

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

1(237) 2016

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2016

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ**

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр
мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;
Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий,
Лозанна, Швейцария;
Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия.
Хейфец А.С., Ph.D. (Physics), профессор, Австралийский национальный университет,
Канберра, Австралия.

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.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**.

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

1(237) 2016

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2016

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL 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;
R.A. Suris – full member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sc. (Biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Kheifets – Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia.
N.M. Kozhevnikov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.V. Kozlovsky – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
J.B. Malherbe – Dr. Sc. (Physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solov'yov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

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.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

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.

Содержание

Математическое моделирование физических процессов

- Кожанов Д.А.** Особенности конечно-элементного моделирования вида структурного элемента гибких тканых композитов 7
- Копп В.Я., Карташов А.Л., Загорёнов М.В., Ключкин В.Ю.** Полумарковская модель структуры технологическая ячейка – накопитель 16

Физическое материаловедение

- Сахаре Ё.С., Такаре Н.Р., Убале А.У.** Влияние количества распыляемого раствора на физические свойства тонких нанокристаллических пленок селенида магния, осажденных методом спрей-пиролиза (статья на английском языке) 29
- Гейм Д.Н., Ингале Н.Б., Оманвар Ш.К.** Синтез и люминесцентные свойства соединения $Sr_5(PO_4)_3Cl:Eu^{2+}$, перспективного для создания твердотельного источника освещения (статья на английском языке) 41

Биофизика и медицинская физика

- Большакова А.В., Куканова Е.О., Гайнуллина А.Н., Жемков В.А., Корбан С.А., Безпрозванный И.Б.** Рецептор сигма-1 как потенциальная фармакологическая мишень при лечении нейропатологии 48

Ядерная физика

- Брагинец Ю.П., Бердников Я.А., Федоров В.В., Кузнецов И.А., Ласица М.В., Семенхин С.Ю., Вежлев Е.О., Воронин В.В.** Эффект ускорения холодных нейтронов в кристалле вблизи брэгговского резонанса (статья на английском языке) 66

Радиофизика

- Лобанов И.Д., Денисов А.В.** Математическая модель флуктуационных помех на основе вейвлетного преобразования 81

Теоретическая физика

- Коновалов А.В., Ипатов А.Н.** Многочастичные корреляции при описании фотопоглощения атома натрия 86

Конференции

- Гаврикова Т.А., Зыков В.А., Фирсов Д.А.** Итоги XVII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике 98
- Иванов В.К.** Памяти Николая Михайловича Кожевникова 109
- Авторский указатель 113

Contents

Simulation of physical processes

- Kozhanov D.A.** *The features of finite element modeling of a structural element of flexible woven composites*..... 7
- Kopp V.Ya., Kartashov A.L., Zamoryonov M.V., Klyukin V.Yu.** *The semi-Markov model for the 'technological module – storage device' structure*..... 16

Physical materials technology

- Sakhare Y.S., Thakare N.R., Ubale A.U.** *Influence of quantity of spray solution on the physical properties of spray deposited nanocrystalline MgSe thin films* 29
- Game D.N., Ingale N.B., Omanwar S.K.** *Synthesis and luminescence properties of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor for solid state lighting*..... 41

Biophysics and medical physics

- Bolshakova A.V., Kukanova E.O., Gainullina A.N., Zhemkov V.A., Korban S.A., Bezprozvanny I.B.** *Sigma-1 receptor as a potential pharmacological target for the treatment of neuropathology* 48

Nuclear physics

- Braginetz Yu.P., Berdnikov Ya.A., Fedorov V.V., Kuznetsov I.A., Lasitsa M.V., Semenikhin S.Yu., Vezhlev E.O., Voronin V.V.** *Crystal acceleration effect for cold neutrons in the vicinity of the Bragg resonance*..... 66

Radiophysics

- Lobanov I.D., Denisov A.V.** *A mathematical model of the fluctuation noise based on the wavelet transform*..... 81

Theoretical physics

- Konovalov A.V., Ipatov A.N.** *Many-electron correlations in calculations of sodium atom photoabsorption* 86

Conferences

- Gavrikova T.A., Zykov V.A., Firsov D.A.** *Results of the 17-th All-Russian youth conference on semiconductor and nanostructure physics, and semiconductor opto- and nanoelectronics* 98
- Ivanov V.K.** *In memory of Nikolay Mikhailovich Kozhevnikov (obituary)*..... 109
- Author index*..... 113



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

DOI: 10.5862/JPM.237.1

УДК: 539.3

Д.А. Кожанов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

ОСОБЕННОСТИ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВИДА СТРУКТУРНОГО ЭЛЕМЕНТА ГИБКИХ ТКАНЫХ КОМПОЗИТОВ

На примере структурного элемента гибких тканых композитов представлены особенности конечно-элементного моделирования как самого объекта, так и его поведения при одноосном растяжении. При моделировании структурного элемента рассматривались основные составляющие материала: армирующая ткань и его матрица. Армирующая ткань представляет собой полотняное переплетение нитей. Эти нити считались упругим материалом. Матрица рассматриваемого материала была представлена мягким полимером с возможностью возникновения в нем необратимых деформаций. При моделировании поведения композита под действием нагрузок учтена возможность возникновения повреждений в его структуре. Построены поля напряжений, деформаций и показаны зоны внутренних повреждений материала при одноосном деформировании. Выявлены опасные зоны переплетения.

ГИБКИЙ ТКАНЫЙ КОМПОЗИТ, МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПОВРЕЖДЕНИЙ, НЕЛИНЕЙНОЕ ДЕФОРМИРОВАНИЕ.

Введение

Основные модели, используемые для описания структуры тканых материалов, применимы лишь к «жесткому» композиту, когда в качестве наполнителя выступают твердые полимеры, например эпоксидная смола после воздействия отвердителя [1 – 6]. Для таких материалов допустимо пренебречь геометрической нелинейностью [5, 6], так как деформации, возникающие при нагружении, невелики. Большое распространение получили модели, созданные в Лёвенском католическом университете (Бельгия) научно-исследовательской группой CMG (Composite Materials Group) [7 – 11]. Данная группа авторов провела полноценные исследования поведения тканых композитов, начиная от экспериментальной составляющей, до разработки собственного программного обеспечения WiseTex [10], которое позволяет моделиро-

вать поведение рассматриваемых материалов на основе метода конечных элементов и визуально определять наиболее опасные области армирующей ткани.

Геометрическая нелинейность оказывает существенное влияние на механические характеристики гибких тканых (тканевых) композиционных материалов [12, 13]. Она связана с типом наполнителя композита и особенностью деформирования нитей армирующей ткани, которые распрямляются в процессе деформирования, изменяют жесткость [14], переходят из состояния изгиба в центральное растяжение и вычлняются из матрицы, что приводит к повреждениям и нарушению адгезии между волокнами и матрицей в структуре материала.

Для построения модели структурного периодического элемента (далее ЭПЯ – элементарная периодическая ячейка) возникает необходимость точного описания

внутренних параметров состояния [15]. Из анализа геометрических характеристик рассматриваемого полотняного переплетения следует, что длина нитей основы и утка по отношению к толщине нити отличается не более чем на один порядок; отсюда можно заключить, что необходим учет изгибающих моментов в нитях [15 – 17]. Кроме того, наличие изгиба вызывает возникновение в нитях ткани областей сжатия, а это требует использования кинематического упрочнения (вместо изотропного) для описания возможного упругопластического деформирования, так как в рассматриваемом случае нить ткани считается композиционным материалом, состоящим из упругих волокон и упругопластической матрицы.

В данной статье на примере конечно-элементного моделирования поведения ЭПЯ образца гибких тканых композитов при наложении нагрузки, показаны основные особенности построения модели деформирования периодических элементов гибких тканых композитов и визуально определе-

ны наиболее опасные области полотняного переплетения. Получены поля напряжений и деформаций, а также области максимального скопления внутренних повреждений материала, возникающих из-за нарушения адгезии в структуре материала.

Периодический элемент и особенности построения структурной модели

Периодические структуры позволяют описывать поведение всего материала через типовые периодические элементы внутренней структуры. Рассматриваемое полотняное переплетение (рис. 1), имеет регулярную периодическую структуру, в которой можно выделить элементарный периодический элемент-ячейку (ЭПЯ). Принято считать, что для рассматриваемых материалов указанная ячейка содержит нить основы, нить утка и архитектуру переплетения нитей; на рис. 1 принятый вид ячейки выделен прямоугольником.

Без ограничения общности, с учетом особенности вида переплетения будем счи-

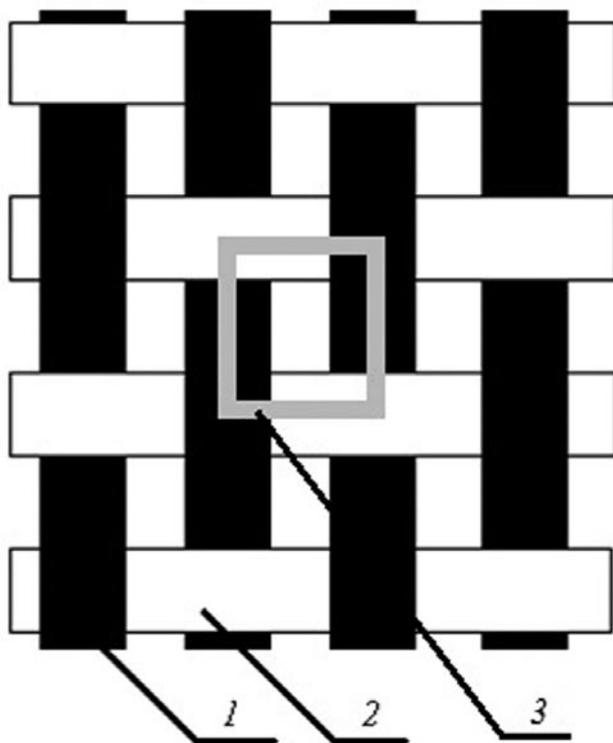


Рис.1. Схема полотняного переплетения (вид сверху):
1 – нить основы; 2 – нить утка; 3 – элементарный периодический элемент (ЭПЯ)

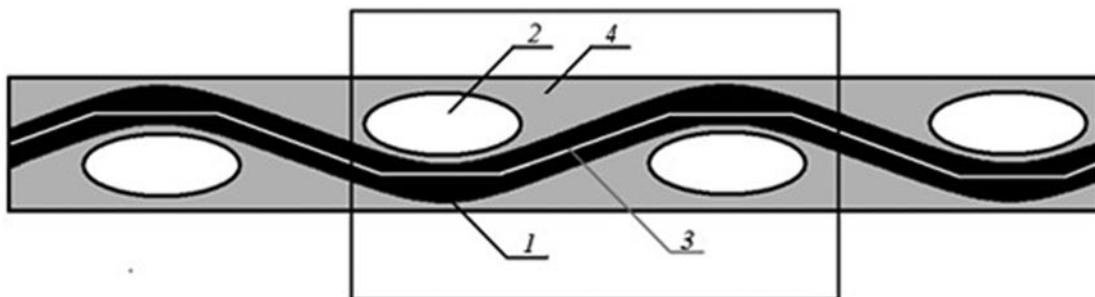


Рис. 2. Продольное сечение вдоль нити основы:
 1, 2 – нити основы и утка соответственно; 3 – линейная аппроксимация синусоидальной формы нити основы, 4 – матрица (заполнитель) гибкого тканого композита

тать, что закон изменения формы переплетения нитей сохраняется по всей области ткани. Рассмотрим вид структуры ЭПЯ вдоль направления нитей основы. В продольном сечении ЭПЯ (рис. 2) армирующая нить переплетения имеет форму, близкую к синусоидальной кривой, которую для упрощения моделирования структуры можно аппроксимировать набором прямолинейных участков (аналогично способу, использованному в работах [1, 14]).

Эллипсоидное поперечное сечение нитей аппроксимируем формой прямоугольника [12]. Результатом выделения струк-

турного элемента и упрощения геометрии переплетения является ЭПЯ, представленная на рис. 3, которая и будет описывать поведение всего материала в целом.

ЭПЯ гибкого тканого композиционного материала состоит из нитей армирования и заполнителя. Нити армирования (основы и утка) являются однонаправленным композитом, состоящим из матрицы нитей (заполнителя нитей) и армирующих волокон (жгутов). Для корректного моделирования армирующей ткани армирование нитей вводится индивидуально для каждого линейного участка и совпадает с ориента-

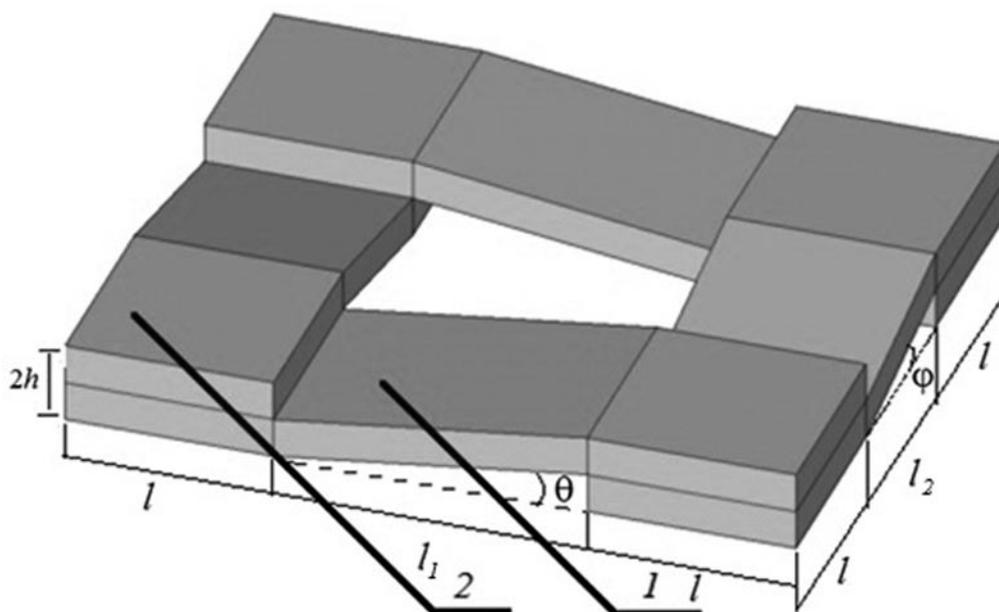


Рис. 3. Геометрия ЭПЯ армирующих нитей гибкого тканого композита:
 1, 2 – нити основы и утка соответственно; l – длина горизонтального участка нити в ЭПЯ; l_1, l_2 – значения длины наклонных участков нити основы и нити утка соответственно

цией направления нити. С учетом природы армирующих нитей (трощеные жгуты), предполагается, что материал элементов армирования (волокон нити) – упругий, с постоянным содержанием объемной доли волокон армирования.

На основе проведенных экспериментов [16] вводится предположение об упруго-пластическом поведении заполнителя нитей и заполнителя всей ЭПЯ композита. Для описания упругопластического поведения удобно применить теорию течения с линейным кинематическим упрочнением. Тогда это поведение выражается при одноосном растяжении вдоль нити основы следующей связью между напряжениями и деформациями:

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon, \varepsilon \leq \varepsilon_i \\ \sigma_i + E_t(\varepsilon - \varepsilon_i), \varepsilon > \varepsilon_i \end{cases},$$

где σ, ε – текущие напряжение и деформация; E – модуль упругости; E_t – модуль упрочнения при упругопластическом деформировании; σ_i – предел текучести; $\varepsilon_i = \sigma_i/E$ – деформации, соответствующие пределу текучести.

В процессе деформирования гибких тканых композиционных материалов, в связи с нарушением адгезии между волокнами армирования и связующим, возможно вычленение волокон в нитях армирования и возникновение повреждений в матрице нитей. Эти процессы можно описать «размазанными трещинами» [18 – 21]. Такое описание основывается на изменении матрицы жесткости материала при появлении раз-

рыва. Трещина явным образом не вводится. Появление разрывов возможно только в матрице композита, а волокна армирования не разрушаются. Для учета возможных внутренних повреждений вводится следующий критерий разрушения матрицы композита и возникновения «размазанной трещины» в узле интегрирования [19]:

$$\frac{F}{f_c} - S \geq 0,$$

где $F = F(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ – функция главных напряжений; f_c – предел прочности материала; S – поверхность отказа, которая определяется из механических характеристик наполнителя.

Расчет ЭПЯ гибкого тканого композита целесообразно описать в приращениях в связи с геометрической нелинейностью задачи и возможным изменением жесткости материала в процессе деформирования, связанным с появлением «размазанных трещин».

Граничные условия

Для моделирования одноосного растяжения ЭПЯ гибкого тканого композита, полей напряжений и деформаций, вдоль нитей основы на границе A запрещается перемещение в направлении растяжения $u_x|_A = 0$, на границе B задается перемещение $u_x|_B = u^*$, на границах C и D задается условие симметрии.

Поставленная задача решается методом конечных элементов (рис. 4). Матрица (заполнитель) ЭПЯ гибкого тканого компо-

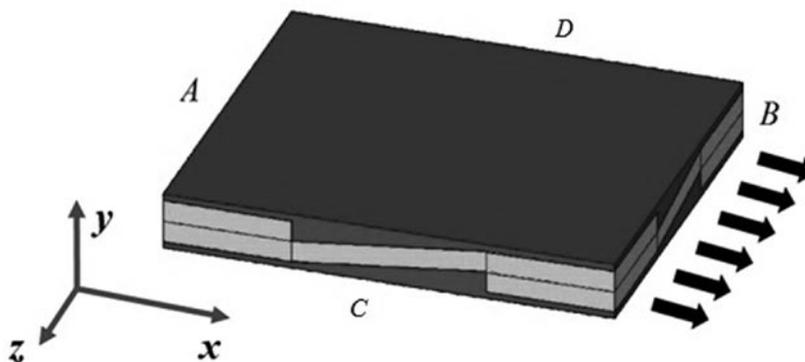


Рис. 4. ЭПЯ гибкого тканого композита при одноосном растяжении (направление растяжения показано стрелками); A, B, C, D – границы объекта

Таблица

Механические характеристики используемых материалов

Тип материала	E , МПа	ν	σ_r , МПа	E_r , МПа
Армирующие волокна нитей основы и утка ЭПЯ	$1,5 \cdot 10^3$	0,20	—	—
Матрица (заполнитель) нитей основы и утка	40	0,35	20	20
Матрица ЭПЯ гибкого тканого композита	30	0,30	18	16

Обозначения: E – начальный модуль упругости, ν – коэффициент Пуассона, σ_r – предел текучести, E_r – модуль упрочнения при упругопластическом деформировании.

зита моделируется основными 8-узловыми конечными элементами solid-185. Этот элемент позволяет моделировать твердотельные объекта в программном комплексе ANSYS и учитывать возможные большие деформации [19]. Нити армирования мо-

делируются 8-узловыми конечными элементами solid-65. Указанные элементы позволяют учесть наличие элементов армирования с заданной ориентацией внутри моделируемого тела и с заданной объемной долей содержания армирующих волокон.

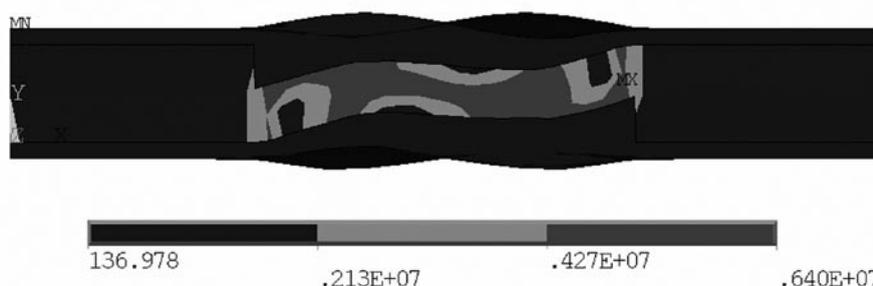


Рис. 5. Поле распределения эквивалентных напряжений (Па) по Мизесу для гибкого тканого композита при одноосном растяжении (фронтальный вид)

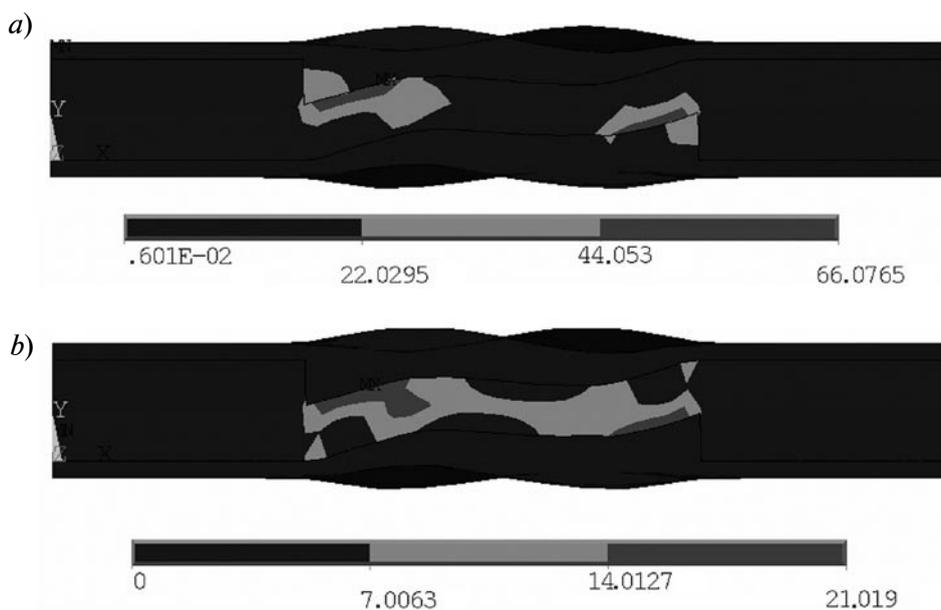


Рис. 6. Поля распределений упругих (а) и пластических (б) деформаций для гибкого тканого композита при одноосном растяжении (фронтальный вид)

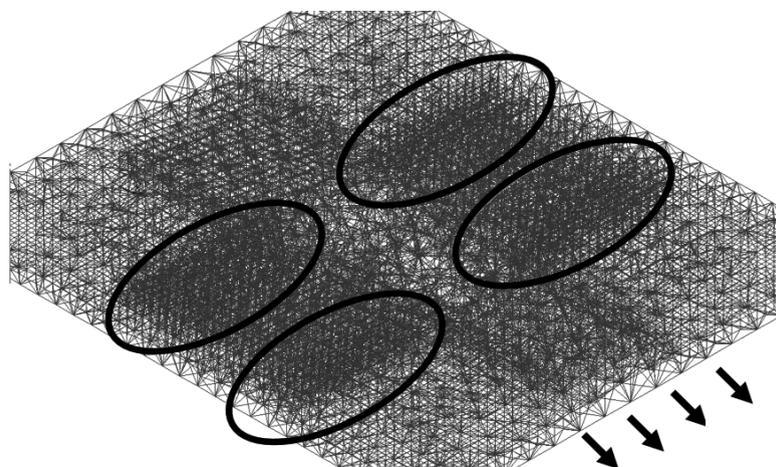


Рис. 7. Результат моделирования внутренних повреждений способом «размазанных трещин» в объекте (эллипсами показаны области максимального скопления повреждений)

Кроме того, есть возможность учета зарождения и влияния «размазанных трещин» на механические свойства материала внутри матрицы армирующих нитей.

Механические характеристики материалов, используемых при моделировании, представлены в таблице.

Полученные поля напряжений и деформаций (рис. 5, 6) позволяют найти наиболее опасные зоны в областях переплетения нитей ткани. Именно эти зоны определяют прочностные способности материала и конструкций, создаваемых на его основе.

На рис. 7 представлены результаты моделирования объекта, подвергнутого одноосному растяжению, методом «размазанных трещин».

Анализ результатов, представленных на рис. 6 и 7, приводит к заключению, что наиболее опасными областями полотняного переплетения являются зоны наклонных участков армирующих нитей. Это подтверждает необходимость учета изгибающих моментов и детального описания архитектуры переплетения армирующей ткани. Даже для материалов, не имеющих предварительных локальных повреждений (пропуск или обрыв нитей армирования, искривление нитей ткани), напряжения на наклонных участках переплетения (см. рис. 5) в 4 – 5 раз превышают напряжения в материале в целом.

Упругие и упругопластические деформации в первую очередь развиваются также на наклонных участках нитей.

Согласно результатам, приведенным на рис. 7, наибольшее количество размазанных трещин возникает в зонах максимальных напряжений и деформаций, что еще раз подтверждает опасность перегрузки наклонных участков нитей.

Заключение

В работе представлен пример и особенности построения модели поведения элементарной периодической ячейки гибкого тканого композита как структурного элемента, описывающего процесс деформирования образцов гибких тканых композитов. Приведены поля напряжений и деформаций представительного объема исследуемого материала, показаны области максимального скопления «размазанных трещин».

Основным выводом данного исследования является необходимость детального учета напряженно-деформированного состояния наклонных участков нитей переплетения армирующей ткани при построении моделей деформирования представленных материалов. Анализ сходимости численного решения показал устойчивость решения к входным параметрам модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Naik R.A.** Analysis of woven and braided fabric reinforced composites. NASA CR-194930. 1994. 46 p.
- [2] **Zhu Q., Shrotriya P., Sottos N.R., et al.** Three-dimensional viscoelastic simulation of woven composite substrates for multilayer circuit boards // *Composites Science and Technology*. 2003. Vol. 63. Pp. 1971–1983.
- [3] **Shrotriya P., Sottos N.R.** Viscoelastic response of woven composite substrates // *Composites Science and Technology*. 2005. Vol. 65. Pp. 621–634.
- [4] **Man X., Swan C.C.** The mathematical modeling framework for analysis of functional clothing // *J. Eng. Fibers and Fabrics*. 2007. Vol. 2. No. 3. Pp. 10–27.
- [5] **Дедков Д.В., Зайцев А.В.** Концентрация напряжений в слое тканого композита с локальными дефектами при двухосном однородном равнокомпонентном макродеформировании // *Вестник Самарского государственного технического университета. Серия физико-математические науки*. 2013. Вып. 4 (33). С. 66–75.
- [6] **Кравченко О.Д., Вильдеман В.Э.** Модели неупругого деформирования перекрестно армированных слоистых композитов // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 1997. № 5. С. 49–55.
- [7] **Lomov S.V., Gusakov A.V., Huysmans G., et al.** Textile geometry preprocessor for meso-mechanical models of woven composites. *Composite Science and Technology*. 2000. Vol. 60. Pp. 2083–2095.
- [8] **Lomov S.V., Parnas R.S., Bandyopadhyay-Ghosh S., et al.** Experimental and theoretical characterisation of the geometry of flat two- and three-axial braids // *Textile Research J.* 2002. Vol. 72. No. 1. Pp. 706–712.
- [9] **Lomov S.V., Thanh Truong Chi, Verpoest I., et al.** Mathematical modelling of internal geometry and deformability of woven preforms // *Int. J. of Forming Processes*. 2003. Vol. 6. Pp. 413–442.
- [10] **Verpoest I., Lomov S.V.** Virtual textile composites software Wisetex: integration with micro-mechanical, permeability and structural analysis // *Composites Science and Technology*. 2005. Vol. 65. Pp. 2563–2574.
- [11] **Lomov S.V., Mikolanda T., Kosek M., Verpoest I.** Model of internal geometry of textile composite reinforcements: Data structure and virtual reality implementation // *Journal of the Textile Institute*. 2007. Vol. 98. No. 1. Pp. 1–13.
- [12] **Багмутов В.П.** Особенности построения единой структурной модели упруго-пластического деформирования слоистых волоконных композитов при статическом и циклическом нагружении // *Известия Волгоградского государственного технического университета*. 2005. № 3. С. 90–96.
- [13] **Мангушева А.Р.** Оценка кратковременной и длительной прочности пленочно-тканевого композиционного материала. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2012.
- [14] **Берендеев Н.Н.** Описание поведения тканого композита при статическом нагружении с использованием структурной модели // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского*. 2013. № 4 (4). С. 173–179.
- [15] **Степанов С.Г.** Математическая модель равновесия основной нити в зоне формирования однослойной ткани // *Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности*. 2006. № 1. С. 47–51.
- [16] **Берендеев Н.Н., Любимов А.К., Шабаров В.В. и др.** Экспериментальное исследование деформационных свойств тканых композитов // *Проблемы прочности и пластичности*. Межвуз. сб. Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2006. Вып. 68. С. 213–220.
- [17] **Гречухин А.П., Селиверстов В.Ю.** Исследование формы нити в ткани полотняного переплетения // *Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности*. 2013. № 5. С. 41–44.
- [18] **Ingraffea A.R.** Computational fracture mechanics // *Encyclopedia of Computational Mechanics*. Vol. 2. Solids and Structures. John Wiley & Sons, Ltd. Pp. 375–402.
- [19] ANSYS release 14.5. Documentation for ANSYS [Электронный ресурс на диске]: ANSYS Inc. 2013.
- [20] **Кожанов Д.А.** Структурная модель гибких тканых, предварительно поврежденных композитов в условиях одноосного растяжения // *Научно-технические ведомости СПбПУ. Физико-математические науки*. 2014. № 4 (206). С. 107–114.
- [21] **Берендеев Н.Н., Кожанов Д.А., Любимов А.К.** Структурная модель гибкого тканого композита // *Проблемы прочности и пластичности*. 2015. Т. 77. № 2. С. 162–171.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

КОЖАНОВ Дмитрий Александрович – аспирант кафедры теоретической, компьютерной и экспериментальной механики Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского. 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, Российская Федерация
pbk996@mail.ru

Kozhanov D.A. THE FEATURES OF FINITE ELEMENT MODELING OF A STRUCTURAL ELEMENT OF FLEXIBLE WOVEN COMPOSITES.

The features of finite element modeling of both an element itself and its behavior under uniaxial tension have been demonstrated with a structural element of flexible woven composites. The main material partials such as reinforcing fabric and material's matrix were examined in modeling. The reinforcing fabric is a plain weave. These threads were taken as an elastic material. The matrix of the material was considered as a soft polymer with the possible occurrence of irreversible elastic-plastic deformations. Moreover, the possible occurrence of damages in the structure of the material under high loads was taken into account in modeling. The fields of stresses and strains were built; the zones of material internal damages under uniaxial tension were demonstrated. The risk zones of weave were revealed.

FLEXIBLE WOVEN COMPOSITE, FINITE ELEMENT METHOD, STRESS-STRAIN FIELD, DAMAGE.

REFERENCES

- [1] **R.A. Naik**, Analysis of woven and braided fabric reinforced composites, NASA CR-194930, 1994.
- [2] **Q. Zhu, P. Shrotriya, N.R. Sottos, P.H. Geubelle**, Three-dimensional viscoelastic simulation of woven composite substrates for multilayer circuit boards, Composites Science and Technology. 63 (2003) 1971–1983.
- [3] **P. Shrotriya, N.R. Sottos**. Viscoelastic response of woven composite substrates, Composites Science and Technology, 65 (2005) 621–634.
- [4] **X. Man, C.C. Swan**, The mathematical modeling framework for analysis of functional clothing, J. Eng. Fibers and Fabrics. 2(3) (2007) 10–27.
- [5] **D.V. Dedkov, A.V. Zaytsev**, Kонтсentratsiya napryazheniy v sloye tkanogo kompozita s lokalnymi defektami pri dvukhosnom odnorodnom ravnokomponentnom makrodeformirovani [The stress concentration in the woven composite layer with local defects under biaxial uniform deformation], Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya fiziko-matematicheskiye nauki. 4(33) (2013) 66–75.
- [6] **O.D. Kravchenko, V.E. Vildeman**, Modeli neuprugogo deformirovaniya perekrestno armirovannykh sloistykh kompozitov [Models of inelastic deformation of cross-ply layered composites], Vestnik Permskogo natsionalnogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika. No. 5 (1997) 49–55.
- [7] **S.V. Lomov, A.V. Gusakov, G. Huysmans, et al.**, Textile geometry preprocessor for meso-mechanical models of woven composites, Composites Science and Technology. 60 (2000) 2083–2095.
- [8] **S.V. Lomov, R.S. Parnas, S. Bandyopadhyay-Ghosh, et al.**, Experimental and theoretical characterization of the geometry of flat two- and three-axial braids, Textile Research J. 72(1) (2002) 706–712.
- [9] **S.V. Lomov, Thanh Truong Chi, I. Verpoest, et al.**, Mathematical modeling of internal geometry and deformability of woven performs, Int. J. of Forming Processes. 6 (3-4) (2003) 413–442.
- [10] **I. Verpoest, S.V. Lomov**, Virtual textile composites software Wisetex: integration with micro-mechanical, permeability and structural analysis, Composites Science and Technology. 65(15-16) (2005) 2563–2574.
- [11] **S.V. Lomov, T. Mikolanda, M. Kosek, I. Verpoest**, Model of internal geometry of textile composite reinforcements: Data structure and virtual reality implementation, Journal of the Textile Institute. 98(1) (2007) 1–13.
- [12] **V.P. Bagmutov**, Osobennosti postroyeniya yedinoj strukturnoy modeli uprugoplasticheskogo deformirovaniya sloistykh voloknovykh kompozitov pri staticheskom i tsiklicheskom nagruzhenii [Construction features of the universal structural model for elastic-plastic deformation of layered-fiber composites under static and cyclic loading], Izvestiya Volgogradskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta. No. 3 (2005) 90–96.
- [13] **A.R. Mangusheva**, Otsenka kratkovremennoy i dlitelnoy prochnosti plenochno- tkanevogo kompozitsionnogo materiala [An estimation of the short-time and the long-time strength of the

film-woven composite material], Thesis Ph. D., Kazanskiy (Privolzhskiy) Federalnyy universitet, Kazan, 2012.

[14] **N.N. Berendeyev**, Opisaniye povedeniya tkanogo kompozita pri staticheskom nagruzhenii s ispolzovaniyem strukturnoy modeli [Behaviour description of the woven composite under static loading using the structural model] // Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo. No. (4) (2013) 173–179.

[15] **S.G. Stepanov**, Matematicheskaya model ravnovesiya osnovnoy niti v zone formirovaniya odnosloynoy tkani [Mathematical model of the beam thread balance in the zone of single-texture fabric forming], Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Tekhnologiya tekstilnoy promyshlennosti. No. 1 (2006) 47–51.

[16] **N.N. Berendeyev, A.K. Ljubimov, V.V. Shabarov, et al.**, Eksperimentalnoye issledovaniye deformatsionnykh svoystv tkanykh kompozitov [Experimental investigation of deformation properties of woven composites], Problemy prochnosti i plastichnosti. Mezhvuz. sb. N. Novgorod: Izd-vo

NNGU, 2006. Iss. 68. Pp. 213–220.

[17] **A.P. Grechukhin, V.Yu. Seliverstov**, Issledovaniye formy niti v tkani polotnyanogo perepleteniya [Investigation of the thread form in the plain braiding fabric], Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy, Tekhnologiya tekstilnoy promyshlennosti. No. 5 (2013) 41–44.

[18] **A.R. Ingraffea**, Computational fracture mechanics, Ed. Erwin Stein, Encyclopedia of Computational Mechanics. Vol. 2: Solids and Structures: John Wiley & Sons, Ltd., Pp. 375–402.

[19] ANSYS release 14.5. Documentation for ANSYS. ANSYS Inc., 2013 (CD).

[20] **D.A. Kozhanov**, Structural model for flexible woven and pre-damaged composites under conditions of uniaxial tension, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. No. 4 (206) (2014) 107–114.

[21] **N.N. Berendeyev, D.A. Kozhanov, A.K. Lyubimov**, Strukturnaya model gibkogo tkanogo kompozita [Structure model of the flexible woven composite], Problemy prochnosti i plastichnosti. 77(2) (2015) 162–171.

THE AUTHOR

KOZHANOV Dmitry A.

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

23, Gagarina Ave., Nizhi Novgorod, Russian Federation.

pbk996@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.237.2

УДК: 621.0:519.873

В.Я. Копп¹, А.Л. Карташов², М.В. Загорёнов¹, В.Ю. Ключкин³

¹ Севастопольский государственный университет;

² Государственное автономное учреждение
«Севастопольская телерадиокомпания»;

³ Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого

ПОЛУМАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА – НАКОПИТЕЛЬ

При построении модели структуры технологическая ячейка – накопитель (ТМ–SD) использовалась теория полумарковских процессов. На базе полученных выражений найдены стационарные характеристики для определения стационарного распределения вложенной цепи Маркова. Проведенное исследование позволило определить стационарное распределение полумарковского процесса и вычислить коэффициент готовности указанной структуры; приведена расчетная формула. Решены уравнения марковского восстановления для системы ТМ–SD с учетом отказов ТМ и SD при допущении об экспоненциальном поведении отказов. Полученные выражения описывают процесс функционирования такой системы и позволяют ее заменить эквивалентным элементом, имеющим два факторных состояния; это существенно упрощает задачу моделирования более сложных систем. Рассмотрена правомерность использования экспоненциальных законов распределения случайных величин (это времена наработки на отказы ТМ и SD). Проведенное имитационное моделирование показало, что уже для ТМ (или SD), состоящей из шести узлов, можно принять гипотезу об экспоненциальном распределении времени наработки на отказ ТМ в целом (или SD).

ПОЛУМАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ, УРАВНЕНИЕ МАРКОВСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ,
ВЛОЖЕННАЯ ЦЕПЬ МАРКОВА, СТАЦИОНАРНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ.

Введение

Временное резервирование по-прежнему остается одним из наиболее эффективных средств повышения надежности технических устройств, особенно асинхронных автоматизированных линий, в которых технологические ячейки соединены друг с другом через накопители. Данному вопросу посвящено значительное число исследований [1 – 7], во многих из которых авторы ограничиваются, как правило, определением коэффициента готовности рассматриваемой системы. Однако заметим, что при моделировании сложных стохастических систем во многих случаях используется иерархический подход к построению их моделей [8 – 11], при котором необходимо

стыковать отдельные элементы системы друг с другом. Для этого требуется знать функции распределения времен наработки на отказ и восстановления этих элементов. К другим недостаткам предлагаемых моделей следует отнести игнорирование надежности накопителя [12 – 14], поскольку это существенно усложняет задачу. Однако при построении моделей многофазных систем необходимо оперировать функциями распределений времени между отказами и восстановлениями элементов с временным резервированием. При этом временной резерв в общем случае будет зависеть от надежности накопителя.

Целью данной работы является построение полумарковской модели процесса функционирования структуры технологи-

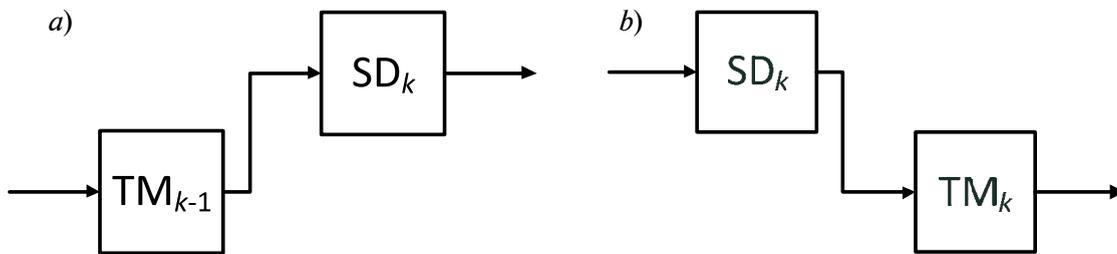


Рис. 1. Структура технологическая ячейка (ТМ) – накопитель (SD), работающая на выдачу (а) и на прием (b) продукции; k – порядковый номер

ческая ячейка – накопитель, позволяющей определять ее коэффициент готовности, а также указанные функции распределения для рассматриваемой структуры в целом. Фактически это означает эквивалентную замену указанной структуры одним простейшим элементом, имеющим два факторных состояния: отказовое и работоспособное.

