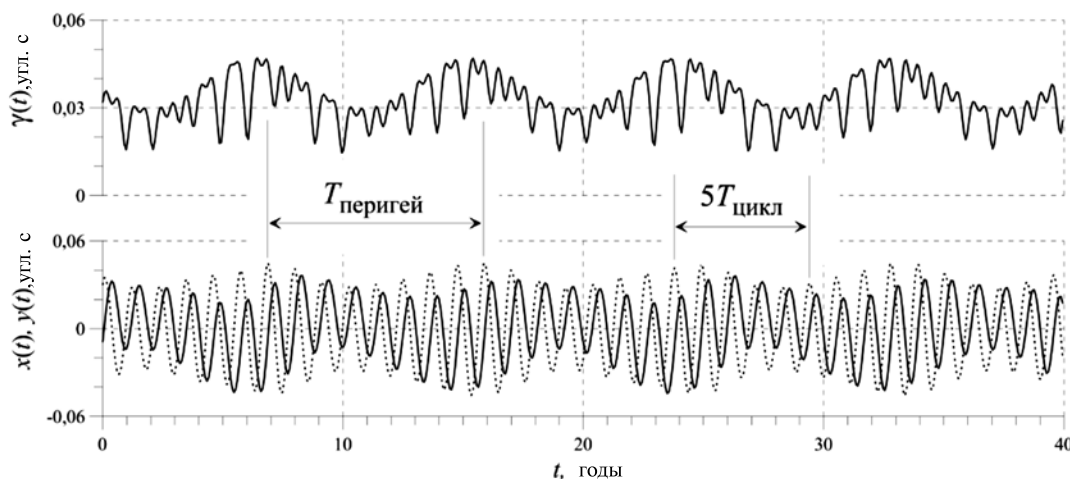


Рис. 9. Временные зависимости угла $\gamma(t)$ и его компонент: $x(t)$ (пунктир) и $y(t)$ (сплошная линия)

различие по амплитуде неизбежно, так как существующие в астрометрии методики накопления и обработки наблюдательных данных основаны на концепции того, что вариация широты места вызвана движением оси вращения Земли в теле Земли, так называемым чандлеровским движением. В действительности, каждое измерение широты классическим астрометрическим инструментом происходит в непрерывно меняющемся гравитационном поле, так как Земля имеет собственное вращение и движется относительно Солнца, Луны и других планет. Непрерывное и неслучайное изме-

нение гравитационной обстановки в точке наблюдения на Земле, естественно, влияет на пространственное положение отвесной линии или нормали к искусственному горизонту [9, 10]. Это означает, что наблюдательные данные, полученные на различных инструментах и в разных гравитационных условиях, сводить в один временной ряд недопустимо.

Предложенный к рассмотрению естественный процесс изменения гравитационного поля — это единственный процесс, который способен объяснить пространственные колебания отвесной линии с периодом,

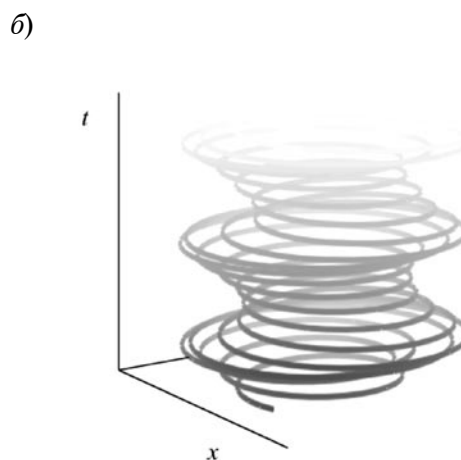
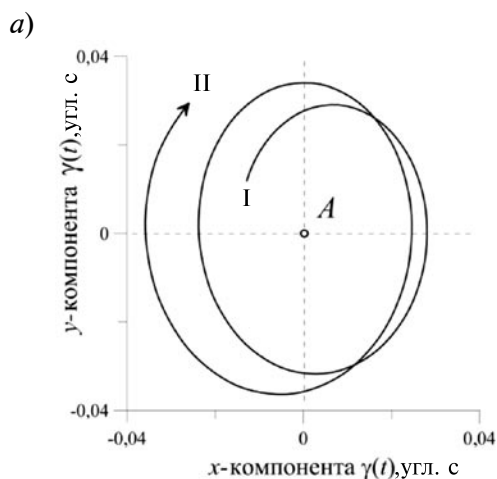


Рис. 10. Фрагмент траектории вершины вектора $l(t)$ за период времени между моментами I (июль 1983 г.) и II (ноябрь 1985 г.): проекция траектории на плоскость Axu (а) и ее временная развертка (б)

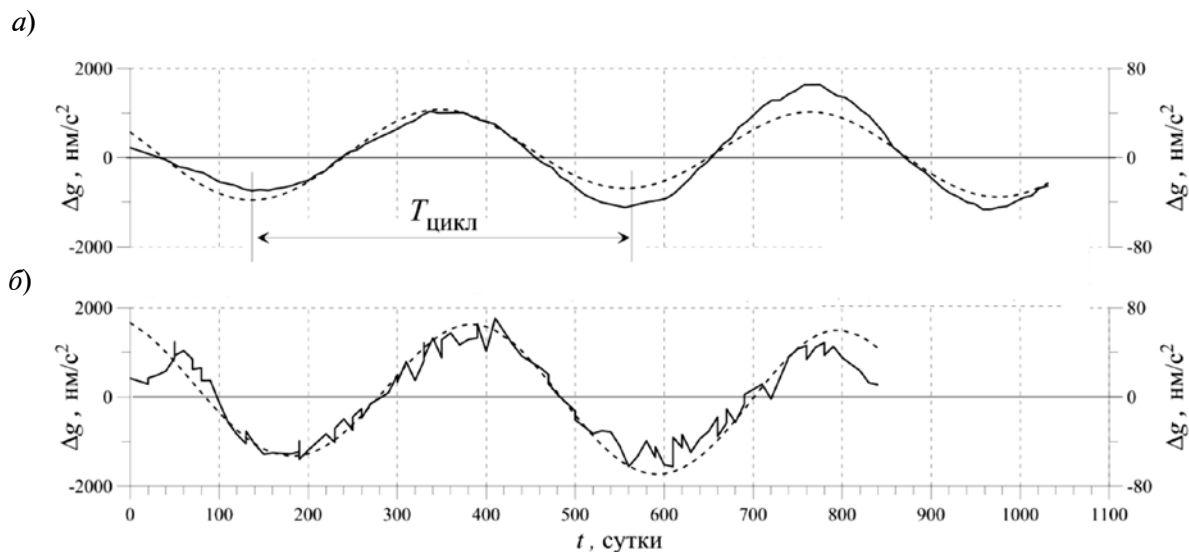


Рис. 11. Сопоставление расчетных (пунктир, левые вертикальные числовые шкалы) и наблюдательных (сплошные линии, правые шкалы) вариаций гравитационного ускорения Δg на станциях Бад-Хомбург (а) и Боулдер (б) с географическими координатами $\varphi_A = 50^\circ 13'$, $\lambda_A = 8^\circ 36' 36''$ (а) и $\varphi_A = 40^\circ 02'$, $\lambda_A = 254^\circ 58'$ (б). Начало каждого ряда (они не синхронны) определяется юлианскими датами $JD = 2444797 + t$ (а) и $JD = 2449820 + t$ (б)

равным примерно 411,8 сут. Численное моделирование процесса хорошо согласуется с результатами долговременных наблюдений за изменением нормальной составляющей гравитационного поля Земли Δg на станциях Бад-Хомбург (Bad Homburg), Германия [12],

и Боулдер (Boulder), США [13]. Из графиков на рис. 11 видно, что при разности в долготе между станциями около 246° период колебания гравитационного поля один и тот же и равен периоду Чандлера $T_{\text{цикл}} \approx 411,8$ сут.