Возможные структуры технологических ячеек (далее ТМ, от англ. technological module) с накопителями (далее SD, от англ. storage device) промежуточной продукции, которые обеспечивают временной резерв (структуры работают в составе асинхронной автоматизированной линии), представлены на рис. 1.

Различие структур, представленных на рис. 1, обусловлено тем, что один и тот же SD может работать совместно с предыдущим ТМ на выдачу продукции и совместно с последующим на ее прием. С точки зрения математического описания структуры, представленные на рис. 1, *a* и *b*, идентичны, поэтому модель будет строиться только для случая, приведенного на рис. 1, *a*.

Постановка задачи

Поставим задачу следующим образом: пусть известны функции распределения $F_{01}(t)$ и $F_{10}(t)$ случайных величин ξ_1 и η_1 , которые являются временами наработки на отказ и восстановления ТМ соответственно, а также функции распределения $F_{03}(t)$ и $F_{30}(t)$ случайных величин ξ_3 и η_3 , являющихся временами наработки на отказ и восстановления накопителя. Кроме этого, известна функция распределения $F_{12}(t)$ случайной величины, ξ_2 , являющейся временем резерва.

Вводим следующие допущения:

пренебрежение вероятностью одновременного отказа ячейки и накопителя (ввиду малой вероятности этого события);

экспоненциальный вид функций распределения $F_{01}(t)$ и $F_{03}(t)$.

В проводимом исследовании необходимо определить функции распределения времен между отказами и восстановлениями участка в целом, то есть эквивалентно заменить его простейшим элементом, имеющим два факторных состояния.

Ставится задача определения стационарных характеристик системы и получение коэффициента готовности участка ТМ – SD.

Построение модели

Граф состояний системы представлен на рис. 2. Описание вершин построенного графа (рис. 2) представлено в табл. 1.

Времена пребывания $\theta_0 - \theta_3$ в состояниях S_0, S_1, S_{2x} и S_3 , соответственно, определим из следующих выражений:

$$\begin{aligned} \theta_0 &= (\xi_1 \wedge \xi_3); \quad \theta_1 = (\eta_1 \wedge \xi_2); \\ \theta_{2x} &= x; \quad \theta_3 = \eta_2, \end{aligned}$$

где \wedge – знак, обозначающий минимум случайных величин.

Тогда функции распределения времен пребывания в состояниях имеют вид, приведенный в табл. 1.

Стационарное распределение $\rho(x)$ вложенной цепи Маркова определяется по формуле

$$\rho(x) = \int_x p(x, y) \rho(y) dy,$$

где $p(x, y)$ – плотность вероятности перехода вложенной цепи Маркова.

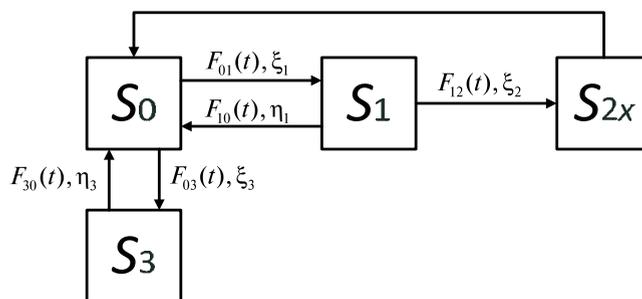


Рис. 2. Граф состояний системы ТМ – SD

Таблица 1

Вид функций распределения промежутков времени пребывания в различных состояниях (рис. 2)

Состояние	Описание состояния	Функция распределения времен пребывания
S_0	ТМ исправна, SD исправен, временной задел ξ_2 в SD, состояние работоспособное	$\bar{F}_0(t) = \bar{F}_{01}(t) \cdot \bar{F}_{03}(t)$
S_1	ТМ отказала, SD исправен, временной задел ξ_2 в SD, состояние работоспособное	$\bar{F}_1(t) = \bar{F}_{10}(t) \cdot \bar{F}_{12}(t)$
S_{2x}	ТМ отказала, SD исправен, резерв времени израсходован, поскольку запас продукции в SD исчерпан ($\xi_2 = 0$), состояние неработоспособное	$F_{2x}(t) = 1_x(t)$, где $1_x(t) = \begin{cases} 0, & t < x; \\ 1, & t \geq x. \end{cases}$
S_3	ТМ исправна, SD отказал, состояние неработоспособное	$F_3(t) = F_{30}(t)$

Сокращения: ТМ – технологическая ячейка, SD – накопитель.

Выражения для $P(x, y)$ имеют следующий вид:

$$\begin{cases}
 P_0^1 \{ \xi_1 < \xi_3 \} = \int_0^\infty F_{01}(z) f_{03}(z) dz, \\
 P_0^3 \{ \xi_1 > \xi_3 \} = \int_0^\infty F_{03}(t) f_{01}(t) dt, \\
 P_1^0 = \int_0^\infty F_{10}(t) f_{12}(t) dt, \\
 P_1^{2x} = \int_0^\infty f_{10}(x+t) f_{12}(t) dt, \\
 P_{2x}^0 = 1, \\
 P_3^0 = 1.
 \end{cases} \quad (1)$$

$\rho(x)$ [15 – 17]:

$$\begin{cases}
 \rho_0 = \int_0^\infty \rho_{2x} \cdot 1_x(t) \cdot dx + \rho_3 \cdot 1 + \\
 + \rho_1 \int_0^\infty F_{10}(w) f_{12}(w) dw, \\
 \rho_1 = \rho_0 \int_0^\infty F_{01}(z) f_{03}(z) dz = \rho_0 P \{ \xi_1 < \xi_3 \}, \\
 \rho_{2x} = \rho_1 \int_0^\infty f_{10}(x+t) f_{12}(t) dt, \\
 \rho_3 = \rho_0 \int_0^\infty F_{03}(u) f_{01}(u) du.
 \end{cases} \quad (2)$$

Условие нормировки:

$$\int_0^\infty \rho_{2x} dx + \rho_3 + \rho_1 \int_0^\infty F_{10}(w) f_{12}(w) dw + \quad (3)$$

Используя систему (1), запишем систему уравнений для определения стационарного распределения вложенной цепи Маркова

$$\begin{aligned}
 & + \rho_0 \int_0^{\infty} F_{01}(z) f_{03}(z) dz + \\
 & + \int_0^{\infty} \rho_1 \int_0^{\infty} f_{10}(x+t) f_{12}(t) dt dx + \\
 & + \rho_0 \int_0^{\infty} F_{03}(u) f_{01}(u) du = 1.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Решая систему уравнений (2) с использованием условия (3), получим:

$$\begin{cases}
 \rho_0 = \frac{1}{2+C}; \\
 \rho_1 = \frac{\int_0^{\infty} F_{01}(z) f_{03}(z) dz}{2+C}; \\
 \rho_{2x} = \frac{C}{2+C}; \\
 \rho_3 = \frac{\int_0^{\infty} \bar{F}_{01}(z) f_{03}(z) dz}{2+C},
 \end{cases}$$

где $C = \int_0^{\infty} F_{01}(z) f_{03}(z) dz \int_0^{\infty} f_{12}(t) \bar{F}_{10}(t) dt$.

Определим стационарное распределение полумарковского процесса. Стационарные вероятности полумарковского процесса следуют выражениям:

$$\begin{aligned}
 \pi_0 &= \frac{\rho_0 \cdot \bar{\theta}_0}{\bar{\theta}}, \quad \pi_1 = \frac{\rho_1 \cdot \bar{\theta}_1}{\bar{\theta}}, \quad \pi_2 = \frac{\rho_2 \cdot \bar{\theta}_2}{\bar{\theta}}, \\
 \pi_3 &= \frac{\rho_3 \cdot \bar{\theta}_3}{\bar{\theta}},
 \end{aligned}$$

где $\bar{\theta} = \rho_0 \cdot \bar{\theta}_0 + \rho_1 \cdot \bar{\theta}_1 + \rho_2 \cdot \bar{\theta}_2 + \rho_3 \cdot \bar{\theta}_3$.

Средние времена пребывания в соответствующих состояниях выражаются как

$$\begin{aligned}
 \bar{\theta}_0 &= \int_0^{\infty} \bar{F}_{01}(t) \bar{F}_{03}(t) dt, \\
 \bar{\theta}_1 &= \int_0^{\infty} \bar{F}_{10}(t) \bar{F}_{12}(t) dt, \quad \bar{\theta}_3 = \int_0^{\infty} \bar{F}_{30}(t) dt, \\
 \bar{\theta}_2 &= \bar{\theta}_x = \int_0^{\infty} 1_x(t) dt = \int_0^{\infty} \bar{F}_{2x}(t) dt; \\
 \bar{\theta} &= \rho_0 \cdot \bar{\theta}_0 + \rho_1 \cdot \bar{\theta}_1 + \rho_2 \cdot \bar{\theta}_2 + \rho_3 \cdot \bar{\theta}_3 = \\
 &= \rho_0 \int_0^{\infty} \bar{F}_{01}(t) \cdot \bar{F}_{03}(t) dt + \rho_0 \int_0^{\infty} F_{01}(z) \cdot f_{03}(z) dz \times \\
 & \times \int_0^{\infty} \bar{F}_{10}(t) \cdot \bar{F}_{12}(t) dt + \rho_0 \int_0^{\infty} F_{01}(z) \cdot f_{03}(z) dz \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \int_0^{\infty} f_{10}(x+t) \cdot f_{12}(t) dt \cdot \int_0^{\infty} \bar{F}_{2x}(t) dt + \\
 & + \rho_0 \int_0^{\infty} F_{03}(u) \cdot f_{01}(u) du \cdot \int_0^{\infty} \bar{F}_{03}(t) dt.
 \end{aligned}$$

Учитывая, что функции распределения времени наработки на отказ ТМ и SD приняты простейшими, т. е.

$$\begin{aligned}
 F_{01}(t) &= 1 - \lambda_1 e^{-\lambda_1 t}, \quad F_{03}(t) = 1 - \lambda_2 e^{-\lambda_2 t}, \\
 \rho_1 &= \rho_0 \int_0^{\infty} F_{01}(z) f_{03}(z) dz = \\
 &= \rho_0 \int_0^{\infty} (1 - e^{-\lambda_1 z}) \lambda_2 e^{-\lambda_2 z} dz = \rho_0 \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2}, \\
 \rho_3 &= \rho_0 \int_0^{\infty} F_{03}(u) f_{01}(u) du = \\
 &= \rho_0 \int_0^{\infty} (1 - e^{-\lambda_2 u}) \lambda_1 e^{-\lambda_1 u} du = \rho_0 \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2},
 \end{aligned}$$

интенсивность потоков отказов можно заменить их математическими ожиданиями:

$$\begin{aligned}
 \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} &= \frac{\frac{1}{m_1}}{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}, \\
 \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} &= \frac{\frac{1}{m_2}}{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}.
 \end{aligned}$$

С учетом определенных выше ρ_1 и ρ_3 среднее время записывается как

$$\begin{aligned}
 \bar{\theta} &= \rho_0 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \left(\int_0^{\infty} \bar{F}_{10}(t) \bar{F}_{12}(t) dt + \right. \\
 & \left. + \int_0^{\infty} f_{10}(x+t) f_{12}(t) dt \int_0^{\infty} \bar{F}_{2x}(t) dt \right) + \\
 & + \rho_0 \int_0^{\infty} \bar{F}_{01}(t) \bar{F}_{03}(t) dt + \rho_0 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \int_0^{\infty} \bar{F}_{03}(t) dt.
 \end{aligned}$$

Стационарные вероятности в этом случае следуют выражениям

$$\begin{aligned}
 \pi_0 &= \int_0^{\infty} \bar{F}_{01}(t) \bar{F}_{03}(t) dt \times \\
 & \times \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \left(\int_0^{\infty} \bar{F}_{10}(t) \bar{F}_{12}(t) dt + \right. \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left. + \int_0^\infty f_{10}(x+t)f_{12}(t)dt \int_0^\infty \bar{F}_{2x}(t)dt \right) + \\
 & \left. + \int_0^\infty \bar{F}_{01}(t)\bar{F}_{03}(t)dt + \frac{m_1}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{03}(t)dt \right)^{-1}, \\
 \pi_1 &= \frac{m_2}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{10}(t)\bar{F}_{12}(t)dt \times \\
 & \times \left(\frac{m_2}{m_1+m_2} \left(\int_0^\infty \bar{F}_{10}(t)\bar{F}_{12}(t)dt + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \int_0^\infty f_{10}(x+t)f_{12}(t)dt \int_0^\infty \bar{F}_{2x}(t)dt \right) + \right. \\
 & \left. + \int_0^\infty \bar{F}_{01}(t)\bar{F}_{03}(t)dt + \frac{m_1}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{03}(t)dt \right)^{-1}, \\
 \pi_2 &= \int_0^\infty F_{01}(z)f_{03}(z)dz \int_0^\infty f_{10}(x+t)f_{12}(t)dt \times \\
 & \times \int_0^\infty \bar{F}_{2x}(t)dt \cdot \left(\frac{m_2}{m_1+m_2} \left(\int_0^\infty \bar{F}_{10}(t)\bar{F}_{12}(t)dt + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \int_0^\infty f_{10}(x+t)f_{12}(t)dt \int_0^\infty \bar{F}_{2x}(t)dt \right) + \right. \\
 & \left. + \int_0^\infty \bar{F}_{01}(t)\bar{F}_{03}(t)dt + \frac{m_1}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{03}(t)dt \right)^{-1}, \\
 \pi_3 &= \frac{m_1}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{30}(t)dt \times \\
 & \times \left(\frac{m_2}{m_1+m_2} \left(\int_0^\infty \bar{F}_{10}(t)\bar{F}_{12}(t)dt + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \int_0^\infty f_{10}(x+t)f_{12}(t)dt \int_0^\infty \bar{F}_{2x}(t)dt \right) + \right. \\
 & \left. + \int_0^\infty \bar{F}_{01}(t)\bar{F}_{03}(t)dt + \frac{m_1}{m_1+m_2} \int_0^\infty \bar{F}_{03}(t)dt \right)^{-1}.
 \end{aligned}$$

Полученные выражения стационарного распределения полумарковского процесса (ПМП) позволяют определять такие важные характеристики системы, как коэффициенты готовности и простоя:

$$K_a = \pi_0 + \pi_1, \quad K_d = \pi_2 + \pi_3.$$

Для определения функции распределения времен наработки на отказ системы в целом необходимо составить и решить систему уравнений марковского восстановления

ния. А для нахождения функции распределения времени восстановления системы достаточно воспользоваться формулой [18]:

$$F_0(t) = \frac{\sum_{j \in M_+} \left(\sum_{i \in M_-} p_{ij} \rho_i \right) G_j(t)}{\sum_{j \in M_+} \sum_{i \in M_-} p_{ij} \rho_i}. \quad (4)$$

Однако ввиду того, что состояние S_{2x} является непрерывным, для нахождения функции распределения времени наработки на отказ (времени непрерывной работы системы) необходимо воспользоваться стационарным алгоритмом фазового укрупнения устойчивых состояний [16, 17] для того, чтобы перейти от системы с непрерывными состояниями к системе с дискретными состояниями. Изображение графа такой системы подобно представленному на рис. 2, но вместо состояния S_{2x} вводится состояние S_2 .

Тогда вероятности переходов примут вид:

$$P_0^1 \{ \xi_1 < \xi_3 \} = \int_0^\infty f_{01}(z)\bar{F}_{03}(z)dz;$$

$$P_0^3 \{ \xi_1 > \xi_3 \} = \int_0^\infty \bar{F}_{01}(t)f_{03}(t)dt;$$

$$P_1^0 = \int_0^\infty f_{10}(t)\bar{F}_{12}(t)dt;$$

$$P_1^2 = \int_0^\infty \bar{F}_{10}(x)f_{12}(t)dt; \quad P_2^0 = 1; \quad P_3^0 = 1.$$

А стационарное распределение вложенной цепи Маркова (ВЦМ):

$$\left\{ \begin{aligned}
 \rho_0 &= \frac{1}{2+B}; \\
 \rho_1 &= \frac{\int_0^\infty F_{01}(z)f_{03}(z)dz}{2+B}; \\
 \rho_2 &= \frac{B}{2+B}; \\
 \rho_3 &= \frac{\int_0^\infty \bar{F}_{01}(z)f_{03}(z)dz}{2+B},
 \end{aligned} \right.$$

где $B = \int_0^\infty F_{01}(z)f_{03}(z)dz \int_0^\infty f_{12}(t)\bar{F}_{10}(t)dt$.

Функция распределения времени пре-

Таблица 2

Полумарковские ядра
для дискретной системы ТМ – SD

Состояние	Полумарковские ядра
S_0	$Q_{01}(t) = \int_0^t f_{01}(x)\bar{F}_{03}(x)dx$ $Q_{03}(t) = \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx$
S_1	$Q_{10}(t) = \int_0^t f_{10}(x)\bar{F}_{12}(x)dx$ $Q_{12}(t) = \int_0^t \bar{F}_{10}(x)f_{12}(x)dx$
S_2	$Q_{2x0}(t) = 1_x(t)$
S_3	$Q_{30}(t) = F_{30}(t)$

бывания системы в укрупненном дискретном состоянии S_2 имеет следующий вид:

$$\bar{F}_2(t) = \left(\int_0^t F_{01}(z)f_{03}(z)dz \int_0^t \bar{F}_{10}(t+y)f_{12}(y)dy \right) \times \left(\int_0^t F_{01}(z)f_{03}(z)dz \int_0^t \bar{F}_{10}(y)f_{12}(y)dy \right)^{-1}.$$

Полумарковские ядра для графа дискретной системы представлены в табл. 2.

Составим уравнения марковского восстановления (УМВ) [16, 17, 19]:

$$\begin{cases} \varphi_0(t) = \int_0^t Q_{01}(dx)\varphi_1(t-x) + Q_{03}(t); \\ \varphi_1(t) = \int_0^t Q_{10}(dx)\varphi_0(t-x) + Q_{12}(t). \end{cases} \quad (5)$$

Подставив полумарковские ядра табл. 2 в уравнения (5), получим:

$$\begin{cases} \varphi_0(t) = \int_0^t \varphi_1(t-x)f_{01}(x)\bar{F}_{03}(x)dx + \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx; \\ \varphi_1(t) = \int_0^t \varphi_0(t-x)f_{10}(x)\bar{F}_{12}(x)dx + \int_0^t \bar{F}_{10}(x)f_{12}(x)dx. \end{cases} \quad (6)$$

Сделав замену переменных и подставив $\varphi_1(t)$ в выражение для $\varphi_0(t)$ в системе (6), получим:

$$\begin{aligned} \varphi_0(t) = & \int_0^t f_{01}(t-x)\bar{F}_{03}(t-x)dx \times \\ & \times \int_0^x \varphi_0(y)f_{10}(x-y)\bar{F}_{12}(x-y)dy + \\ & + \int_0^t f_{01}(t-x)\bar{F}_{03}(t-x)dx \int_0^x \bar{F}_{10}(y)f_{12}(y)dy + \\ & + \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx. \end{aligned} \quad (7)$$

Преобразовав выражение (7), имеем:

$$\begin{aligned} \varphi_0(t) = & \int_0^t \varphi_0(y)[(f_{01}\bar{F}_{03}) * (f_{10}\bar{F}_{12})](t-y)dy + \\ & + \int_0^x \bar{F}_{10}(y)f_{12}(y)dy \int_0^{t-y} f_{01}(x)\bar{F}_{03}(x)dx + \\ & + \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx, \end{aligned} \quad (8)$$

где * – знак операции свертки.

Введем обозначения

$$K(x) = [(f_{01}\bar{F}_{03}) * (f_{10}\bar{F}_{12})](x);$$

$$\begin{aligned} \Phi(t) = & \int_0^x \bar{F}_{10}(y)f_{12}(y)dy \int_0^{t-y} f_{01}(x)\bar{F}_{03}(x)dx + \\ & + \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx. \end{aligned}$$

Тогда выражение (8) будет иметь вид

$$\varphi_0(t) = \int_0^t \varphi_0(x)K(t-x)dx + \Phi(t). \quad (9)$$

Введем оператор [20, 21]:

$$[A\varphi_0](t) = \int_0^t \varphi_0(x)K(t-x)dx.$$

Тогда выражение (9) примет вид

$$\varphi_0(t) = [A\varphi_0](t) + \Phi(t). \quad (10)$$

Решая уравнение (10), получим:

$$\varphi_0(t) = [I - A]\Phi(t) = \Phi(t) + \sum_{n=1}^{\infty} [A^n\Phi](t).$$

Проитерировав, получим:

$$\varphi_0(t) = \Phi(t) + \int_0^t h(t-x)\Phi(x)dx, \quad (11)$$

где $h(x) = \sum_{n=1}^{\infty} [(f_{01}\bar{F}_{03}) * (f_{10}\bar{F}_{12})]^{(n)}(x)$;

$$\Phi(t) = \int_0^t \bar{F}_{10}(y)f_{12}(y)dy \int_0^{t-y} f_{01}(x)\bar{F}_{03}(x)dx + \int_0^t \bar{F}_{01}(x)f_{03}(x)dx.$$

Полученная функция распределения (11) описывает время наработки системы на отказ.

Найдем функцию распределения времени восстановления системы, используя формулу (4):

$$F_{23}^0(t) = \frac{F_2(t)P_2^0\rho_2 + F_3(t)P_3^0\rho_3}{P_2^0\rho_2 + P_3^0\rho_3}. \quad (12)$$

Поскольку $P_2^0 = 1$ и $P_3^0 = 1$, функция распределения (12) принимает вид

$$F_{23}^0(t) = \frac{F_2(t)\rho_2 + F_3(t)\rho_3}{\rho_2 + \rho_3}. \quad (13)$$

Полученные формулы (11) и (13) дают нам возможность полностью описать поведение системы в целом, то есть представить ее в виде эквивалентного ей простейшего элемента, имеющего два факторных состояния: отказа и рабочее. Результаты моде-

лирования с использованием формулы (11) представлены на рис. 3.

Исходными данными для моделирования служат функции распределения $F_{01}(t)$, $F_{03}(t)$, $F_{10}(t)$ и $F_{12}(t)$; они распределены по обобщенному закону Эрланга второго порядка с параметрами λ_{01} , λ_{03} ; μ_1 , μ_2 ; ν_1 , ν_2 соответственно; причем

$$f_{01}(t) = \lambda_{01}e^{-\lambda_{01}t},$$

где $\lambda_{01} = 0,1250 \text{ ч}^{-1}$;

$$f_{03}(t) = \lambda_{03}e^{-\lambda_{03}t},$$

где $\lambda_{03} = 0,0625 \text{ ч}^{-1}$;

$$f_{10}(t) = \frac{\mu_1\mu_2(e^{-\mu_1t} - e^{-\mu_2t})}{\mu_2 - \mu_1},$$

где $\mu_1 = 0,3333 \text{ ч}^{-1}$, $\mu_2 = 1,000 \text{ ч}^{-1}$.

$$f_{12}(t) = \frac{\nu_1\nu_2(e^{-\nu_1t} - e^{-\nu_2t})}{\nu_2 - \nu_1},$$

где $\nu_1 = 1,1 \text{ ч}^{-1}$, $\nu_2 = 10,9 \text{ ч}^{-1}$.

Обсуждение полученных результатов

Сравним значения математического ожидания полученной нами функции (11) и математического ожидания, определяемого с помощью выражения [16]:

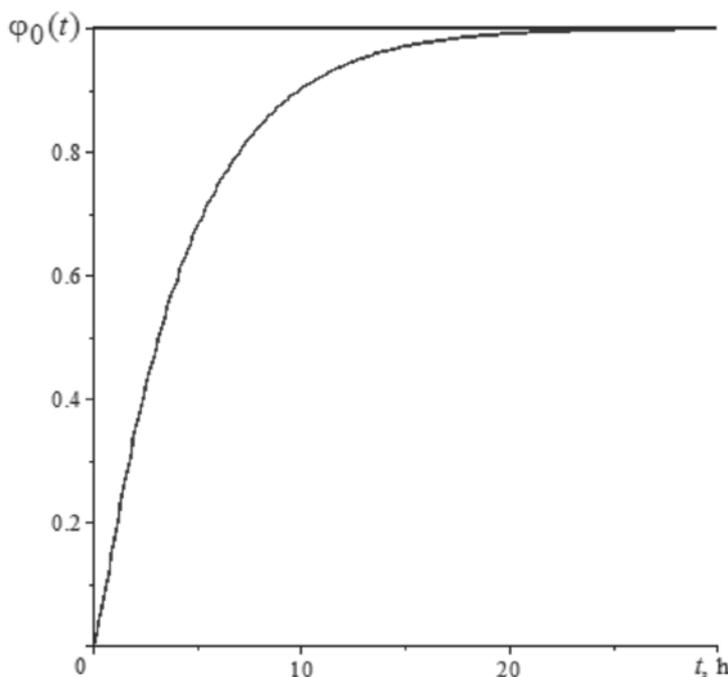


Рис. 3. Вид функции распределения $\varphi_0(t)$ – времени наработки на отказ (см. формулу (11))

$$T_+ = \frac{\sum_{i \in M_+} m_i \rho_i}{\sum_{e \in E \subset M_+} \sum_{j \in M_+} P_{ej} \rho_j}$$

Математическое ожидание полученной нами функции распределения составляет

$$6,453680520695,$$

тогда как определяемое авторами работы [16] –

$$6,453680520781.$$

Нетрудно констатировать, что различие наблюдается только в четырех последних значащих цифрах, т. е. фактически полученные значения совпадают.

Рассмотрим влияние принятого нами допущения об экспоненциальном характере отказов ТМ и SD на точность модели.

Введенные допущения о том, что функции распределения времени наработки на отказ ТМ и времени наработки на отказ накопителя (SD) являются экспонентами, существенно упрощают модель. Анализ условий, которые приводят к простейшему потоку отказов, могут привести к выводу, что простейшие потоки достаточно редки. Конечно, потоки отказов обладают последствием. Примером может служить то наблюдение, что отказ того или иного узла ТМ ведет, как правило, к отказу строго определенного ряда других узлов. Возможно также и нарушение ординарности: одновременный отказ нескольких узлов возможен, хотя при создании моделей такая ситуация принимается маловероятной. Условие же стационарности практически всегда выполняется, поскольку интенсивности отказов ТМ и SD с течением времени не изменяются.

Однако использовать простейшие потоки для описания отказов во многих случаях допустимо. Любая ТМ представляет собой сложную техническую систему, состоящую из большого числа узлов и деталей. Поток отказов отдельной механической детали выражается, как правило, экспонентой. Закон наработки на отказ для ТМ, состоящей из узлов и деталей, наработка на отказ которых подчиняется экспоненциальному закону, также будет выражаться экспонентой

[22]. В случае, если какой-либо из потоков оказывается ординарным и стационарным, можно воспользоваться теоремой Хинчина [23].

А.Я. Хинчин в свое время доказал, что если поток представляет собой суперпозицию стационарных, ординарных и взаимно независимых потоков, и λ_i – интенсивность i -го потока, то суммарный поток будет стремиться к простейшему потоку с интенсивностью

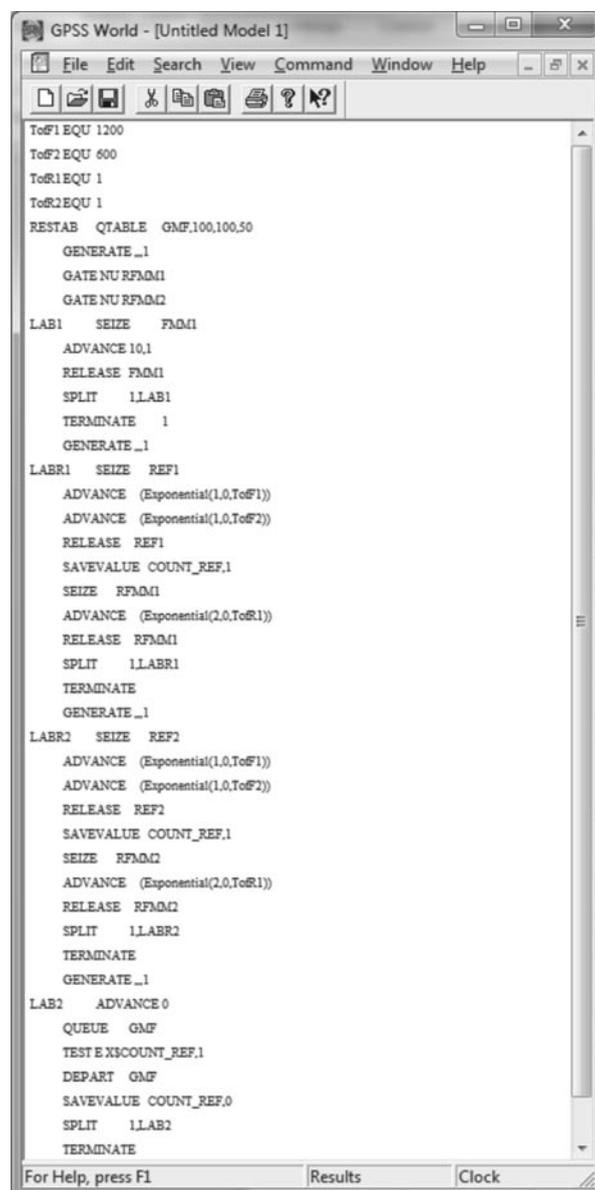


Рис. 4. Листинг программы для ТМ, состоящей из двух узлов

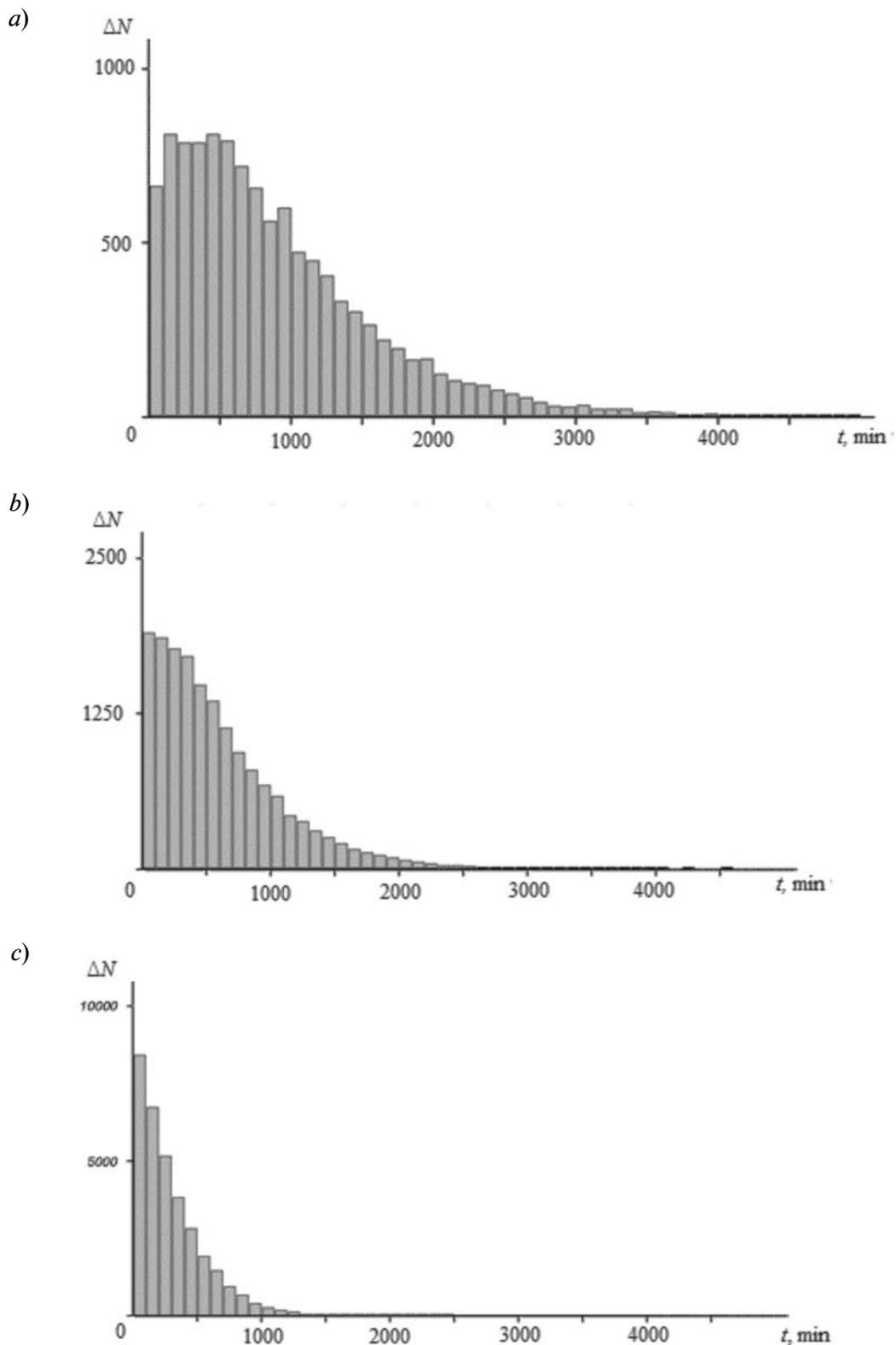


Рис. 5. Гистограммы времен наработки для ТМ, состоящих из двух (a), трех (b) и шести (c) узлов; получены на основе закона Эрланга второго порядка (ΔN – количество отказов в промежуток времени)

$$\Lambda = (\lambda_1 + \dots + \lambda_i + \dots + \lambda_n),$$

если n достаточно велико.

Возникает вопрос, насколько велико должно быть значение n , чтобы можно было принять поток отказов ТМ экспоненциальным.

Для оценки этого значения построим имитационную модель, используя систему GPSS World. В качестве закона наработки на отказ примем обобщенный закон Эрланга второго порядка. Листинг программы для ТМ, состоящей из двух узлов, приведен на рис. 4.

Моделирование осуществлялось для ТМ, содержащей от двух до шести узлов. Ряд гистограмм времени наработки на отказ приведен на рис. 5.

Как видно из результатов моделирования, уже для ТМ, состоящей из шести узлов (см. рис. 5, с), можно принять гипотезу об экспоненциальном распределении времени наработки на отказ всей ТМ. Поскольку ТМ реально содержит значительно большее число узлов и деталей, допущение, принятое нами в модели, вполне приемлемо. Аналогичные рассуждения справедливы и для наработки на отказ накопительных устройств.

Заключение

В результате проведенного исследования поставленная цель, а именно

– построение полумарковской модели процесса функционирования структуры технологической ячейки – накопитель, достигнута: получены выражения для определения функций распределения времен наработки на отказ и на восстановление системы (см. формулы (11) и (13) соответственно).

Проведенное сравнение значений математического ожидания времени наработки системы на отказ, определенное с использованием полученной нами функции распределения, и полученного по формуле, приведенной в работе [16], показало практически полное совпадение результатов.

Полученные выражения позволяют заменить исследуемую структуру эквивалентным простейшим элементом, что значительно упрощает моделирование систем верхнего уровня иерархии.

В дальнейшем планируется использование полученных выражений при моделировании асинхронных автоматизированных линий.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации по базовой части государственного задания № 2014/702 (проект № 3858) и при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 15-01-05840.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Черкесов Г.Н. Надежность технических систем с временной избыточностью. М.: Советское радио, 1974. 296 с.
- [2] Черкесов Г.Н. Современное состояние теории и практики надежности многофазных систем с накопителями // Надежность и контроль качества. 1986. № 10. С. 3–7.
- [3] Ганин Н.М., Катковник В.Я. Сетевые модели функционирования ГПС с ограниченными накопителями // Машиностроение. 1988. № 2. С. 26–32.
- [4] Obzherin Yu.E., Boyko E.G. Semi-Markov Models. Control of Restorable Systems with Latent Failures. USA, Elsevier, Academic Press, 2015. 214 p.
- [5] Peschansky A.I. Semi-Markov Models of One-Server Loss Queues with Recurrent Input. Germany: LAP LAMPERT Academic Publishing, 2013. 138 p.
- [6] Карташов Л.Е., Копп В.Я., Обжерин Ю.Е., Заморёнов М.В. К вопросу об использовании закона Эрланга при моделировании производственных систем // СИЯЭП. Сб. научн. тр. Севастополь, 2002. Вып. 7. С. 220–225.
- [7] Филипович О.В., Копп В.Я., Заморёнов М.В., Гаджибеков А.Н. Использование уравнения Фоккера – Планка при анализе СМО типа G/G/1/K // Оптимизация производственных процессов. Сб. научн. тр. Севастополь, 2000. Вып. 3. С. 56–60.
- [8] Управление ГПС: Модели и алгоритмы / Под общ. ред. акад. АН СССР С.В. Емельянова. М.: Машиностроение, 1987. 368 с.
- [9] Сольников Р.И., Кононюк А.Е., Кулаков Ф.М. Автоматизация проектирования гибких производственных систем. Л.: Машиностроение, 1990. 415 с.
- [10] Вальков В.М., Вершин В.Е. Автомати-

зированные системы управления технологическими процессами. 2-е изд., доп. и перераб. Л.: Машиностроение, 1977, 240 с.

[11] **Крон Г.** Исследование сложных систем по частям. Диакоптика. М.: Изд-во иностр. лит., 1965. 542 с.

[12] **Копп В.Я., Обжерин Ю.Е., Песчанский А.И.** Моделирование автоматизированных линий. Севастополь: Изд-во СевНТУ, 2006. 240 с.

[13] **Копп В.Я., Обжерин Ю.Е., Песчанский А.И.** Стохастические модели автоматизированных производственных систем с временным резервированием. Севастополь: Изд-во СевНТУ, 2000. 284 с.

[14] **Филипович О.В., Копп В.Я., Галкина Л.В.** Моделирование участков автоматизированных линий с учетом стохастического характера межоперационных заделов //Сб. научн. тр. СИЯЭиП. Севастополь: СИЯЭиП, 2001. Вып. 5. С. 213217.

[15] **Байхельт Ф., Франкен П.** Надежность и техническое обслуживание. Математический подход. Пер. с нем. М.: Радио и связь, 1988. 392 с.

[16] **Королюк В.С., Турбин А.Ф.** Процессы марковского восстановления в задачах на-

дежности систем. Киев: Наукова думка, 1982. 236 с.

[17] **Королюк В.С.** Стохастические модели систем. Отв. ред. А.Ф. Турбин. Киев: Наукова думка, 1989. 208 с.

[18] **Райншке К., Ушаков И.А.** Оценка надежности систем с использованием графов. М.: Радио и связь, 1988. 208 с.

[19] **Броди С.М., Власенко О.Н., Марченко Б.Г.** Расчет и планирование испытаний систем на надежность. Киев: Наукова думка, 1970. 192 с.

[20] **Колмогоров А.Н., Фомин С.В.** Элементы теории функций и функционального анализа. Учебник для ун-тов. 6-е изд., испр. М.: Наука, 1989. 623 с.

[21] **Михлин С.Г.** Интегральные уравнения и их приложения к некоторым проблемам механики, математической физики и техники. М.: Гостехиздат, 1949. 380 с.

[22] **Вентцель Е.С.** Теория вероятностей. Учеб. для вузов. 6-е изд., стер. М.: Высшая школа, 1999. 576 с.

[23] **Хинчин А.Я.** Математические методы в теории массового обслуживания. М.: Изд-во АН СССР, 1955. 123 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОПП Вадим Яковлевич – доктор технических наук, профессор кафедры приборных систем и автоматизации технологических процессов Севастопольского государственного университета.

299053, г. Севастополь, Университетская ул., 33, Российская Федерация.
volkov-and@yandex.ru

КАРТАШОВ Алексей Леонидович – инженер Государственного автономного учреждения города Севастополя «Севастопольская телерадиокомпания».

299011, г. Севастополь, 4-я Бастионная ул., 1, Российская Федерация.
kartashov.alekseyy@rambler.ru

ЗАМОРЁНОВ Михаил Вадимович – кандидат технических наук, доцент кафедры информационных технологий и компьютерных систем Севастопольского государственного университета.

299053, г. Севастополь, Университетская ул., 33, Российская Федерация.
zamoryonoff@gmail.com

КЛЮКИН ВАЛЕРИЙ ЮРЬЕВИЧ – кандидат технических наук, доцент кафедры «Автоматы» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, Российская Федерация.
volkov-and@yandex.ru

Kopp V.Ya., Kartashov A.L., Zamoryonov M.V., Klyukin V.Yu. THE SEMI-MARKOV MODEL FOR THE 'TECHNOLOGICAL MODULE – STORAGE DEVICE' STRUCTURE.

The theory of semi-Markov process has been used to design the model of 'technological module – storage device' (TM-SD) structure. Stationary characteristics based on obtained equations were determined to find stationary distribution of the Markov embedded chain. Relying upon performed studies the stationary

distribution of semi-Markov process was determined. This allowed calculation of the availability ratio of TM-SD structure and the design formula was given. The Markov restoration equations for TM-SD system with taking into account TM and SD failures were solved assuming the exponential behavior of these failures. The obtained expressions describe operating of such a system and allow substitution of TM-SD system with an equivalent element with two factor states. This result significantly simplifies the modeling problem for more complex systems. The legitimacy of using exponential distributions of random variables (error-free periods for TM and SD) was analyzed. The performed simulation modeling disclosed that the hypothesis for an exponential behavior of error-free periods for TM as a whole (and SD as well) can be accepted even in the case that TM (or SD) consists of six nodes.

SEMI-MARKOV MODEL, MARKOV RESTORATION EQUATION, EMBEDDED MARKOV CHAIN, STATIONARY DISTRIBUTION.

REFERENCES

- [1] **G.N. Cherkesov**, Nadezhnost tekhnicheskikh sistem s vremennoy izbytochnostyu [The reliability of technical systems with time redundancy], Moscow, Sov. Radio, 1974.
- [2] **G.N. Cherkesov**, Sovremennoye sostoyaniye teorii i praktiki nadezhnosti mnogofaznykh sistem s nakopitelyami [The current state of theory and practice of reliability of polyphase systems with storage devices], Nadezhnost i kontrol kachestva. No. 10 (1986) 3–7.
- [3] **N.M. Ganin, V.Ya. Katkovnik**, Setevyye modeli funktsionirovaniya GPS s ogranichennymi nakopitelyami [Networks models for operation of GPS with organic storage devices], Mashinostroyeniye. No. 2 (1988) 26–32.
- [4] **Yu.E. Obzherin, E.G. Boyko**, Semi-Markov Models. Control of Restorable Systems with Latent Failures, Elsevier, Academic press, USA, 2015.
- [5] **A.I. Peschansky**, Semi-Markov Models of One-Server Loss Queues with Recurrent Input, Germany: LAP LAMPERT Academic Publishing, 2013.
- [6] **L.E. Kartashov, V.Ya. Kopp, Yu.E. Obzherin, M.V. Zamorenov**, K voprosu ob ispolzovanii zakona Erlanga pri modelirovanii proizvodstvennykh sistem [On the using the Erlang distribution when modeling of the manufacturing systems] SIYaEP Sb. Nauchn. Tr. Sevastopol, 2002. No. 7 (2002) 220–225.
- [7] **O.V. Filipovich, V.Ya. Kopp, M.V. Zamorenov, A.N. Gadzhibekov**, Ispolzovaniye uravneniya Fokkera–Planka pri analize SMO tipa G/G/1/K Optimizatsiya proizvodstv. protsessov [Manufacturing process optimization], Sb. Nauch. Tr. Sevastopol, No. 3 (2000) 56–60.
- [8] Upravleniye GPS: Modeli i algoritmy [GPS control: models and algorithms], Ed. S.V. Emelyanov, Moscow, Mashinostroyeniye, 1987.
- [9] **R.I. Solnitsev, A.E. Kononyuk, F.M. Kulakov**, Avtomatizatsiya proyektirovaniya gibkikh proizvodstvennykh sistem [Design automation of the flexible manufacturing systems], Leningrad, Mashinostroyeniye, 1990.
- [10] **V.M. Valkov, V.E. Vershin**, Avtomatizirovannyye sistemy upravleniya tekhnologicheskimi protsessami [Automated systems to control manufacturing processes], 2d ed., Leningrad, Mashinostroyeniye, 1977.
- [11] **G. Kron**, Issledovaniye slozhnykh sistem po chastyam. Diakoptika [Studies in complex systems by parts. Diakoptics], Moscow, Izd-vo inostr. lit., 1965.
- [12] **V.Ya. Kopp, Yu.E. Obzherin, A.I. Peschanskiy**, Modelirovaniye avtomatizirovannykh liniy [Modeling of the automated lines], Sevastopol: Izd-vo SevNTU, 2006.
- [13] **V.Ya. Kopp, Yu.E. Obzherin A.I. Peschanskiy**, Stokhasticheskiye modeli avtomatizirovannykh proizvodstvennykh sistem s vremennym rezervirovaniyem [Stochastic models of automated manufacturing systems with time reservation], Sevastopol: Izd-vo SevNTU, 2000.
- [14] **O.V. Filipovich, V.Ya. Kopp, L.V. Galkina**, Modelirovaniye uchastkov avtomatizirovannykh liniy s uchetom stokhasticheskogo kharaktera mezhoperatsionnykh zadelov [Modeling of the automated line sections with consideration for stochastic character of interoperational process stock], Sb. Nauch. Tr. SIYaEP, Sevastopol: SIYaEP, No. 5 (2001) 213217.
- [15] **F. Baykhelt, P. Franken**, Nadezhnost i tekhnicheskoye obsluzhivaniye. Matematicheskiy podkhod [Reliability and technical service. The mathematical approach], Moscow, Radio i svyaz, 1988.
- [16] **V.S. Korolyuk, A.F. Turbin**, Protssy markovskogo vosstanovleniya v zadachakh nadezhnosti sistem [The Markov renewal processes in the system reliability problems], Kiev, Naukova Dumka, 1982.
- [17] **V.S. Korolyuk**, Stokhasticheskiye modeli system [Stochastic models of systems], Ed. A.F. Turbin, Kiev, Naukova Dumka, 1989.
- [18] **K. Raynshke, I.A. Ushakov**, Otsenka nadezhnosti sistem s ispolzovaniyem grafov [The reliability assessment of the systems using the graph theory], Moscow, Radio i svyaz, 1988.

[19] **S.M. Brodi, O.N. Vlasenko, B.G. Marchenko**, Raschet i planirovaniye ispytaniy sistem na nadezhnost [The calculation and planning of the system reliability testing], Kiev, Naukova Dumka, 1970.

[20] **A.N. Kolmogorov, S.V. Fomin**, Elementy teorii funktsiy i funktsionalnogo analiza [Elements of function theory and functional analysis], 6th ed., Moscow, Nauka, 1989.

[21] **S.G. Mikhlin**, Integralnyye uravneniya i ikh prilozheniya k nekotorym problemam mekhaniki,

matematicheskoy fiziki i tekhniki [The integral equations and their application to some problems of mechanics, mathematical physics and engineering], Moscow, Gostekhizdat, 1949.

[22] **E.S. Venttsel**, Teoriya veroyatnostey [The theory of chances], 6-th ed. Moscow, Vysshaya shkola, 1999.

[23] **A.Ya. Khinchin**, Matematicheskiye metody v teorii massovogo obsluzhivaniya [Mathematical methods in the queueing theory], Moscow, Izd-vo Akademii Nauk, 1955.

THE AUTHORS

KOPP Vadim Ya.

Sevastopol State University

33, Universitetskaja St., Sevastopol, 299053, Russian Federation
volkov-and@yandex.ru

KARTASHOV Aleksey L.

State Autonomous Institution of Sevastopol "Sevastopol Television and Radio Company"

1, 4 Bastionnaja St., Sevastopol, 299011, Russian Federation
kartashov.alekseyy@rambler.ru

ZAMORYONOV Michael V.

Sevastopol State University

33, Universitetskaja St., Sevastopol, 299053, Russian Federation
zamoryonoff@gmail.com

KLYUKIN Valery Y.

Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University

29, Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
volkov-and@yandex.ru

DOI: 10.5862/JPM.237.3

UDC: 539.216

Y.S. Sakhare¹, N.R. Thakare¹, A.U. Ubale²

¹ P.R. Pote College of Engineering & Management, Amravati, India

² Government Vidarbha Institute
of Science and Humanities, Amravati, India

INFLUENCE OF QUANTITY OF SPRAY SOLUTION ON THE PHYSICAL PROPERTIES OF SPRAY DEPOSITED NANOCRYSTALLINE MgSe THIN FILMS

Nanocrystalline MgSe thin films have been prepared by varying the quantity of spray solution using the spray pyrolysis technique. The effect of the varying quantity of spray solution on the structural, electrical, morphological and optical properties of MgSe thin films was investigated. The X-ray diffraction studies revealed that the deposited MgSe has a cubic lattice with (111) as the preferred orientation. The optical studies showed that the deposited MgSe exhibited direct optical band gap which varied from 2.45 to 2.75 eV depending on the quantity of spray solution. The electrical resistivity of MgSe decreased with an increase in temperature indicating its semiconducting nature. The electrical resistivity, activation energy and optical band gap energy were found to depend upon the quantity of spray solution. The measurement of thermo-emf with applied temperature gradient across the film confirmed its *p*-type conductivity.

THIN FILMS, X-RAY DIFFRACTION, OPTICAL PROPERTIES.

1. Introduction

The alkaline earth chalcogenides such as MgSe, CaSe, SrSe, etc., have attracted the scientific community due to their potential applications in various optoelectronic devices, especially luminescent ones. M.W. Wang, et al. [1] have studied the growth of MgSe films of zinc-blende structure on ZnTe substrates by the molecular beam epitaxy (MBE) method. The surface reconstructions of MgSe under different flux ratios and growth temperatures were studied. A.L. Rouff, et al. [2] have studied MgSe using the energy dispersive X-ray diffraction to 202 GPa and local density approximation to ultra-soft pseudo-potentials to 500 GPa. It was reported that MgSe underwent continuous phase transformation from rocksalt to FeSi. P. Prete, et al. [3]

have reported growth and characterization of ZnMgSe and MgSe on (100) GaAs by low-pressure metallorganic vapour phase epitaxy (MOVPE). The crystallographic phases of as grown MgSe and ZnMgSe were investigated. F.A. Sahraoui, et al. [4] have reported the structural and electric properties of MgSe at high hydrostatic pressure by the pseudo-potential plane wave method. R. Pendey, et al. [5] have studied structural phase transition on MgSe from wurtzite zinc-blende to rocksalt phase by the periodic Hartree-Fock method. As compared to low pressure, the MOVPE and MBE methods used for the deposition of MgSe thin films, the spray pyrolysis method has many advantages, such as high deposition rate, control of various deposition parameters and low cost [6 – 12]. The spray method has been used for several decades in glass industry and

in solar cell production to deposit electrically conducting electrodes. Thin film formation using this technique involves spraying a metal salt solution onto a heated substrate. The sprayed droplet reaching the hot substrate surface undergoes pyrolytic decomposition and forms the desired product. The other volatile by-products escape in the vapour phase. The quality and properties of the films depend largely on substrate temperature, precursor solution concentration, spray rate and substrate, etc. Previous studies have shown that very few reports are available on growth of MgSe films by solution growth [13, 14] by the metalorganic vapour chemical deposition (MOVCD) [5] and MBE [1] methods. The effect of triethanolamine (TEA) on the physical properties of MgSe thin films grown by the chemical bath deposition method has been reported in our earlier report [15]. The purpose of this work is to investigate the effect of the quantity of spray solution on the physical properties of MgSe thin films. This paper reports structural, electrical and optical properties of MgSe thin films prepared by varying the quantity of the spray solution from 5 to 30 ml.

2. Deposition of MgSe thin films

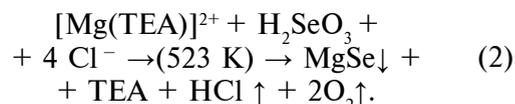
MgSe thin solid films were prepared using the versatile spray pyrolysis technique, which is simple and economic as compared to the MBE and MOVCD methods. The properties of the film can be controlled by adjusting the preparative parameters such as substrate temperature, spray rate, quantity of spray solution, pH of spray solution, etc. Aqueous solutions of magnesium chloride (MgCl_2), selenium oxide (SeO_2) and triethanolamine $\text{NH}(\text{CH}_2\text{-CH}_2)_3$ (TEA) were prepared using double distilled water. The glass substrates were ultrasonically cleaned and purged with acetone prior to the deposition. The spray solution was prepared by mixing 10 ml of 0.12 M MgCl_2 , 10 ml of 0.10 M TEA and 10 ml of 0.13 M SeO_2 . The MgSe thin films of various thicknesses were deposited by spraying 5, 10, 15, 20, 25 and 30 ml of spray solution onto preheated amorphous glass substrates, maintained at a temperature of 523 K. The spray rate was kept at 4 ml/min. The distance of 25 cm was kept between the substrate and the nozzle. The

MgSe film thickness was measured using weight difference method (by sensitive microbalance for thin films) and considering bulk density of MgSe.

The X-ray diffractogram was recorded using PANalytical X'Pert PRO MRD diffractometer with CuK_α line in 2θ range from 20 to 90°. The compositional analysis of the deposited film was carried out by Energy Dispersive X-ray Spectroscopy and microstructure aspects of the films were studied with a JOEL'S JSM-7600F Scanning Electron Microscope with the resolution of 1 nm and an Atomic Force Microscope (AFM) from Park Scientific Instruments. The optical absorption spectrum was recorded using the JASCO V-530 UV/Visible Spectrophotometer at normal incidence in the wavelength range from 300 to 900 nm. The electrical resistivity of the film was measured in the temperature range from 300 to 550 K by employing the two point probe method; quick drying silver paste was used as a contact material. A chromel-alumel thermocouple was used to measure the temperature of the sample. The type of electrical conductivity of the films was determined from the sign of the thermo-emf developed across the hot and cold junction.

3. Results and discussion

Film formation mechanism. The aqueous solution containing Mg^{2+} ions complexed with TEA, i.e. $[\text{Mg}(\text{TEA})]^{2+}$ along with SeO_2 , was sprayed onto hot substrates kept at a temperature of 523 K. The sprayed droplets underwent thermal decomposition and well-adherent milk-white colored MgSe thin films were deposited. The film formation takes place according to the following reaction:



The deposited films were uniform, pinhole-free and adherent to the glass substrate. Fig. 1 shows the variation of film thickness as a function of the quantity of spray solution. The film thickness is 145 nm for a 5 ml spray solution and it increases to 188 nm as the spray

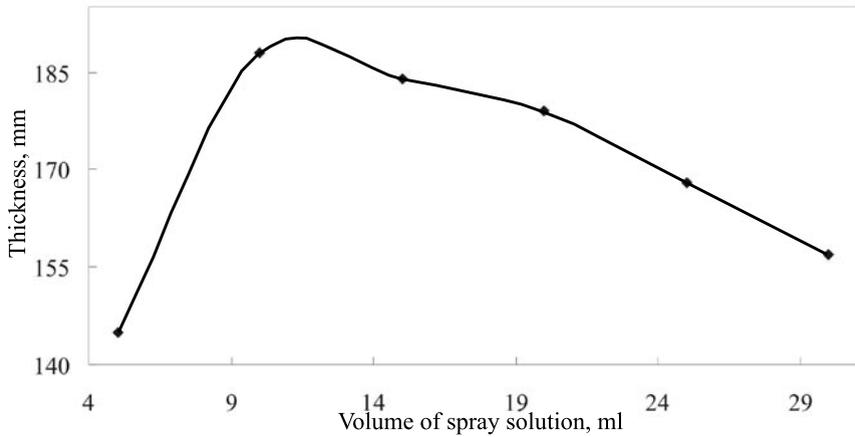


Fig. 1. The plots of MgSe film thickness versus the volume of the spray solution

solution becomes 10 ml. However, a slight decrease in the film thickness was observed with a further increase in the quantity of the spray solution. This may be due to incomplete thermal decomposition of the spray solution. Here, the optimum quantity of the spray solution was found to be 10 ml and above it the film surface started becoming somewhat powdery, giving lower thickness [16].

Structural studies. The grown films were

characterized by X-ray diffraction (XRD) using $CuK\alpha$ radiation, for structural identification and changes in the crystallinity of MgSe. Fig. 2 shows XRD patterns of MgSe films deposited by varying the quantity of the spray solution.

The films are nanocrystalline in nature with cubic lattice (see Table). The XRD pattern exhibits the major (111) orientation which becomes prominent with an increase in the thickness. Beside this, other diffraction peaks

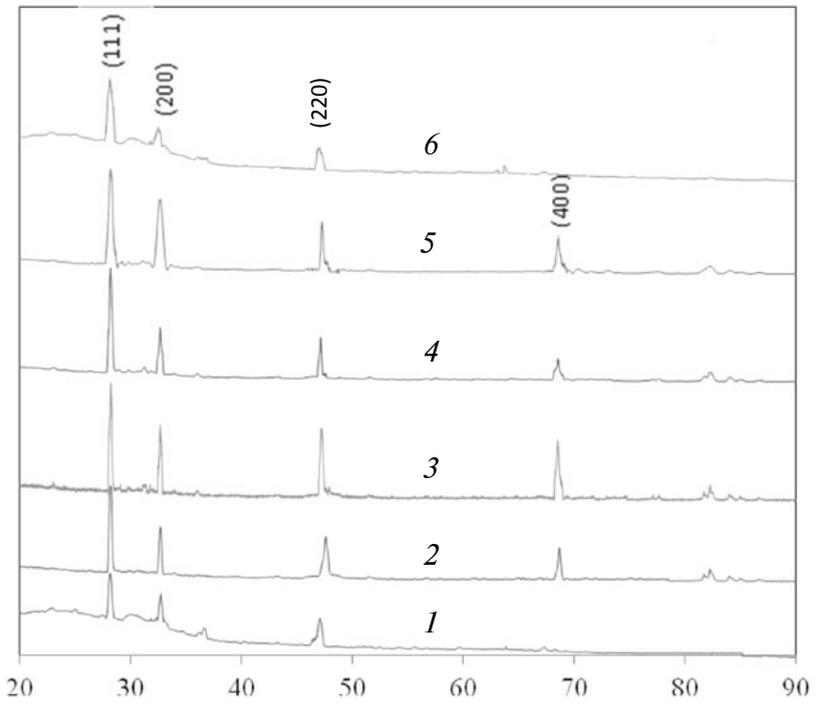


Fig. 2. X-ray diffraction patterns of MgSe thin films deposited changing the spray solution volume, ml: 5 (1), 10 (2), 15 (3), 20 (4), 25 (5), 30 (6)

Table

The obtained physical properties of MgSe thin films depending on the spray solution volume

Spray solution volume, ml	Film thickness, nm	Band gap energy, eV	Activation energy, eV	Grain size, nm	$\rho \times 10^2, \Omega\text{-cm, at } 373 \text{ K}$
05	145	2.75	0.97	11	23
10	188	2.45	0.86	24	11
15	184	2.50	0.87	21	13
20	179	2.60	0.88	17	14
25	168	2.65	0.90	13	07
30	157	2.69	0.92	10	20

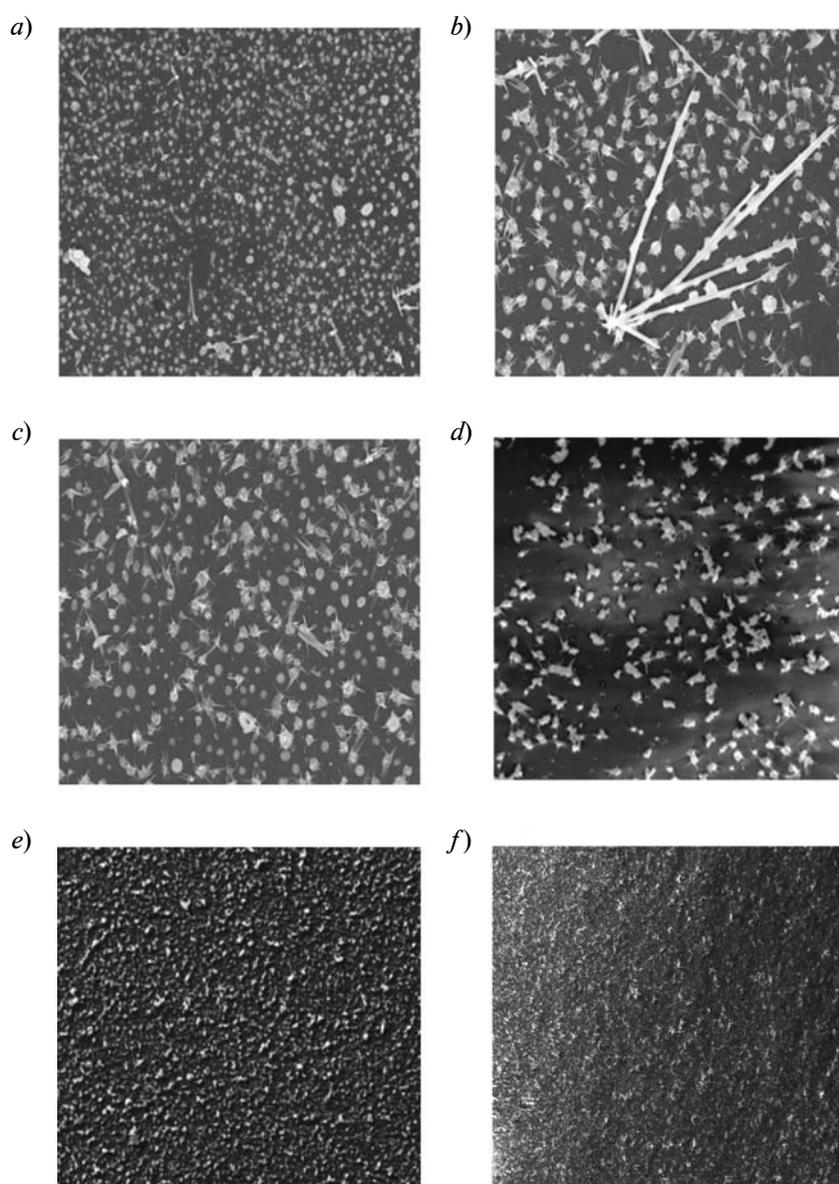


Fig. 3. Scanning electron microscopy images of MgSe thin films deposited by changing the spray solution volume, ml: 05 (a), 10 (b), 15 (c), 20 (d), 25 (e), 30 (f)



of (200), (220) and (400) are observed. These patterns clearly demonstrate that the film thickness of 188 nm deposited by spraying 10 ml of the solution is more oriented than others. The variation in the peak intensity with respect to the quantity of the spray solution may also be attributed to the variation in the film thickness and the grain structure. The average crystallite size of the deposited material was determined using Debye-Scherrer's formula:

$$d = 0.9\lambda/(\beta\cos\theta), \quad (3)$$

where β is the peak width at half-height (in radians), λ is the wavelength of CuK_α radiation

($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$), θ is Bragg's diffraction angle at peak position (in degrees).

The average crystallite size was found to vary between 10 to 24 nm as the film thickness was changed from 145 to 188 nm (see Table). Above 10 ml of the spray solution, the film thickness and the grain size gradually decrease due to the formation of powdery film. Consequently, the thicker films consist of larger grains as compared to the thinner ones.

Surface morphology. Fig. 3 shows scanning electron microscopy (SEM) micrographs of spray-deposited MgSe thin films. The SEM micrograph reveals that the substrates were

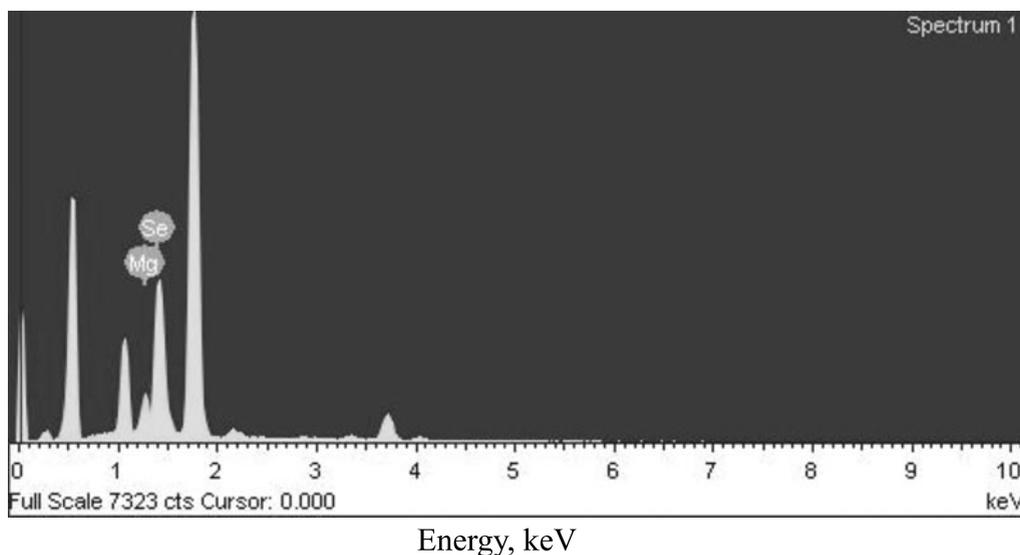


Fig. 4. Typical energy dispersive X-ray analysis spectrum of MgSe thin film of thickness 188 nm (the volume of the spray solution is 10 ml)

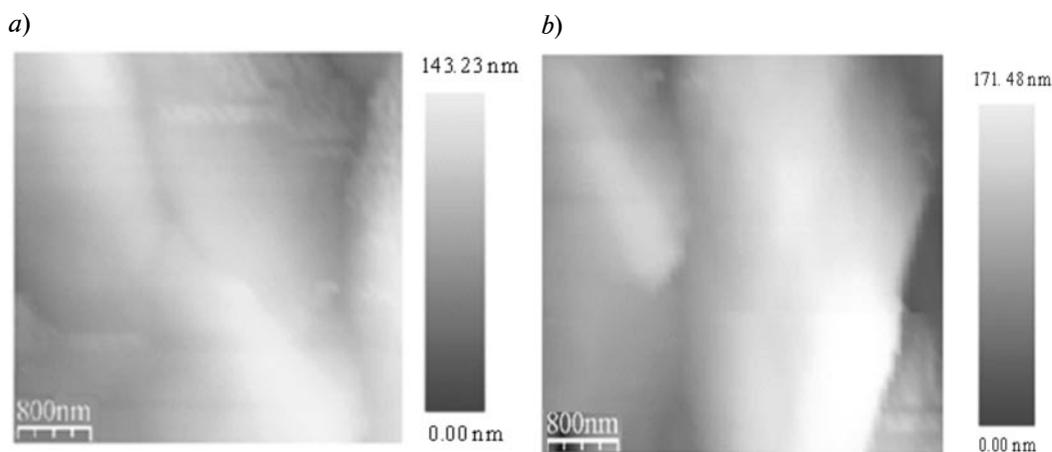


Fig. 5. AFM images of MgSe thin films deposited by changing the volume of the spray solution: 5 ml (a) and 10 ml (b)

well-covered with a uniform distribution of a large number of fine grains. As the quantity of spray solution increased from 5 to 10 ml, a remarkable grain growth is observed. The film deposited using 10 ml spray solution has well-defined MgSe nano-rods along with spherical grains showing spikes on the surface. However, this type of morphology is suppressed as the quantity of the spray solution is increased above 10 ml. This fact confirms that films deposited with the optimum quantity of the spray solution, i.e., 10 ml, are more useful due to their porous nature.

A typical energy dispersive X-ray analysis (EDAX) spectrum of MgSe thin film deposited using the spray solution of the volume ranging from 5 to 30 ml is shown in Fig. 4. The formation of MgSe is confirmed from the elemental analysis. Other peaks appearing due to glass substrate can also be observed.

Fig. 5 shows an atomic force microscopy (AFM) image of MgSe films deposited with 05 and 10 ml of the spray solution. It is evident that the film surface is uniform and homogenous.

Optical properties. The optical absorption spectra of the films of different thicknesses were recorded and analyzed to estimate band gap energies of MgSe. The variation in

absorption density αt with a wavelength λ for all the samples is shown in Fig. 6. It is evident that the absorption coefficient of the MgSe film is of the order of 10^4 cm^{-1} .

To confirm the nature of the optical transition in these samples, the optical data was analyzed using the classical relationship [17]:

$$\alpha h\nu = A(E_g - h\nu)^n, \quad (4)$$

where α is the absorption coefficient, A is the constant, h is the Planck constant, ν is the photon frequency, E_g is the optical band-gap energy, and n is $1/2$ and 2 for the direct and the indirect transition, respectively.

Fig. 7 shows the variation of $(\alpha h\nu)^2$ values versus $h\nu$ values for MgSe thin films of various thicknesses. The extrapolation of the straight-line portion of the plot to zero absorption coefficient gives the value of the band gap energy E_g .

Fig. 8 shows the changing of the optical band-gap energy of the MgSe thin film with the volume of the spray solution. The energy gap increases from 2.45 to 2.75 eV as the film thickness decreases from 188 to 145 nm [18, 19]. The red shift observed in the absorption edge of MgSe thin film results from the smaller grain size of the nanostructured material as the

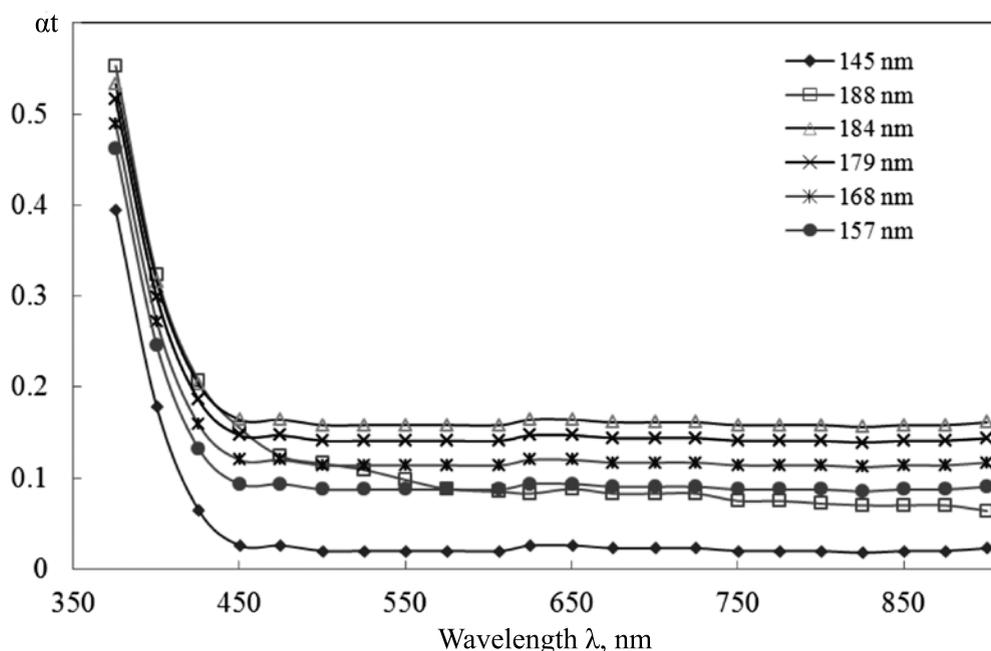


Fig. 6. Plots of the optical absorption αt versus wavelength λ for MgSe thin films deposited by changing the quantity of the spray solution (see Table)

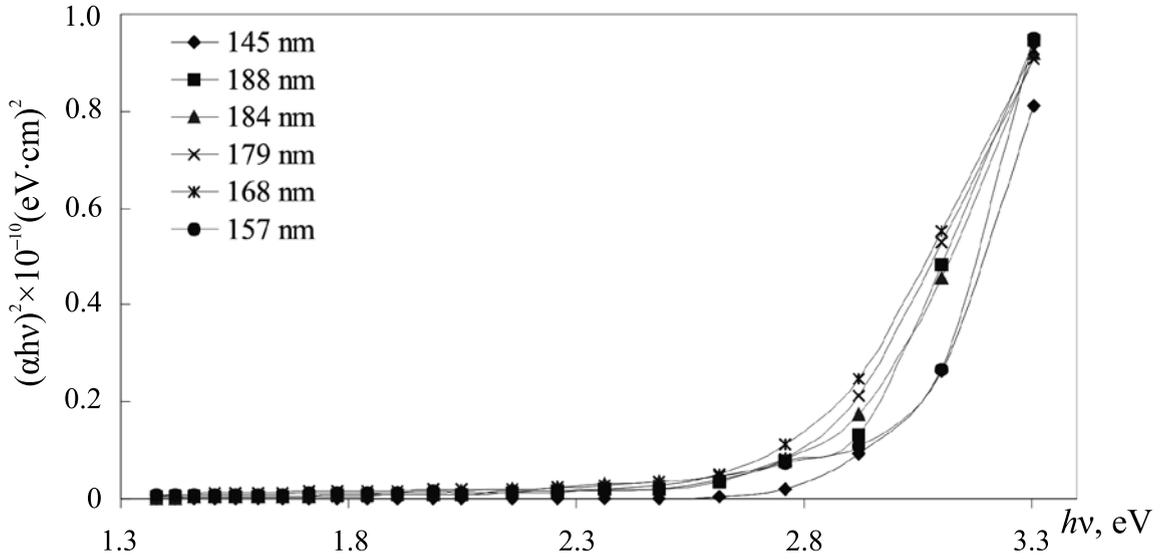


Fig. 7. Plots of $(\alpha hv)^2$ values versus $h\nu$ values for MgSe films. Volumes of spray solution are given in Table

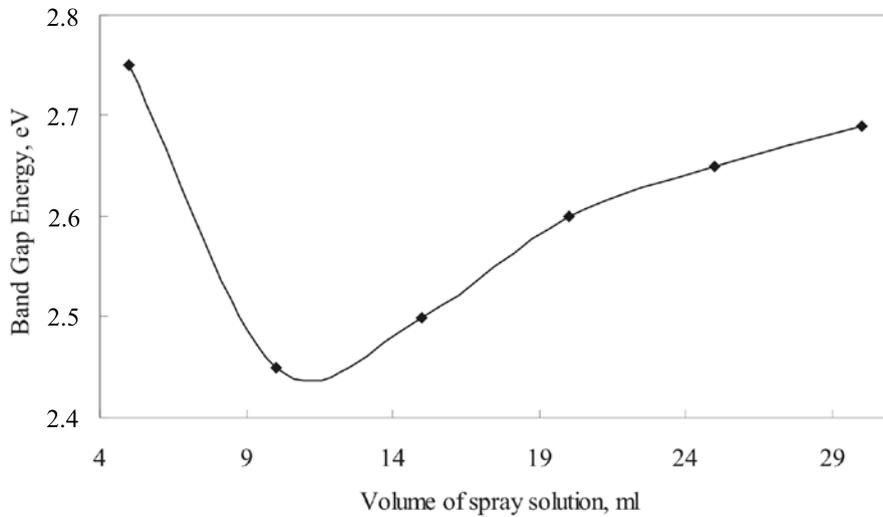


Fig. 8. The dependence of the optical band gap energy of the MgSe film on the volume of the spray solution

quantum size effect becomes prominent [20].

Electrical properties. The d.c. electrical resistivity of all the deposited samples was studied in the temperature range from 300 to 500 K using the two-probe method. The variation of the $\log \rho$ value with the reciprocal of temperature ($1000/T$) is shown in Fig. 9. The electrical resistivity follows the relation

$$\rho = \rho_0 \exp(-E_a/(kT)), \quad (5)$$

where ρ is the resistivity at temperature T , ρ_0 is

the constant, k is the Boltzmann constant, E_a is the activation energy required for conduction.

The electrical resistivity of thinner film was found to be $2.3 \cdot 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$ and it decreases to $1.1 \cdot 10^3 \Omega \cdot \text{cm}$ as film thickness becomes 188 nm. The improvement in crystallinity and the grain size with thickness induces conductivity. Fig. 10 shows the dependence of electrical resistivity on the volume of the spray solution for the MgSe thin film. For all the samples it was obtained that the electrical resistivity decreases

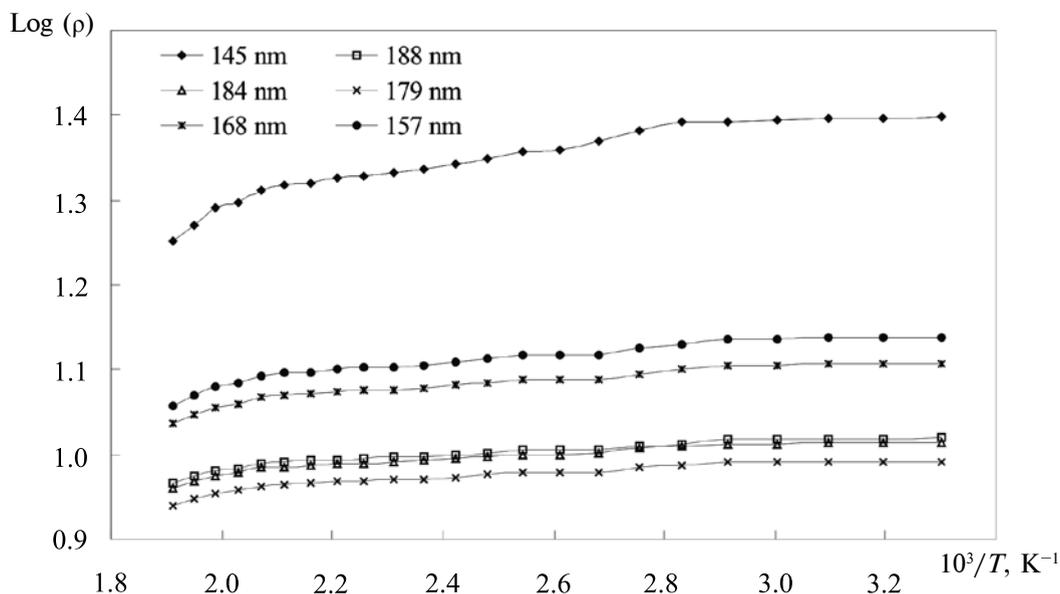


Fig. 9. The plots of $\text{Log}(\rho)$ value versus $(10^3/T)$ for MgSe thin films deposited varying the quantity of the spray solution (see Table)

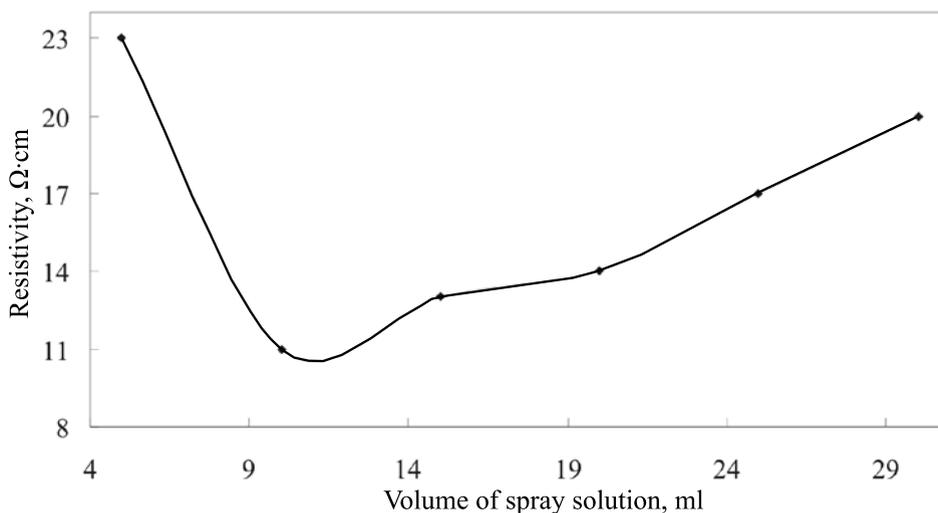


Fig. 10. The dependence of the resistivity of MgSe thin films obtained at 373 K on the volume of the spray solution

with an increase in temperature, confirming the semiconducting nature of MgSe. The thermal activation energies were calculated and were found to vary from 0.97 to 0.87 eV depending on the film thickness (Fig. 11). This variation in the activation energy with the film thickness is due to the changes in the crystalline structure and the density of dislocations in the film.