Данные наблюдений за «ходом широты»

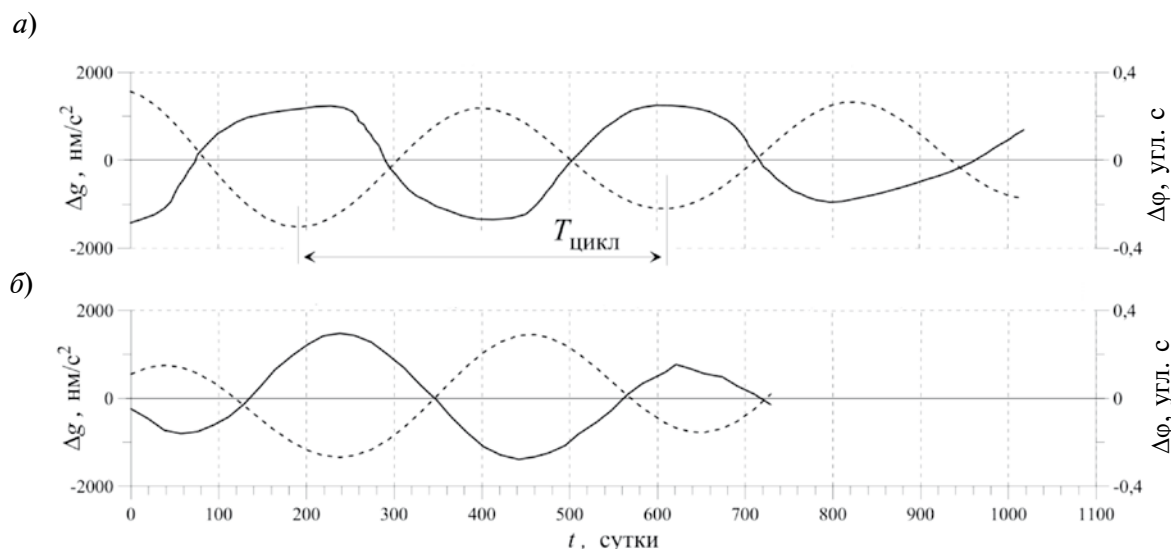


Рис. 12. Сопоставление расчетной вариации гравитационного ускорения Δg (пунктир) с наблюдательными данными «хода широты» $\Delta \varphi$ (сплошные линии) на станциях Йоханнесбурга (а) и Брюсселя (б) с географическими координатами $\varphi_A = -26^\circ 10' 55''$, $\lambda_A = 28^\circ 04' 30''$ (а) и $\varphi_A = 50^\circ 47' 54''$, $\lambda_A = 04^\circ 21' 30''$ (б). $JD = 2418783 + t$ (а) и $JD = 2443164 + t$ (б) (ряды не синхронны)

$\Delta\varphi$ и вариации нормальной составляющей гравитационного поля Δg на станциях Йоханнесбурга [4] и Брюсселя [7] представлены на рис. 12. Ход кривых показывает правильность нашего утверждения, что вариация широты есть не что иное, как колебание отвесной линии измерительного инструмента с периодом Чандлера, равным 411,8 сут.

Важно подчеркнуть, что наблюдаемый «ход широты» $\Delta\varphi$, а правильнее — изменение угла отклонения силовой линии (местной нормали) от направления на звезду, и изменение нормальной составляющей гравитационного ускорения Δg имеют один и тот же период и находятся строго в противофазе, как это и должно быть при гравитационном взаимодействии Земли и Луны.

Временные ряды наблюдательных данных IERS

Общепринято, что при обработке данных наблюдательных экспериментов по изучению вариаций зенитного расстояния звезд максимальное внимание уделяется статистическим методам и практически игнорируется физическая суть явления. Анализ наблюдательных данных статистическими методами, без четкого представления о природе регистрируемого процесса,

часто уводит исследование в область метафизики. Гистограмма (рис. 13) показывает результат нашего анализа наблюдательных рядов IERS (International Earth Rotation and Reference Systems Service) [18, 19]. Из гистограммы видно, что период, равный примерно 411,8 сут, имеет наибольшую частоту появления.

И если предположить, что процесс с этим периодом есть результат внешнего воздействия, то необходимо учесть дополнительное годовое вращение Земли, входящее в определение солнечных суток (см. формулу (6)). Собственное вращение наблюдателя с периодом $T_{\text{год}}$ изменяет численное значение периодов внешних возмущающих факторов, регистрируемых в наблюдениях. Так, перигейная масса Луны вращается с периодом $T_{\text{перигей}} \approx 8,85$ лет (3232,46 сут) вокруг центра массы Земли против часовой стрелки и возмущает гравитационное поле Земли. Период изменения пространственного положения отвесной линии, вызванный этим возмущением и регистрируемый наблюдателем A на Земле, в рамках классической механики определяется следующим образом:

$$T_{\text{цикл}} = \frac{T_{\text{перигей}} \cdot T_{\text{год}}}{T_{\text{перигей}} - T_{\text{год}}} =$$

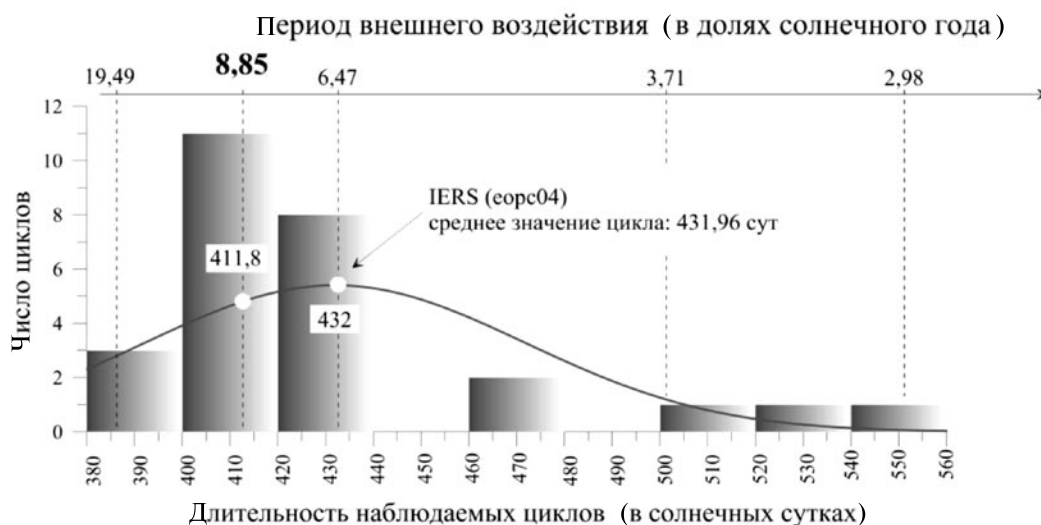


Рис. 13. Распределение циклов (2π) по длительности в «остаточном движении» оси вращения Земли в теле Земли. Жирным шрифтом выделено значение перигея Луны (8,85)

$$= \frac{8,85 \cdot 1}{8,85 - 1} \approx 1,13 \text{ год} \approx 411,8 \text{ сут.} \quad (23)$$

Тот же самый период гравитационного возмущения отвесной линии при использовании временной шкалы с шагом, не кратным солнечным суткам, будет иным:

$$T_{\text{цикл}} = \frac{T_{\text{перигей}} \cdot T_{\text{сутки}}}{T_{\text{перигей}} - T_{\text{сутки}}} = \frac{3232,46 \cdot 1}{3232,46 - 1} \approx 1,00031 \text{ сут.} \quad (24)$$

Вернемся к гистограмме на рис. 13. Нижняя, линейная, шкала — это длительность циклов без учета собственного вращения наблюдателя с периодом $T_{\text{год}}$. Верхняя, нелинейная, шкала соответствует нижней шкале длительности циклов, но после коррекции на собственное вращение наблюдателя с периодом $T_{\text{год}}$. Для наблюдаемого периода приблизительно в 411,8 сут (назовем его вторичным) период внешнего возмущающего процесса (назовем его первичным) находится в интервале 8 — 11 лет. Источником возмущения в данном случае может быть только перигейная Луна (см. формулы (15)), периодичность обращения которой относительно Земли равна $T_{\text{перигей}}$. Таким образом, мы можем утверждать, что период около 411,8 сут имеет естественное природное происхождение, но сам по себе вторичен.