Thermo-emf measurement. The temperature difference applied across the film causes the transport of carriers from the hot end to the cold one thus creating an electric field. It was concluded from the polarity of the thermoelectric-emf that MgSe film exhibited *p*-type conductivity. Fig. 12 shows the variation of thermo-emf with applied temperature difference.

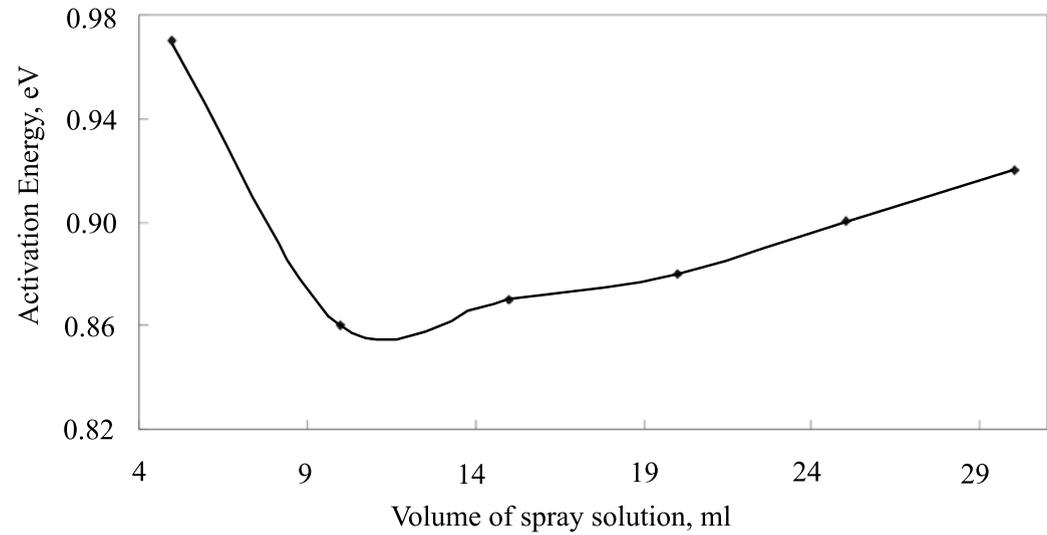


Fig. 11. The dependence of the activation energy of MgSe thin films on the volume of the spray solution

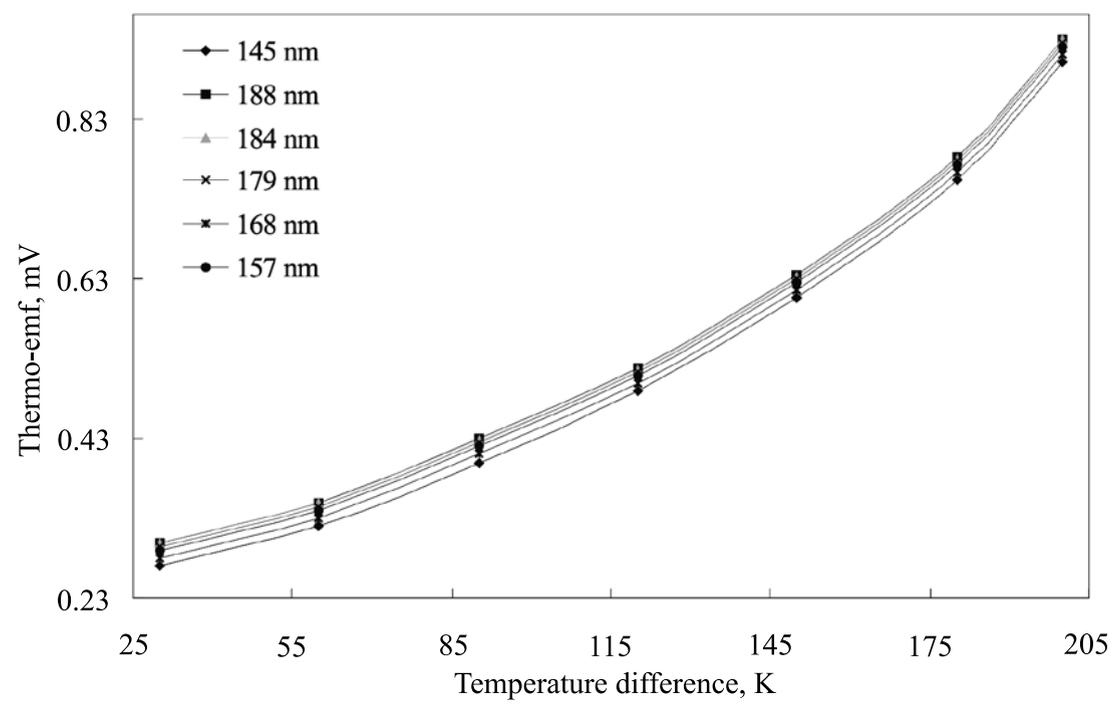


Fig. 12. The plots of thermo e.m.f. versus temperature differences applied across the MgSe thin films

It is evident that the thermo-emf increases linearly with the applied temperature difference. The thermo-emf developed across the film increases with thickness, which may be due to the improvement in the crystalline structure of the film [21]. At lower thickness the grain boundary

scattering is prominent which may decrease with thickness due to the grain growth.

4. Conclusions

Magnesium selenide thin films of thickness from 145 to 188 nm were deposited onto glass

substrates at 523 K using the spray pyrolysis technique with varying the quantity of the spray solution. The grown films are nanocrystalline in nature with cubic structure. The crystallinity and the grain size of MgSe is improved with thickness. The films deposited by spraying 10 ml of the solution are porous, showing growth

of nano-rods. The optical band-gap energy decreases with an increase in film thickness. It is, therefore, concluded that the physical properties of the magnesium selenide films can be customized by merely controlling the film thickness, which in turn becomes suitable for a particular application.

REFERENCES

- [1] **M.W. Wang, M.C. Phillips, J.F. Swenberg, et al.**, *n*-CdSe/*p*-ZnTe based wide band-gap light emitters: Numerical simulation and design, *J. Appl. Phys.* 73 (1993) 4660.
- [2] **A.L. Rouff, T. Li, A.C. Ho, et al.**, Sevenfold coordinated MgSe: Experimental internal atom position determination to 146 GPa. Diffraction studies to 202 GPa, and theoretical studies to 500 GPa, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 2723.
- [3] **P. Prete, N. Lovergine, L. Tapfer, et al.**, MOVPE growth of MgSe and ZnMgSe on (100) GaAs, *J. Cryst. Growth*, 214 (2000) 119.
- [4] **F.A. Sahraoui, F. Arab, S. Zerroug, L. Louail**, First-principles study of structural and elastic properties of MgSe under hydrostatic pressure, *Comp. Mater. Sci.* 41 (2008) 538.
- [5] **R. Pandey, A. Sntijianto**, Study of structural phase transition in MgSe, *Solid State Commun.* 91 (1994) 269.
- [6] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare**, Growth of nanocrystalline MgSe thin films by spray pyrolysis, *Vacuum* 99 (2014) 124.
- [7] **Y. Takemura, H. Suto, N. Honda, et al.**, Characterization of FeSe thin films prepared on GaAs substrate by selenization technique, *J. Appl. Phys.* 81 (1997) 5177.
- [8] **C.E.M. Campos, J.L. de Lima, T.A. Grandi, et al.**, GaSe formation by mechanical alloying Ga₃₀Se₅₀ mixture, *Solid State Commun.* 23 (2003) 179.
- [9] **B. Ouertani, J. Ouertfelli, M. Saadoun, et al.**, Transformation of amorphous iron oxide films pre-deposited by spray pyrolysis into FeS₂-pyrite films, *Mater. Lett.* 59 (2005) 734.
- [10] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare, M.R. Belkhedkar**, Synthesis and characterization of spray deposited nanostructured FeSe thin films, *Mater. Lett.* 92 (2013) 111.
- [11] **B. Ouertani, J. Ouertfelli, M. Saadoun, et al.**, Transformation of amorphous iron oxide thin films predeposited by spray pyrolysis into a single FeSe₇-phase by selenisation, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 87 (2005) 501.
- [12] **X.J. Wu, Z.Z. Zhang, J.Y. Zhang, et al.**, Structural and electrical characterizations of single tetragonal FeSe on Si substrate, *J. Cryst. Growth.* 300 (2007) 483.
- [13] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare**, Thickness dependent physical properties of chemically deposited nanocrystalline MgSe thin films deposited at room temperature by solution growth method, *Mater. Sci. Semi. Processing.* 16 (2013) 1769.
- [14] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare**, Physical properties of MgSe thin films grown by chemical bath deposition method: effect of molar concentration of MgCl₂, *Ind. J. Phys.* 87(12) (2013) 1183.
- [15] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare, S.G. Ibrahim, M.R. Belkhedkar**, Structural, optical and electric properties of nanocrystalline MgSe thin films deposited by chemical route using triethanolamine as a complexing agent, *Solid State Science.* 23 (2013) 96–108.
- [16] **A.U. Ubale, V.P. Deshpande**, Thickness dependent structural, electrical and optical properties of nanostructured zinc oxide thin films deposited by chemical spray technique, *Optoelectronic Advan. Mater. Rapid Commun.* 5(2) (2011) 119–124.
- [17] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare, S.M. Bombatkar**, Influence of the complexing agent (Na₂-EDTA) on the structural, morphological, electrical and optical properties of chemically deposited FeSe thin films, *Mater. Res. Bull.* 48 (2013) 3564.
- [18] **A. Fleszar**, LDA, GW, and exact-exchange Kohn-Sham scheme calculations of the electronic structure of sp semiconductors, *Phys. Rev. B.* 64 (2001) 245204.
- [19] **H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto**, Epitaxial growth of ZnMgSSe on GaAs substrate by molecular beam epitaxy, *J. Cryst. Growth* 117 (1992) 139.
- [20] **A.U. Ubale**, Effect of complexing agent on growth process and properties of nanostructured Bi₂S₃ thin films deposited by chemical bath deposition method, *Mater. Chem. Phys.* 121 (2010) 555–560.
- [21] **A.U. Ubale, Y.S. Sakhare, M.V. Bhute, et al.**, Size-dependent structural, electrical and optical properties of nanostructured iron selenide thin films deposited by Chemical Bath Deposition Method, *Solid State Sci.* 16 (2013) 134.



THE AUTHORS

SAKHARE Yogesh S.

Department of Engineering Physics, P.R. Pote College of Engineering & Management.
Pote Estate, Kathora Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
sakhare.yogesh@gmail.com

THAKARE Nilesh R.

Department of Engineering Physics, P.R. Pote College of Engineering & Management.
Pote Estate, Kathora Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
nileshthakare@gmail.com

UBALE Ashok U.

Nanostructured Thin Film Materials Laboratory, Department of Physics, Government Vidarbha Institute of Science and Humanities.
VMV Road, Amravati, Maharashtra 444604, India
ashokuu@yahoo.com

Сахаре Ё.С., Такаре Н.Р., Убале А.У. ВЛИЯНИЕ КОЛИЧЕСТВА РАСПЫЛЯЕМОГО РАСТВОРА НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК СЕЛЕНИДА МАГНИЯ, ОСАЖДЕННЫХ МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПИРОЛИЗА.

Тонкие нанокристаллические пленки селенида магния MgSe были приготовлены методом спрей-пиролиза с использованием различного количества распыляемого раствора. Рассмотрено влияние изменения количества этого раствора на структурные, электрические, морфологические и оптические свойства пленок MgSe. Методом рентгеновской дифракции установлено, что осажденный MgSe имеет кубическую кристаллическую решетку с преимущественной ориентацией (111). Оптические исследования показали, что для полученного объекта характерна запрещенная зона с прямыми оптическими переходами, ширина которой меняется от 2,45 до 2,75 эВ, в зависимости от количества распыляемого раствора. Электрическое сопротивление пленки MgSe снижается с повышением температуры, что указывает на ее полупроводниковую природу. Установлено, что электросопротивление, энергия активации и ширина запрещенной зоны зависят от количества распыляемого раствора. Измерение термоэдс путем создания температурного градиента через пленку подтвердило, что она проявляет проводимость дырочного типа.

ТОНКИЕ ПЛЕНКИ, ДИФРАКЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ, ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Wang M.W., Phillips M.C., Swenberg J.F., et al., *n*-CdSe/*p*-ZnTe based wide band-gap light emitters: Numerical simulation and design // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 73. No. 9. P. 4660.
- [2] Ruoff A.L., Li T., Ho A.C., et al., Sevenfold coordinated MgSe: experimental internal atom position determination to 146 GPa. Diffraction studies to 202 GPa, and theoretical studies to 500 GPa // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 81. No. 13. Pp. 2723–2726.
- [3] Prete P., Lovergine N., Tapfer L., et al. MOVPE growth of MgSe and ZnMgSe on (100) GaAs // J. Cryst. Growth. 2000. Vol. 214–215. Pp. 119–124.
- [4] Sahraoui Ali F., Arab F., Zerroug S., Louail L. First-principles study of structural and elastic properties of MgSe under hydrostatic pressure // Comput. Mater. Sci. 2008. Vol. 41. No. 4. Pp. 538–541.
- [5] Pandey R., Sutjianto A. Study of structural phase transition in MgSe // Solid State Commun. 1994. Vol. 91. No. 4. Pp. 269–271.
- [6] Ubale A.U., Sakhare Y.S. Growth of nanocrystalline MgSe thin films by spray pyrolysis // Vacuum. 2014. Vol. 99. Pp. 124–126.
- [7] Takemura Y., Suto H., Honda N., et al., Characterization of FeSe thin films prepared on GaAs substrate by selenization technique // J. Appl. Phys. 1997. Vol. 81. No. 8. P. 5177.
- [8] Campos C.E.M., de Lima J.C., Grandi T.A., et al., GaSe formation by mechanical alloying Ga₅₀Se₅₀ mixture // Solid State Commun. 2003. Vol. 126. No. 11. Pp. 611–615.
- [9] Ouertani B., Ouerfelli J., Saadoun M.,

Bessaïs B. Transformation of amorphous iron oxide films pre-deposited by spray pyrolysis into FeS₂-pyrite films // *Mater. Lett.* 2005. Vol. 59. P. 734.

[10] **Ubale A., Sakhare Y., Belkhedkar M.** Synthesis and characterization of spray deposited nanostructured FeSe thin films // *Mater. Lett.* 2013. Vol. 93. P. 111.

[11] **Ouertani B., Ouerfelli J., Saadoun M.** Transformation of amorphous iron oxide thin films predeposited by spray pyrolysis into a single FeSe₂-phase by selenisation // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2005. Vol. 87. P. 501.

[12] **Wu X., Zhang Z., Zhang J., Ju Z.** Structural and electrical characterizations of single tetragonal FeSe on Si substrate // *J. Cryst. Growth.* 2007. Vol. 300. P. 483.

[13] **Ubale A.U., Sakhare Y.S.** Thickness dependent physical properties of chemically deposited nanocrystalline MgSe thin films deposited at room temperature by solution growth method // *Mater. Sci. Semicond. Processing.* 2013. Vol. 16. No. 6. Pp. 1769–1774.

[14] **Ubale A.U., Sakhare Y.S.** Physical properties of MgSe thin films grown by chemical bath deposition method: effect of molar concentration of MgCl₂ // *Indian J. Phys.* 2013. Vol. 87. No. 12. Pp. 1183–1188.

[15] **Ubale A.U., Sakhare Y.S., Ibrahim S.G., Belkhedkar M.R.** Structural, optical and electric properties of nanocrystalline MgSe thin films deposited by chemical route using triethanolamine

as a complexing agent // *Solid State Science.* 2013. Vol. 23. Pp. 96–101.

[16] **Ubale A., Deshpande V.** Thickness dependent structural, electrical and optical properties of nanostructured zinc oxide thin films deposited by chemical spray technique // *Optoelectronic Advan. Mater. Rapid Commun.* Vol. 5. No. 2. Pp. 119–124. 2011.

[17] **Ubale A., Sakhare Y., Bombatkar S.** Influence of the complexing agent (Na₂-EDTA) on the structural, morphological, electrical and optical properties of chemically deposited FeSe thin films // *Mater. Res. Bull.* 2013. Vol. 48. P. 3564.

[18] **Fleszar A.** LDA, GW, and exact-exchange Kohn-Sham scheme calculations of the electronic structure of sp semiconductors // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 64. P. 254204.

[19] **Okuyama H., Nakano K., Miyajima T., Akimoto K.** Epitaxial growth of ZnMgSSe on GaAs substrate by molecular beam epitaxy // *J. Cryst. Growth.* 1992. Vol. 117. P. 139.

[20] **Ubale A.** Effect of complexing agent on growth process and properties of nanostructured Bi₂S₃ thin films deposited by chemical bath deposition method // *Mater. Chem. Phys.* 2010. Vol. 121. Pp. 555–560.

[21] **Ubale A.U., Sakhare Y.S., Bhute M.V., et al.,** Size-dependent structural, electrical and optical properties of nanostructured iron selenide thin films deposited by Chemical Bath Deposition Method // *Solid State Sci.* 2013. Vol. 16. Pp. 134–142.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

САХАРЕ Ёгеш С. — *PhD, доцент факультета инженерной физики Колледжа инженерных наук Р.П. Поте.*

Pote Estate, Kathora Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
sakhare.yogesh@gmail.com

ТАКАРЕ Нилеш Р. — *PhD, сотрудник факультета инженерной физики Колледжа инженерных наук Р.П. Поте.*

Pote Estate, Kathora Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
nileshthakare@gmail.com

УБАЛЕ Ашок У. — *PhD, сотрудник лаборатории наноструктурных тонкопленочных материалов факультета физики Института естественных и гуманитарных наук правительства Видарбхи.*

VMV Road, Amravati, Maharashtra 444604, India
ashokuu@yahoo.com



DOI: 10.5862/JPM.237.4

UDC: 535.37

*D.N. Game¹, N.B. Ingale², S.K.Omanwar¹*¹ Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, India² Prof. Ram Meghe Institute of Technology and Research, Amravati, India

SYNTHESIS AND LUMINESCENCE PROPERTIES OF $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ PHOSPHOR FOR SOLID STATE LIGHTING

A novel method to prepare Eu^{2+} doped chlorapatite phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ useful for solid state lighting has been given in this paper. The phosphor was synthesized by the Pechini (citrate gel) method which turned out to be more efficient than the conventional high temperature solid state reaction. The results of the photoluminescence (PL) investigation revealed that it was possible to efficiently excite the phosphor by a UV-visible light from 220 to 430 nm; the phosphor exhibited a bright blue emission at the wavelength $\lambda_{em} = 456$ nm for the excitation wavelength $\lambda_{ex} = 350$ nm of near-ultraviolet light. The developed phosphor emits in blue and, hence, could provide one of the three (RGB) primary color components in a phosphor-converted LED-producing white light.

SOLID STATE LIGHTING, PECHINI (CITRATE GEL) METHOD, BLUE PHOSPHOR, PHOTOLUMINESCENCE.

1. Introduction

White-light emitting diodes (W-LEDs) are one of the most promising eco- friendly light sources due to their low energy consumption [1]. W-LEDs offer benefits in terms of reliability, energy saving, and safety and therefore have drawn much attention in recent years [2, 3]. To increase the efficiency of W-LEDs, special attention has recently been paid to the development of new phosphors with good luminescence properties that can be excited in the long-UV range (300 – 420 nm). Blue phosphors are an important part in those new phosphors. Recently, W-LEDs have been used in many applications due to the developments in GaN-based chips and phosphor technology. The most popular products in the market are obtained by the combination of a blue-emitting phosphor ($\text{YAG}:\text{Ce}^{3+}$), which suffer from the low color rendering index(CRI) and high color temperature T_c (usually above 5500 K). These drawbacks can be overcome by the use of triband W-LED, utilizing RGB (red, green and blue) tricolor phosphor coatings on the near ultraviolet (near-UV) LED chip. Blue phosphor $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ (BAM: Eu^{2+}) has been intensively studied [4, 5]. However,

BAM: Eu^{2+} has two major drawbacks: thermal degradation and UV damage, which lead to a color shift and loss of brightness [6, 7]. Apatite phosphors, which are naturally occurring materials, have recently been used for field-emission displays (FEDs) and would be suitable for white LEDs in the near future because of their low price, environmental friendliness, thermal stability and good photoluminescence properties [8]. W.N. Wang, et al. [8] reported synthesis of a chloroapatite blue phosphor $(\text{Ca},\text{Mg})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}$ with high quantum efficiency using a spray pyrolysis method. The color of the present W-LED depends completely on phosphors because the eyes are not sensitive to the UV output from the W-LED. The market share of the three-band W-LEDs based on near-UV chips has been steadily increasing. Eu^{2+} ions doped alkaline earth halophosphates are efficient blue-emitting phosphors used for triband W-LEDs. The hosts have been paid more attention in many studies because of their high quantum efficiencies and the excellent physical and chemical stabilities [9, 10]. At the time they show very interesting physical, and, in particular, optical properties [11, 12]. Several solid solutions of alkaline earth halophosphates like $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$, $\text{Sr}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ and $\text{Ba}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$

are known [13]. The substitution of Eu^{2+} for Ca^{2+} is facilitated by the similarity in ionic radii. These phosphors are normally synthesized by solid state reaction which requires very high temperature and it is time consuming also. This prompted us to go for alternative method for the synthesis of such phosphors which would be easy, needs low temperature and less time consuming than solid state reaction.

The present work reports for the first time the synthesis of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor via the Pechini (citrate gel) method and the investigation of its photoluminescent properties.

2. Experimental

For synthesis of Eu^{2+} activated chlorapatite phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ stoichiometric amount of the precursors $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, Eu_2O_3 converted to $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $(\text{NH}_4)\text{H}_2\text{PO}_4$ were taken in a china clay basins and dried in a desiccator. All the dried precursors were then finely milled and mixed together. Stoichiometric amount of Citric monohydrated and Ethylene glycol along with 2 drops of Glacial acetic acid were added to

dried precursors and stirred continuously.

On slow heating up to 140°C for ~ 1 h, the solution boils with the evolution of pale yellowish brown fumes and the process of gelation started. The mixture was then allowed to cool leading to a thick pale yellow gel. The gel was further heated slowly up to 350°C in air. The polymerization took place and a pale yellow resin/foam was formed and was pyrolysed into stunning black foam at 450°C , which started burning at 600°C . The complete pyrolysis took place at 750°C for 2 h. The white powder so obtained was slowly reduced first at 600°C for 1 h and then at 970°C for 3 h in presence of charcoal in order to reduce the trivalent activator to divalent state. Thus white crystalline $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor was prepared.

3. Results and discussion

XRD-Studies. X-ray diffraction (XRD) pattern of as prepared $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor obtained using Rikagu Meniflex II X-ray diffractometer is shown in Fig. 1. The XRD pattern of calcium apatite suggests the formation of a crystalline $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$

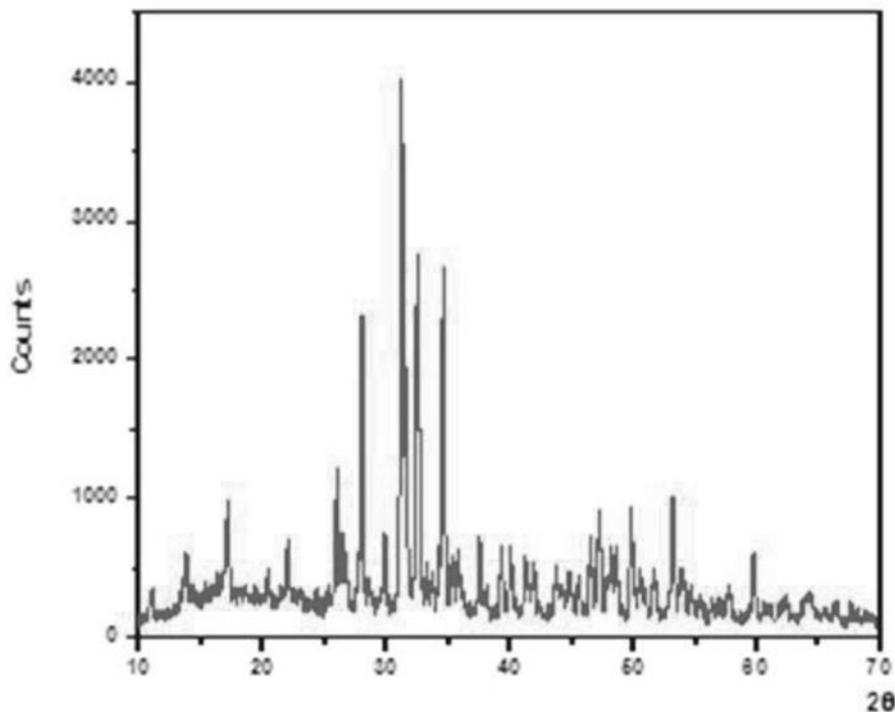


Fig. 1. X-ray diffraction pattern of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor

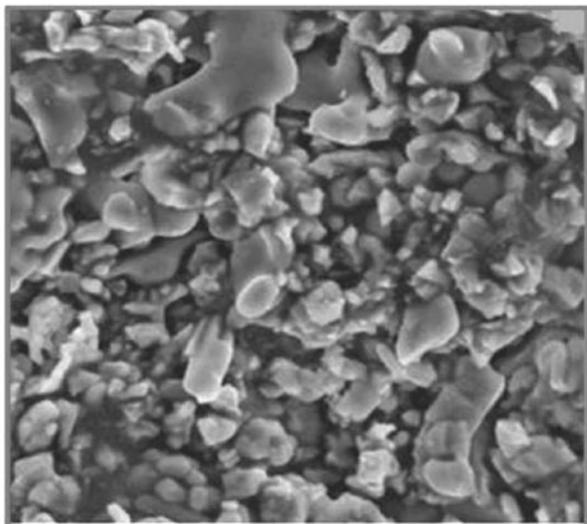


Fig. 2. Scanning electron microscope image of as-prepared $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor

matrix. The results of the XRD analysis indicate that almost all diffraction peaks can be indexed to a pure hexagonal $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ in JCPDS file with file No. JCPDS 33-0271.

Surface Morphology. The phosphor surface morphology was investigated using a Hitachi S-520 scanning electron microscope (SEM). Fig. 2 presents the SEM image of as prepared $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor. It can be seen that the particles have some irregular shape and the particle size lies in the range from 5 to 10 μm .

Photoluminescence (PL) study. PL measurements were performed at room temperature, using a Hitachi F-7000 Spectrofluorimeter equipped with a 450 W xenon lamp, in the range from 200 to 700 nm, with spectral width of 2.5 nm. Spectra were corrected using Rhodamine B standard by following the procedure prescribed by Hitachi. Prepared phosphors for W-LED meet the basic requirement that exhibits a bright emission under the excitation of near-UV light. Thus, the excitation and emission spectra of the prepared phosphors $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ were studied in order to assess their potential to be used for near-UV LED based W-LEDs. The photoluminescence (PL) and photoluminescence excitation (PLE)

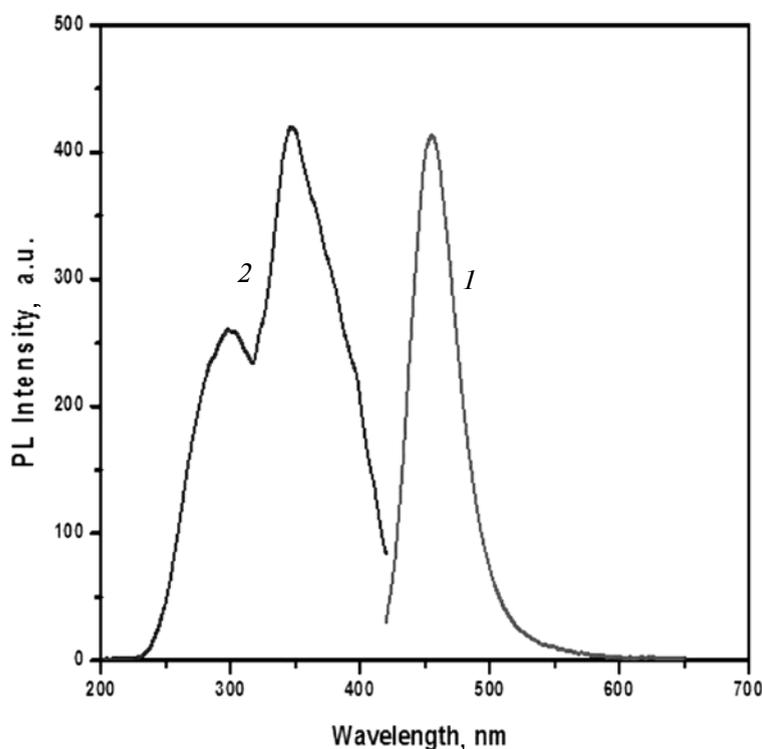


Fig. 3. Photoluminescence emission (1) and excitation (2) spectra of Eu^{2+} activated $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ phosphor; $\lambda_{em} = 456 \text{ nm}$, $\lambda_{ex} = 350 \text{ nm}$

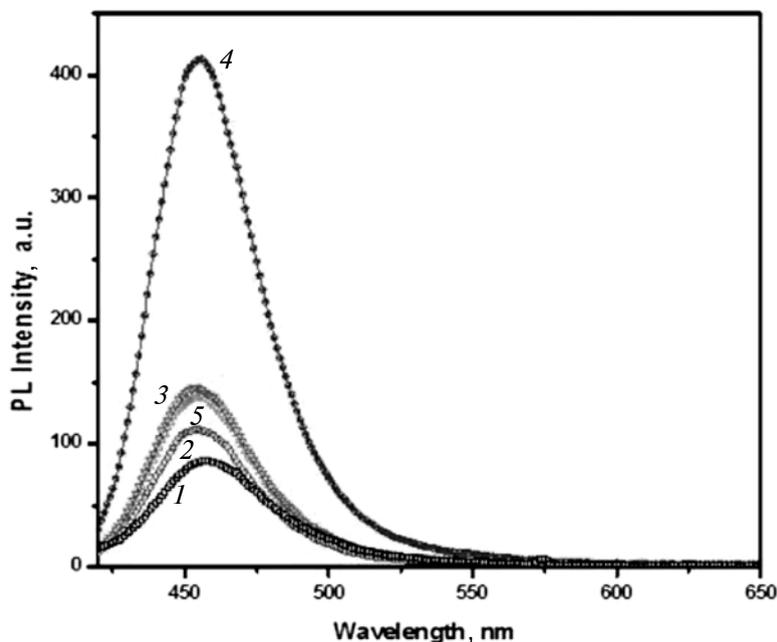


Fig. 4. Photoluminescence emission spectrum of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ with different concentration of Eu^{2+} , mol: 0.001 (1), 0.002 (2), 0.005 (3), 0.010 (4), 0.020 (5)

spectra of phosphor prepared are shown in Fig. 3. There are two broad bands in the PLE ($\lambda_{em} = 456 \text{ nm}$) spectra of phosphors, which are due to the transition from $^8S_{7/2}$ ($4f^7$) ground state of Eu^{2+} to the $4f^65d^1$ excited state. The weaker band is located at about 299 nm, and the stronger one is located at around 350 nm with shoulders at 386 nm, which matches well with the emission of commercially available near-UV LED chips. The bright blue emission band with peak at about 456 nm is observed in the PL ($\lambda_{ex} = 350 \text{ nm}$) spectra of this phosphors, which could be attributed to the typical $4f^65d^1$ (t_{2g}) – $4f^7$ ($^8S_{7/2}$) transition of Eu^{2+} [14].

The concentration of the activator has an impact on the performance of a phosphor. Therefore, it is important to determine the composition of the $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor with optimal PL emission intensity. A series of $\text{Ca}_{5-x}(\text{PO}_4)_3\text{Cl} : x\text{Eu}^{2+}$ phosphors with various Eu^{2+} content x was prepared and studied for the effect of activator concentration. The emission spectra of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor ($\lambda_{ex} = 350 \text{ nm}$) with different activator concentration are shown in Fig. 4. No obvious changes were observed for all the samples in our experimental wavelength range,

except the fact that the emission intensity of phosphor increases with the increase in Eu^{2+} concentration and reaches the maximum at $x = 0.01$ then concentration quenching occurs as the concentration of Eu^{2+} increased above 1 %. This type of quenching may be attributed to the fact that energy transfer between two identical ions occurs because the average distance between the activator ions becomes short enough for the energy to migrate and for the killers to reach [15].

CIE color coordinates. Fig. 5 shows color coordinates CIE (Commission internationale de l'éclairage) 1931 as (0.1551, 0.0849) for $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl} : 0.01 \text{Eu}^{2+}$ where as the commercial blue phosphor $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17} : \text{Eu}^{2+}$ (BAM: Eu^{2+}) has color coordinates as (0.1417, 0.1072) thus showing better purity of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl} : 0.01 \text{Eu}^{2+}$ as compared to BAM: Eu^{2+} phosphor. Moreover, the color coordinates of the above synthesized phosphor are nearer to those for blue color suggested by the color system EBUPAL/ESCAM, RGBs Blue as well as Adobe blue (0.15, 0.06). Thus the synthesized phosphor is a potential candidate for blue emitting phosphor for solid state lighting using near-UV based W-LEDs.

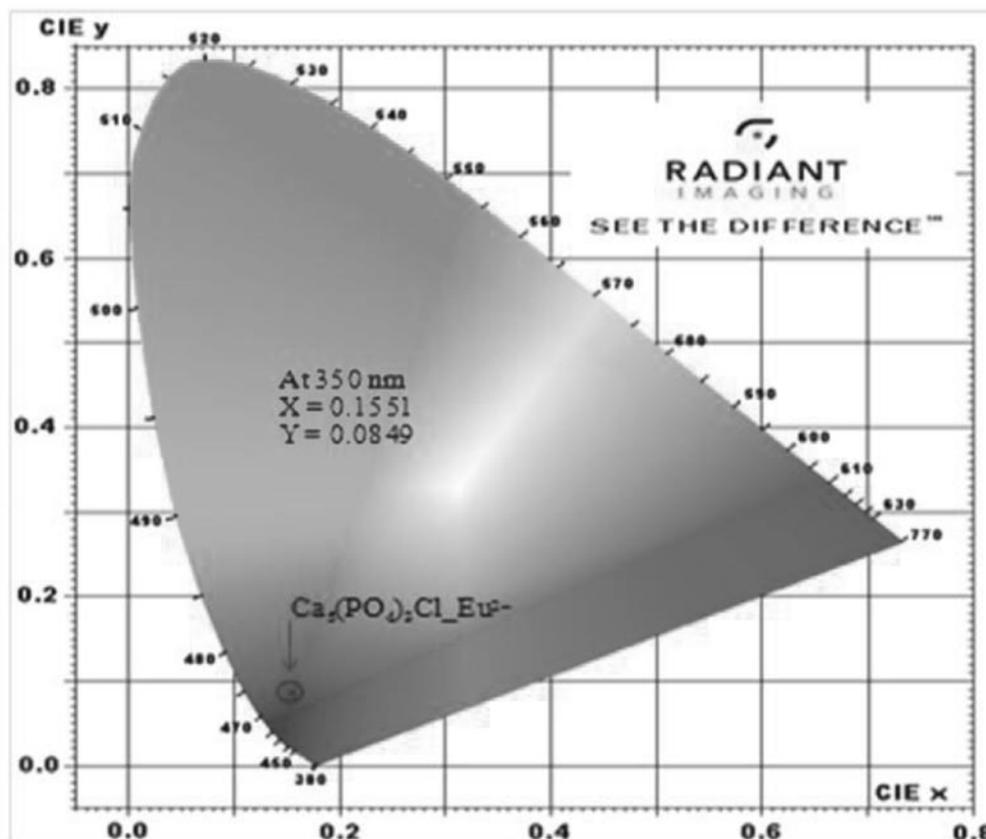


Fig. 5. CIE chromaticity coordinates of $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl} : 0.01\text{Eu}^{2+}$ phosphor

4. Conclusions

For the first time Eu^{2+} doped chlorapatite phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ was synthesized by novel Pechini (citrate gel) method. Photoluminescence measurements showed that Eu^{2+} doped chlorapatite phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ synthesized by this method exhibits intensive blue wide-band emission with maximum intensity at 456 nm under near-UV excitation. Both blue and white LEDs can be fabricated by pre-coating the above synthesized phosphors onto 395 nm-emitting InGaN chips. Moreover, the strong absorption of phosphor in the range of 300 nm to 410 nm makes this Eu^{2+} -activated

chlorapatite phosphor a potential candidate as a blue component (one of the three primary color components) for fabrication near-UV based phosphor converted white LEDs.

Acknowledgements

The author D.N. Game is thankful to the Head of the Department of Physics, Sant Gadge Baba Amravati University, Amravati, for providing all the necessary research facilities and also to the Principal, Deccan Education Society's Technical Institute, Fergusson College Campus, Pune for constant encouragement and guidance.

REFERENCES

- [1] M. Mikami, H. Watanabe, K. Uhedra, et al., New phosphors for white LEDs: Material design concepts, IOP Conf. Ser: Mater. Sci. Eng. 1 (2009) 012002.
- [2] M. Bredol, U. Kynast, C. Ronda, Designing luminescent materials, Adv. Mater. 3 (1991) 361.
- [3] W.M. Yen, S. Shionoya, H. Yamamoto, Phosphor Handbook, CRC Press, New York, 2007.
- [4] S. Ekamparam, K.C. Patil, Synthesis and properties of Eu^{2+} activated blue phosphors, J. Alloy Compd. 248 (1997) 7.
- [5] R.P. Rao, D.J. Devine, RE-activated lanthanide phosphate phosphors for PDP applications, J. Lumin. 87 (2000) 1260.

[6] **Z.S. Wu, Y. Dong, J.Q. Jiang**, Thermal treatment effects on degradation of $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor for PDP, *Mat. Sci., Eng. B. Solid.* 150 (2008) 151.

[7] **P.F. Zhu, Q.R. Zhu, H.Y. Zhu**, Effect of SiO_2 coating on photoluminescence and thermal stability of $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ under VUV and UV excitation, *Opt. Mater.* 30 (2008) 930.

[8] **W.N. Wang, F. Iskandar, K. Okuyama, Y. Shinomiya**, Rapid synthesis of non-aggregated fine chlorapatite blue phosphor powders with high quantum efficiency, *Adv. Mater.* 20 (2008) 3422.

[9] **M. Kottaisamy, R. Jagannathan, P. Jeyagopal, et al.**, Eu^{2+} luminescence in $\text{M}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ apatites, where M is Ca^{2+} , Sr^{2+} and Ba^{2+} , and X is F^- , Cl^- , Br^- and OH^- , *J. Phys. D: Appl. Phys.* 27 (1994) 2210.

[10] **Z. Zhang, J. Wang, M. Zhang, et al.**, The energy transfer from Eu^{2+} to Tb^{3+} in calcium chlorapatite phosphor and its potential application

in LEDs, *Appl. Phys. B.* 91 (2008) 529.

[11] **R. Parreu, J.J. Carvajal, X. Solans, et al.**, Crystal structure and optical characterization of pure and Nd-substituted type III $\text{KGd}(\text{PO}_3)_4$, *Chem. Mater.* 18 (2006) 221.

[12] **R. Parreu, R. Solià, J. Gavalda, et al.**, Crystallization Region, Crystal Growth, and Phase Transitions of $\text{KNd}(\text{PO}_3)_4$, *Chem. Mater.* 15 (2003) 5059.

[13] **D.H. Gahane, B.M. Bahirwar, C.D. Mungmode, S.V. Moharil**, Development of blue emitting alkaline earth chlorophosphates phosphor for white light emitting diode, *Bionano Frontier. Special Issue* (2011) 38–40.

[14] **J. Yu, C. Guo, Z. Ren, J. Bai**, Photoluminescence of double-color-emitting phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$, Mn^{2+} for near-UV LED, *Optics & Laser Technology.* 43 (2011) 762.

[15] **G. Blasse, B. Grabmaier**, *Luminescent Materials*, Springer, Berlin, 1994.

THE AUTHORS

GAME Deorao N.

Sant Gadge Baba Amravati University

Camp Area, Near Tapovan Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
deorao.game@gmail.com

INGALE Nitin B.

Prof. Ram Meghe Institute of Technology and Research

Anjangaon Bari Road, Badnera, Amravati, Maharashtra 444701, India
cbp.2702@gmail.com

OMANWAR Shreeniwas Kerba

Sant Gadge Baba Amravati University

Camp Area, Near Tapovan Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
shreeniwasomanwar@gmail.com

Гейм Д.Н., Ингале Н.Б., Оманвар Ш.К. СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$, ПЕРСПЕКТИВНОГО ДЛЯ СОЗДАНИЯ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ИСТОЧНИКА ОСВЕЩЕНИЯ.

В статье представлен новый метод приготовления люминофора на основе хлорapatита $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$, активированного Eu^{2+} , который можно применять как твердотельный источник освещения. Люминофор был синтезирован методом Печини (цитратный метод), который оказался более эффективным, чем традиционный метод высокотемпературной твердотельной реакции. Изучение люминофора показало, что его фотолюминесценцию можно возбуждать источником света в диапазоне 220 – 430 нм, что вызывает ярко-синее свечение на длине волны $\lambda_{em} = 456$ нм (длина волны возбуждения $\lambda_{ex} = 350$ нм лежит в ближней УФ-области). Предлагаемый люминофор испускает синий цвет и, следовательно, может служить одним из трех исходных цветовых компонентов (RGB – красный, зеленый, синий) светодиода, дающего белый свет.

ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ИСТОЧНИК ОСВЕЩЕНИЯ, МЕТОД ПЕЧИНИ (ЦИТРАТНЫЙ МЕТОД), СИНИЙ ЛЮМИНОФОР, ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Mikami M., Watanabe H., Uheda K., et al., New phosphors for white LEDs: Material design concepts // IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. 2009. Vol. 1. No. 1. P. 012002.
- [2] Bredol M., Kynast U., Ronda C. Designing luminescent materials // Adv. Mater. 1991. Vol. 3. No. 7–8. Pp. 361–367.
- [3] Yen W.M., Shionoya S., Yamamoto H. Phosphor Handbook. New York: CRC Press, 2007.
- [4] Ekambaram S., Patil K.C. Synthesis and properties of Eu^{2+} activated blue phosphors // J. Alloys Compd. 1997. Vol. 248. No. 1–2. Pp. 7–12.
- [5] Rao R.P., Devine D.J. RE-activated lanthanide phosphate phosphors for PDP applications // J. Lumin. 2000. Vol. 87–89. Pp. 1260–1263.
- [6] Wu Z., Dong Y., Jiang J. Thermal treatment effects on degradation of $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ phosphor for PDP // Mater. Sci. Eng. B. 2008. Vol. 150. No. 3. Pp. 151–156.
- [7] Zhu P., Zhu Q., Zhu H., et al., Effect of SiO_2 coating on photoluminescence and thermal stability of $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ under VUV and UV excitation // Opt. Mater. (Amst). 2008. Vol. 30. No. 6. Pp. 930–934.
- [8] Wang W.-N., Iskandar F., Okuyama K., Shinomiya Y. Rapid synthesis of non-aggregated fine chloroapatite blue phosphor powders with high quantum efficiency // Adv. Mater. 2008. Vol. 20. No. 18. Pp. 3422–3426.
- [9] Kottaisamy M., Jagannathan R., Jeyagopal P., Rao R.P., Narayanan R. Eu^{2+} luminescence in $\text{M}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ apatites, where M is Ca^{2+} , Sr^{2+} and Ba^{2+} , and X is F^- , Cl^- , Br^- and OH^- // J. Phys. D. Appl. Phys. 1994. Vol. 27. No. 10. Pp. 2210–2215.
- [10] Zhang Z., Wang J., Zhang M., Zhang Q., Su Q. The energy transfer from Eu^{2+} to Tb^{3+} in calcium chloroapatite phosphor and its potential application in LEDs // Appl. Phys. B. 2008. Vol. 91. No. 3–4. Pp. 529–537.
- [11] Parreu R., Carvajal J.J., Solans X., Dñaz F., Aguilu M. Crystal structure and optical characterization of pure and Nd-substituted type III $\text{KGd}(\text{PO}_3)_4$ // Chem. Mater. 2006. Vol. 18. No. 1. Pp. 221–228.
- [12] Parreu R., Soliñ R., Gavalda J., et al., Crystallization region, crystal growth, and phase transitions of $\text{KNd}(\text{PO}_3)_4$ // Chem. Mater. 2003. Vol. 15. No. 26. Pp. 5059–5064.
- [13] Gahane D.H., Mungmode C.D., Moharil S.V. Development of blue phosphor for white light emitting diode // Bionano Front. 2013. Special Issue. Pp. 38–40.
- [14] Yu J., Guo C., Ren Z., Bai J. Photoluminescence of double-color-emitting phosphor $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$, Mn^{2+} for near-UV LED // Opt. Laser Technol. 2011. Vol. 43. No. 4. Pp. 762–766.
- [15] Blasse G., Grabmaier B.C. Luminescent Materials. Berlin: Springer Science & Business Media. 2012.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГЕЙМ Деорао Н. — сотрудник кафедры физики университета Сант Гадж Баба Амравати, Индия.

Camp Area, Near Tapovan Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
deora.game@gmail.com

ИНГАЛЕ Нитин Б. — сотрудник Института технологии и исследований Проф. Рама Мегхе, Амравати, Индия.

Anjangaon Bari Road, Badnera, Amravati, Maharashtra 444701, India
cbp.2702@gmail.com

ОМАНВАР Шринивас Керба — Ph.D., профессор, заведующий кафедрой физики университета Сант Гадж Баба Амравати, Индия.

Camp Area, Near Tapovan Road, Amravati, Maharashtra 444602, India
shreenivasomanwar@gmail.com

DOI: 10.5862/JPM.237.5

УДК: 577.35, 577.25

*А.В. Большакова¹, Е.О. Куканова¹, А.Н. Гайнуллина¹,
В.А. Жемков^{1,2}, С.А. Корбан^{1,2}, И.Б. Безпрозванный^{1,3}*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Российская Федерация,

² Петербургский институт ядерной физики

им. Б.П. Константинова, Российская Федерация,

³ Юго-Западный медицинский центр университета Техаса, США

РЕЦЕПТОР СИГМА-1 КАК ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКАЯ МИШЕНЬ ПРИ ЛЕЧЕНИИ НЕЙРОПАТОЛОГИИ

Сигма-рецепторы классифицируются как отдельный класс внутриклеточных рецепторов. Среди них рецептор сигма-1 лучше всего изучен со стороны фармакологического применения. Этот рецептор со средней или высокой степенью аффинности связывает широкий спектр химических соединений самых разных структурных классов и разнообразных терапевтических и фармакологических свойств. Рецептор сигма-1 представляет собой трансмембранный белок эндоплазматического ретикула (ЭПР), где он регулирует функцию инозитол-3-фосфатного рецептора, стабилизируя кальциевую сигнализацию между ЭПР и митохондрией. Указанный рецептор участвует в формировании многих неврологических и психиатрических состояний. Предполагается, что он действует как сенсор нормального функционирования кальция. В исследованиях последних лет была показана роль нарушения кальциевой сигнализации в патогенезе болезней Альцгеймера и Хантингтона. В частности, изменения кальциевого гомеостаза в эндоплазматическом ретикулуме ведут к нарушению синаптических связей в нейронах. Таким образом, рецептор сигма-1 является перспективным объектом, который можно рассматривать как потенциальную терапевтическую мишень для лечения невропатологических заболеваний.

РЕЦЕПТОР СИГМА-1, ЭНДОПЛАЗМАТИЧЕСКИЙ РЕТИКУЛУМ, КАЛЬЦИЕВАЯ СИГНАЛИЗАЦИЯ, ШАПЕРОННАЯ АКТИВНОСТЬ, НЕЙРОПАТОЛОГИЯ.

Введение

Многочисленные данные доклинических исследований, проведенных на различных моделях нарушения памяти, позволяют рассматривать агонисты рецепторов сигма-1 как многообещающие препараты для лечения когнитивной дисфункции [1, 2, 20, 61 – 63]. Регуляция возбудимости плазматической мембраны нейрона через рецептор сигма-1, вероятно, играет ключе-

вую роль в предотвращении неврологических заболеваний.

В целом можно с уверенностью сказать, что рецептор сигма-1 выступает в качестве внутриклеточного модулятора:

между эндоплазматическим ретикулумом (ER) и митохондриями,
между ER и ядром клеток,
между ER и мембраной,
а также модулятором межклеточного сигналинга.

Поскольку рецептор сигма-1 связывает широкий спектр химических соединений очень разных структурных классов и разнообразных терапевтических свойств, он представляет большой интерес для фармакологии. Сотрудники лаборатории молекулярной нейродегенерации (ЛМН) Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого поддерживают кальциевую гипотезу развития нейропатологии. Данная гипотеза указывает на ключевую роль нарушения кальциевого сигналинга в развитии и возникновении нейродегенеративных заболеваний. При этом рецептор сигма-1 (предмет исследования настоящего обзора) регулирует функцию инозитолтрифосфатного рецептора, стабилизируя кальциевую сигнализацию между эндоплазматическим ретикуломом и митохондрией.

Таким образом, наш наибольший интерес к изучению рецептора сигма-1 вызван его биофизической ролью в формировании нейрологических и психиатрических состояний, а также в регуляции внутриклеточной концентрации ионов кальция и кальциевой сигнализации.

Цель данного обзора — анализ сведений в современной литературе, посвященных рецептору сигма-1, его структуре и биофизической роли в клетках, участию этого рецептора в нормальных и патологических процессах.

Сигма-рецепторы изначально считались разновидностью опиоидных рецепторов, однако сейчас они классифицируются как отдельный класс рецепторов, уникальных по структуре и набору связывающихся с ними лигандов. Среди рецепторов данного типа наиболее фармакологически изучен рецептор сигма-1.

Рецептор сигма-1 выполняет защитную функцию в различных тканях. Действие этого рецептора осуществляется через регуляцию биоэнергетики клетки, что предполагает его участие в различных нейропсихиатрических заболеваниях [1]. Указанные рецепторы регулируют различные ионные каналы, включая калиевые, кальциевые и хлорные, а также NMDA-рецепторы, высвобождают различные нейротрансмитте-

ры, обеспечивают транспорт липидов, передачу сигнала нейротрофического фактора головного мозга (BDNF), миелинизацию, нейрито- и синаптогенез, что включает в себе высокий терапевтический потенциал лигандов рецепторов сигма-1. Модулирующий эффект рецепторов сигма-1 на нейротрансмиттерные системы включает усиление глутаматергической, холинергической, серотонинергической нейротрансмиссии. Напротив, активация рецепторов сигма-1 снижает интенсивность высвобождения норадреналина и гамма-аминомасляной кислоты. Усиление или ослабление кальциевого тока благодаря работе рецепторов сигма-1 объясняет, почему селективные агонисты этих рецепторов могут модулировать широкий спектр нейрональных эффектов, в том числе ключевой механизм влияния рецепторов сигма-1 на процессы обучения и памяти [2].

Молекулярная биология рецептора сигма-1

Данный рецептор представляет собой высококонсервативный белок млекопитающих [3, 4]. Выравнивание последовательностей показало, что белковая последовательность на 30 % идентична (гомологичность составляет 67 %) дрожжевой стерол-изомеразе C8-C7, но при этом сам рецептор не обладает этой ферментативной активностью.

Ген рецептора сигма-1 расположен на девятой хромосоме, локусе p13, известном ввиду своей связи с психотическими расстройствами [6]. Рецептор сигма-1, имея небольшие размеры (223 а.к.о. (аминокислотные остатки)), со средней или высокой степенью аффинности связывает широкий спектр химических соединений очень разных структурных классов и разнообразных терапевтических и фармакологических свойств. Среди его лигандов такие соединения, как бензоморфаны (SKF-10047, пентазоцин, декстрометорфан), антипсихотики (галоперидол), антидепрессанты (флювоксамин), стероиды (прогестерон), антигистаминные препараты (хлорфенирамин), лиганды ядерных рецепторов (тамоксифен), антагонисты каналов Ca^{2+} (верапамил, эмопамил), противогрибковые

препараты (фенпропиморф, тридэморф) и наркотические средства (метамфетамин, кокаин и N,N-диметилтриптамин) [7]. Тем не менее, жизнеспособны мыши, нокаутные по гену рецептора сигма-1, они также фертильны и не проявляют каких-либо явных изменений в фенотипе, за исключением пониженной гипермоторной реакции в ответ на стимуляцию SKF-10047, по сравнению с мышами дикого типа. Данный факт свидетельствует в пользу идеи о вовлеченности рецептора сигма-1 в ответ на психостимулирующие воздействия [8].

Рецепторы сигма-1 широко распространены в центральной нервной системе, печени, почках, легких, в эндокринных, иммунных и репродуктивных тканях [9]. Данный рецептор представляет собой трансмембранный белок, специфично расположенный в богатых церамидом и холестерином липидных микродоменах, ассоциированных с митохондриями участков мембраны ER. Там он регулирует функцию инозитол-3-фосфатного рецептора, стабилизируя кальциевый сигналинг между ER и митохондрией. Показано, что рецептор сигма-1 формирует Ca^{2+} -регулирующий тримерный комплекс с анкирином В и инозитол-3-фосфатным рецептором в клетках нейробластомы NG-108 [10].

Кроме того, регулируя уровни реактивных форм кислорода, рецептор сигма-1 контролирует уровни Рас-ГТФазы в плазматической мембране и таким образом отвечает за формирование шипиков в гиппокампе — центральном отделе мозга, ответственном за формирование памяти [11]. Через регуляцию уровня реактивных форм кислорода рецептор сигма-1 также активирует транскрипционный фактор NF- κ B, который контролирует экспрессию антиапоптотического белка Bcl-2 [7] и, значит, участвует в поддержании жизни нейронов. На кортикальных клеточных культурах показано, что агонист рецептора сигма-1 SA4503 увеличивает количество выживших клеток после оксидативного стресса через подавление MAP-киназного пути и экспрессии глутаматных рецепторов [12].

Хотя рецептор сигма-1 и не взаимодействует с G-белком непосредственно [13], все

же показано, что существуют функциональная и физическая связи рецептора сигма-1 с клонированным опиоидным μ -рецептором (он связывает G-белок) [14]. Эти взаимодействия, которые возникают только у формы рецептора сигма-1, связанной с антагонистом, проявляются в значительном облегчении активации G-белка агонистом μ -рецептора DAMGO. Такое облегчение подтверждается эффектом усиления (наблюдается *in vivo*) морфин-обусловленного наркоза антагонистами рецептора сигма-1.

Функциональная активность и расположение рецептора сигма-1 в клетке зависят от общего состояния клетки, стимуляции его лигандами и уровня концентрации кальция в ER. Рецептор сигма-1 может быть как в активном, так и неактивном состояниях. Самые последние исследования свидетельствуют о том, что этот рецептор взаимодействует с шаперонами и сам является шапероном ER [3]. В неактивном состоянии или при стимуляции антагонистами (например, NE-100 или галоперидолом) рецептор сигма-1 связан с другим белком ЭПР — шапероном BiP [10]. При стимуляции агонистами (например, кокаином или пентазоцином) в концентрации насыщения или под воздействием длительного клеточного стресса, вызванного, например, гипогликемией или истощением кальциевых запасов в ER под действием тапсигаргина, рецептор сигма-1 транслоцируется в приближенные к плазматической мембране области ER или непосредственно в плазматическую мембрану [15, 16].

Сверхэкспрессия рецептора сигма-1 также приводит к его увеличенной транслокации на плазматической мембране [17]. На мышинной модели [18] показано, что хроническое потребление алкоголя вызывает повышенную экспрессию (и поэтому, возможно, транслокацию в плазматической мембране) рецептора сигма-1 в мозге. Вместе с тем недавние исследования Х. Яо с сотрудниками [19] продемонстрировали, что кокаин вызывает перемещение рецептора сигма-1 с ER на липидные рафты плазматической мембраны, где через активацию Src-киназы осуществляется индукция хемокинов CCL2 в микроглии. Также пока-



зано, что в кортикальных нейронах оверэкспрессия рецептора сигма-1 увеличивает связывание тирозинкиназного рецептора В и фосфолипазы С [20].

Транслоцировавшись на плазматическую мембрану, рецептор сигма-1 взаимодействует с разнообразными ионными каналами, рецепторами и киназами [21]. Действительно, с помощью пэтч-клампа на меланотропных клетках гипофиза было показано, что агонист рецептора сигма-1 пентазоцин ингибирует выходящий ток ионов калия K^+ и данное явление можно обратить, воздействуя антагонистом рецептора сигма-1 NE-100 [22]. Помимо прямого физического взаимодействия и регуляции активности потенциал-зависимых (ПЗ) каналов K^+ в мышечных нервных терминалях задней доли гипофиза [23], рецептор сигма-1 регулирует активность канала K^+ и в крысиных срезах гиппокампа, интракардиальных нейронах и опухолевых клетках [24]. Лиганды рецептора сигма-1 модулируют несколько типов персинаптических каналов Ca^{2+} в крысиных симпатических и парасимпатических нейронах [25]. Рецептор сигма-1 также модулирует активность рецептора NMDA [26] и воздействует на синаптическую пластичность через Ca^{2+} -активируемые каналы K^+ малой проводимости [27]. На клетках HEK293 cells и COS-7, так же, как и на неонатальных мышечных кардиомиоцитах, показано, что рецептор сигма-1 модулирует кардиальные ПЗ каналы ионов натрия Na^+ [28]. В культивированных клетках ганглия сетчатки под воздействием агониста рецептора сигма-1 SKF10047 ингибируются токи ионов кальция. Прямая связь между рецептором сигма-1 и Ca^{2+} -каналом L-типа была доказана с помощью иммунопреципитации [29].

Существуют также данные, указывающие на то, что рецептор сигма-1 регулирует релиз нейротрансмиттера в дофаминовой, серотониновой и м-холинэргической передаче, участвует в клеточной дифференциации, клеточном ответе на воспаление и в патогенезе экстрапирамидных расстройств [21].

Интересно, что рецептор сигма-1 был обнаружен во внеклеточном пространстве в

клетках NG-108, подвергаемых воздействию кокаина, что показывает возможную активность рецептора сигма-1 в качестве шаперона и во внеклеточном пространстве [7].

Структура рецептора сигма-1

Рецептор сигма-1 является интегральным мембранным рецептором и предпочтительно локализуется в мембранах ER, ассоциированных с митохондриями [16].

Несмотря на то, что детальная атомная структура рецептора на настоящий момент еще не установлена, был предпринят ряд исследований, направленных на установление топологии белка и картирование его активного сайта. Первоначально рецептор сигма-1 был охарактеризован как трансмембранный белок первого типа, имеющий лишь один трансмембранный домен [30]. В настоящий момент достаточно большое число экспериментальных данных указывают на то, что имеется два трансмембранных домена, представляющих собой альфа-спирали. Это данные биоинформатического анализа, молекулярного моделирования, методов мечения эпитопов, ограниченного протеолиза и ЯМР-спектроскопии (NMR).

Число и локализация трансмембранных доменов оказываются различными и зависят от конкретного алгоритма предсказания гидрофобных доменов по аминокислотной последовательности (рис. 1) [31 – 37]. Большинство алгоритмов указывает на наличие двух или трех гидрофобных участков (см. рис. 1). Первые два домена были определены как трансмембранные высокоупорядоченные альфа-спирали (TM1, TM2). Вторая трансмембранная спираль обладает амфипатическими свойствами [38]. Домены 91 – 109 и 176 – 194 а.к.о. содержат высококонсервативные последовательности, гомологичные стерол-изомеразе C8-C7 дрожжей и грибов. Благодаря своей гомологичности, эти последовательности получили названия как стероид-связывающие домены SBDLI и SBDLII (Steroid Binding Domain-Like I, II) (рис. 2, а) [39].

Результаты мечения эпитопов и ограниченного протеолиза также согласуются с результатами компьютерного анализа последовательности. На настоящий мо-

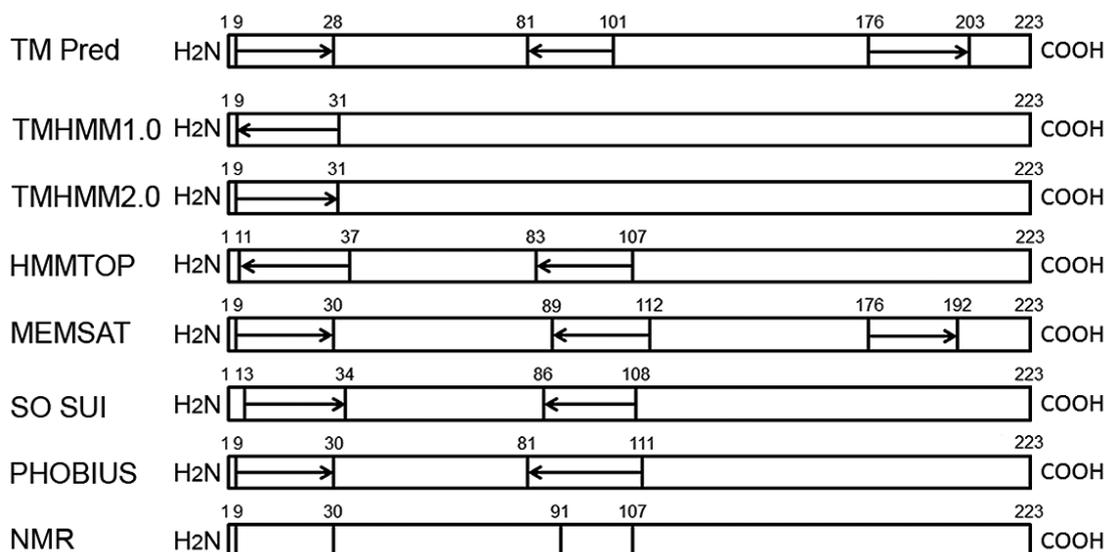


Рис. 1. Топологические модели рецептора сигма-1, построенные на основании аминокислотной последовательности рецептора с использованием различных предсказательных алгоритмов: TM Pred [31], TMHMM [32, 33], HMMTOP [34], MEMSAT [35], SO SUI [36], PHOBIUS [37] и метода ЯМР (NMR).

H₂N, COOH – соответственно N- и C-концевые участки аминокислотной последовательности; числа соответствуют порядковым номерам аминокислотных остатков; стрелки указывают направления трансмембранной спирали в биологической мембране (→ из цитоплазмы, ← в цитоплазму) (см. рис. 2)

мент были предложены две альтернативные топологические модели, которые отличаются друг от друга направленностью встраивания рецептора в липидный бислой (рис. 2, *b*, *c*) [16, 23]. Э. Эйдар с сотрудниками [23] предложили топологическую модель рецептора сигма-1, согласно которой два трансмембранных домена этого рецептора, TM1 и TM2, соединены во внеклеточном пространстве петлей примерно в 50 аминокислотных остатков, тогда как его N- и C-концы обращены в цитоплазму (см. рис. 2, *b*) [23]. C-концевой участок простирается примерно на 125 а.к.о., а N-терминальный – относительно короткий и включает в себя всего 10 а.к.о.

Альтернативная топологическая модель была предложена Т. Хаяши и Т.П. Су, согласно которой рецептор сигма-1 локализован на мембранах ER, а его N- и C-концевые участки обращены в люмен ER (см. рис. 2, *c*) [16].

На N-конце белка расположен диаргининовый (R7R8) мотив, который является сигналом удержания рецептора в мембранах ER [30, 40].

В настоящее время известно несколько сплайсинговых вариантов полноразмерного рецептора сигма-1. Одна из форм представляет собой вариант, имеющий делецию третьего экзона (119 – 149 а.к.о.) [41]. Другая охарактеризованная форма – это укороченный рецептор сигма-1, альтернативный сплайсинг мРНК которого приводит к образованию преждевременного стоп-кодона (вариант 12 кДа) [42]. Известно, что обе формы не способны к связыванию лигандов. Их же функциональное значение остается неизвестным.

Было показано, что изолированные трансмембранный (1 – 116 а.к.о.) и C-концевой (116 – 223 а.к.о.) домены рецептора также лишены способности связывать лиганды, хотя часть функций рецептора при этом сохранена (в частности, способность активировать рецептор Ins3P или шаперонная активность C-концевого фрагмента) [16, 43]. Показательно, что изолированный C-концевой домен при этом также локализуется в мембранах ER, что согласуется с наличием третьего гидрофобного мембраносвязанного участка в райо-

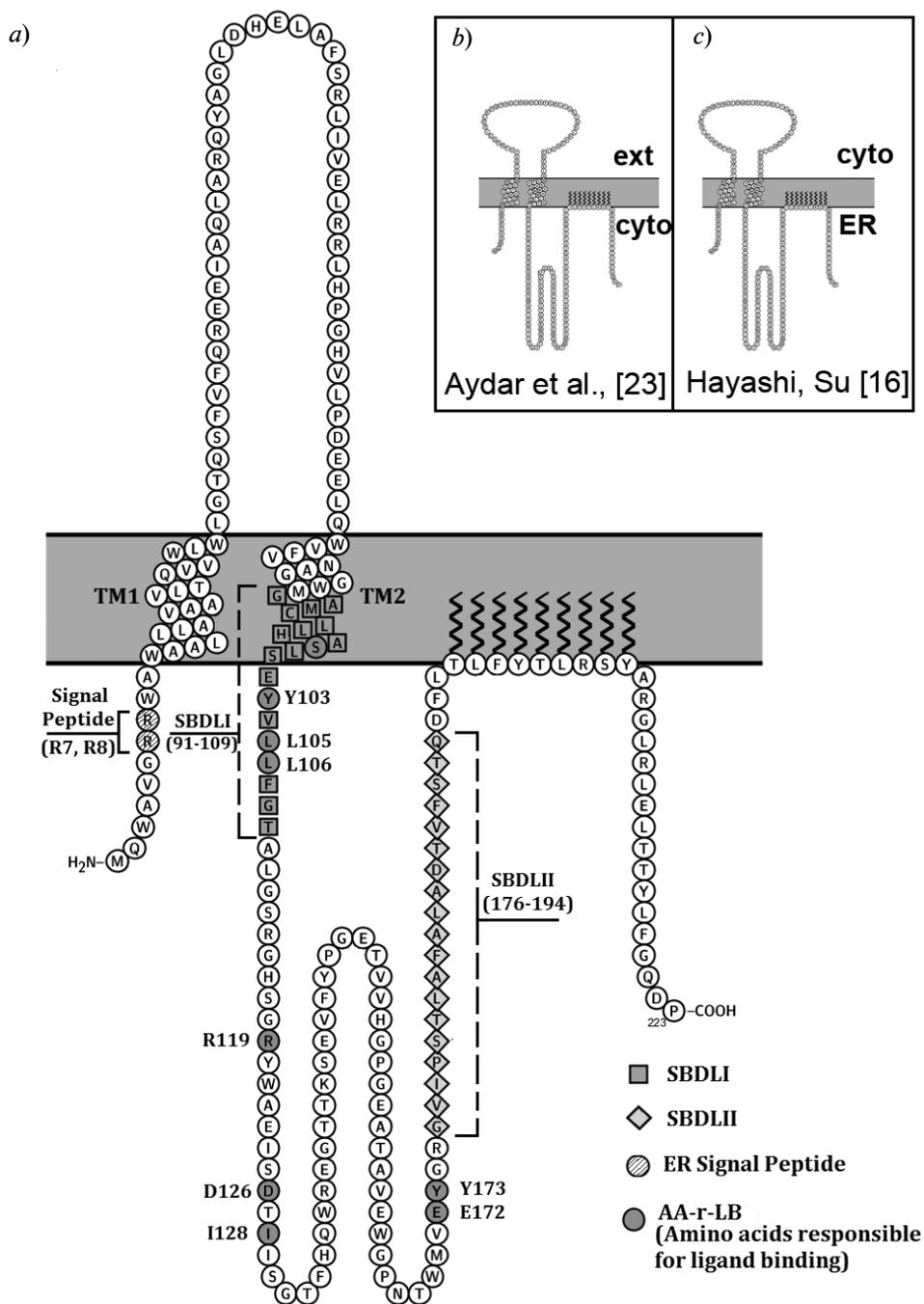


Рис. 2. Предполагаемая структура рецептора сигма-1 и аминокислотные остатки, ответственные за связывание его лигандов, согласно данным, полученным различными методами: сайт-направленного мутагенеза и мечения светочувствительными лигандами (a), а также мембранная ориентация рецептора согласно результатам мечения эпитопов [23] (b) и ограниченного протеолиза [16] (c).

Ext – внеклеточное пространство; Cyto – цитоплазма; ER – люмен эндоплазматического ретикулума; TM1, TM2 – трансмембранные высокоупорядоченные альфа-спирали; SBDL I, SBDL II – стероид-связывающие домены I и II; ER Signal Peptide – сигнальная последовательность ER, AA-r-LB – аминокислотные остатки, участвующие в связывании лигандов рецептора сигма-1. Числа соответствуют порядковым номерам аминокислотных остатков

не SBDL II. Методом ЯМР-спектроскопии было показано, что этому мембраносвязанному участку отвечают аминокислотные остатки 198 – 206 [44].

Недавно Дж.Л. Ортега-Ролдан с сотрудниками определили методами ЯМР-спектроскопии вторичную структуру рецептора сигма-1 [44]. Гидрофобный участок TM2 находится в районе 91 – 107 а.к.о., тогда как амфипатический мембраносвязанный участок – в диапазоне 198 – 206 а.к.о. Фрагменты SBDL I и SBDL II (см. рис. 2, а) были идентифицированы как альфа-спиральные. Петля, обращенная в цитозоль, образована несколькими короткими альфа-спиральными участками и участками петель. Этим же коллективом авторов были изучены конформационные перестройки, происходящие в С-концевом фрагменте (112 – 223 а.к.о.) при связывании с белком-шапероном ER GRP78/BiP [38], которые, как было показано, затрагивают практически все аминокислотные остатки рецептора сигма-1.

На настоящий момент с помощью сайт-направленного мутагенеза, мечения светочувствительными метками и методов молекулярного моделирования установлено, что в формирование компактного сайта связывания рецептора так или иначе вовлечены все его домены (см. рис. 2).

Первые эксперименты по картированию активного сайта с использованием сайт-направленного мутагенеза позволили идентифицировать остатки во втором трансмембранном домене, критичные для лиганд-связывающей функции рецептора: S99, Y103, L105 и L106 [45]. С помощью синтезированных специфических лигандов со светочувствительными метками было показано, что сайт связывания образован аминокислотными остатками SBDL I региона 91 – 109 а.к.о., которые окружают критический атом азота, обнаруженный во всех специфических рецептору сигма-1 агонистах и антагонистах [46 – 49]. Кроме того, в образовании сайта связывания участвуют аминокислоты SBDL II региона 176 – 194 а.к.о., окружая фенильное кольцо лиганда. Й. Чен с соавторами в своей работе [49] по характеристике сайта связывания кокаина

в рецепторе сигма-1 при помощи фотоувствительного 3-йодо-4-азидококаина и радиосеквенирования идентифицировали остаток D188 (располагается в регионе SBDL II) как одну из ключевых аминокислот, участвующих в образовании лиганд-связывающего сайта.

Для поддержания структуры активного сайта важную роль играет С-концевая последовательность 209 – 223 а.к.о., делеции которого приводят к потере лиганд-связывающих свойств [49].

Карбоксильный конец первого трансмембранного домена TM1 также принимает участие в образовании сайта связывания через близкое взаимодействие с регионами SBDL I и SBDL II, расстояние между которыми составляет 8 Å [46, 50]. Таким образом, гипотетическая пространственная организация лиганд-связывающего сайта рецептора сигма-1 основана на внутримолекулярном сближении участков TM1/SBDL I с регионом SBDL II.

В недавней серии статей было описано построение модели рецептора сигма-1 и картирование его активного сайта методами *in silico* и сайт-направленного мутагенеза [51, 52]. Начальная модель была построена методом моделирования по гомологии (PDB 3CIA, 1I24, 2ZZZ, 2Q8I), а негомологичная часть (N-концевой участок) была построена *de novo*. Результаты компьютерного моделирования достаточно хорошо согласуются с имеющимися на настоящий момент экспериментальными данными, а сама модель была использована для дизайна и разработки новых, более специфичных синтетических лигандов рецептора сигма-1 [53, 54]. Картирование активного сайта позволило идентифицировать ключевые остатки, вовлеченные в связывание агониста рецептора сигма-1 – пентазоцина. Остаток аспарагиновой кислоты D126 образует ключевую связь – солевой мостик с атомом азота молекулы пентазоцина; E172 образует водородную связь с гидроксильной группой лиганда; остатки R119, I128, Y173 формируют гидрофобный карман активного сайта. Мутации по остаткам в участке SBDL II незначительно влияли на связывание лигандов, однако С-концевой участок

200 – 223 а.к.о. оказался необходимым для стабилизации структуры сайта связывания. Данная модель хорошо соотносится с гипотезой о наличии сайта связывания, в который вовлечены все рецепторные домены.

Существуют данные, что рецептор сигма-1 является функционально-активным и способен связывать лиганды только в олигомерном состоянии [55, 56]. Впервые высокомолекулярные формы рецептора сигма-1 (молекулярные массы 97, 130 и 147 кДа) были обнаружены в микросомальных мембранах печени крысы с помощью радиоактивных фоточувствительных меток [46]. Доказательства существования рецептора сигма-1 в виде различных форм (как мономерной, так и олигомерной) были также получены с применением спектральной технологии FRET на клетках линии COS-7 в культуре [57].

Эксперименты *in vitro* с очищенным рекомбинантным белком слияния MBP-S1R показали, что только олигомерные формы рецептора сигма-1 (гексамеры, тетрамеры, октамеры) способны связывать меченый тритием агонист [3H]-(+)-пентазоцин, тогда как мономеры являются функционально неактивными [55]. Такой известный антагонист, как галоперидол, благоприятствует высокомолекулярным олигомерным формам, но при этом агонист пентазоцин стабилизирует димеры рецептора сигма-1 [57].

Способность к олигомеризации связана со структурными особенностями рецептора сигма-1. В последовательности рецептора обнаружены два предполагаемых мотива димеризации GxxxG [56, 58, 59]. Первый из них расположен в домене TM2 (87 – 91 а.к.о.), тогда как второй – в С-концевой области SBDL II региона (108 – 112 а.к.о.). Возможно, что первый мотив опосредует димеризацию рецептора сигма-1, а второй отвечает за формирование высокомолекулярных олигомеров. Все точечные мутации в домене олигомеризации 87 – 91 а.к.о. GQWMG привели к значительному снижению экспрессии рецептора в клетках, а также к сдвигу олигомерных форм рецептора в сторону мономеров [55]. Укороченная версия рецептора сигма-1 (1 – 122 а.к.о.) способна к образованию гетеромеров с

полноразмерной формой рецептора, негативно регулируя функцию полноразмерной формы [42].

У.Б. Чу с сотрудниками в своей статье предложили модель, согласно которой рецептор сигма-1 образует гомодимер или олигомер, состоящий из димеров, а стехиометрия связывания рецептора с лигандом следует правилу, по которому одна молекула лиганда приходится на один димер рецептора сигма-1 [56]. В противоположность этой модели в ряде других работ по компьютерному моделированию показана возможность связывания лигандов с мономерной формой рецептора сигма-1, что соответствует стехиометрии один лиганд на один рецептор [51 – 53].

В попытке объяснить физиологическое значение баланса олигомерных и мономерных форм рецептора сигма-1 было выдвинуто предположение, что олигомеризация рецептора сигма-1 регулирует его лигандопосредованные функции [57]. Предположительно, лиганды рецептора сигма-1 могут влиять на кинетику взаимодействия рецептора с другими, так называемыми клиентными белками (ионными каналами и другими) посредством изменения соотношения между олигомерными и мономерными формами, сдвигая баланс в пользу первых.

На сегодняшний день рецептор сигма-1 представлен как высокодинамичная молекула, способная образовывать гомомерные комплексы, которые и обеспечивают многозадачные функции рецептора.

Чтобы более точно ответить на вопросы о локализации, организации лигандсвязывающего сайта, а также определить стехиометрию связывания различных лигандов с рецептором сигма-1, требуются дополнительные исследования с применением высокоточных методов структурной биологии, например таких, как рентгеноструктурный анализ и ЯМР-спектроскопия.