Иллюзия чандлеровской вариации широты места

Рассмотрим роль Луны в изменении пространственного положения силовой линии гравитационного поля системы Земля—Луна. Пусть расстояние от Земли до Луны фиксируется в моменты времени, когда наблюдатель A и Луна находятся в плоскости $Oy'z'$ (рис. 14). В эти же моменты времени фиксируем угол $\gamma(t)$ между векторами $l(t)$ (отвесная линия) и неподвижным репером $\underline{n}$.

По мере приближения Луны к Земле уклонение отвесной линии $dy/dt > 0$ создает мнимый эффект увеличения широты в точках A и D , а в точках C и B — ее уменьшения, так как $dy/dt < 0$. Поэтому при одновременных наблюдениях зенитных расстояний звезд на одном меридиане, но по разные стороны экваториальной зоны, отклонения отвесной линии $l(t)$ должны быть синфазными.

Роль фактора очевидности в выборе направления исследования

Так произошло, что результат наблюдения за широтой места, по очевидным соображениям, был воспринят как следствие движения оси вращения Земли в теле Земли. При этом остался без должного внимания факт, что так называемый наблюдаемый «ход

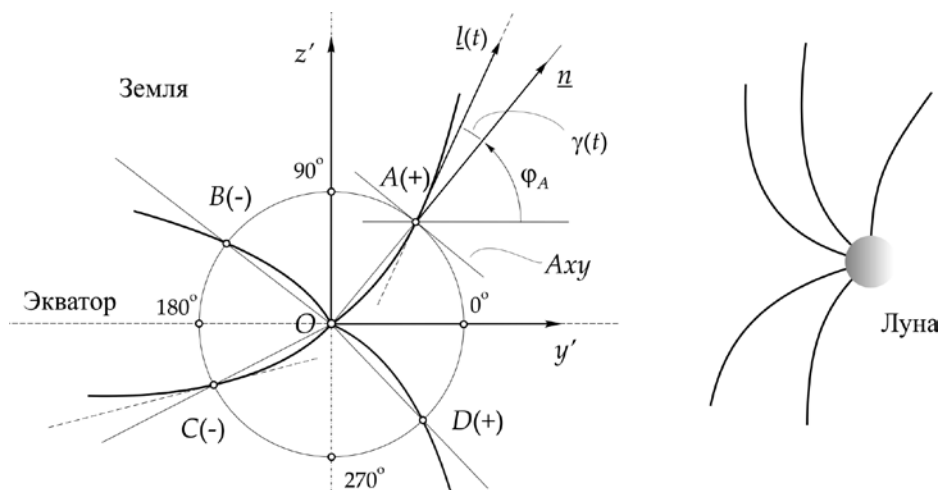


Рис. 14. Отклонение отвесной линии $l(t)$ от неподвижного репера $\underline{n}$ в точке A на поверхности Земли как функция расстояния от Земли до Луны

широты» может быть результатом воздействия малых длиннопериодических вариаций гравитационного поля на пространственное положение отвесной линии (нуль-пункт астрометрического инструмента). Этот момент можно назвать точкой бифуркации в формировании парадигмы, в рамках которой и стали выполняться все дальнейшие изыскания физической природы чандлеровского движения; но никакая самая совершенная математика не смогла объяснить то, чего не существует в природе.

В заключение сформулируем основные итоги работы.

1. Чандлеровское движение как остаточное движение оси вращения Земли в теле Земли отсутствует. Наблюдаемые вариации в измерениях зенитного расстояния звезд вызваны изменением положения отвесной линии (репера в измерительном инструменте). Отклонение отвесной линии (вектора гравитационного ускорения) определяется гравитирующими телами, окружающими Землю, в частности Луной.

2. Непосредственно период Чандлера — это один из параметров природных явлений гравитационной природы, не имеющих отношения к оси вращения Земли. Колебания с чандлеровским периодом, наблюдаемые на поверхности Земли, вращающейся с периодом $T_{\text{год}}$, — это колебания гравитационного поля, вызываемые вращением перигейной Луной с периодом $T_{\text{перигей}}$ вокруг Земли. Так, регистрируемое гравитационное возмущение с периодом около 411,8 сут наблюдается на вращающейся Земле в отклонениях отвеса (или уровня), в вариациях атмосферного давления [15], в колебаниях уровня моря (полюсный прилив) [21]. Проведенный нами анализ открытых материалов гравиметрических наблюдений [20] также показал наличие чандлеровского периода. Околосуточные вариации зенитного расстояния звезд такой же амплитуды, как и чандлеровские, зарегистрированные А.С. Васильевым [3], имеют ту же природу, что и чандлеровские колебания широты, поскольку наблюдения за зенитными расстояниями

вели теми же гравизависимыми астрометрическими инструментами. Но поскольку временные ряды формировались с шагом, не кратным солнечным суткам, период вариаций зенитных расстояний — не чандлеровский, а околосуточный (см. формулу (24)).

3. Исключение фактора «чандлеровского движения полюса» приведет к пересмотру модели Земли и теории ее вращения, к изменению поправок в системе Мирового времени, в системе спутниковой навигации (GPS, ГЛОНАСС), в геодезических измерениях, в метрологии и физических экспериментах и везде, где необходима соответствующая точность.

Приложение

Матрицы поворота

Пусть точка M в системе координат $Oxyz$ задается вектором $\underline{r}$, тогда в новой системе координат $Ox'y'z'$, полученной путем поворота $Oxyz$ на угол α вокруг оси Ox , точка M будет определяться вектором $\underline{r}'$. Ниже приведены матрицы поворота на угол α вокруг осей Ox , Oy , Oz . Вращение против часовой стрелки принимается за положительное.

$$\begin{aligned}\underline{r}' &= \mathbf{P}_x(\alpha)\underline{r}, \\ \mathbf{P}_x(\alpha) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ 0 & \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix}, \\ \underline{r} &= \mathbf{P}_x^{-1}(\alpha)\underline{r}', \\ \underline{r}' &= \mathbf{P}_z(\alpha)\underline{r}, \\ \mathbf{P}_z(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \underline{r} &= \mathbf{P}_z^{-1}(\alpha)\underline{r}', \\ \underline{r}' &= \mathbf{P}_y(\alpha)\underline{r}, \\ \mathbf{P}_y(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & 0 & \sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \end{pmatrix}, \\ \underline{r} &= \mathbf{P}_y^{-1}(\alpha)\underline{r}'.\end{aligned}$$