Роль рецептора сигма-1 в нейропатологии

Как известно, одним из нейропсихологических заболеваний, в котором ключевую роль играет рецептор сигма-1, является депрессия. В этом случае наблюдается

дисфункция структур мозга. Они модулируются моноаминергическими системами, такими как лобная кора и гиппокамп. Некоторые антидепрессанты обладают свойствами лигандов рецептора сигма-1, модулирующих многие нейротрансмиттерные системы, что предполагает наличие антидепрессивного эффекта, связанного с рецептором сигма-1. Действительно, агонисты рецепторов сигма-1 демонстрируют значимый антидепрессивный эффект на различных моделях [60]. В настоящее время имеются доказательства того, что эти рецепторы влияют на настроение, благодаря усилению серотонинергической и глутаматергической нейрональной функции, а также за счет нейротрофического действия. Важным эффектом агонистов рецептора сигма-1 является усиление активации серотонинергических нейронов дорзального ядра шва. Активация серотонинергической трансмиссии под влиянием таких агонистов начинается уже после двух дней лечения, в то время как клинически значимые изменения, индуцированные торможением обратного захвата серотонина, появляются только после двух-трехнедельного приема антидепрессанта. Быстрый серотонинергический эффект агонистов рецептора сигма-1 предполагает более раннее начало антидепрессивного действия по сравнению с традиционными антидепрессантами. Более того, комбинация селективного агониста рецептора сигма-1 прамипексола и антидепрессанта сертралина в субэффективных дозах на экспериментальной модели депрессии демонстрирует синергичное антидепрессивное действие [61]. У пациентов, страдающих депрессией, имеется снижение числа рецепторов NMDA в префронтальной коре и гиппокампе. Экспериментальная модель депрессии (эктомия обонятельных луковиц у крыс, приводящая к снижению числа рецепторов NMDA) сопровождается поведенческим дефицитом, который напоминает психомоторное возбуждение, потерю интереса и когнитивную дисфункцию при клинической депрессии. Агонисты рецепторов сигма-1 улучшают поведенческий дефицит и также увеличивают экспрессию рецепторов NMDA. Эти

находки подтверждают связь между депрессией и рецепторами двух видов: NMDA и сигма-1 [20].

Наряду с модулирующей ролью рецепторов сигма-1 в глутаматергической и серотонинергической трансмиссии, ассоциированной с депрессией, они обладают дополнительным механизмом действия, связанным с процессами нейропластичности. Нейротрофическое действие некоторых антидепрессантов за счет индукции фактора роста нейронов может регулироваться рецепторами сигма-1 [62]. Высокая связь флувоксамина в терапевтических дозировках с рецепторами сигма-1 головного мозга свидетельствует о том, что некоторые эффекты этого антидепрессанта связаны именно с рассматриваемыми рецепторами.

Таким образом, анализ доклинических исследований позволяет предположить возможные дополнительные клинические эффекты антидепрессантов, обладающих свойствами агонистов рецепторов сигма-1. Клиницисты фокусируют свое внимание на следующих явлениях: улучшение когнитивных способностей; ускорение развития антидепрессивного эффекта; нейропротективный эффект [63].

Также имеются данные, указывающие на физиологическую роль рецептора сигма-1 в мотонейронах. Было, в частности, установлено, что мутация в рецепторе E102Q приводит к аутосомно-рецессивной форме юношеского паралича [64]. При развитии данного заболевания мотонейроны спинного мозга погибают. У мутантных мышей с удаленным геном рецептора сигма-1, проявляющих симптомы паралича, продолжительность жизни значительно уменьшается, и симптомы паралича наступают раньше, чем у мышей, экспрессирующих рецептор сигма-1. Это свидетельствует о том, что даже у мышей указанный рецептор замедляет развитие дегенеративных процессов [65]. Точная роль рецептора сигма-1 пока не выяснена, но высказываются различные гипотезы.

При иммуногистохимическом исследовании было выявлено, что рецептор сигма-1 располагается под холинергическими бутонами. Ранее было показано, что



в постсинаптической мембране холинергических синапсов мотонейронов расположены два типа калиевых каналов: Kv2.1 и SK. Эти каналы выводят ионы калия K^+ из клетки и таким образом снижают возбудимость мотонейронов, что особенно важно, поскольку мотонейроны при стрессе погибают первыми. Было показано, что лиганды рецептора сигма-1 могут влиять на активность калиевых каналов типа Kv2 и SK [21]. Возможно, подобная регуляция существует и в мотонейронах. Механизм влияния рецептора сигма-1 на калиевые каналы может осуществляться непосредственно через взаимодействие либо через цепочку взаимодействующих белков. Так, рецептор сигма-1 способен взаимодействовать с инозитолтрифосфатным рецептором, который находится на мембране ER, а активаторы рецептора приводят к значительному усилению выброса кальция из ER в цитозоль. Кальций активирует кальмодулин, а активный кальмодулин в свою очередь открывает непосредственно канал калиевых ионов SK в плазматической мембране. Кроме того, кальмодулин способен влиять на канал Kv2.1 через активацию кальцинейрина, которая вызывает дефосфорилирование канала и приводит к его дальнейшей активации [66]. Таким образом, оба калиевых канала могут быть модулированы посредством активации рецептора сигма-1 через каскад белковых взаимодействий.

Рецептор сигма-1 играет важную роль и в других отделах центральной нервной системы. Так, было показано, что ганглиозные клетки сетчатки при нокауте рецептора сигма-1 погибают в большем количестве, чем ганглиозные клетки здоровых животных. При активации рецептора сигма-1 у мышей после инъекции амилоидного пептида и приобретения таким образом симптомов болезни Альцгеймера, значительно улучшаются результаты тестирования памяти [67]. В исследованиях с использованием позитронно-эмиссионной томографии показано, что при нормальном старении чувствительность рецепторов сигма-1 не меняется. Это контрастирует с возраст-зависимым снижением холинергической, глутаминергической и дофаминергической

рецепции. Но у пациентов, страдающих болезнью Альцгеймера, обнаружено снижение (утрата на 26 %) рецепторов сигма-1 в регионе гиппокампа CA1, по сравнению со здоровыми людьми. Причем указанное снижение коррелировало с деградацией пирамидальных нейронов [68]. Недавно было обнаружено, что агонисты этих рецепторов могут противодействовать микроглиальной активации. В результате этого ослабляется воспалительный компонент нейродегенеративных заболеваний.

Кроме того, в недавних исследованиях была показана роль нарушения кальциевой сигнализации в патогенезе болезней Альцгеймера и Хантингтона. В частности, изменение кальциевого гомеостаза в ER ведет к нарушению синаптических связей в нейронах [69]. Предполагается, что рецептор сигма-1 является сенсором нормального функционирования кальция. Недавно стало также известно, что этот рецептор является потенциальной мишенью для лекарственного средства приодипин [70]. Данный препарат оказал некоторые положительные эффекты в третьей фазе лечения болезни Хантингтона, и в настоящее время оценивается возможность его использования в дальнейших клинических испытаниях [71]. На основе полученного воздействия препарата в экспериментах на животных, приодипин рассматривается исследователями как «стабилизатор дофамина». Однако точный молекулярный механизм его действия на дофаминовые рецепторы еще подлежит уточнению [72].

Заключение

В данном обзоре были рассмотрены особенности строения и структуры рецептора сигма-1. Мы обсудили возможные биофизические механизмы регуляции данного рецептора и его участия в различных клеточных процессах, а также его роль при развитии различных нейропатологий. Кроме того, нами были описаны возможные пути применения рецептора сигма-1 как терапевтической мишени при лечении данного вида заболеваний.

Учитывая широкие перспективы использования рецептора сигма-1 как тера-

пептической мишени на основе белка, в лаборатории молекулярной нейродегенерации (ЛМН) Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого проводятся комплексные биофизические исследования по изучению роли рецептора сигма-1 в контексте исследований развития нейропатологии, с применением таких методов, как компьютерное моделирование, рентгеноструктурный анализ и конфокальная микроскопия.

Благодарности

Авторы выражают благодарность директору Научно-образовательного центра «Фундаментальные основы медицинских

и биомедицинских технологий», доктору физико-математических наук О.Л. Власовой, научному сотруднику ЛМН СПбПУ, кандидату физико-математических наук П.В. Плотниковой, а также всему коллективу ЛМН СПбПУ за постоянное внимание к проводимым исследованиям и плодотворное обсуждение полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 14-25-00024 (раздел, посвященный структуре рецептора сигма-1 и его роли в нейропатологии), гранта Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания №17.1360.2014/К (раздел, посвященный молекулярной биологии рецептора сигма-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Hayashi T., Stahl S.M.** The sigma-1 receptor and its role in the treatment of mood disorders// *Drugs Future*. 2009. Vol. 34. No. 29. Pp. 137–146.
- [2] **Meyer D.A., Carta M., Partridge L.D.** Neurosteroids enhance spontaneous glutamate release in hippocampal neurons. Possible role of metabotropic σ 1-like receptors// *J. Biol. Chem.* 2002. Vol. 277. No. 32. Pp. 28725–28732.
- [3] **Brune S.** The sigma enigma: in vitro/in silico site-directed mutagenesis studies unveil σ 1 receptor ligand binding // *Biochemistry*. 2014. Vol. 53. No.18. Pp. 2993–3003.
- [4] **Hanner M.** Purification, molecular cloning, and expression of the mammalian sigma1-binding site // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1996. Vol. 93. No. 15. Pp. 8072–8077.
- [5] **Moebius F.F.** High affinity of sigma 1-binding sites for sterol isomerization inhibitors: evidence for a pharmacological relationship with the yeast sterol C8-C7 isomerase// *Br. J. Pharmacol.* 1997. Vol. 121. No. 1. Pp. 1–6.
- [6] **Prasad P.D.** Exon-intron structure, analysis of promoter region, and chromosomal localization of the human type 1 sigma receptor gene // *J. Neurochem.* 1998. Vol. 70. No. 2. Pp. 443–451.
- [7] **Su T.P.** The sigma-1 receptor chaperone as an inter-organellar signaling modulator// *Trends Pharmacol. Sci.* 2010. Vol. 31. No. 12. Pp. 557–566.
- [8] **Langa F.** Generation and phenotypic analysis of sigma receptor type I (sigma 1) knockout mice// *Eur. J. Neuroscience*. 2003. Vol.18. No. 8. Pp. 2188–2196.
- [9] **Pabba M.** The essential roles of protein–protein interaction in sigma-1 receptor functions // *Frontiers in Cellular Neuroscience*. 2003. Vol. 53. No. 18. Pp. 2993–3003.
- [10] **Hayashi T., Su T.P.** Regulating ankyrin dynamics: roles of sigma-1 receptors // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2001. Vol. 98. No. 2. Pp. 491–496.
- [11] **Tsai Sh.-Y.** Sigma-1 receptors regulate hippocampal dendritic spine formation via a free radical-sensitive mechanism involving Rac1 GTP pathway // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2009. Vol. 106. No 52. Pp. 22468–22473.
- [12] **Tuerhong T.** SA4503, a sigma-1 receptor agonist, prevents cultured cortical neurons from oxidative stress-induced cell death via suppression of MAPK pathway activation and glutamate receptor expression // *Neuroscience Letters*. 2010. Vol. 469. No. 3. Pp. 303–308.
- [13] **Wilke R.A., Mehta R.P., Lupardus P.J., et al.** Sigma receptor photolabeling and sigma receptor-mediated modulation of potassium channels in tumor cells // *J. Biol. Chem.* 1999. Vol. 274. No. 26. Pp. 18387–18392.
- [14] **Kim F.J., Kovalyshyn I., Burgman M., et al.** Sigma 1 receptor modulation of G-proteincoupled receptor signaling: potentiation of opioid transduction independent from receptor binding // *Mol. Pharmacol.* 2009. Vol. 77. No. 4. Pp. 695–703.
- [15] **Hayashi T., Su T.P.** Sigma-1 receptors (sigma(1) binding sites) form raft-like microdomains and target lipid droplets on the endoplasmic reticulum: roles in endoplasmic reticulum lipid compartmentalization and export // *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 2009. Vol. 306. No. 2. Pp. 718–725.
- [16] **Hayashi T., Su T.P.** Sigma-1 receptor chaperones at the ER-mitochondrion interface regulate Ca(2+) signaling and cell survival // *Cell*. 2007. Vol. 131. No. 3. Pp. 596–610.

- [17] **Hayashi T., Su T.P.** Subcellular localization and intracellular dynamics of σ_1 receptors // *Sigma Receptors: Chemistry, Cell Biology and Clinical Implications*. Springer, 2007. Pp. 151–164.
- [18] **Meunier J., Demeilliers B., C el erier A., et al.** Compensatory effect by sigma-1 receptor stimulation during alcohol withdrawal in mice performing an object recognition task // *Behav. Brain Res.* 2006. Vol. 166. No. 1. Pp. 166–176.
- [19] **Yao H., Yang Y., Kim K.J., et al.** Molecular mechanisms involving sigma receptor-mediated induction of MCP-1: implication for increased monocyte transmigration // *Blood*. 2010. Vol. 115. No. 23. Pp. 4951–4962.
- [20] **Yagasaki Y., Numakawa T., Kumamaru E., et al.** Chronic antidepressants potentiate via sigma-1 receptors the brain-derived neurotrophic factor-induced signaling for glutamate release // *J. Biol. Chem.* 2006. Vol. 281. No. 18. Pp. 12941–12949.
- [21] **Maurice T., Su T.P.** The pharmacology of sigma-1 receptors // *Pharmacol. Ther.* 2009. Vol. 124. No. 2. Pp. 195–206.
- [22] **Hayashi T., Su T.P.** The sigma receptor: evolution of the concept in neuropsychopharmacology // *Curr. Neuropharmacol.* 2005. Vol. 3. No. 4. Pp. 267–280.
- [23] **Aydar E., Palmer C.P., Klyachko V.A., et al.** The sigma receptor as a ligand-regulated auxiliary potassium channel subunit // *Neuron*. 2002. Vol. 34. No. 3. Pp. 399–410.
- [24] **Monassier L., Manoury B., Bellocq C., et al.** Sigma(2)-receptor ligand-mediated inhibition of inwardly rectifying K^+ channels in the heart // *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 2007. Vol. 322. No. 1. Pp. 341–350.
- [25] **Zhang H., Cuevas J.** Sigma receptors inhibit high-voltage-activated calcium channels in rat sympathetic and parasympathetic neurons // *J. Neurophysiol.* 2002. Vol. 87. No. 6. Pp. 2867–2879.
- [26] **Kume T., Nishikawa H., Taguchi R., et al.** Antagonism of NMDA receptors by sigma receptor ligands attenuates chemical ischemia-induced neuronal death in vitro // *Eur. J. Pharmacol.* 2002. Vol. 455. No. 2–3. Pp. 91–100.
- [27] **Martina M., Turcotte M.E., Halman S., et al.** The sigma-1 receptor modulates NMDA receptor synaptic transmission and plasticity via SK channels in rat hippocampus // *J. Physiol.* 2007. Vol. 578. No. 1. Pp. 143–157.
- [28] **Johannessen M.A., Ramachandran S., Riemer L., et al.** Voltage-gated sodium channel modulation by sigma receptors in cardiac myocytes and heterologous systems // *Am. J. Physiol. Cell Physiol.* 2009. Vol. 296. No. 5. Pp. 1049–1057.
- [29] **Kourrich S.** The sigma-1 receptor: roles in neuronal plasticity and disease // *Trends in Neurosciences*. 2012. Vol. 38. No. 10. Pp. 581–668.
- [30] **Hanner M., Moebius F. F., Flandorfer A., et al.** Purification, molecular cloning, and expression of the mammalian sigma1-binding site // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1996. Vol. 93. No. 15. Pp. 8072–8077.
- [31] **Hofmann K.S.** TM base – A database of membrane spanning proteins segments // *Biol. Chem. Hoppe-Seyler*. 1993. Vol. 374. Pp. 166.
- [32] **Krogh A.** Predicting transmembrane protein topology with a hidden Markov model: application to complete genomes // *J. Mol. Biol.* 2001. Vol. 305. No. 3. Pp. 567–580.
- [33] **Tusnady G.E., Simon I.** Principles governing amino acid composition of integral membrane proteins: application to topology prediction // *J. Mol. Biol.* 1998. Vol. 283. No. 2. Pp. 489–506.
- [34] **Tusnady G.E., Simon I.** The HMMTOP transmembrane topology prediction server // *Bioinformatics*. 2001. Vol. 17. No. 9. Pp. 849–850.
- [35] **Jones D.T., Taylor W.R., Thornton J.M.** A model recognition approach to the prediction of all-helical membrane protein structure and topology // *Biochemistry*. 1994. Vol. 33. No. 10. Pp. 3038–3049.
- [36] **Hirokawa T., Boon-Chieng S., Mitaku S.** SOSUI: classification and secondary structure prediction system for membrane proteins // *Bioinformatics*. 1998. Vol. 14. No. 4. Pp. 378–379.
- [37] **Kall L., Krogh A., Sonnhammer E.L.** Advantages of combined transmembrane topology and signal peptide prediction—the Phobius web server // *Nucleic Acids Res.* 2007. No. 35. Pp. 429–432.
- [38] **Ortega-Roldan J.L., Ossa F., Amin N.T., et al.** Solution NMR studies reveal the location of the second transmembrane domain of the human sigma-1 receptor // *FEBS Lett.* 2015. Vol. 589. No. 5. Pp. 659–665.
- [39] **Su T.P., Hayashi T., Maurice T., et al.** The sigma-1 receptor chaperone as an inter-organelle signaling modulator // *Trends Pharmacol. Sci.* 2010. Vol. 31. No. 12. Pp. 557–566.
- [40] **Sharma P., Ignatchenko V., Grace K., et al.** Endoplasmic reticulum protein targeting of phospholamban: a common role for an N-terminal di-arginine motif in ER retention? // *PLoS One*. 2010. Vol. 5. No. 7. Pp. e11496.
- [41] **Ganapathy M.E., Prasad P.D., Huang W., et al.** Molecular and ligand-binding characterization of the sigma-receptor in the Jurkat human T lymphocyte cell line // *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 1999. Vol. 289. No. 1. Pp. 251–260.
- [42] **Shioda N., Ishikawa K., Tagashira H., et al.** Expression of a truncated form of the endoplasmic reticulum chaperone protein, sigma1 receptor, promotes mitochondrial energy depletion and

apoptosis // *J. Biol. Chem.* 2012. Vol. 287. No. 28. Pp. 23318–23331.

[43] **Wu Z., Bowen W.D.** Role of sigma-1 receptor C-terminal segment in inositol 1,4,5-trisphosphate receptor activation: constitutive enhancement of calcium signaling in MCF-7 tumor cells // *J. Biol. Chem.* 2008. Vol. 283. No. 42. Pp. 28198–28215.

[44] **Ortega-Roldan J.L., Ossa F., Schnell J.R.** Characterization of the human sigma-1 receptor chaperone domain structure and binding immunoglobulin protein (BiP) interactions // *J. Biol. Chem.* 2013. Vol. 288. No. 29. Pp. 21448–21457.

[45] **Yamamoto H., Miura R., Yamamoto T., et al.** Amino acid residues in the transmembrane domain of the type 1 sigma receptor critical for ligand binding // *FEBS Lett.* 1999. Vol. 445. No. 1. Pp. 19–22.

[46] **Pal A., Hajipour A.R., Fontanilla D., et al.** Identification of regions of the sigma-1 receptor ligand binding site using a novel photoprobe // *Mol. Pharmacol.* 2007. Vol. 72. No. 4. Pp. 921–933.

[47] **Pal A., Chu U.B., Ramachandran S., et al.** Juxtaposition of the steroid binding domain-like I and II regions constitutes a ligand binding site in the sigma-1 receptor // *J. Biol. Chem.* 2008. Vol. 283. No. 28. Pp. 19646–19656.

[48] **Guo L.W., Hajipour A.R., Gavala M.L., et al.** Sulfhydryl-reactive, cleavable, and radioiodinatable benzophenone photoprobes for study of protein-protein interaction // *Bioconjug. Chem.* 2005. Vol. 16. No. 3. Pp. 685–693.

[49] **Chen Y., Hajipour A.R., Sievert M.K., et al.** Characterization of the cocaine binding site on the sigma-1 receptor // *Biochemistry.* 2007. Vol. 46. No. 11. Pp. 3532–3542.

[50] **Fontanilla D., Hajipour A.R., Pal A., et al.** Probing the steroid binding domain-like I (SBDLI) of the sigma-1 receptor binding site using N-substituted photoaffinity labels // *Biochemistry.* 2008. Vol. 47. No. 27. Pp. 7205–7217.

[51] **Laurini E., Col V.D., Mamolo M.G., et al.** Homology model and docking-based virtual screening for ligands of the sigma1 receptor // *ACS Med. Chem. Lett.* 2011. Vol. 2. No. 11. Pp. 834–839.

[52] **Brune S., Schepmann D., Klempnauer K.H., et al.** The sigma enigma: in vitro/in silico site-directed mutagenesis studies unveil sigma1 receptor ligand binding // *Biochemistry.* 2014. Vol. 53. No. 18. Pp. 2993–3003.

[53] **Laurini E., Marson D., Dal Col V., et al.** Another brick in the wall. Validation of the sigma1 receptor 3D model by computer-assisted design, synthesis, and activity of new sigma1 ligands // *Mol. Pharm.* 2012. Vol. 9. No. 11. Pp. 3107–3126.

[54] **Zampieri D., Laurini E., Vio L., et al.** Improving selectivity preserving affinity: new pip-

eridine-4-carboxamide derivatives as effective sigma-1-ligands // *Eur. J. Med Chem.* 2015. Vol. 90. Pp. 797–808.

[55] **Gromek K.A., Suchy F.P., Meddaugh H.R., et al.** The oligomeric states of the purified sigma-1 receptor are stabilized by ligands // *J. Biol. Chem.* 2014. Vol. 289. No. 29. Pp. 20333–20344.

[56] **Chu U.B., Ramachandran S., Hajipour A.R., et al.** Photoaffinity labeling of the sigma-1 receptor with N-[3-(4-nitrophenyl)propyl]-N-dodecylamine: evidence of receptor dimers // *Biochemistry.* 2013. Vol. 52. No. 5. Pp. 859–868.

[57] **Mishra A.K., Mavlyutov T., Singh D.R., et al.** The sigma-1 receptors are present in monomeric and oligomeric forms in living cells in the presence and absence of ligands // *Biochem. J.* 2015. Vol. 466. No. 2. Pp. 263–271.

[58] **Xu J., Peng H., Zhang J.T.** Human multidrug transporter ABCG2, a target for sensitizing drug resistance in cancer chemotherapy // *Curr. Med. Chem.* 2007. Vol. 14. No. 6. Pp. 689–701.

[59] **Overton M.C., Chinault S.L., Blumer K.J.** Oligomerization, biogenesis, and signaling is promoted by a glycoporphin A-like dimerization motif in transmembrane domain 1 of a yeast G protein-coupled receptor // *J. Biol. Chem.* 2003. Vol. 278. No. 49. Pp. 49369–49377.

[60] **Cobos E.J., Entrena J.M., Nieto F.R., et al.** Pharmacology and therapeutic potential of sigma1 receptor ligands // *Current Neuropharmacol.* 2008. Vol. 6. No. 4. Pp. 344–366.

[61] **Rogoz Z., Skuza G.** Mechanism of synergistic action following co-treatment with pramipexole and fluoxetine or sertraline in the forced swimming test in rats // *Pharmacol. Rep.* 2006. Vol. 58. No. 4. Pp. 493–500.

[62] **Monnet F.P., Maurice T.** The sigma1 protein as a target for the non-genomic effects of neuro(active)steroids: molecular, physiological, and behavioral aspects // *J. Pharmacol. Sci.* 2006. Vol. 100. No. 2. Pp. 93–118.

[63] **Martina M., Turcotte M.E., Halman S., Bergeron R.** The sigma-1 receptor modulates NMDA receptor synaptic transmission and plasticity via SK channels in rat hippocampus // *J. Physiol.* 2007. Vol. 578. No. 1. Pp. 143–157.

[64] **Al-Saif A., Al-Mohanna F., Bohlega S.** A mutation in sigma-1 receptor causes juvenile amyotrophic lateral sclerosis // *Ann. Neurol.* 2011. Vol. 70. No. 6. Pp. 913–919.

[65] **Mavlyutov T.A., Epstein M.L., Huerta M. S., et al.** The sigma-1 receptor retards the propagation of ALS // *Program Mo.* 2012. Vol. 346.12/J11.

[66] **Park K.S., Mohapatra D.P., Misonou H., Trimmer J.S.** Graded regulation of the Kv2.1 potassium channel by variable phosphorylation // *Sci-*

ence. 2006. Vol. 313. No. 5789. Pp. 976–979.

[67] Villard V., Espallergues J., Keller E., Vamvakides A., Maurice T. Anti-amnesic and neuroprotective potentials of the mixed muscarinic receptor/sigma-1 (sigma1) ligand ANAVEX2-73, a novel aminotetrahydrofuran derivative // J. Psychopharmacol. 2011. Vol. 25. No. 8. Pp. 1101–1117.

[68] Jansen K.L., Faull R.L., Storey P., Leslie R.A. Loss of sigma binding sites in the CA1 area of the anterior hippocampus in Alzheimer's disease correlates with CA1 pyramidal cell loss // Brain Res. 1993. Vol. 623. No. 2. Pp. 299–302.

[69] Sun S., Zhang H., Liu J., et al. Reduced synaptic STIM2 expression and impaired store-operated calcium entry cause destabilization of mature spines in mutant presenilin mice // Neuron. 2014.

Vol. 82. No. 1. Pp. 79–93.

[70] Dyhring T., Nielsen E.O., Sonesson C., et al. The dopaminergic stabilizers pridopidine (ACR16) and (-)-OSU6162 display dopamine D(2) receptor antagonism and fast receptor dissociation properties // European J. of Pharmacology. 2010. Vol. 628. No. 1–3. Pp. 19–26.

[71] Huntington Study Group, H.I. A randomized, double-blind, placebo-controlled trial of pridopidine in Huntington's disease // Mov. Disord. 2013. Vol. 28. No. 10. Pp. 1407–1415.

[72] Rung J.P., Rung E., Helgeson L., et al. Effects of (-)-OSU6162 and ACR16 on motor activity in rats, indicating a unique mechanism of dopaminergic stabilization // J. Neural. Transm. 2008. Vol. 115. No. 6. Pp. 899–908.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БОЛЬШАКОВА Анастасия Викторовна – кандидат биологических наук, научный сотрудник лаборатории молекулярной нейродегенерации НОЦ ФОМБТ и доцент кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
asya.bolshakova@gmail.com

КУКАНОВА Екатерина Олеговна – студентка Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций и лаборант лаборатории молекулярной нейродегенерации НОЦ ФОМБТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
katena_94@list.ru

ГАЙНУЛЛИНА Анастасия Наильевна – студентка Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций и лаборант лаборатории молекулярной нейродегенерации НОЦ ФОМБТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
anastasiia.gainullina@gmail.com

ЖЕМКОВ Владимир Андреевич – аспирант и ассистент кафедры медицинской физики, лаборант лаборатории молекулярной нейродегенерации НОЦ ФОМБТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; старший лаборант лаборатории энзимологии Отделения молекулярной и радиационной биофизики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова».

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vladimirzhemkov.edu@gmail.com

КОРБАН Светлана Андреевна – студентка Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций и лаборант лаборатории молекулярной нейродегенерации НОЦ ФОМБТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; лаборант лаборатории энзимологии отделения молекулярной и радиационной биофизики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова».

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sa_korban@mail.ru

БЕЗПРОЗВАННЫЙ Илья Борисович – доктор биологических наук, заведующий лабораторией молекулярной нейродегенерации *НОЦ ФОМБТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого*, заведующий кафедрой медицинской физики; профессор физиологии на отделении физиологии *Юго-Западного медицинского центра университета Техаса, Даллас, США.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
5323 Harry Hines Blvd., Даллас, Техас, 75390 США
mnlabspb@gmail.com

Bolshakova A.V., Kukanova E.O., Gainullina A.N., Zhemkov V.A., Korban S.A., Bezprozvanny I.B. SIGMA-1 RECEPTOR AS A POTENTIAL PHARMACOLOGICAL TARGET FOR THE TREATMENT OF NEUROPATHOLOGY.

Sigma receptors are usually classified as a separate class of intracellular receptors. Among them sigma-1 receptor has received the most study in respect to pharmacology application. This receptor with average or high affinity binds a wide range of chemical compounds of very different structural classes and a variety of therapeutic and pharmacological properties. The sigma-1 receptor is a trans-membrane protein placed in the endoplasmic reticulum (ER), which regulates the function of inositol-3-phosphate receptor, stabilizing the calcium signaling between ER and mitochondria. The receptor in question is involved in the formation of many neurological and psychiatric states. It is assumed that the sigma-1 receptor acts as a sensor of normal calcium operation. The studies over the recent years have shown the role of a disturbance in calcium signaling in the pathogenesis of Alzheimer's and Huntington's diseases. In particular, changes in calcium homeostasis of the endoplasmic reticulum lead to the break of synaptic connections in the neurons. Thus, sigma-1 receptor holds promise in application as potential therapeutic targets for the treatment of neuropathological diseases.

SIGMA-1 RECEPTOR, ENDOPLASMIC RETICULUM, CALCIUM SIGNALING, CHAPERONE ACTIVITY, NEUROPATHOLOGY.

REFERENCES

- [1] **T. Hayashi, S.M. Stahl**, The sigma-1 receptor and its role in the treatment of mood disorders, *Drugs Future*. 34 (29) (2009) 137–146.
- [2] **D.A. Meyer, M. Carta, L.D. Partridge**, Neurosteroids enhance spontaneous glutamate release in hippocampal neurons. Possible role of metabotropic σ 1-like receptors, *J. Biol. Chem.* 277 (32) (2002) 28725–28732.
- [3] **S. Brune**, The sigma enigma: in vitro/in silico site-directed mutagenesis studies unveil σ 1 receptor ligand binding, *Biochemistry*. 53(18) (2014) 2993–3003.
- [4] **M. Hanner**, Purification, molecular cloning, and expression of the mammalian sigma1-binding site, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 93 (15) (1996) 8072–8077.
- [5] **F.F. Moebius**, High affinity of sigma 1-binding sites for sterol isomerization inhibitors: evidence for a pharmacological relationship with the yeast sterol C8-C7 isomerase, *Br. J. Pharmacol.* 121(1) (2007) 1–6.
- [6] **P.D. Prasad**, Exon-intron structure, analysis of promoter region, and chromosomal localization of the human type 1 sigma receptor gene, *J. Neurochem.* 70(2) (1998) 443–451.
- [7] **T.P. Su**, The sigma-1 receptor chaperone as an inter-organelle signaling modulator, *Trends Pharmacol. Sci.* 31(12) (2010) 557–566.
- [8] **F. Langa**, Generation and phenotypic analysis of sigma receptor type I (sigma 1) knockout mice, *Eur. J. Neuroscience*. 18(8) (2003) 2188–2196.
- [9] **M. Pabba**, The essential roles of protein-protein interaction in sigma-1 receptor functions, *Frontiers in Cellular Neuroscience*. 53(18) (2003) 2993–3003.
- [10] **T. Hayashi, T.P. Su**, Regulating ankyrin dynamics: roles of sigma-1 receptors, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 98 (2) (2001) 491–496.
- [11] **Sh.-Y. Tsai**, Sigma-1 receptors regulate hippocampal dendritic spine formation via a free radical-sensitive mechanism involving Rac1 GTP pathway, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 106 (52) (2009) 22468–22473.
- [12] **T. Tuerhong**, SA4503, a sigma-1 receptor agonist, prevents cultured cortical neurons from oxidative stress-induced cell death via suppression of MAPK pathway activation and glutamate receptor expression, *Neuroscience Letters*. 469(3) (2010) 303–308.
- [13] **R.A. Wilke, R.P. Mehta, P.J. Lupardus, et al.**, Sigma receptor photolabeling and sigma receptor-mediated modulation of potassium channels in tumor cells, *J. Biol. Chem.* 274(26) (1999) 18387–18392.

- [14] **F.J. Kim, I. Kovalyshyn, M. Burgman, et al.**, Sigma 1 receptor modulation of G-proteincoupled receptor signaling: potentiation of opioid transduction independent from receptor binding, *Mol. Pharmacol.* 77 (4) (2009) 695–703.
- [15] **T. Hayashi, T.P. Su**, Sigma-1 receptors (sigma(1) binding sites) form raft-like microdomains and target lipid droplets on the endoplasmic reticulum: roles in endoplasmic reticulum lipid compartmentalization and export, *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 306 (2) (2009) 718–725.
- [16] **T. Hayashi, T.P. Su**, Sigma-1 receptor chaperones at the ER-mitochondrion interface regulate Ca(2+) signaling and cell survival, *Cell.* 131(3) (2007) 596–610.
- [17] **T. Hayashi, T.P. Su**, Subcellular localization and intracellular dynamics of s1 receptors. In *Sigma Receptors: Chemistry, Cell Biology and Clinical Implications* Springer, 2007, 151–164.
- [18] **J. Meunier, B. Demeilliers, A. Célérier, et al.**, Compensatory effect by sigma-1 receptor stimulation during alcohol withdrawal in mice performing an object recognition task, *Behav. Brain Res.* 166 (1) (2006) 166–176.
- [19] **H. Yao, Y. Yang, K.J. Kim, et al.**, Molecular mechanisms involving sigma receptor-mediated induction of MCP-1: implication for increased monocyte transmigration, *Blood.* 115 (23) (2010) 4951–4962.
- [20] **Y. Yagasaki, T. Numakawa, E. Kumamaru, et al.**, Chronic antidepressants potentiate via sigma-1 receptors the brain-derived neurotrophic factor-induced signaling for glutamate release, *J. Biol. Chem.* 281 (18) (2006) 12941–12949.
- [21] **T. Maurice, T.P. Su**, The pharmacology of sigma-1 receptors, *Pharmacol. Ther.* 124 (2) (2009) 195–206.
- [22] **T. Hayashi, T.P. Su**, The sigma receptor: evolution of the concept in neuropsychopharmacology, *Curr. Neuropharmacol.* 3 (4) (2005) 267–280.
- [23] **E. Aydar, C.P. Palmer, V.A. Klyachko, et al.**, The sigma receptor as a ligand-regulated auxiliary potassium channel subunit, *Neuron.* 34 (3) (2002) 399–410.
- [24] **L. Monassier, B. Manoury, C. Bellocq, et al.**, Sigma(2)-receptor ligand-mediated inhibition of inwardly rectifying K(+) channels in the heart, *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 322 (1) (2007) 341–350.
- [25] **H. Zhang, J. Cuevas**, Sigma receptors inhibit high-voltage activated calcium channels in rat sympathetic and parasympathetic neurons, *J. Neurophysiol.* 87 (6) (2002) 2867–2879.
- [26] **T. Kume, H. Nishikawa, R. Taguchi, et al.**, Antagonism of NMDA receptors by sigma receptor ligands attenuates chemical ischemia-induced neuronal death in vitro, *Eur. J. Pharmacol.* 455 (2–3) (2002) 91–100.
- [27] **M. Martina, M.E. Turcotte, S. Halman, et al.**, The sigma-1 receptor modulates NMDA receptor synaptic transmission and plasticity via SK channels in rat hippocampus, *J. Physiol.* 578(1) (2007) 143–157.
- [28] **M.A. Johannessen, S. Ramachandran, L. Riemer, et al.**, Voltage-gated sodium channel modulation by sigma receptors in cardiac myocytes and heterologous systems, *Am. J. Physiol. Cell Physiol.* 296(5) (2009) 1049–1057.
- [29] **S. Kourrich**, The sigma-1 receptor: roles in neuronal plasticity and disease, *Trends in Neurosciences.* 38 (10) (2012) 581–668.
- [30] **M. Hanner, F.F. Moebius, A. Flandorfer, et al.**, Purification, molecular cloning, and expression of the mammalian sigma1-binding site, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 93 (15) (1996) 8072–8077.
- [31] **K.S. Hofmann**, TM base – A database of membrane spanning proteins segments, *Biol. Chem. Hoppe-Seyler.* 374 (1993) 166.
- [32] **A. Krogh**, Predicting transmembrane protein topology with a hidden Markov model: application to complete genomes, *J. Mol. Biol.* 305(3) (2001) 567–580.
- [33] **G.E. Tusnady, I. Simon**, Principles governing amino acid composition of integral membrane proteins: application to topology prediction, *J. Mol. Biol.* 283(2) (1998) 489–506.
- [34] **G.E. Tusnady, I. Simon**, The HMMTOP transmembrane topology prediction server, *Bioinformatics.* 17(9) (2001) 849–850.
- [35] **D.T. Jones, W.R. Taylor, J.M. Thornton**, A model recognition approach to the prediction of all-helical membrane protein structure and topology, *Biochemistry.* 33(10) (1994) 3038–3049.
- [36] **T. Hirokawa, S. Boon-Chieng, S. Mitaku, SOSUI**: classification and secondary structure prediction system for membrane proteins, *Bioinformatics.* 14(4) (1998) 378–379.
- [37] **L. Kall, A. Krogh, E.L. Sonnhammer**, Advantages of combined transmembrane topology and signal peptide prediction – the Phobius Web server, *Nucleic Acids Res.* 35 (2007) 429–432.
- [38] **J.L. Ortega-Roldan**, Solution NMR studies reveal the location of the second transmembrane domain of the human sigma-1 receptor, *FEBS Lett.* 589(5) (2015) 659–665.
- [39] **T.P. Su**, The sigma-1 receptor chaperone as an inter-organelle signaling modulator, *Trends Pharmacol. Sci.* 31(12) (2010) 557–566.
- [40] **P. Sharma**, Endoplasmic reticulum protein targeting of phospholamban: a common role for an N-terminal di-arginine motif in ER retention?, *PLoS One.* 5 (7) (2010) e11496.
- [41] **M.E. Ganapathy**, Molecular and ligand-binding characterization of the sigma-receptor in

the Jurkat human T lymphocyte cell line, *J. Pharmacol. Exp. Ther.* 289(1) (1999) 251–260.

[42] **N. Shioda, K. Ishikawa, H. Tagashira, et al.**, Expression of a truncated form of the endoplasmic reticulum chaperone protein, sigma1 receptor, promotes mitochondrial energy depletion and apoptosis, *J. Biol. Chem.* 287 (28) (2012) 23318–23331.

[43] **Z. Wu, W.D. Bowen**, Role of sigma-1 receptor C-terminal segment in inositol 1,4,5-trisphosphate receptor activation: constitutive enhancement of calcium signaling in MCF-7 tumor cells, *J. Biol. Chem.* 283(42) (2008) 28198–28215.

[44] **J.L. Ortega-Roldan, F. Ossa, J.R. Schnell**, Characterization of the human sigma-1 receptor chaperone domain structure and binding immunoglobulin protein (BiP) interactions, *J. Biol. Chem.* 288(29) (2013) 21448–21457.

[45] **H. Yamamoto, R. Miura, T. Yamamoto, et al.**, Amino acid residues in the transmembrane domain of the type 1 sigma receptor critical for ligand binding, *FEBS Lett.* 445(1) (1999) 19–22.

[46] **A. Pal, A.R. Hajipour, D. Fontanilla, et al.**, Identification of regions of the sigma-1 receptor ligand binding site using a novel photoprobe, *Mol. Pharmacol.* 72(4) (2007) 921–933.

[47] **A. Pal, U.B. Chu, S. Ramachandran, et al.**, Juxtaposition of the steroid binding domain-like I and II regions constitutes a ligand binding site in the sigma-1 receptor, *J. Biol. Chem.* 283(28) (2008) 19646–19656.

[48] **L.W. Guo, A.R. Hajipour, M.L. Gavala, et al.**, Sulfhydryl-reactive, cleavable, and radioiodinatable benzophenone photoprobes for study of protein-protein interaction, *Bioconjug. Chem.* 16(3) (2005) 685–693.

[49] **Y. Chen, A.R. Hajipour, M.K. Sievert, et al.**, Characterization of the cocaine binding site on the sigma-1 receptor, *Biochemistry.* 46(11) (2007) 3532–3542.

[50] **D. Fontanilla, A.R. Hajipour, A. Pal, et al.**, Probing the steroid binding domain-like I (SBDLI) of the sigma-1 receptor binding site using N-substituted photoaffinity labels, *Biochemistry.* 47(27) (2008) 7205–7217.

[51] **E. Laurini, V.D. Col, M.G. Mamolo, et al.**, Homology model and docking-based virtual screening for ligands of the sigma 1 receptor, *ACS Med. Chem. Lett.* 2 (11) (2011) 834–839.

[52] **S. Brune, D. Schepmann, K.H. Klempnauer, et al.**, The sigma enigma: in vitro/in silico site-directed mutagenesis studies unveil sigma 1 receptor ligand binding, *Biochemistry.* 53(18) (2014) 2993–3003.

[53] **E. Laurini, D. Marson, V. Dal Col, et al.**, Another brick in the wall. Validation of the sigma1 receptor 3D model by computer-assisted design, synthesis, and activity of new sigma1 ligands, *Mol.*

Pharm. 9 (11) (2012) 3107–3126.

[54] **D. Zampieri, E. Laurini, L. Vio, et al.**, Improving selectivity preserving affinity: new piperidine-4-carboxamide derivatives as effective sigma-1-ligands, *Eur. J. Med. Chem.* 90 (2015) 797–808.

[55] **K.A. Gromek, F.P. Suchy, H.R. Meddaugh, et al.**, The oligomeric states of the purified sigma-1 receptor are stabilized by ligands, *J. Biol. Chem.* 289(29) (2014) 20333–20344.

[56] **U.B. Chu, S. Ramachandran, A.R. Hajipour, et al.**, Photoaffinity labeling of the sigma-1 receptor with N-[3-(4-nitrophenyl)propyl]-N-dodecylamine: evidence of receptor dimers, *Biochemistry.* 52(5) (2013) 859–868.

[57] **A.K. Mishra, T. Mavlyutov, D.R. Singh, et al.**, The sigma-1 receptors are present in monomeric and oligomeric forms in living cells in the presence and absence of ligands, *Biochem. J.* 466(2) (2015) 263–271.

[58] **J. Xu, H. Peng, J.T. Zhang**, Human multidrug transporter ABCG2, a target for sensitizing drug resistance in cancer chemotherapy, *Curr. Med. Chem.* 14(6) (2007) 689–701.

[59] **M.C. Overton, S.L. Chinault, K.J. Blumer**, Oligomerization, biogenesis, and signaling is promoted by a glycoporphin A-like dimerization motif in transmembrane domain 1 of a yeast G protein-coupled receptor, *J. Biol. Chem.* 278(49) (2003) 49369–49377.

[60] **E.J. Cobos, J.M. Entrena, F.R. Nieto, et al.**, Pharmacology and therapeutic potential of sigma1 receptor ligands, *Current Neuropharmacology.* 6(4) (2008) 344–366.

[61] **Z. Rogoz, G. Skuza**, Mechanism of synergistic action following co-treatment with pramipexole and fluoxetine or sertraline in the forced swimming test in rats, *Pharmacol Rep.* 58(4) (2006) 493–500.

[62] **F.P. Monnet, T. Maurice**, The sigma1 protein as a target for the non-genomic effects of neuro(active)steroids: molecular, physiological, and behavioral aspects, *J. Pharmacol Sci.* 100 (2) (2006) 93–118.

[63] **M. Martina, M.E. Turcotte, S. Halman, R. Bergeron**, The sigma-1 receptor modulates NMDA receptor synaptic transmission and plasticity via SK channels in rat hippocampus, *J. Physiol.* 578 (1) (2007) 143–157.

[64] **A. Al-Saif, F. Al-Mohanna, S. Bohlega**, A mutation in sigma-1 receptor causes juvenile amyotrophic lateral sclerosis, *Ann. Neurol.* 70 (6) (2011) 913–919.

[65] **T.A. Mavlyutov, M.L. Epstein, M.S. Huerta, et al.**, The sigma-1 receptor retards the propagation of ALS, *Program. Mo.* 346 (2012) 12/J11.

[66] **K.S. Park, D.P. Mohapatra, H. Misonou,**

J.S. Trimmer, Graded regulation of the Kv2.1 potassium channel by variable phosphorylation, *Science*. 313 (5789) (2006) 976–979.

[67] **V. Villard, J. Espallergues, E. Keller, et al.**, Anti-amnesic and neuroprotective potentials of the mixed muscarinic receptor/sigma-1 (sigma1) ligand ANAVEX2-73, a novel aminotetrahydrofuran derivative, *J. Psychopharmacol.* 25(8) (2011) 1101–1117.

[68] **K.L. Jansen, R.L. Faull, P. Storey, R.A. Leslie**, Loss of sigma binding sites in the CA1 area of the anterior hippocampus in Alzheimer's disease correlates with CA1 pyramidal cell loss, *Brain Res.* 623(2) (1993) 299–302.

[69] **S. Sun, H. Zhang, J. Liu, et al.**, Reduced synaptic STIM2 expression and impaired store-operated calcium entry cause destabilization of mature

spines in mutant presenilin mice, *Neuron*. 82(1) (2014) 79–93.

[70] **T. Dyhring, E.O. Nielsen, C. Sonesson, et al.**, The dopaminergic stabilizers pridopidine (ACR16) and (-)-OSU6162 display dopamine D(2) receptor antagonism and fast receptor dissociation properties, *European Journal of Pharmacology*. 628(1–3) (2010) 19–26.

[71] **Huntington Study Group, H.I.**, A randomized, double-blind, placebo-controlled trial of pridopidine in Huntington's disease, *Mov. Disord.* 28(10) (2013) 1407–1415.

[72] **J.P. Rung, E. Rung, L. Helgeson, et al.**, Effects of (-)-OSU6162 and ACR16 on motor activity in rats, indicating a unique mechanism of dopaminergic stabilization, *J. Neural Transm.* 115 (6) (2008) 899–908.

THE AUTHORS

BOLSHAKOVA Anastasia V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
asya.bolshakova@gmail.com

KUKANOVA Ekaterina O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
katena_94@list.ru

GAINULLINA Anastasiia N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
anastasiia.gainullina@gmail.com

ZHEMKOV Vladimir A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute
PNPI, Gatchina, Leningrad district 188300, Russian Federation
vladimirzhemkov.edu@gmail.com

KORBAN Svetlana A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute
PNPI, Gatchina, Leningrad district 188300, Russian Federation
sa_korban@mail.ru

BEZPROZVANNY Ilya B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Department of Physiology, University of Texas Southwestern Medical Center,
5323 Harry Hines Blvd., Dallas, Texas, 75390 USA
mnlabspb@gmail.com

DOI: 10.5862/JPM.237.6

UDC 539.125.5

*Yu.P. Braginetz^{1,2}, Ya.A. Berdnikov¹, V.V. Fedorov¹, I.A. Kuznetsov²,
M.V. Lasitsa^{1,2}, S.Yu. Semenikhin², E.O. Vezhlev^{1,2}, V.V. Voronin^{1,2}*

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

² Petersburg Nuclear Physics Institute

CRYSTAL ACCELERATION EFFECT FOR COLD NEUTRONS IN THE VICINITY OF THE BRAGG RESONANCE

A new mechanism of neutron acceleration is studied experimentally in detail for cold neutrons passing through the accelerated perfect crystal with the energies close to the Bragg one. The effect arises due to the following reason. The crystal refraction index (neutron-crystal interaction potential) for neutron in the vicinity of the Bragg resonance sharply depends on the parameter of deviation from the exact Bragg condition, i.e. on the crystal-neutron relative velocity. Therefore the neutrons enter into accelerated crystal with one neutron-crystal interaction potential and exit with the other potential. Neutron kinetic energy cannot vary inside the crystal due to its homogeneity. So after passage through such a crystal neutrons will be accelerated or decelerated because of the different energy change at the entrance and exit crystal boundaries.

NEUTRON ACCELERATION, PERFECT CRYSTAL, NEUTRON DIFFRACTION, ACCELERATED CRYSTAL.

1. Introduction

The possibility to control the energy of neutron beams is of great interest because of the wide neutron applications in various scientific fields from material science to nuclear physics, particle physics and astrophysics. The acceleration effect for neutrons scattered by excited isomeric nuclei was first predicted in 1959 [1] and was discovered experimentally in 1980 [2, 3]. The acceleration of neutrons in an inversely populated medium [4, 5] turned out to be very important in processes of stellar nucleosynthesis. In Ref. [6] acceleration of neutrons by vibrationally excited nitrogen molecules was observed.

Acceleration of neutrons in the uniform magnetic field by means of radio-frequency flipper is well-known and successfully used in physical experiments (see, e.g., Ref. [7]). The

phenomenon of neutron acceleration in a strong alternating magnetic field (of amplitude ~ 0.4 T) was observed in Ref. [8]. The acceleration of neutrons in a weak alternating magnetic field (of 0.1–1.0 mT) was measured using anomalous behaviour of the velocity dispersion for neutrons, moving in a crystal close to the Bragg directions [9]. The foundations of the neutron acceleration in a laser radiation field were considered in Ref. [10].

Also acceleration and deceleration of neutrons by reflection from moving mirror [11, 12] or by Doppler-shifted Bragg diffraction from a moving crystal [13, 14] are well-known and used in experiments with ultracold neutrons.

Recently a new interest has arisen in the acceleration of neutrons, passing through accelerating media [15, 16]. This effect was first observed by the authors of Ref. [17] and was described in detail in Ref. [18]. It was noted in

Ref. [18] that “the observed effect was a manifestation of quite a general phenomenon – the accelerated medium effect (AME) inherent to waves and particles of different nature”. In Ref. [19], the acceleration and deceleration of neutrons were observed by applying a specific time-of-flight method. In Ref. [20], some new special features of the effect for a birefringent medium were discussed with the applications to neutron spin optics and evolution of flavor states of neutrino, propagating through a free space. The acceleration of the samples in the mentioned experiments reached several tens of g units, and the value of the energy transfer ΔE_n to a neutron with energy E_n

$$(\Delta E_n \approx 2(\Delta \mathbf{v}/\mathbf{v}_n)E_n[(1-n)/n])$$

fell within the range of $(2-6) \cdot 10^{-10}$ eV [18] for ultracold neutrons (UCN), so up to now AME was observed only for UCN and by only one research group (see Refs. [18, 20]). Here \mathbf{v}_n is a neutron velocity, $\Delta \mathbf{v}$ is a value of a relative neutron-matter velocity variation during the neutron time-of-flight through the sample, n is the refraction index for a neutron.

In the present paper, a new much more effective mechanism of acceleration effect is proposed [21], which has been tested and confirmed experimentally for cold neutrons passing through the accelerated perfect crystal. An energy transfer to a neutron in this case can be at the level of $\sim 4 \cdot 10^{-8}$ eV. This value in contrast to AME is determined by the amplitude V_g of the corresponding harmonic of the nuclear neutron-crystal periodic potential, but not by the value of a relative neutron-crystal velocity variation during the neutron time-of-flight through the crystal. For a cold neutron

$$[(1-n)/n] \approx V_0 / 2E_n,$$

so AME in our case has an order

$$\Delta E_n \approx (\Delta \mathbf{v}/\mathbf{v}_n)V_0 \sim 10^{-5}, V_0 \sim 10^{-13} \text{ eV}$$

that is negligible in further consideration (V_0 is zero harmonic of neutron-crystal interaction potential, i.e. averaged crystal potential).

The essence of the crystal acceleration effect is as follows. The crystal refraction index for neutrons in the vicinity of the Bragg resonance sharply depends on the crystal-neutron relative velocity (see further). The neutrons enter into

accelerated crystal with one potential of a neutron-crystal interaction and exit with the other potential, so the kinetic energy change at the crystal boundaries will differ, and neutrons will be accelerated or decelerated after passage through such a crystal, in this case the energy transfer to a neutron being at the level of $\sim 4 \cdot 10^{-8}$ eV.

Neutron wave function significantly modifies for neutrons moving through the crystal under conditions close to the Bragg ones. As a result neutrons concentrate on “nuclear” planes or between them [22, 23]. We take the term “nuclear” planes to mean the positions of maxima of periodic nuclear potential for corresponding system of crystallographic planes. The neutron-crystal interaction potential can be written as a sum (the reciprocal lattice vectors expansion) of harmonic potentials (harmonics) corresponding to all nuclear plane systems described by reciprocal lattice vector \mathbf{g} normal to the given plane system, $|\mathbf{g}| = 2\pi/d$ (d is an interplanar distance):

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} = V_0 + \sum_{\mathbf{g}>0} 2v_{\mathbf{g}} \cos(\mathbf{g}\mathbf{r} + \varphi_{\mathbf{g}}). \quad (1)$$

Here $V_{\mathbf{g}}$ are the amplitudes of g -harmonics of the crystal nuclear potential, which are determined by neutron scattering amplitudes for crystal elementary cell (structural amplitudes). In general, $V_{\mathbf{g}}$ are complex values, i.e. $V_{\mathbf{g}} = v_{\mathbf{g}} \exp \varphi_{\mathbf{g}}$.

However, if the crystal is nonabsorbing and centrosymmetric, one can make all phases vanish at once, i.e. make all $V_{\mathbf{g}}$ real, putting the coordinate origin at the centre of symmetry. When neutron is moving through the crystal under conditions close to the Bragg ones for a plane system \mathbf{g} , only one harmonic with amplitude $V_{\mathbf{g}}$ will be essential and should be taken into account. That is due to a very narrow width of the Bragg reflection of neutrons. For one harmonic, the origin of coordinates can be always placed at its maximum making $V_{\mathbf{g}}$ amplitude real. Just the same we can make with the crystal electric potential. So for centrosymmetric crystals the positions of «nuclear» and «electric» planes always coincide.

But if the center of symmetry is absent the maxima of electric potential for some

crystallographic planes will be shifted relative to the nuclear maxima. That will lead to gigantic electric fields, acting on the neutron inside the crystal [23–25], because the neutrons concentrate in the vicinities of the maxima and minima of nuclear potential where electric field is just nonzero in this case. So the whole class of new neutron optics phenomena arises (see, for example, Ref. [26]).

2. Neutron crystal optics

Interest in neutron optics in the perfect crystals has quickened in the past few years. It is caused first by new outstanding possibilities for studies of neutron fundamental properties and its interactions. The case in point is, for instance, a search for a neutron electric dipole moment, as well as a search for CP-violating pseudomagnetic forces due to exchange of a pseudoscalar axion-like particle, using neutron optics in the crystals [27–32]; these are now the most important tasks.

The admixture of the waves reflected by crystallographic planes to the neutron wave function significantly changes the pattern of neutron propagation in the crystal and leads to new phenomena, which manifest sharply defined resonance character with the Bragg (Darwin) width. For example, a small change of the neutron energy within this width ($\Delta E/E \sim 10^{-5}$ for thermal and cold neutrons) results in significant changing the neutron mean velocity in the crystal (the anomalous velocity dispersion), and so the sharp energy dependence of the neutron-traveltime through the crystal on neutron energy exhibits [33].

In the present paper we discuss one more phenomenon related to the change in the neutron wave function in the crystal, namely the resonant behavior of the neutron refractive index (i.e. kinetic energy of the neutron inside the crystal) depending on the difference of the initial and a Bragg neutron energies. If a neutron passes through the non-absorbing perfect crystal and Bragg conditions are not satisfied for any crystallographic planes, the neutron propagation through the crystal can be described by refractive index, which depends on the V_0 amplitude of zero harmonic (average crystal potential). In this article, by a perfect crystal it is meant the crystal with the dispersion

of the interplanar distance much less than the intrinsic width of the Bragg reflection. But when the energy or velocity direction of a neutron approaches the Bragg values, the waves reflected by the corresponding plane system start arising. The amplitudes of these waves are determined by the corresponding V_g amplitudes of potential harmonics and by the deviations from the exact Bragg condition. When this deviation being more than the harmonic amplitude we can use the perturbation theory [28, 34]. In this case if the neutron has an initial energy equal to E_0 and the wave vector \mathbf{k}_0 ($E_0 = \hbar \mathbf{k}_0 / 2m$), its wave function inside the crystal will be written as

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{V_g}{E_k - E_{k_g}} e^{i\mathbf{k}_g\mathbf{r}} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[1 - \frac{1}{\Delta_B} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \right], \quad (2)$$

where

$$\Delta_B = (E_k - E_{k_g}) / V_g = 2(E_k - E_B) / V_g$$

is the dimensionless parameter of deviation from the exact Bragg condition for some \mathbf{g} system of planes; \mathbf{k} , $\mathbf{k}_g = \mathbf{k} + \mathbf{g}$ are the wave vectors of incident and reflected waves inside the crystal with the mean refraction index taken into account; E_k and E_{k_g} are the unperturbed neutron kinetic energies in states $|\mathbf{k}\rangle$ and $|\mathbf{k}_g\rangle$,

$$E_k = \hbar^2 k^2 / 2m = \hbar^2 k_0^2 / 2m - V_0,$$

$$E_{k_g} = \hbar^2 k_g^2 / 2m;$$

$$E_B = \hbar^2 g^2 / (8m \sin^2 \theta_B)$$

is the neutron energy that corresponds to exact Bragg condition. The presence of reflected wave with the amplitude equal to $1/\Delta_B$ leads to localization of neutron density in the crystal on (or between) reflecting planes depending on the sign of Δ_B :

$$|\psi(\mathbf{r})|^2 = 1 - \frac{2}{\Delta_B} \cos(\mathbf{g}\mathbf{r}). \quad (3)$$

The concentration of neutron density in the vicinity of maxima or minima of nuclear potential, as in the case of Laue diffraction, leads to additional changing the neutron kinetic energy \tilde{E}_k and, respectively, the value of the wave vector and the refractive index n inside the crystal depending on the magnitude of this concentration, i.e. on deviation parameter Δ_B from the Bragg condition. Notice that the

neutron refraction index n is determined as usual:

$$n^2 = 1 - \tilde{E}_k / E_0.$$

Averaging the potential over the wave function (2), using (3), one gets

$$\tilde{E}_k = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m} = E_0 - V_0 + V_g \cdot \frac{1}{\Delta_B}. \quad (4)$$

The last term in Eq. (4) increases infinitely approaching the Bragg condition ($E_k = E_{k_g}$), so it becomes incorrect (and the perturbation theory is inapplicable as well) already for

$$E_k - E_{k_g} \sim V_g.$$

The precise fulfilment of the Bragg condition

$$E_k - E_{k_g} = 0$$

means the equality of energies for two neutron states with momenta $\hbar\mathbf{k}$ and $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{g})$, i.e. the neutron energy level E_k becomes doubly degenerated. Amplitudes of these neutron states become comparable in value, and one should solve well-known two-level problem that corresponds to the two-wave approximation of the dynamic diffraction theory. The result is the following. Neutrons with the energies within Bragg (Darwin) width $|E_k - E_B| \leq V_g/2$ cannot penetrate into the working K_3 crystal (Fig. 1), they will completely reflect from the crystal entrance face which is parallel to the crystallographic planes. So only the neutrons with $|E_k - E_B| > V_g/2$ ($\Delta_B > 1$) can pass through this crystal and can be accelerated. Using expansion of the exact two wave dispersion equation over $1/\Delta_B$ one can get the following result for the kinetic energy of neutron after its entrance into the crystal:

$$\tilde{E}_k = E_0 - V_0 + V_g \cdot \frac{\Delta_B}{\Delta_B^2 + 1}. \quad (5)$$

The last term in Eq.(5) describes the additional potential neutron energy due to neutron localization. It significantly changes with small variation of neutron energy within the Bragg reflection width $\Delta_B \cong 1$, i.e. in the narrow energy range

$$E_B - V_g < E_k < E_B + V_g.$$

For thermal and cold neutrons

$V_g / E_B \cong 10^{-5}$. The V_g amplitude value itself is comparable to that of the mean crystal potential V_0 . Hence changing the incident neutron energy in the vicinity of E_B , one can observe a well-defined resonance-type energy dependence of the neutron refraction index in the crystal. For example, for (110) plane of quartz $V_g = 4 \cdot 10^{-8}$ eV, $V_0 = 10^{-7}$ eV and $E_B = 3.2 \cdot 10^{-3}$ eV for diffraction angle close to $\pi/2$.

It is worth to notice that in our case the Eq. (4) can also be quite good approximation, the infinities can be removed by overaging over neutron spectrum within $\Delta_B \sim 2$, because it is formed by two crystals K_1 and K_2 . When $\Delta_B = 0$ for the central part of the spectrum only the left and the right wings, having opposite potentials connected with the neutron concentration, can penetrate to the crystal so that averaged potential for this neutrons will be zero as in accordance with Eq. (5).

3. Experimental setup

Our experiment was carried out at the horizontal neutron beam of the WWR-M reactor (PNPI, Gatchina, Leningrad Region, Russia). The energy change of a neutron passed through the accelerating crystal near to the Bragg condition was measured.

If a neutron moves through the accelerating crystal, then the parameter of deviation from the Bragg condition and correspondingly the mean potential of neutron-crystal interaction will be time-dependent (see Eq. (5)). As a result, the refractive index will vary during a neutron travel in the crystal. Correspondingly the changes in the neutron kinetic energies at the entrance and the exit surfaces of the crystal will differ. Therefore, one should observe either acceleration or deceleration of the neutron passing through such a crystal, because the kinetic energy \tilde{E}_k of the neutron inside the crystal does not change because of the crystal homogeneity. It should be noticed that it does not matter in which way a change in the parameter of deviation from the Bragg condition occurs over a time interval of the neutron propagation through the crystal. For example, instead of variation of the relative neutron-crystal velocity one can vary the crystal temperature or deform the crystal by squeezing.

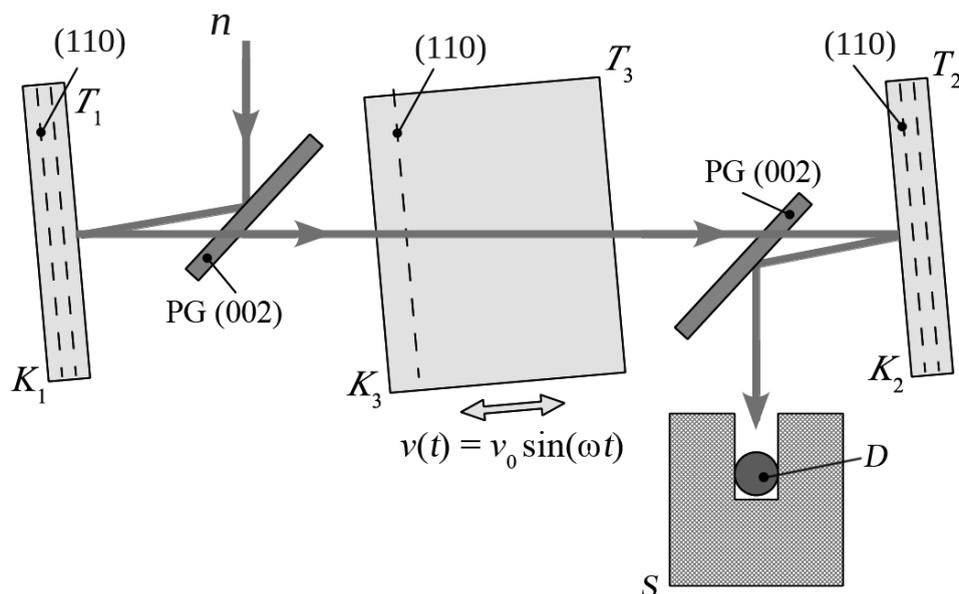


Fig. 1. Scheme of the experimental setup:

K_1 is the monochromator; K_2 is the crystal-analyzer; K_3 is the working crystal; PG are the mosaic crystals of pyrolytic graphite; T_1 , T_2 , T_3 are the crystal temperatures; n is the neutron beam; (002), (110) are the reflecting planes; $v(t)$ is the time-dependent speed of crystal K_3 ; D is a neutron detector inside a neutron shield S

Both actions will cause a change in the crystal interplanar dimensions and so to the shift of the Bragg energy. The crystal movement was chosen due to the convenience of its realization (the above-mentioned accelerated medium effect [18] is negligible in this case). Numerical estimations show that for the quartz crystal plane (110) the Bragg width in the neutron-velocity units is equal to $\Delta v_B \cong 9 \text{ mm/s}$, i.e. if the crystal velocity changes by 9 mm/s over the time interval of neutron transit through the crystal, the deviation from the Bragg condition will vary by one Bragg width.

The scheme of our experimental setup is shown in Fig. 1. Preselected neutron beam (the beam size is about $3 \times 1 \text{ cm}$), reflected by the mosaic crystal of pyrolytic graphite (PG) with reflecting plane (002), falls on the monochromator K_1 made from perfect quartz crystal. Reflected by K_1 highly monoenergetic (within Darwin width) neutrons pass through the working crystal K_3 (the size is $5 \times 5 \times 10 \text{ cm}$) and then are reflected by the crystal-analyzer K_2 . The second PG crystal redirects these reflected neutrons to the detector. The quartz crystals K_1 , K_2 and K_3 with the same working reflecting planes (110) were arranged to have

their plane orientations in the parallel directions. The diffraction angle was close to the right one: $\theta_B = 89^\circ$ ($\lambda \approx 4.9 \text{ \AA}$). Scanning over the Bragg wave length performed by varying temperature difference $T_{21} = T_2 - T_1$ between crystals K_2 and K_1 , the temperature T_3 of the crystal K_3 being a reference one. An example of a scanning curve is shown in Fig. 2, when the crystal K_3 is absent. We have scanned the shape of neutron reflex from the K_1 crystal changing T_{21} and so the relative interplanar distance for the K_2 crystal-analyzer. The width of this convolution scanning curve is close to that calculated (solid line) for two perfect crystals.

There was a possibility to vary the temperature of the crystal K_3 and so its interplanar distance too. Also we could move it in the direction parallel to the reciprocal lattice vector \mathbf{g} for the working plane. To carry out an experiment, the crystal was set in harmonic motion by a piezoelectric motor. The frequency of crystal vibration was $\nu_c = 4.5 \text{ kHz}$ and the period $\tau_c = 222 \mu\text{s}$. Vibration amplitude reached a value of $0.15 \mu\text{m}$. The crystal length was $L = 5 \text{ cm}$ and neutron time-of-flight through the crystal was $\tau_n = 62 \mu\text{s}$ that was about a quarter of the crystal vibration period.

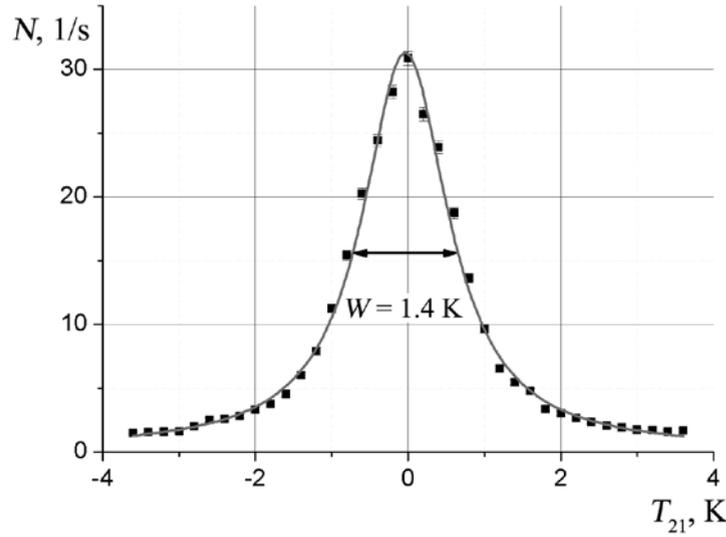


Fig. 2. The experimental (symbols) and the calculated (solid line) two-crystal reflection curves. They reach their maxima when interplanar distances for K_1 and K_2 crystals (see Fig. 1) coincide ($T_{21} = T_2 - T_1 = 0$); N is the neutron intensity. The width W (in Kelvin) corresponds to $\Delta d/d = 1.8 \cdot 10^{-5}$ (in d units of the interplanar distance)

If the speed of the working crystal K_3 depends on time as

$$v(t) = v_0 \cdot \sin \omega t, \quad (6)$$

the deviation from the Bragg condition for neutrons moving through that crystal will also depend on time in the same way:

$$\Delta_B(t) = \Delta_{B_0} + 4 \frac{1}{v_n} \frac{E_B}{V_g} v(t), \quad (7)$$

where v_n is the speed of incident neutrons, Δ_{B_0} is the deviation from the Bragg condition for resting crystal at $v(t) = 0$. This deviation Δ_{B_0} is determined by the T_{13} difference of temperatures (interplanar distances) between K_1 and K_3 crystals $T_{13} = T_1 - T_3$. So further we will use this temperature difference T_{13} as a parameter of deviation from the Bragg condition for neutrons passing the resting K_3 crystal. The relationship between parameters Δ_{B_0} and T_{13} is given by the expression

$$\Delta_{B_0} = 4 \frac{E_B}{V_g} \alpha_L T_{13}, \quad (8)$$

where $\alpha_L \cong 1.3 \cdot 10^{-5}$ is the linear thermal expansion coefficient for a quartz crystal in the direction perpendicular to crystallographic planes.

The effect of the neutron energy change

after passing through the crystal boundaries is determined by variation of the crystal velocity and so the averaged potential (5) is done during the neutron time-of-flight through the accelerated crystal:

$$\begin{aligned} \Delta E(t_0) &= V_g \left(\frac{\Delta_B(t_2)}{\Delta_B^2(t_2) + 1} - \frac{\Delta_B(t_1)}{\Delta_B^2(t_1) + 1} \right) = \\ &= \frac{1 - \Delta_{B_0}^2}{(1 + \Delta_{B_0}^2)^2} \frac{4E_B}{v_n} \Delta v(t_0), \end{aligned} \quad (9)$$

where $\Delta v(t_0) = v(t_0) - v(t_0 + \tau_n)$; t_0 is the entry time of the neutron into the crystal, τ_n is the neutron time-of-flight through the crystal. Notice once more that the neutron kinetic energy (wave vectors) inside the crystal cannot change because of homogeneity of the averaged crystal potential.

The change (9) of neutron energy (as well as the wavelength) after accelerated crystal results in a shift of the scanning-curve maximum (see Fig. 2). This maximum will be found for some other temperature difference T_{21} of the K_2 and K_1 crystals. Such variations of the scanning curve, depending on temperature and movement of the K_3 crystal, were studied to find how the crystal acceleration effects. Time-of-flight technique was used for this purpose.

The main systematic error of this experiment associates with the dependence of the neutron transmission through the K_3 crystal on the deviation from the Bragg condition in this crystal, that results in the spectrum distortion for neutrons passed through the crystal. Therefore, the position and the shape of the scanning curve can change for neutrons passed even through the resting K_3 crystal, when the acceleration effect is absent. Examples of the neutron intensity distribution over the wavelength after such passage through the resting K_3 crystal with different deviations T_{31} from the Bragg condition are shown in Fig. 3. It is evident that both intensity of transmitted neutrons and maximum position of the scanning curve can change in different ways. In particular, for $T_{31} = 0$ K the neutrons after reflection from K_1 crystal cannot penetrate into K_3 crystal. They will be completely reflected (due to the exact Bragg condition) and cannot reach the K_2 crystal. So the last will reflect only background neutrons. In the other case, for $T_{31} \gg 5$ K, crystal behaves as a homogeneous medium and practically does not distort the spectrum. In an intermediate case, the spectrum

will be distorted, because the neutron K_3 crystal reflectivity (and so its transmittance) sharply depends on the neutron wavelength.

However, unlike the sought crystal acceleration effect (9), the curve distortion is determined only by the deviation from the exact Bragg condition at the entry time t_0 of neutron to crystal, but not by variation of the deviation during the time-of-flight through the crystal.

So the position $E_s(t_0)$ of the maximum and the maximum intensity $N(t_0)$ of the scanning curve (see Fig. 2) in the absence of the crystal acceleration effect will be some functions of deviation $\Delta_B(t_0)$, depending on the crystal speed $v(t_0)$:

$$E_s(t_0) = F(\Delta_B(t_0)), \quad (10)$$

$$N(t_0) = G(\Delta_B(t_0)). \quad (11)$$

For further consideration and comparison with the experimental results expressions (10) and (11) can be expanded by Taylor series over $v(t_0)$ about the point $v(t_0) = 0$ (i.e. $\Delta_B(t_0) = \Delta_{B_0}$). Taking into account that the crystal speed was significantly less than the

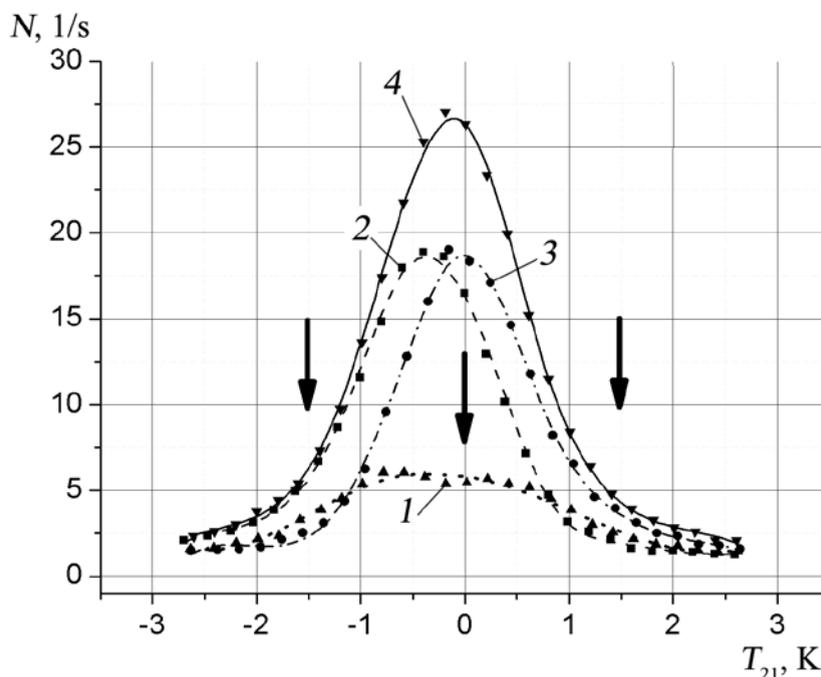


Fig. 3. Two-crystal scanning curves for neutrons passed through immovable working crystal with different deviations T_{31} from the Bragg energy. T_{31} , K: 0 (1), +1.5 (2), -1.5 (3), > 5 (4). The arrows point to exact Bragg positions for K_3 crystal

typical Bragg widths, it is enough to leave expansion terms up to the second order over $\nu(t_0)$:

$$E_s(t_0) = A + B \cdot \nu(t_0) + C \cdot \nu(t_0)^2, \quad (12)$$

$$N(t_0) = N_0 + N_1 \cdot \nu(t_0) + N_2 \cdot \nu(t_0)^2, \quad (13)$$

where A, B, C, N_0, N_1 and N_2 are the free parameters depending on Δ_{B_0} to be found from experiment.

As it follows from Eq. (9), the crystal acceleration effect contains a term phase-shifted with respect to the false effect (12) by the value of $\omega\tau_n / 2$. This shift is approximately equal to $\pi/4$ for our experimental conditions. Furthermore, the presence of acceleration effect does not change the intensity of the line, but gives its additional shift. Thus there is a phase shift between time dependencies of $N_{exp}(t_0) = N(t_0)$ and $E_{exp}(t_0) = E_s(t_0) + \Delta E(t_0)$ that represents the crystal acceleration effect.

4. Results and discussion

An example of experimental dependence of the line positions on its maximal intensity $E_{exp}(N_{exp})$ is shown in Fig. 4. In the absence of

the acceleration effect it should be observed a bijection between the maximum positions and the intensities shown by a dashed line. The presence of the neutron energy change after passage through the accelerating crystal leads to dependence $E_{exp}(N_{exp})$ described with a closed curve like Lissajous figure, where the figure square is determined by the crystal acceleration effect. Curved arrows in Fig. 4 show the sweep direction over time. The relation between a line shift in units of the crystal temperature and a change in the neutron energy is given by the following expression:

$$\Delta E = 2E_B \cdot \alpha_L \Delta T. \quad (14)$$

The splitting marked by arrows in Fig. 4 corresponds to $\Delta E_{exp} \cong 5$ neV.

Examples of the time dependencies of the scanning curve maximum position are shown in Fig. 5 for different deviations T_{13} from the Bragg condition. Those are the results of fitting the experimental curves under the assumption that the maximum position is determined by a sum of two effects: see formulae (12) and (9).

Dependence of the maximum value for an energy change (9) due to the acceleration effect on

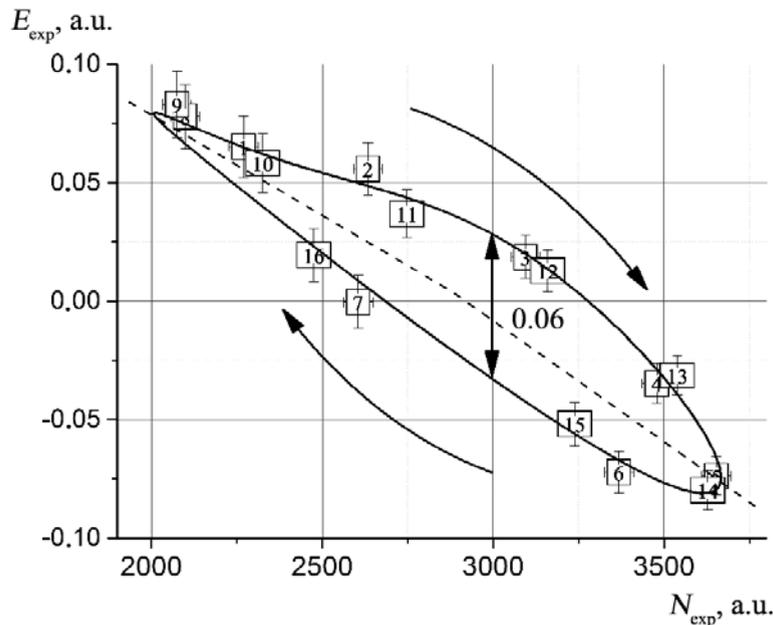


Fig. 4. The plots of the line positions versus its maximum intensities $E_{exp}(N_{exp})$.