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Newcomb, S.** On the dynamics of the Earth's rotation with respect to the periodic variations of latitude [Text] / S. Newcomb // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 1892. — Vol. 52. — P. 336–341.
2. **Chandler, S.C.** New study of the polar motion for the interval, 1890 – 1901 [Text] / S.C. Chandler // Astronomical Journal. — 1902. — Vol. 22. — June. — P. 145–148.
3. **Васильев, А.С.** Широты Пулково в 1917–1941 гг. по наблюдениям на пассажном инструменте в первом вертикале [Текст] / А.С. Васильев // Тр. Главной астрономической обсерватории в Пулкове. — 1952. — Т. 2. — № 69. — P. 15–20.
4. **Филиппов, А.Е.** Сравнение Пулковских и Йоханнесбургских наблюдений широты [Текст]: Т. VI / А.Е. Филиппов. — Киев: Изд-во АН УССР, 1956. — 200 с.
5. **Константинов, А.И.** Время [Текст] / А.И. Константинов, А.Г. Флеер. — М.: Изд-во стандартов, 1971. — 367 с.
6. **Куликов, К.А.** Основы лунной астрометрии [Текст] / К.А. Куликов, В.Б. Гуревич. — М.: Наука, 1972. — 392 с.
7. **Подобед, В.В.** Общая астрометрия [Текст] / В.В. Подобед, В.В. Нестеров. — М.: Наука, 1982. — 576 с.
8. **Runcorn, S.K.** The excitation of the Chandler wobble [Text] / S.K. Runcorn, G.A. Wilkins, E. Groten [et al.] // Surveys in Geophysics. — 1987. — Vol. 9. — Iss. 3–4. — P. 419–449.
9. **Кириян, Г.В.** А.с. 1718632 СССР, МКИ⁷ G 01 C 15/14 Искусственный горизонт [Текст] / Г.В. Кириян, В.В. Кизин. — Приоритет от 20.10.1988. — 2 с.: ил. 1.
10. **Кириян, Г.В.** А.с. 1832962 СССР, МКИ⁷ G 02 B 23/16 Камера астрономического инструмента [Текст] / Г.В. Кириян, Д.Г. Кириян. — Приоритет от 20.10.1988. — 4 с.: ил. 5.
11. Астрономический ежегодник СССР на 1991 год [Текст]: Т. 70 — Л.: Наука, 1989. — 693 с.
12. **Schneider, M.** Earth rotation — Research group for space geodesy [Text] / M. Schneider // Bundesamt für Kartographie und Geodäsie, Frankfurt am Main. — 1998. — January.
13. **van Dam, T.M.** Two years of continuous measurements of tidal and nontidal variations of gravity in Boulder, Colorado [Text] / T.M. van Dam, O. Francis // Geophysical Research Letters. — 1998. — Vol. 25. — P. 393–396.
14. **Кириян, Г.В.** Движение центра массы Земли. Физические основы [Текст]: Монография / Г.В. Кириян, Д.Г. Кириян. — СПб.: СПбГПУ, 2003. — 174 с.
15. **Богданов, М.Б.** Периодические изменения атмосферного давления [Текст] / М.Б. Богданов, А.В. Федоренко // Изв. Саратовского ун-та. Сер. «Науки о Земле». — 2009. — Т. 9. — № 1. — P. 17–20.
16. **Kiryan, D.G.** The Chandler wobble is a phantom [Электронный ресурс] / D.G. Kiryan, G.V. Kiryan // ArXiv-prints(2011arXiv1109.4969K). Сентябрь 2011.
17. **Kiryan, D.G.** The Chandler wobble is a phantom [Text] / D.G. Kiryan, G.V. Kiryan // Advanced Problems in Mechanics. — 2012. — July. — P. 195–205.
18. IERS [Электронный ресурс]. — Режим доступа <http://www.iers.org>
19. EOC (Earth Orientation Center) [Электронный ресурс]. — Режим доступа <http://hpiers.obspm.fr/eop-pc>
20. ОНРДМС (Ocean Hemisphere Project Data Management Center) [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://ohp-ju.eri.u-tokyo.ac.jp>
21. **Максимов, И.В.** О «полюсном приливе» в море и атмосфере Земли [Текст] / И.В. Максимов // Доклады Академии наук СССР. — 1952. — Т. 86. — № 4. — P. 673–676.

КИРЬЯН Дмитрий Георгиевич — кандидат технических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН.

199178, г. Санкт-Петербург, В.О., Большой пр., 61
diki.ipme@gmail.com

КИРЬЯН Георгий Васильевич — астроном-исследователь
diki.ipme@gmail.com

УДК 621

*М.А. Васильева, Т.А. Гаврикова,
В.И. Ильин, С.Ф. Мусихин*

**КОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ – НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ
РАЗВИТИЯ НАНОТЕХНОЛОГИЙ
(по материалам XIV Всероссийской молодежной
конференции по физике полупроводников и наноструктур,
полупроводниковой опто- и наноэлектронике)**

*М.А. Vasil'eva, T.A. Gavricova,
V.I. Ilyin, S.F. Musikhin*

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

**COMPOSITE MATERIALS AS A NEW DIRECTION
OF NANOTECHNOLOGY DEVELOPMENT
(on the 14th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and
Nanostructure Physics and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics)**

В статье подведены итоги XIV Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 26 – 30 ноября 2012 г.) Названы работы студентов и аспирантов, отмеченных дипломами конференции и премиями. Во вводной части статьи дан обзор работ, посвященных композитным материалам, – направлению, открывающему новые перспективы развития нанотехнологии.

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ. НАНОСТРУКТУРЫ. КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ. ОПТОЭЛЕКТРОНИКА. НАНОЭЛЕКТРОНИКА.

The paper briefly summarizes the results of the 14th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and Nanostructure Physics and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics (St. Petersburg, on November 26 – 30, 2012). The titles of students' and post-graduate students' reports diplomaed and awarded prizes are presented. The introductory part reviews works on composite materials as a new direction of nanotechnology development.

SEMICONDUCTOR PHYSICS. NANOSTRUCTURES. COMPOSITE MATERIALS. OPTOELECTRONICS. NANOELECTRONICS.

26 – 30 ноября 2012 года в Санкт-Петербурге, в здании Академического университета РАН, прошла XIV Всероссийская молодежная конференция по физике полу-

проводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. Настоящая статья посвящена итогам конференции. По традиции, которой мы придерживались,



публикуя в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета» итоги многих предыдущих конференций, мы и на этот раз, предваряя описание собственно результатов конференции, даем обзор работ по одному из наиболее перспективных (по нашему мнению) направлений в тематике конференции. В данном случае статья посвящена композиционным материалам, имеющим в своем составе полупроводниковые нанoeлементы.

Композиционный материал, часто сокращенно называемый композитом или композитным материалом, — это «искусственно созданный неоднородный материал, состоящий из двух или более компонентов с четкой границей раздела между ними» (так определяет композитные материалы Википедия). В большинстве композитов компоненты можно разделить на матрицу и включенные в нее элементы. В композитах элементы обычно обеспечивают необходимые характеристики материала, а матрица — совместную работу элементов и их защиту от внешней среды. В некоторых случаях трудно, а иногда и невозможно, разделить композит на элементы и матрицу. Композит обладает не только свойствами, присущими элементам и матрице, но и может проявлять новые свойства, которых не было у матрицы и элементов по отдельности. Если элементы имеют размеры от единицы до нескольких десятков нанометров, то в этом случае говорят о нанокompозитах. Мы будем рассматривать компоненты, представленные полупроводниковыми наночастицами (квантовыми точками (КТ)), проводящими или диэлектрическими полимерами и другими материалами. Нас будут интересовать электрические и оптические свойства нанокompозитов, а также их применение.

Нанокompозиты привлекают внимание уже более 10 лет [1 – 3]. За это время исследованы различные сочетания КТ в различных матрицах. Наиболее популярны КТ в сульфиде, теллуриде и селениде кадмия с фотолюминесценцией в видимой области спектра, а также в сульфиде и селениде свинца, арсениде индия в ближней инфра-

красной области [4]. Кроме того, в последнее время также привлекают внимание наночастицы оксида цинка, фосфида индия и возродился интерес к наночастицам диоксида титана. Нанокompозиты являются быстро развивающейся областью исследования наноматериалов. Сфера их применения охватывает обширный диапазон от опто- и наноэлектроники до различного рода сенсоров для химии, биологии и медицины. В данном обзоре мы сфокусируем внимание на применении нанокompозитов в опто- и наноэлектронике. В ряде работ нанокompозитом называют квантовые точки с оболочкой из полупроводника иного типа, чем ядро, и покрытием из лигандов. В данном обзоре мы будем считать такой объект квантовой точкой. Пленки, образованные КТ, покрытыми органическими лигандами, тоже образуют нанокompозит. Материал лиганда и полупроводниковые ядра являются компонентами нанокompозита. Материал лиганда играет ту же роль, что и полимер, и, по сути, представляет собой матрицу.

Коллоидные квантовые точки, проводящие полимеры, нанокompозиты

Квантовые точки (КТ) — это нульмерные наноматериалы [5]. Их привлекательность связана с нанометровыми размерами и возможностью проектирования для определенных применений в таких устройствах, как электро- и нелинейно-оптические приборы, солнечные элементы и узлы для компьютеров (здесь мы опускаем обширную область их применения в биосенсорах и в медицине). КТ могут быть соединены с полимерами и образовывать нанокompозиты, которые можно рассматривать как небывалое новшество XXI века [6]. КТ и методы их синтеза, проводящие полимеры и нанокompозиты ранее были описаны в статье [3], поэтому в данном обзоре мы рассмотрим последние научные достижения и новые приборы на основе нанокompозитов.

Основной особенностью КТ, стимулирующей их применение, следует считать зависимость эффективной ширины запрещенной зоны от размера КТ: чем меньше

размер КТ, тем больше ширина зоны. Такая корреляция приводит к зависимости спектров поглощения и люминесценции от размера КТ, что позволяет задавать заранее спектральные свойства объектов, которые требуются конкретно для проектируемого прибора.

Свойства проводящих полимеров определяются двойными связями между атомами углерода, обусловлены пайерлсовской неустойчивостью и особенностью π -связей. Положение уровней низшей незанятой молекулярной орбитали (LUMO) и наивысшей занятой молекулярной орбитали (НОМО) полимера — аналогов дна зоны проводимости и потолка валентной зоны полупроводника зависит от структуры элементарного звена полимерной цепи (мономера) и длины участка (сегмента) с согласованным положением связей. В проводящих полимерах эти уровни распределены по энергии в некотором интервале. Источники энергетического беспорядка — это распределение сегментов по длине в π - или s -связанных главных цепях полимера и флуктуация энергии поляризации в решетке. Этот участок можно рассматривать как квантовую нить, в пределах которой электроны или дырки могут свободно перемещаться, причем они локализованы на этих сегментах, оставаясь делокализованными в пределах сегмента. Положение уровней зависит от длины квантовой нити и поэтому может меняться от одного участка цепи к другому. Границы сегмента полимерной нити могут быть связаны либо с обрывом полимерной цепи, либо с ее поворотом вокруг оси цепи, либо с ее изгибом.

Флуктуация поляризационной энергии обусловлена хаотическим расположением полимерных цепей и случайным образованием зарядов носителей, которое приводит к возникновению поляронов. В нанокompозитах положение уровней зависит также от включения наночастиц в полимерную матрицу. Величины диэлектрической проницаемости материалов наночастиц и полимеров могут значительно различаться, что приводит к изменению поляризационной энергии полимеров в окрестности наночастиц [7]. В целом локализованные

состояния распределены по Гауссову закону [8]:

$$g(\varepsilon) = \frac{N}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1)$$

где $g(\varepsilon)$ — плотность локализованных состояний в диапазоне энергий от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$; σ — энергетический масштаб распределения; N — полная концентрация локализованных состояний.

Энергия ε отсчитывается от центра полосы состояний. Распределение локализованных состояний в органических соединениях отличается от аналогичного распределения в неорганических, например полупроводниках, где локализованные состояния распределены по экспоненциальному закону.

Проводимость в проводящих полимерах носит прыжковый характер с переменной длиной прыжка. Предполагается, что заряженные носители движутся в неупорядоченных органических полупроводниках через некогерентные прыжковые переходы между локализованными состояниями с некоторой концентрацией N , которые хаотически распределены в пространстве. Все состояния локализованы, а их энергетическое распределение описывается уравнением (1). Энергетический масштаб σ для распределения плотности состояний в большинстве органических материалов составляет около 0,1 эВ. Считается, что нет никаких корреляций между пространственным положением локализованных состояний и их энергией.

Температурная зависимость дрейфовой подвижности, полученная из времяпролетных экспериментов в неупорядоченных органических твердых телах, обычно имеет форму [8]:

$$\mu \sim \exp\left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^2\right], \quad (2)$$

где T_0 — параметр.

Эта температурная зависимость была воспроизведена при расчетах методом Монте-Карло прыжкового переноса заряженных носителей в наборе локализованных состояний с гауссовским распределением по энергии. Для экспоненциального распределения локализованных состояний



характерна температурная зависимость подвижности, которая следует закону Аррениуса:

$$u \sim \exp\left(-\frac{\Delta}{k_0 T}\right), \quad (3)$$

где Δ — энергия активации.

Поведение носителей существенно различается в зависимости от характера распределения состояний по энергии. При гауссовском распределении локализованных состояний существует граничная энергия $\langle \varepsilon_\infty \rangle$, вблизи которой собираются релаксирующие по энергии электроны (или дырки), и ниже они уже не опускаются, в то время как при экспоненциальном распределении носители могут неограниченно релаксировать, опускаясь на свободные состояния до тех пор, пока они не окажутся вблизи уровня Ферми μ . Для гауссовского спектра распределения локализованных состояний выражаются как

$$\langle \varepsilon_\infty \rangle = \frac{\sigma^2}{k_0 T}. \quad (4)$$

Оказалось, что в органических проводящих материалах можно наблюдать зависимости как типа (2), так и типа (3). Если энергия $\langle \varepsilon_\infty \rangle$ лежит выше уровня Ферми, то температурная зависимость подвижности описывается соотношением (2). Подвижность электронов в этом случае является хорошо определенной величиной, независимо от размеров образца и приложенного электрического поля, и характеризует сам материал. Если концентрация носителей велика, так что уровень Ферми находится выше $\langle \varepsilon_\infty \rangle$, то подвижность зависит от концентрации электронов в системе. Более того, в последнем режиме температурная зависимость подвижности носителей, вследствие прыжков по локализованным состояниям с гауссовским распределением, принимает форму закона Аррениуса (3). Обычно такая зависимость в органических материалах наблюдается при измерении электропроводности в системе со значительной концентрацией электронов, например, в полевых транзисторах.

В неупорядоченных органических материалах существует уровень энергии ε_r ,

который играет роль края подвижности. Он отделяет локализованные состояния от делокализованных в хвосте распределения плотности состояний. При низких температурах, когда $k_0 T < \sigma$, носители, помещенные в область большой энергии гауссовского распределения, совершают переходы вниз по энергии до тех пор, пока они не достигнут величины ε_r — транспортного уровня. После этого носители совершают прыжки вверх по энергии в состояния вблизи уровня ε_r . Этот прыжковый процесс, около и ниже ε_r , напоминает процесс многочисленных захватов на ловушки, где величина ε_r играет роль края подвижности.

Для проводимости на постоянном токе перколяционная теория дает зависимость

$$\sigma_{DC} = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_r - \mu}{k_0 T}\right), \quad (5)$$

где σ_0 — предэкспоненциальный множитель, слабо зависящий от температуры, а энергия μ — уровень Ферми.

Смесь КТ и полимеров образует нанокомпозит. КТ распределены хаотически в объеме полимерной матрицы.

Нанокомпозит образуется также при соединении графенового листа с другими материалами. Так, возможно соединение графена с полимером и графена с квантовой точкой.

Проводимость в нанокомпозитах

В зависимости от концентрации наночастиц возможно образование из них бесконечного кластера наночастиц. Если полимерная матрица является проводящей, то проводимость возможна как по проводящей полимерной матрице, так и по бесконечному кластеру из наночастиц. Если же полимер не проводит электричества, то проводимость возможна только в случае образования бесконечного кластера из наночастиц. Перенос зарядов по бесконечному кластеру происходит по прыжковому механизму [9]. Носители туннелируют из одной КТ в другую, если расстояние между КТ достаточно мало. Темп туннельных переходов заряженных носителей из локализованного состояния i в локализованное состояние j , лежащее ниже по энергии, зависит от про-

пространственного разделения r_{ij} между узлами i и j и следует равенству

$$v(r_{ij}) = v_0 \exp\left(-\frac{2r_{ij}}{a}\right),$$

где a — длина локализации, которая предполагается одной и той же для всех узлов; r_{ij} — расстояние между КТ.

Длина локализации определяет экспоненциальный спад волновой функции носителей в локализованных состояниях. Длину спада на отдельных узлах можно оценить из численных расчетов дрейфовой подвижности в зависимости от концентрации. Коэффициент v_0 зависит от механизма взаимодействия электронов, который вызывает переход. Обычно предполагается, что переходы носителей, которые дают вклад в их перенос в неупорядоченных материалах, вызваны взаимодействием с фононами. Часто предполагают, что коэффициент v_0 имеет порядок фоновой частоты. При более строгом рассмотрении необходимо определить эту величину и принять во внимание структуру электронных локализованных состояний, а также детали механизма взаимодействия.

Размеры КТ распределены приблизительно по Гауссову закону, следовательно, и уровни энергии КТ тоже распределены приблизительно по данному закону. Перескоки носителей между КТ будут зависеть от положения уровней энергии в КТ. Темп переходов между КТ с уровнями энергии ε_i и ε_j , которые расположены на расстоянии r_{ij} между КТ, будет выражаться как

$$v(r_{ij}) = v_0 \exp\left(-\frac{2r_{ij}}{\beta}\right) \times \exp\left(-\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i + |\varepsilon_j - \varepsilon_i|}{2k_0 T}\right), \quad (6)$$

где β — эффективный радиус собственного состояния в КТ.

Заряд по прыжковому механизму переносится по сетке Миллера — Абрахамса в форме заряда, делокализованного по всей наночастице, а не в форме электрона или дырки на локализованных состояниях.

Все, что изложено относительно проводящих полимеров, справедливо и для

КТ бесконечного кластера. Соответствующие уровни, аналогичные энергиям $\langle \varepsilon_\infty \rangle$ и ε_p , можно определить и для бесконечного кластера.

Важной характеристикой, которая определяет поведение проводимости в полимерных нанокомпозитах, служит порог протекания. Он проявляется, когда концентрация нанокристаллов достигает достаточно высоких значений и возникает проводимость вдоль цепочек нанокристаллов. При пороговом значении концентрации проводимость резко возрастает и может достигать значений $10^7 - 10^8$ (Ом·см) $^{-1}$. Этот эффект аналогичен переходу металл — изолятор в сильно легированных и сильно компенсированных полупроводниках (переход Мотта). Порог протекания (по концентрации частиц) зависит от размера наночастиц. Было показано, что порог для наноразмерных частиц ниже, чем для частиц микронного размера, и изменение проводимости с ростом концентрации — более резкое. Порог протекания для наночастиц составляет около 15 об. % (или несколько меньше) [10].

Примеры приборов на основе нанокомпозитов

Фрактальный p – n -переход образован двумя слоями нанокомпозитов, в одном из которых содержатся КТ с проводимостью n -типа, а в другом — с проводимостью p -типа. Если разместить наночастицы так, что их концентрация максимальна у противоположных краев пленки и спадает к середине, т. е. они размещаются с градиентом концентрации, то образуется диффузионный p – n -переход, образованный двумя бесконечными кластерами наночастиц. На границе образуется смешанный слой, содержащий одновременно КТ с проводимостью обоих типов. В случае двух типов частиц порог протекания для каждого составляет около 15 об. %. Таким образом, наночастицы должны в целом занимать 30 об. %, а полимер — 70 об. %. В этом случае имеется протекание по кластерам частиц как n -, так и p -типа (рис. 1).

Если ширина смешанного слоя W составляет около семи диаметров частиц, а

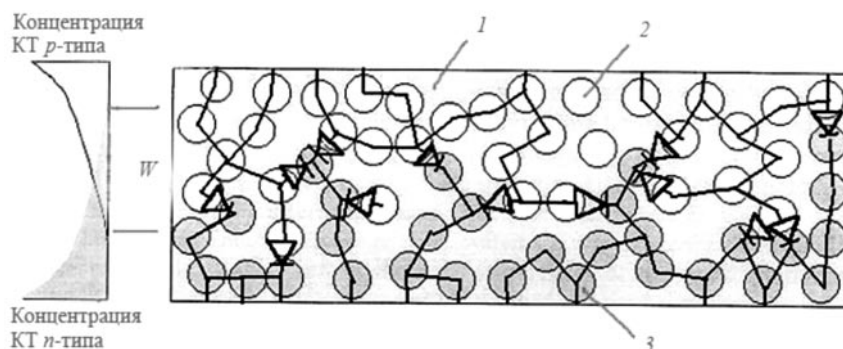


Рис. 1 [10]. Структура прибора с фрактальной геометрией p – n -перехода:
 1 – полимерная матрица; 2, 3 – КТ p - и n - типов;
 W – ширина фрактального p – n -перехода (смешанного слоя)

длина экранирования Дебая

$$L_D = \sqrt{\frac{\kappa \kappa_0 k_0 T}{e^2 n_b}}$$

(n_b – число свободных носителей в зоне проводимости (или валентной зоне) частицы, κ – диэлектрическая проницаемость, κ_0 – электрическая постоянная) больше диаметра частиц, то образуется планарный p – n -переход.

Однако, если уровень легирования частиц возрастает либо переход подвергается воздействию света, то длина экранирования Дебая может оказаться сравнимой с радиусом наночастиц, вследствие чего область пространственного заряда изменяется и сводится к области пространственного заряда p – n -перехода одиночной пары частиц, т. е. наступает «фрактализация» области пространственного заряда. Распределение потенциала можно найти из уравнения Пуассона. Если допустить, что примесные атомы однородно распределены по объему наночастицы, а КТ n - и p -типа перемешаны, то можно решить уравнение численным методом, используя метод конечных элементов при соответствующих граничных условиях. Результаты расчетов показывают, что порог «фрактализации» зависит от таких параметров, как диаметр частицы, дебаевская длина, топология и толщина смешанного слоя.

Особенностью такого перехода является существование сильного электрического поля, так как даже в случае частиц с тем же типом проводимости локальные поля мо-

гут достигать значений 10^7 В/см, а в случае контакта или близкого расположения частиц p - и n - типов значения напряженности поля будут даже выше и могут превышать 10^8 В/см. Так, когда наступает «фрактализация», область объемного заряда рассматриваемого перехода может превосходить таковую для обычного полупроводникового плоского перехода в 10 – 1000 раз, в зависимости от топологии смешанной области. Это дает существенное преимущество при изготовлении фотовольтаических наноконструктивных ячеек, так как активная область (область, где поля достаточно сильны, чтобы разделить заряды фотогенерированных экситонов, образованных как в наночастицах, так и в полимерах) увеличивается до 10 – 20 мкм; другими словами, образуется объемный p – n -переход. Топология фрактального перехода также предоставляет непрерывные пути для носителей заряда обоих типов к соответствующим электродам с минимальной рекомбинацией, поскольку вблизи всегда имеется частица с подходящим типом проводимости, входящая в бесконечный кластер, на которую может перепрыгнуть электрон или дырка. В итоге дырки передаются по бесконечному кластеру дырочного типа, а электроны – по кластеру электронного. Такие кластеры сосуществуют в активной области диффузионного перехода с данным типом топологии.

Контакты с разными значениями работы выхода создают встроенное поле в структуре. Тогда возможен перенос дырок

по матрице и электронов по бесконечному кластеру нанокристаллов. Разделение зарядов можно создать, если использовать уже рассмотренную структуру фрактального диода, которая образуется при использовании нанокристаллов *n*- и *p*- типов. Такую структуру можно создать из нанокристаллов Cu_2S (*p*-тип) и CdS (*n*-тип).

Использование бесконечного кластера из наночастиц сульфида или селенида кадмия при их высокой концентрации позволяет разделить около 90 % носителей от общего числа генерированных экситонов. Главные потери происходят в результате захвата электронов в «мертвых» концах проводящей сети нанокристаллов, которые действуют как центры рекомбинации. Цепи нанокристаллов CdS играют роль электрода (коллектора носителей), распределенного в полимерной матрице.

Фрактальный *p*–*n*-переход образуется также при использовании КТ Bi_2S_3 (*n*-тип) и PbS (*p*-тип) [11]. На базе такого перехода возможна разработка оптоэлектронных приборов и солнечных элементов.

Объединение графена и КТ образует в итоге наноккомпозит. Слой КТ на поверхности графенового листа использован для создания полевого фототранзистора [12]. Графен нанесен на поверхность структуры Si/SiO_2 и покрыт КТ PbS . Графен образует канал переноса носителей, а слой КТ PbS – слой, в котором происходит поглощение фотонов. Носители, образующиеся под действием света в КТ, переходят в графен, а противоположные заряды захватываются в слое КТ. Эти захваченные заряды приводят к эффекту фотоусиления, когда в их присутствии через емкостную связь меняется сопротивление графенового листа. Главная особенность прибора состоит в сверхвысоком коэффициенте фотоэлектрического усиления благодаря высокой подвижности носителей в графене (порядка $10^3 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$) и многократному переносу носителей за то время, пока захваченные носители остаются в КТ PbS . Этот гибридный фототранзистор графен – КТ обладает сверхвысоким коэффициентом фотоусиления и высокой квантовой эффективностью. Обнаружительная способность составляет

$7 \cdot 10^{13} \text{ см}\cdot\text{Гц}^{1/2}/\text{Вт}$. Это сопоставимо с эпитаксиально выращенными фототранзисторами на основе материалов A^3B^5 .

Наноккомпозит графен – КТ CdSe явился основой для изготовления фотовольтаических элементов [13]. Возбужденные светом электроны переходят из КТ CdSe в графен, затем в электрод SnO_2 , а дырки через электролит Na_2S – к противоположному электроду. Эффективность преобразования падающего потока фотонов в ток солнечного элемента составила 17 %.

Коллоидные КТ являются хорошим основанием для разработки различных источников излучения в видимой и инфракрасной областях спектра. Так, благодаря использованию КТ CdSe/ZnCdS удалось получить излучение во всей видимой области спектра и разработать источники для лазерного излучения в красной, зеленой и голубой областях спектра [14]. Это, в свою очередь, позволяет создать на этой основе источники белого цвета.

Применение наноккомпозитов на основе КТ охватывает широкий спектр оптических и оптоэлектронных приборов [15]. Они включают как фотодетекторы, фотопроводники, фотовольтаические приборы (в том числе и солнечные элементы), так и оптические приборы, использующие фоторефрактивный эффект и другие явления нелинейной оптики. В частности, это могут быть устройства для динамической голографии и обратимой оптической памяти.

Существуют и другие приборы на основе наноккомпозитов с коллоидными КТ, но ограничения объема данной статьи не позволяют их все рассмотреть.

Итоги конференции

Организаторами конференции выступили Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербургский академический университет – научно-образовательный центр нанотехнологий РАН, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербургский государственный университет. Опубликовано 89 докладов, которые представили 25 вузов и научных центров из 15 городов России: от Санкт-Петербурга



до Красноярска [16]. К сожалению, в отечественных исследованиях работ по полупроводниковым нанокompозитам немного. Развитие проблемы в этом направлении интенсивно ведется за рубежом. Именно на таких работах и базируется, главным образом, представленный выше обзор. Их авторами выступают, в том числе, и ученые из России. К ним принадлежит и один из авторов данной статьи, опыт его работы за рубежом отражен в обзоре. Среди работ, представленных на конференцию, только пять-шесть посвящено нанокompозитам. Организаторы конференции надеются, что в ближайшие годы исследования, направленные на изучение полупроводниковых нанокompозитов, будут представлены в отечественных работах (и, соответственно, в трудах последующих конференций) более весомо, поскольку приведенный обзор показывает необходимость таких исследований для достойного участия российских исследователей в развитии нанотехнологий, происходящем в мировой науке.

В программу конференции были включены три приглашенных доклада ведущих российских ученых: М.М. Глазова (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН) «Когерент-

ная спиновая динамика в наноструктурах», В.П. Евтихиева (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН) «Инжекционные полупроводниковые лазеры — от указки до интегральной оптики», В.С. Запасского (СПбГУ, «Spinoptics laboratory») «Спектроскопия спиновых шумов».

На девяти пленарных заседаниях студентами и аспирантами было сделано 48 устных докладов. Состоялась стендовая сессия (35 докладов) по разделам «Объемные свойства полупроводников», «Процессы роста, поверхность, границы раздела», «Гетероструктуры, сверхрешетки, квантовые ямы», «Квантовые точки, квантовые нити и другие низкоразмерные системы», «Приборы опто- и наноэлектроники», «Новые материалы».

Программный комитет отметил дипломами и премиями следующие работы аспирантов и студентов.

Премией (5 000 руб.) имени Е.Ф.Гросса за лучшую работу в области оптики полупроводников награждены:

Лямкина Анна Алексеевна, аспирантка Института физики полупроводников СО РАН (г. Новосибирск), за доклад «Резонансное усиление люминесценции в систе-



Рис. 2. Стендовая сессия конференции: доктор физико-математических наук, профессор Санкт-Петербургского государственного университета В.Ф. Агемян знакомится с докладами; на его вопросы отвечает Д.А. Суровегина, магистрант Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского

ме квантовая точка — металлическая капля за счет экситон-плазмонного взаимодействия»;

Козырев Дмитрий Сергеевич, студент Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, за доклад «Желто-зеленая фотолюминесценция электронно-дырочной жидкости в квазидвумерных слоях SiGe кремниевых гетероструктур».

Дипломом I степени и премией 4300 руб. награжден

Барановский Максим Владимирович, аспирант Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ», за доклад «Диагностика гетероструктур InGaN/GaN с множественными квантовыми ямами фотоэлектрическим методом».

Дипломами II степени и премиями (по 3 200 руб.) награждены аспиранты:

Гребенькова Юлия Эрнестовна (Институт физики СО РАН, г. Красноярск), за доклады «Влияние морфологии и структуры Ni-Ge-пленок на их магнитные свойства», «Магнитное и магнитооптическое поведение пленочных структур $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3/\text{YSZ}$ »;

Румянцев Владимир Владимирович (Институт физики микроструктур РАН, г. Нижний Новгород), за доклад «Особенности релаксации ТГц-фотопроводимости в объемных *p*-Ge и *p*-Si в сильных и слабых электрических полях».

Дипломами III степени и премиями (по 2 300 руб.) награждены аспиранты:

Волкова Наталья Сергеевна (Нижегородский государственный университет), за доклад «Оптоэлектронные свойства гетеронаноструктур с комбинированными слоями квантовых ям и точек In(Ga)As/GaAs»;

Коновалов Глеб Георгиевич (Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург), за доклад «Фото-вольтаический детектор на основе гетероструктуры II типа с глубокой квантовой ямой AlSb/InAsSb/AlSb в активной области для среднего инфракрасного диапазона».

Дипломами награждены аспиранты:

Ахундов Игорь Олегович (Институт физики полупроводников СО РАН, г. Новосибирск), за доклад «Формирование терра-

сированных поверхностей арсенида галлия в равновесных условиях»;

Корнев Владимир Владимирович (Академический университет РАН, Санкт-Петербург), за доклад «Аналитическая модель генерации через основные состояния в полупроводниковых лазерах на квантовых точках»;

Матвеев Сергей Александрович (Нижегородский государственный университет), за доклад «Рост и исследование фотолюминесценции гетероструктур $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x : \text{Er}/\text{Si}/\text{сапфир}$ »;

Мельников Юрий Сергеевич (Санкт-Петербургский государственный политехнический университет), соавтор Д.А. Старостенко (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН), за доклад «Создание и исследование сенсора водорода на основе структуры с барьером Шоттки»;

Миронова Мария Сергеевна (Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»), за доклад «Эффекты междолинного смешивания в гетероструктурах на основе непрямозонных полупроводников. Сверхрешетки $(\text{AlAs})_M/(\text{GaAs})_N$ и квантовые ямы $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ ».

Дипломом I степени и премией 4 300 руб. награжден

Пошакинский Александр Валерьевич, студент Академического университета РАН (Санкт-Петербург), за доклад «Отражение сверхкоротких оптических импульсов от резонансных фотонных структур».

Дипломами II степени и премиями (по 3 200 руб.) награждены студенты:

Смирнов Дмитрий Сергеевич (Академический университет РАН, Санкт-Петербург), за доклад «Накачка и зондирование электронных спинов в сферических нанокристаллах»;

Цакаев Абдул-Вахаб Валидович (Санкт-Петербургский государственный университет), за доклад «Эффекты пространственной дисперсии экситонов в квантовых ямах ZnSe».

Дипломами III степени и премиями (по 2 300 руб.) награждены студенты:

Лазаренко Александра Анатольевна (Академический университет РАН, Санкт-Петербург), за доклад «Исследование слоев



GaP(As)N на подложках Si и GaP, выращенных методом МПЭ»;

Таланцев Артём Дмитриевич (Московский физико-технический институт), за доклад «Ферромагнетизм нанокластеров сплавов хрома и гашение фотолюминесценции в гетероструктурах ZnSe/ZnMgSSe/ZnSSe:Cr».

Дипломами награждены студенты:

Баранов Артём Игоревич (Академический университет РАН, Санкт-Петербург), за доклад «Компьютерное моделирование характеристик фотоэлектрических преобразователей на основе гетероперехода GaP/GaNAsP»;

Бельтюков Ярослав Михайлович (Санкт-Петербургский государственный политехнический университет) за доклад «Моделирование электрон-фононного взаимодействия и электропроводности в квантово-холловских системах»;

Григорьев Филипп Сергеевич (Санкт-Петербургский государственный университет) за доклад «Численный расчет волновых функций экситона в квантовой яме»;

Давыдовская Диана Викторовна (Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»), соавтор Д.Д. Фирсов, аспирант того же университета, за доклад «Фотолюминесценция квантовых точек InSb/InAs в диапазоне 4 – 6 мкм»;

Князева Мария Викторовна (Новосибирский государственный технический университет), за доклад «Определение оптимальных параметров роста GaAs-нановискеров с помощью Монте-Карло-модели»;

Котова Мария Сергеевна (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова), соавтор М.А. Дронов, аспирант Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН, за доклад «Эффект резистивного переключения и энергонезависимая память на его основе в полимерных материалах и композиционных материалах с металлическими частицами»;

Крылов Иван Владимирович (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова), соавтор К.А. Дроздов, аспирант того же университета, за доклад «Влияние примеси олова на энергетиче-

ский спектр и оптические свойства тонких наноструктурированных пленок оксида индия (III)»;

Мещанкин Андрей Вячеславович (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова), за доклад «Определение разрыва зон на гетеропереходе InGaAs/InGaAsP методом спектроскопии фотоотражения»;

Мыльников Дмитрий Александрович (Московский физико-технический институт), за доклад «Осцилляции конденсата экситонных поляритонов в GaAs-микрорезонаторе»;

Саргинов Сергей Сергеевич (Санкт-Петербургский государственный университет), за доклад «Стабильность политипного состава монокристаллических и поликристаллических образцов AgI»;

Суворов Сергей Константинович (Санкт-Петербургский государственный политехнический университет), соавторы М.Я. Винниченко и Г.А. Мелентьев, аспиранты того же университета; А.Н. Яблонский и К.Е. Кудрявцев, младшие научные сотрудники Института физики микроструктур РАН; Л.В. Красильникова, научный сотрудник того же института, за доклад «Фотолюминесценция и разогрев носителей заряда в квантовых ямах GaAs/AlGaAs с различным типом проводимости»;

Туманов Дмитрий Сергеевич (Санкт-Петербургский государственный политехнический университет), за доклад «Модификация спектров поглощения квантовых ям с резонансными состояниями акцепторов в сильных электрических полях»;

Чирков Евгений Леонидович (Санкт-Петербургский государственный университет), за доклад «Исследование структуры нановискеров AlGaAs».

Пять докладов рекомендовано для участия в конкурсе по Программе «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («УМНИК») в номинации «Научные результаты, обладающие существенной новизной и перспективой их коммерциализации» с последующим их финансированием Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере:

Гильштейн Евгения Павловна, студентка Академического университета РАН (Санкт-Петербург), за доклад «(Ga,Mn)As ННК: синтез и электрические свойства»;

Безнасюк Дарья Вячеславовна, студентка Академического университета РАН (Санкт-Петербург), за доклад «Использование массивов GaAs : Ве ННК в качестве активных слоев солнечных элементов»;

Свистунов Александр Николаевич, студент Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ», за доклад «Получение методом газофазной эпитаксии твердых растворов, согласованных по постоянной решетки с подложкой фосфида индия, и создание на их основе фотоэлектрического преобразователя InGaAsP»;

Мельников Юрий Сергеевич, аспирант Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, за доклад «Создание и исследование сенсора водорода на основе структуры с барьером Шоттки»;

Корнев Владимир Владимирович, аспирант Академического университета РАН (Санкт-Петербург), за доклад «Аналитическая модель генерации через основные состояния в полупроводниковых лазерах на квантовых точках».

Организаторы конференции благодарны сотрудникам Научно-образовательного комплекса «СПбФТНОЦ РАН» за создание всех условий для работы конференции. Информация о следующей конференции будет помещена в сентябре 2013 г. на сайте: <http://www.spbstu.ru/rphf/conf2013.html>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bakueva, L.S.** Luminescence and photovoltaic effects in polymer-based nanocomposites [Text] / L.S. Bakueva, S.F. Musikhin, E.H. Sargent, H.E. Ruda, A. Shik // Handbook of Organic-Inorganic Hybrid Materials and Nanocomposites. — Vol. 2. — Chapter 5. — New-York: American Scientific Publishers, 2003. — P. 182 — 216.
2. **Hussain, F.** Polymer-matrix nanocomposites, processing, manufacturing, and application: An overview [Text] / F. Hussain, M. Hojjati, M. Okamoto, R.E. Gorga // J. of Composite Materials. — 2006. — Vol. 40. — № 17. — P. 1511 — 1575.
3. **Мусихин, С.Ф.** Гибридные полимер-полупроводниковые наноструктуры, технология, приборы [Текст] / С.Ф. Мусихин, В.И. Ильин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. — 2007. — № 4-1. — С. 105 — 112.
4. **Gordillo, H.** Colloidal QDs-polymer nanocomposites [Text] / H. Gordillo, I. Subrez, P. Rodriguez-Canty, [et al.] // Proc. of SPIE. — 2012. — Vol. 8424. — 84242A.
5. **Шик, А.Я.** Физика низкоразмерных систем [Текст] / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. — СПб.: Наука, 2001. — 155 с.
6. **Mansur, H.S.** Quantum dots and nanocomposites [Text] / H.S. Mansur // WIREs. Nanomedicine and Nanobiotechnology. — 2010. — Vol. 2. — P. 113 — 129.
7. **Musikhin, S.** Luminescent properties and electron structure of composite structures conjugated polymer-dielectric nanocrystals [Text] / S. Musikhin, L. Bakueva, E.H. Sargent, A. Shik // J. Appl. Phys. — 2002. — Vol. 91. — P. 6679 — 6683.
8. **Baranovskii, S.D.** Description of charge transport in disordered organic materials [Text] / S.D. Baranovskii, O. Rubel, F. Jansson, R. Österbacka // Adv. Polym. Sci. — 2010. — Vol. 223. — P. 45 — 71.
9. **Забродский, А.Г.** Электронные свойства неупорядоченных систем [Текст] / А.Г. Забродский, С.А. Немов, Ю.И. Равич. — СПб.: Наука, 2000. — 70 с.
10. **Godovsky, D.Y.** Device applications of polymer-nanocomposites [Text] / D.Y. Godovsky // Advances in polymer science. — 2000. — Vol. 153. — P. 163 — 205.
11. **Rath, A.K.** Solution-processed inorganic bulk nano-heterojunctions and their application to solar cells [Text] / A.K. Rath, M. Bernechea, L. Martinez [et al.] // Nature Photonics. — 2012. — Vol. 6. — P. 529 — 534.
12. **Konstantatos, G.** Hybrid graphene — quantum dot phototransistors with ultrahigh gain [Text] / G. Konstantatos, M. Badioli, L. Gaudreau [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2012. — Vol. 7. — P. 363 — 368.
13. **Jing, Chen.** Flexible photovoltaic cells based on a graphene — CdSe quantum dot nanocomposite [Text] / Jing Chen, Feng Xu, Jun Wu [et al.] // Nanoscale. — 2012. — Vol. 4. — № 2. — P. 441 — 443.
14. **Dang, C.** Red, green and blue lasing enabled by single-exciton gain in colloidal quantum dot films [Text] / C. Dang, J. Lee, C. Breen [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2012. — Vol. 7. — P. 335 — 339.
15. **Prabhakaran, P.** Quantum dots (QDs) for

photonic applications [Text] / P. Prabhakaran, W.J. Kim, K.-S. Lee, P.N. Prasad // Optical Materials Express. — 2012. — Vol. 2. — № 5. — P. 578 — 593.

16. 14-я Всероссийская молодежная конфе-

ренция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике [Текст]: Тезисы докладов. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. — 96 с.

ВАСИЛЬЕВА Мария Александровна — старший научный сотрудник, заместитель заведующего кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

vilyin@rphf.spbstu.ru

ГАВРИКОВА Татьяна Андреевна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

zykov@rphf.spbstu.ru

ИЛЬИН Владимир Иванович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

vilyin@rphf.spbstu.ru

МУСИХИН Сергей Федорович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

sergei.musikhin@rphf.spbstu.ru

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 2 (170) 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 № ФС77-51457 от 19.10.2012 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 *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 26.06.2013. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 26,16. Уч.-изд. л. 26,16. Тираж 1000. Заказ

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 ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ 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 10.00 до 18.00 – Александра Сергеевна

или по e-mail: physics@spbstu.ru