The initial deviation from the Bragg condition for the working crystal $T_{13} = +1.5$ K. Numbers inside the experimental points correspond to the channel numbers of the time spectrum. Solid curve is the result of fitting the experimental data; the dashed line indicates a bijection between the maximum positions and the intensities; curved arrows show the sweep direction over time

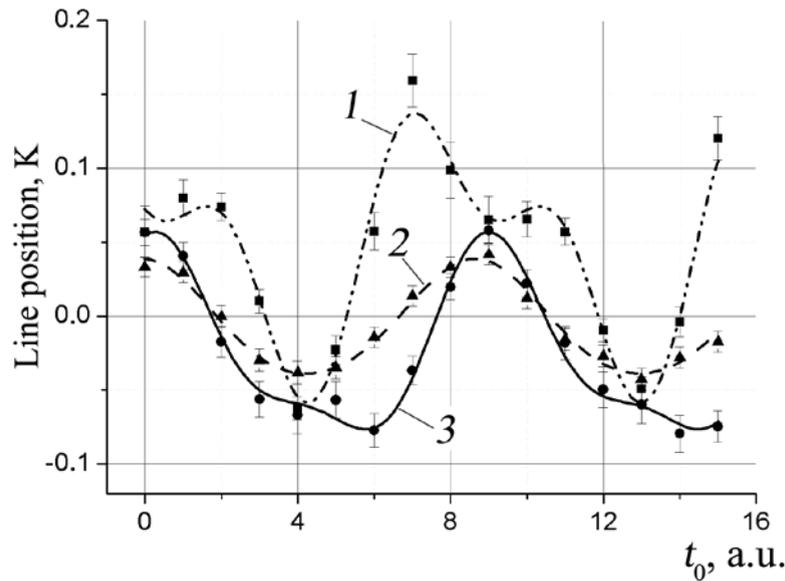


Fig. 5. The experimental dependence of the line position on the entry time t_0 of neutrons into the crystal for various T_{13} – initial deviations from the Bragg condition; T_{31} , K: +1.0 (1), -1.5 (2), -2.5 (3). Horizontal axis t_0 in time-of-flight (TOF) channel units. One channel is equal to 25.6 μ s

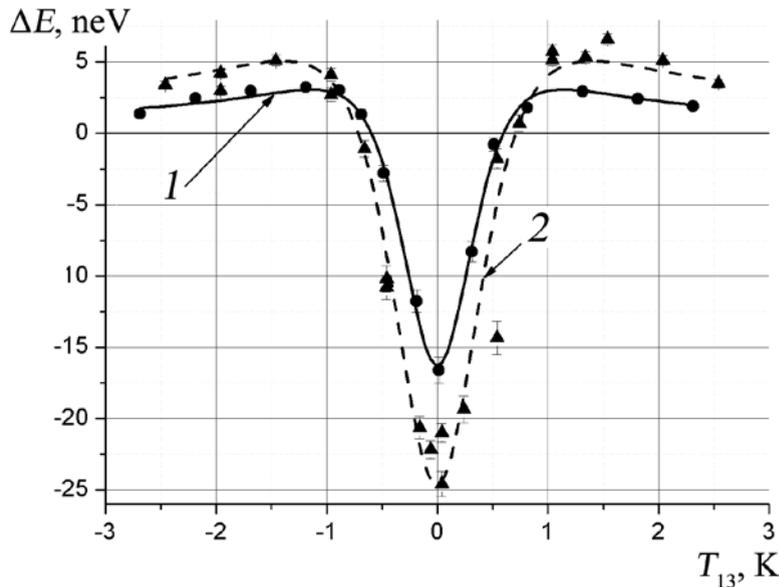


Fig. 6. The experimental (symbols) magnitude of energy variation of a neutron passed through the accelerating crystal as a function of the deviation from the Bragg condition for incident beam, and this function approximation (solid and dashed lines); measurements were carried out at two different crystal oscillation amplitudes, corresponding to $v_0 = 1.5$ mm/s (1) and 3.0 mm/s (2)

the deviation from the neutron Bragg energy for the working crystal (temperature difference T_{13}) is shown in Fig. 6. Measurements were carried out at two different crystal oscillation amplitudes, corresponding to $v_0 \cong 3.0$ mm / s and

$v_0 \cong 1.5$ mm / s (see Eq. (6)). Curves show the results of approximating the experimental points by the theoretical curve (9). Thus, one can see that the neutron energy change after passage through the accelerating crystal can reach ~ 20 neV.

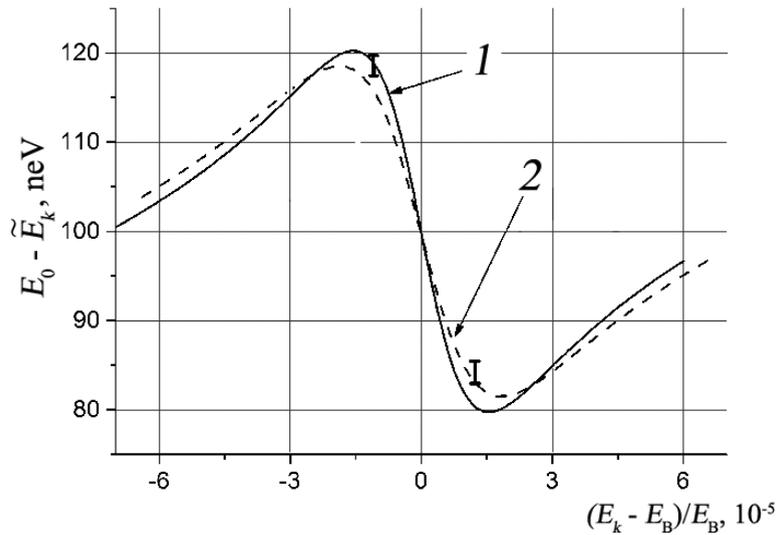


Fig. 7. The behaviour of the interaction potential $E_0 - \tilde{E}_k$ (see Eq. (5)) of neutrons with the crystal in the vicinity of the Bragg energy.

Calculated and reconstructed from Fig. 6 curves coincide in error limits; the curves for different v_0 ($v_0 = 1.5$ mm/s (1) and $v_0 = 3.0$ mm/s (2)) coincide also (vertical bars show the scale of the experimental error)

The mean potential energy of a neutron-crystal interaction (see Eq. (5)) can be obtained from the experimental dependence shown in Fig. 6, because that is actually a derivative of function (5) (see Eq. (6)). One should take into account that far from the Bragg condition the correction to the mean interaction potential due to the presence of g -harmonic V_g tends to zero (see Eq. (4)), and so neutron refraction will be determined only by the average potential V_0 . The result of the interaction potential reconstruction for neutrons moving in a crystal with energies close to the Bragg one is shown in Fig. 7. It is easy to see that the relative change of the neutron energy by several units of 10^{-5} leads to the variation of the interaction neutron-crystal potential by $\pm 20\%$.

5. Summary

The features of refraction of a neutron wave moving in a crystal close to the Bragg condition has been studied. The energy dependence of the refractive index was shown to exhibit an evident resonance shape in the vicinity of the Bragg energy with the corresponding Bragg (Darwin) width (for thermal and cold neutrons $\Delta E / E \cong 10^{-5}$). The variation of the interaction potential of the neutron with the crystal in this energy range can reach about $\pm 20\%$.

The resonance behaviour of the neutron-crystal interaction potential results in one more new phenomenon. That is the neutron acceleration, which is found experimentally for neutrons passed through the accelerating perfect crystal for neutron energies, close to the Bragg one. The effect arises due to a change in the parameter of deviation from the exact Bragg condition during the neutron time-of-flight through the accelerating crystal. As a result the refraction index for neutron changes as well and so does the velocity of the outgoing neutron.

This crystal acceleration effect has been observed for the first time. One should take this phenomenon into account in precision neutron optical experiments such as mentioned above, because the neutron refraction index is determined not only by averaged crystal potential, but also by its harmonics, which have the same order of value as the average potential itself.

Acknowledgment

The authors are thankful to the staff of WWR-M reactor (PNPI, Gatchina) for efforts to maintain performance of this apparatus.

This work was supported by Ministry of Science and Education of the Russian Federation (program 3.329.2014/K).

REFERENCES

- [1] **Yu.V. Petrov**, Possibility of investigating the levels of the compound nucleus produced by interaction between slow neutrons and isomers, *Sov. Phys. JETP*. 10 (4) (1960) 833–834.
- [2] **I.A. Kondurov, E.M. Korotkikh, Yu.V. Petrov**, Acceleration of thermal neutrons by ^{152m}Eu isomeric nuclei, *JETP Lett.* 31 (4) (1980) 232–235.
- [3] **I.A. Kondurov, E.M. Korotkikh, Yu.V. Petrov, G.I. Shulyak**, Acceleration of thermal neutrons by isomeric nuclei ($^{180}\text{Hf}^m$), *Phys. Lett. B* 106(5) (1981) 383–385.
- [4] **Yu.V. Petrov, A.I. Shlyalchter**, The cross section of inelastic neutron acceleration for indium isomers, *Nucl. Phys. A* 292 (1–2) (1977) 88–92.
- [5] **Yu.V. Petrov**, Multiple acceleration of neutrons in an inversely populated medium, *Sov. Phys. JETP* 36 (3) (1973) 395–398.
- [6] **A.B. Laptev, G.A. Petrov, Yu.S. Pleva, M.A. Yamshikov**, Acceleration of thermal neutrons in scattering by vibrationally excited nitrogen molecules. *Sov. Journal of Nucl. Phys.* 49 (2) (1989) 204–207.
- [7] **H. Weinfurter, G. Badurek, H. Rauch, D. Schwahn**, Inelastic action of a gradient radio-frequency neutron spin flipper, *Z. Phys. B: Condens. Matter* 72 (2) (1988) 195–201.
- [8] **L. Niel, H. Rauch**, Acceleration, deceleration and monochromatization of neutrons in time dependent magnetic fields, *Z. Phys. B: Condens. Matter* 74 (1) (1989) 133–139.
- [9] **V.V. Voronin, Yu.V. Borisov, A.V. Ivanyuta, et al.**, Observation of small changes in the energy of a neutron in an alternating magnetic field, *JETP Lett.* 96 (10) (2012) 613–615.
- [10] **L.A. Rivlin**, Laser acceleration of neutrons (physical foundations), *Quantum Electron.* 40(5) (2010) 460–463.
- [11] **A.V. Antonov, D.E. Vul', M.V. Kazarnovskii**, Possible method of obtaining ultracold neutrons by reflection from moving mirrors, *JETP Lett.* 9 (5) (1969) 180–183.
- [12] **A.Z. Andreev, A.G. Glushkov, P. Geltenbort, et al.**, Ultracold neutron cooling upon reflection from a moving wall, *Tech. Phys. Lett.* 39 (4) (2013) 370–373.
- [13] **T.W. Dombek, J.W. Lynn, S.A. Werner, et al.**, Production of ultracold neutrons using Doppler-shifted Bragg scattering and an intense pulsed neutron spallation source, *Nucl. Instr. Meth. A*, 165 (2) (1979) 139–155.
- [14] **S. Mayer, H. Rauch, P. Geltenbort, et al.**, New aspects for high-intensity neutron beam production, *Nucl. Instr. Meth. A*, 608(3) (2009) 434–439.
- [15] **F.V. Kowalski**, Interaction of neutrons with accelerating matter: test of the equivalence principle, *Phys. Lett. A* 182 (1-2) (1993) 335–340.
- [16] **V.G. Nosov, A.I. Frank**, Interaction of slow-neutrons with moving matter, *Phys. At. Nucl.* 61(4) (1998) 613–623.
- [17] **A.I. Frank, P. Geltenbort, G.V. Kulin, et al.**, Effect of accelerating matter in neutron optics, *JETP Lett.* 84(7) (2006) 363–367.
- [18] **A.I. Frank, P. Geltenbort, M. Jentschel, et al.**, Effect of accelerated matter in neutron optics, *Phys. At. Nucl.* 71 (10) (2008) 1656–1674.
- [19] **A.I. Frank, P. Geltenbort, M. Jentschel, et al.** New experiment on the observation of the effect of accelerating matter in neutron optics, *JETP Lett.* 93(7) (2011) 361–365.
- [20] **A.I. Frank, V.A. Naumov**, Interaction of waves with a birefringent medium moving with acceleration, *Physics of Atomic Nuclei.* 76 (12) (2013) 1423–1433.
- [21] **V.V. Voronin, Ya.A. Berdnikov, A.Ya. Berdnikov, et al.**, Dispersion of the refractive index of a neutron in a crystal, *JETP Lett.* 100(8) (2014) 497–502.
- [22] **P. Hirsch, A. Howie, R. Nicholson, et al.**, *Electron microscopy of thin crystals.* Butterworths, London, 1965.
- [23] **V.L. Alexeev, V.V. Fedorov, E.G. Lapin, et al.**, Observation of a strong interplanar electric field in a dynamical diffraction of a polarized neutron, *Nucl. Instr. and Meth. A*, 284 (1) (1989) 181–183.
- [24] **V.L. Alexeev, V.V. Voronin, E.G. Lapin, et al.**, Measurement of the strong intracrystalline electric field in the Schwinger interaction with diffracted neutrons, *Sov. Phys. JETP* 69 (6) (1989) 1083–1085.
- [25] **V.V. Fedorov, I.A. Kuznetsov, E.G. Lapin, et al.**, Neutron spin optics in noncentrosymmetric crystals as a new way for nEDM search, *Nucl. Instr. and Meth. B* 252 (1) (2006) 131–135.
- [26] **V.V. Fedorov, V.V. Voronin**, Neutron diffraction and optics in noncentrosymmetric crystals. New feasibility of a search for neutron EDM, *Nucl. Instr. and Meth. B* 201(1) (2003) 230–242.
- [27] **V.V. Fedorov, V.V. Voronin, E.G. Lapin**. On the search for neutron EDM using Laue diffraction by a crystal without a center of symmetry. Preprint LNPI-1644, Leningrad, 1990.
- [28] **V.V. Fedorov**, On the possibility for neutron EDM search using diffraction by crystal without a center of symmetry, *Proceedings of XXVI LNPI Winter School, Leningrad, 1991*, 65–118.
- [29] **V.V. Fedorov, V.V. Voronin, E.G. Lapin**, On the search for neutron EDM using Laue diffraction by a crystal without a centre of symmetry, *J. Phys. G* 18 (7) (1992) 1133–1148.

[30] **V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, et al.**, Measurement of the neutron electric dipole moment by crystal diffraction, *Nucl. Instr. and Meth. A* 611 (2-3) (2009) 124–128.

[31] **V.V. Fedorov, M. Jentschel, I.A. Kuznetsov, et al.**, Measurement of the neutron electric dipole moment via spin rotation in a non-centrosymmetric crystal, *Physics Letters. B* 694 (1) (2010) 22–25.

[32] **V.V. Voronin, V.V. Fedorov, I.A. Kuznetsov**, Neutron diffraction constraint on spin-dependent short

range interaction, *JETP Letters*. 90 (1) (2009) 5–7.

[33] **V.V. Voronin, Yu.V. Borisov, A.V. Ivanyuta, et al.**, Anomalous behavior of the dispersion of a neutron transmitting through a crystal at nearly Bragg energies, *JETP Letters*. 96 (10) (2012) 609–612.

[34] **V.V. Fedorov, V.V. Voronin**, New possibilities for neutron EDM search by polarization method using diffraction in the crystal without a centre of symmetry. *Proceedings of XXVI PNPI Winter School, Part 1, St. Petersburg, 1996*, 123–164.

THE AUTHORS

BRAGINETZ Yulia P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
aiver@pnpi.spb.ru

BERDNIKOV Yaroslav A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
berdnikov@spbstu.ru

FEDOROV Valery V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
vfedorov@pnpi.spb.ru

KUZNETSOV Igor A.

Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
ikuz@pnpi.spb.ru

LASITSA Michael V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
mishlas1@gmail.com

SEMENIKHIN Sergey Yu.

Petersburg Nuclear Physics Institute
OrlovaRoscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
ssy@pnpi.spb.ru

VEZHLEV Egor O.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
vezhlev@gmail.com

VORONIN Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

Petersburg Nuclear Physics Institute

Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation

vvv@pnpi.spb.ru

Брагинец Ю.П., Бердников Я.А., Федоров В.В., Кузнецов И.А., Ласица М.В., Семенухин С.Ю., Вежлев Е.О., Воронин В.В. ЭФФЕКТ УСКОРЕНИЯ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ ВБЛИЗИ БРЭГГОВСКОГО РЕЗОНАНСА.

Проведено детальное исследование нового механизма ускорения холодных нейтронов, прошедших через ускоренный совершенный кристалл с энергиями, близкими к брэгговским. Эффект возникает по следующей причине. Коэффициент преломления нейтронов в кристалле (и соответственно потенциал взаимодействия нейтрона с кристаллом) резонансно зависят от параметра отклонения от условия Брэгга, т. е. от скорости нейтрона относительно движущегося кристалла, так что нейтрон входит в ускоренный кристалл при одном значении потенциала взаимодействия, а выходит при другом. Следовательно, изменения кинетической энергии нейтрона на входной и выходной гранях кристалла будут разными. А поскольку кинетическая энергия нейтронов внутри кристалла не может измениться вследствие его однородности, то после прохождения границ кристалла нейтроны будут либо ускорившимися, либо замедлившимися.

УСКОРЕНИЕ НЕЙТРОНА, ИДЕАЛЬНЫЙ КРИСТАЛЛ, НЕЙТРОННАЯ ДИФРАКЦИЯ, УСКОРЕННЫЙ КРИСТАЛЛ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Петров Ю.В.** О возможности исследования уровней составного ядра, образующегося при взаимодействии медленных нейтронов с изомерами // *ЖЭТФ*. 1959. Т. 37. № 4. С. 1170–1171.
- [2] **Кондуков И.А., Коротких Е.М., Петров Ю.В.** Ускорение тепловых нейтронов изомерными ядрами ^{152m}Eu // *Письма в ЖЭТФ*. 1980. Т. 31. № 4. С. 254–257.
- [3] **Kondurov I.A., Korotkikh E.M., Petrov Yu.V., Shulyak G.I.** Acceleration of thermal neutrons by isomeric nuclei ($^{180}\text{Hf}^m$) // *Phys. Lett.* 1981. B. Vol. 106. No. 5. Pp. 383–385.
- [4] **Petrov Yu.V., Shlyalchter A.I.** The cross section of inelastic neutron acceleration for indium isomers // *Nucl. Phys. A*. 1977. Vol. 292. No. 1–2. Pp. 88–92.
- [5] **Петров Ю.В.** Многократное ускорение нейтронов в инверсно заселенной среде // *ЖЭТФ*. 1972. Vol. 63. No. 3. Pp. 753–760.
- [6] **Лаптев А.Б., Петров Г.А., Плева Ю.С., Ямщиков М.А.** Эффект ускорения тепловых нейтронов при их рассеянии колебательно-возбужденными молекулами азота // *Ядерная физика*. 1989. Т. 49. Вып. 2. С. 331–337.
- [7] **Weinfurter H., Badurek G., Rauch H., Schwahn D.** Inelastic action of a gradient radio-frequency neutron spin flipper // *Z. Phys. B: Condens. Matter*. 1988. Vol. 72. No. 2. Pp. 195–201.
- [8] **Niel L., Rauch H.** Acceleration, deceleration and monochromatization of neutrons in time dependent magnetic fields // *Z. Phys. B: Condens. Matter*. 1989. Vol. 74. No. 1. Pp. 133–139.
- [9] **Воронин В.В., Борисов Ю.В., Иванюта А.В. и др.** Наблюдение малых изменений энергии нейтрона в переменном магнитном поле // *Письма в ЖЭТФ*. 2012. Т. 96. № 10. С. 685–687.
- [10] **Ривлин Л.А.** Лазерное ускорение нейтронов (физические основы) // *Квантовая электроника*. 2010. Т. 40. № 5. С. 460–463.
- [11] **Антонов А.В., Вуль Д.Е., Казарновский М.В.** Возможный метод получения ультрахолодных нейтронов путем отражения от движущихся зеркал // *Письма в ЖЭТФ*. 1969. Т. 9. Вып. 5. С. 307–311.
- [12] **Андреев А.З., Глушков А.Г., Geltenbort P. и др.** Охлаждение ультрахолодных нейтронов при их отражении от движущейся стенки // *Письма в ЖТФ*. 2013. Т. 39. № 8. С. 25–32.
- [13] **Dombeck T.W., Lynn J.W., Werner S.A., et al.** Production of ultracold neutrons using Doppler-shifted Bragg scattering and an intense pulsed neutron spallation source // *Nucl. Instr. Meth. A*. 1979. Vol. 165. No. 2. Pp. 139–155.
- [14] **Mayer S., Rauch H., Geltenbort P., et al.** New aspects for high-intensity neutron beam production // *Nucl. Instr. Meth. A*. 2009. Vol. 608. No. 3. Pp. 434–439.
- [15] **Kowalski F.V.** Interaction of neutrons with accelerating matter: test of the equivalence principle // *Phys. Lett. A*. 1993. Vol. 182. No. 1–2.

Рр. 335–340.

[16] **Носов В.Г., Франк А.И.** Взаимодействие медленных нейтронов с движущимся веществом // Ядерная физика. 1998. Т. 61. № 4. С. 686–696.

[17] **Франк А.И., Гелтенборг П., Г.В. Кулин Г.В. и др.** Эффект ускоряющейся среды в нейтронной оптике // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 84. № 7. С. 435–439.

[18] **Франк А.И., Гелтенборг П., Жентшель М. и др.** Эффект ускоряющегося вещества в нейтронной оптике // Ядерная физика. 2008. Т. 71. № 10. С. 1686–1704.

[19] **Франк А.И., Гелтенборг П., Ентшель М. и др.** Новый эксперимент по наблюдению эффекта ускоряющегося вещества в нейтронной оптике // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. № 7. С. 403–407.

[20] **Франк А.И., Наумов В.А.** Взаимодействие волн с двоякопреломляющим веществом, движущимся с ускорением // Ядерная физика. 2013. Т. 76. № 12. С. 1507–1518.

[21] **Воронин В.В., Бердников Я.А., Бердников А.Я. и др.** Дисперсия показателя преломления нейтрона в кристалле // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. № 8. С. 555–560.

[22] **Hirsch P., Howie A., Nicholson R., et al.** Electron microscopy of thin crystals. Butterworths, London, 1965.

[23] **Alexeev V.L., Fedorov V.V., Lapin E.G., et al.** Observation of a strong interplanar electric field in a dynamical diffraction of a polarized neutron // Nucl. Instr. and Meth. A. 1989. Vol. 284. No. 1. Pp. 181–183.

[24] **Алексеев В.Л., Воронин В.В., Лапин Е.Г. и др.** Измерение сильного электрического внутрикристаллического поля в швингеровском взаимодействии дифрагирующих нейтронов // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 6. С. 1921–1926.

[25] **Fedorov V.V., Kuznetsov I.A., Lapin E.G., et al.** Neutron spin optics in noncentrosymmetric crystals as a new way for n EDM search // Nucl. Instr. and Meth. B. 2006. Vol. 252. No. 1.

Рр. 131–135.

[26] **Fedorov V.V., Voronin V.V.** Neutron diffraction and optics in noncentrosymmetric crystals. New feasibility of a search for neutron EDM // Nucl. Instr. and Meth. B. 2003. Vol. 201. No. 1. Pp. 230–242.

[27] **Федоров В.В., Воронин В.В., Лапин Е.Г.** О возможности поиска ЭДМ нейтрона при динамической дифракции по Лауэ в нецентросимметричном кристалле. Препринт ЛИЯФ-1644. Ленинград, 1990.

[28] **Федоров В.В.** О возможности поиска ЭДМ нейтрона при дифракции в нецентросимметричном кристалле // Матер. XXVI зимней школы ЛИЯФ (ФЭЧ). Л., 1991. С. 65–118.

[29] **Fedorov V.V., Voronin V.V., Lapin E.G.** On the search for neutron EDM using Laue diffraction by a crystal without a centre of symmetry // J. Phys. G. 1992. Vol. 18. No. 7. Pp. 1133–1148.

[30] **Fedorov V.V., Jentschel M., Kuznetsov I.A., et al.** Measurement of the neutron electric dipole moment by crystal diffraction // Nucl. Instr. and Meth. A. 2009. Vol. 611. No. 2-3. Pp. 124–128.

[31] **Fedorov V.V., Jentschel M., Kuznetsov I.A., et al.** Measurement of the neutron electric dipole moment via spin rotation in a non-centrosymmetric crystal // Physics Letters. B. 2010. Vol. 694. No. 1. Pp. 22–25.

[32] **Voronin V.V., Fedorov V.V., Kuznetsov I.A.** Neutron diffraction constraint on spin-dependent short range interaction // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. № 1. С. 7–9.

[33] **Воронин В.В., Борисов Ю.В., Иванюта А.В. и др.** Аномальное поведение дисперсии нейтрона, проходящего через кристалл, при энергиях, близких к брэгговским // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. № 10. С. 681–684.

[34] **Федоров В.В., Воронин В.В.** Новые возможности поиска ЭДМ нейтрона поляризационным методом при дифракции в кристалле без центра симметрии. Материалы XXVI зимней школы ЛИЯФ. Ч. 1. Санкт-Петербург, 1996. С. 123–164.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БРАГИНЕЦ Юлия Петровна — младший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; младший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роша
aiver@pnpi.spb.ru

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
berdnikov@spbstu.ru

ФЕДОРОВ Валерий Васильевич — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; заведующий лабораторией Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
vfedorov@pnpi.spb.ru

КУЗНЕЦОВ Игорь Алексеевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
ikuz@pnpi.spb.ru

ЛАСИЦА Михаил Владимирович — лаборант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; старший лаборант Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
mishlas1@gmail.com

СЕМЕНИХИН Сергей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
ssy@pnpi.spb.ru

ВЕЖЛЕВ Егор Олегович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; младший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
evezhlev@gmail.com

ВОРОНИН Владимир Владимирович — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого; заместитель директора по научной работе Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
vvv@pnpi.spb.ru

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПОМЕХ НА ОСНОВЕ ВЕЙВЛЕТНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Предложена новая модель белого шума на основе вейвлетного преобразования. Данная модель является более адекватной при решении некоторых радиофизических задач, например задач об отражении электромагнитных волн от ионосферы. Помимо этого, показано, что с точки зрения вероятностного описания траекторий случайного процесса при помощи функционала плотности вероятностей, предложенного И.Н. Амиантовым, вейвлетная реализация данного случайного процесса более вероятна. При получении модели были использованы свойства вейвлетов, а также известные теоремы математического анализа и теории вероятности (теорема о среднем значении, центральная предельная теорема Ляпунова). В результате была получена теорема о разложении рассматриваемого случайного процесса по вейвлетному базису. В работе показано, что полученные результаты согласуются с соответствующими результатами В.А. Котельникова.

БЕЛЫЙ ШУМ, ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ПОМЕХИ, ВЕЙВЛЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ.

Нормальные флуктуационные помехи, согласно работам В.А. Котельникова [1], характеризуются тем, что состоят из большого количества импульсов, следующих друг за другом через случайные промежутки времени, причем такие импульсы могут накладываться друг на друга.

В работе [1] и в ряде других публикаций (см., например, [2 – 4]) аналитическое задание помех представлено в виде разложения по тригонометрическому базису. Однако в некоторых задачах радиофизики такая модель, которая характеризуется дискретным спектром, не всегда является адекватной. Так например, в задачах об отражении радиоволн в нижней (турбулентной) ионосфере целесообразно рассматривать флуктуации со сплошным спектром.

Возьмем за основу вероятностное описание возможных траекторий стационарных случайных процессов при помощи функци-

онала плотности вероятностей $F(x(t))$, впервые предложенное в работе [5]. В случае равномерного спектра мощности процесса и при фиксированной ширине его полосы указанный функционал имеет вид

$$F(x(t)) = h \exp \left(-\frac{1}{2N} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} x^2(t) dt \right), \quad (1)$$

где $x(t)$ – траектории, зависящие от времени t ; h – величина, зависящая от ранга дробления промежутка, на котором рассматриваются траектории (она одинакова для всех траекторий при стремлении ранга дробления к нулю); N – высота спектра мощности; T – рассматриваемый временной интервал.

Нетрудно убедиться, что при указанных условиях, когда функционал выражен формулой (1), вейвлетная реализация процесса более вероятна, чем синусоидальная.

Это следует из того, что для синусоидальной функции $x(t)$ интеграл в выражении (1) расходится с ростом значения T , а для вейвлета он конечен.

С целью развития результатов, полученных в монографии [1], в нашем исследовании получено аналитическое задание помехи, представляющей собой суперпозицию элементарных случайных процессов в виде разложения по вейвлетному базису. В качестве нового результата данной работы предлагается доказательство теоремы о разложении стационарного случайного процесса по вейвлетному базису.

Для дальнейшего изложения целесообразно перейти от размерных величин t , T (имеют размерность времени) к безразмерным, поделив их, например, на $t_0 = 1$ с; для этих величин далее будут использованы прежние обозначения, а именно t , T .

Теорема. Пусть на промежутке $[-T/2, T/2]$ помеха $W(t)$ задана суперпозицией «элементарных» случайных процессов $F_k(t)$:

$$W(t) = \sum_{k=1}^N F_k(t)$$

и выполняются условия:

- 1) $F_k(t)$ – некоррелированные случайные процессы;
- 2) N – количество импульсов, попавших в промежуток $[-T/2, T/2]$, – случайная величина, причем $N \gg 1$;
- 3) энергия процесса

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} W^2(t) dt$$

остаётся неизменной в каждой реализации случайного процесса.

Тогда с точки зрения сходимости в среднем квадратичном справедливо разложение:

$$W(t) = \frac{1}{\sqrt{TC_\psi}} \sum_i \sum_j 2^{-\frac{i}{2}} \left[\theta_{i,j} \sqrt{\sum_{k=1}^N M((q_k^+)^2)} - \chi_{i,j} \sqrt{\sum_{k=1}^N M((q_k^-)^2)} \right] \Psi_0 \left(\frac{t-j}{2^i} \right), \quad (2)$$

где C_ψ – константа нормировки [4], равная

$$C_\psi = \int_0^\infty \frac{|\hat{\Psi}_0(\omega)|^2}{\omega} d\omega$$

и зависящая от выбранного материнского вейвлета; случайные величины $\theta_{i,j}, \chi_{i,j} \in N(0,1)$, q_k^+, q_k^- – соответственно площади положительных и отрицательных подграфиков реализаций $F_k(t)$.

Доказательство. Будем использовать общепринятое для вейвлетов обозначение

$$\Psi_{i,j}(t) = 2^{-\frac{i}{2}} \Psi_0 \left(\frac{t-j}{2^i} \right)$$

[7] и рассматривать вейвлеты $\Psi_{i,j}(t)$ и $\Psi_0(t)$, удовлетворяющие следующим условиям при $T \rightarrow \infty$:

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \Psi_0(t) dt \rightarrow 0, \quad (3)$$

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \Psi_0(t)^2 dt \rightarrow 1. \quad (4)$$

Запишем коэффициенты $W(i, j)$ разложения $W(t)$ по этим вейвлетам [6]:

$$W(i, j) = \sum_{k=1}^N \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} F_k(t) \Psi_{i,j}(t) dt.$$

Реализация $F_k(t)$ есть, вообще говоря, знакопеременная функция с произвольным числом нулей (на своем носителе), которую можно представить в виде кортежей положительных и отрицательных всплесков, так что справедливы выражения

$$W(i, j) = \sum_{k=1}^N C_k^+ - \sum_{k=1}^N C_k^-,$$

$$C_k^+ = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} F_k^+(t) \Psi_{i,j}(t) dt,$$

$$C_k^- = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} F_k^-(t) \Psi_{i,j}(t) dt. \quad (5)$$

Рассмотрим положительные всплески и применим к первому интегралу (5) извест-

ную из математического анализа теорему о среднем значении:

$$C_k^+ = \Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) q_k^+, q_k^+ = \int_{\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} F_k^+(t) dt, \quad (6)$$

$$\bar{t}_k \in \left[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2} \right].$$

Оценим модуль корреляционного момента R случайных величин q_k^+ и $\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right)$ с использованием неравенства Коши – Буняковского – Шварца:

$$R^2 \leq D \left(\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) \right) D(q_k^+),$$

где

$$R = M \left[\left(\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) - M \left[\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) \right] \right) \left(q_k^+ - M[q_k^+] \right) \right].$$

Заметим, что при $T \rightarrow \infty$

$$D \left(\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) \right) = \frac{1}{T} \int_{\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \Psi_{i,j}^2 \left(\bar{t}_k \right) d\bar{t}_k \rightarrow \frac{1}{T} \rightarrow 0.$$

Полагая, что дисперсия q_k^+ конечна, имеем:

$$\text{при } T \rightarrow \infty \quad R^2 \rightarrow 0,$$

что доказывает некоррелированность величин q_k^+ и $\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right)$.

Далее применим для случайных величин C_k^+ центральную предельную теорему А.М. Ляпунова:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{k=1}^N C_k^+ - \sum_{k=1}^N M(C_k^+)}{\sqrt{\sum_{k=1}^N D(C_k^+)}} = \theta, \quad (7)$$

где $\theta \in N(0, 1)$.

Найдем математическое ожидание $M(C_k^+)$ как математическое ожидание произведения некоррелированных случайных величин:

$$M(C_k^+) = M \left(\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) \right) M(q_k^+) =$$

$$= M(q_k^+) \int_{\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right) \frac{d\bar{t}_k}{T}. \quad (8)$$

С учетом свойства (3) интеграл в правой части равенства (8) равен нулю, следовательно, $M(C_k^+) = 0$.

Теперь определим дисперсию $D(C_k^+)$:

$$D(C_k^+) = M[(C_k^+ - M(C_k^+))^2] = M[(C_k^+)^2].$$

С учетом выше доказанной некоррелированности q_k^+ и $\Psi_{i,j} \left(\bar{t}_k \right)$ получаем:

$$D(C_k^+) = M \left[\Psi_{i,j}^2 \left(\bar{t}_k \right) \right] M[(q_k^+)^2].$$

Перепишем последнее выражение, используя свойство (4):

$$D(C_k^+) = M \left[\Psi_{i,j}^2 \left(\bar{t}_k \right) \right] M[(q_k^+)^2] =$$

$$= M[(q_k^+)^2] \frac{1}{T} \int_{\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \Psi_{i,j}^2 \left(\bar{t}_k \right) d\bar{t}_k = \frac{M[(q_k^+)^2]}{T}. \quad (9)$$

Из формулы (7) с учетом равенств (8) и (9) находим:

$$\sum_{k=1}^N C_k^+ = \frac{1}{\sqrt{T}} \theta \sqrt{\sum_{k=1}^N M[(q_k^+)^2]}, \theta \in N(0, 1). \quad (10)$$

Проделав аналогичные преобразования для случайных величин C_k^- , получим следующее:

$$\sum_{k=1}^N C_k^- = \frac{1}{\sqrt{T}} \chi \sqrt{\sum_{k=1}^N M[(q_k^-)^2]}, \chi \in N(0, 1). \quad (11)$$

Перепишем (5) в соответствии с (10) и (11):

$$W(i, j) = \frac{1}{\sqrt{T}} \left[\theta_{i,j} \sqrt{\sum_{k=1}^N M((q_k^+)^2)} - \chi_{i,j} \sqrt{\sum_{k=1}^N M((q_k^-)^2)} \right]. \quad (12)$$

Формула (12) определяет коэффициенты разложения процесса $W(t)$ по вейвлетному

базису. Восстанавливая $W(t)$ по найденным коэффициентам $W(i, j)$ [7], получаем (2).

Теорема доказана.

Разложение (2) является каноническим разложением белого шума по вейвлетному базису, то есть представляет собой сумму произведений случайных величин на детерминированные функции времени. В данном случае это вейвлетные функции.

В работе И.Н. Амиантова [5], в частности, доказано утверждение, что при равномерном спектре стационарного случайного процесса функционал плотности вероятности имеет вид (1). Если проанализировать вывод формулы (1) в работе [5], прочитав его в обратном порядке, то можно заметить следующее: из условия постоянства энергии процесса за большой промежуток времени и некоррелированности элементов корреляционной матрицы [5] получается равномерный спектр. При этом важно, что матрица составлена для сечений случайного процесса [5], взятых в моменты времени, согласованные с теоремой отсчетов Котельникова.

При решении практических задач (моделирование случайных процессов на компьютере) целесообразно применять те вейвлеты, которые хорошо локализованы как по времени, так и по частоте. Такие

вейвлеты рассмотрены в работах [6, 7] и других. В качестве материнских вейвлетов при разложения вещественных случайных процессов можно использовать, например, вещественную часть вейвлета Морле:

$$\Psi_0(t) = \pi^{\frac{1}{4}} \cos(\omega_0 t) e^{-\frac{t^2}{2}},$$

где ω_0 – параметр, либо вещественную часть вейвлета Пауля:

$$\Psi_0(t) = \operatorname{Re} \left[\frac{2^m i^m m!}{\sqrt{\pi(2m!)}} (1 - it)^{-(m+1)} \right],$$

где m – параметр.

Заметим также, что если рассматривать помехи того же типа, что рассматривал В.А. Котельников в работе [1], то разложение (2) можно записать следующим образом:

$$W(t) = \frac{1}{\sqrt{TC_\psi}} \sqrt{\sum_{k=1}^N M((q_k^+)^2)} \cdot \sum_i \sum_j \theta_{i,j} \Psi_{i,j}(t). \quad (13)$$

Формула (13) аналогична полученной В.А. Котельниковым [1], но отличается от нее базисом: вместо тригонометрического в формуле (13) стоит вейвлетный, а также наличием двойного суммирования, которое можно заменить (с учетом известных в математике свойств счетных множеств) на суммирование по одному индексу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Котельников В.А. Теория потенциальной помехоустойчивости. М.: Госэнегиздат, 1956. 152 с.
- [2] Белянский М.А., Денисов А.В. Метод канонического разложения случайных функций в классических радиофизических задачах. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2015. 140 с.
- [3] Боровская И.А., Козубская Т.К., Курбанмурадов О., Сабельфельд К.К. О моделировании однородных случайных полей и сигналов и их использование в задачах аэроакустики // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 10. С. 76 – 88.
- [4] Пригарин С.М. Методы численного моделирования случайных процессов и полей. Новосибирск: Изд-во ИВМ и МГ СО РАН, 2005. 259 с.
- [5] Амиантов И.Н. Избранные вопросы статистической теории связи. М.: Советское радио, 1971. 416 с.
- [6] Короновский А.А., Храмов А.Е. Непрерывный вейвлетный анализ и его приложения. М.: Физматлит, 2003. 176 с.
- [7] Добеши И. Десять лекций по вейвлетам. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 461с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛОБАНОВ Иван Дмитриевич – студент Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lobanov.111@yandex.ru

ДЕНИСОВ Александр Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
A.V.Denisov@inbox.ru

Lobanov I.D., Denisov A.V. A MATHEMATICAL MODEL OF THE FLUCTUATION NOISE BASED ON THE WAVELET TRANSFORM.

A new model of white noise on the basis of the wavelet transform has been put forward. This model is more adequate for solving some radiophysical tasks such as the problem of electromagnetic waves reflection from the ionosphere. Moreover, it was shown that in terms of probabilistic description of the random-process trajectories, the wavelet implementation of this random process is more likely (using the probability density functional offered by I.N. Amiantov). The wavelet properties and the famous theorems of mathematical analysis and theory of chances were used to develop our model: the mean value theorem and Lyapunov's central limit theorem. Our study resulted in a theorem on random-process expansion in terms of wavelet basis. It was also shown that the obtained results were in agreement with those of V.A. Kotelnikov.

WHITE NOISE, FLUCTUATION NOISE, WAVELET TRANSFORM.

REFERENCES

- [1] V.A. Kotelnikov, *Teoriya potentsialnoy pomekhoustoychivosti* [The theory of potential noise immunity], Moscow, Gosnecoizdat, 1956.
- [2] M.A. Belyanskiy, A.V. Denisov, *Metod kanonicheskogo razlozheniya sluchaynykh funktsiy v klassicheskikh radiofizicheskikh zadachakh* [The method of canonical expansion of random functions in the classical radiophysical problems], St. Petersburg, Izd-vo Politehnicheskogo universiteta, 2015.
- [3] I.A. Borovskaya, T.K. Kozubskaya, O. Kurbanmuradov, K.K. Sabelfeld, *O modelirovanii odnorodnykh sluchaynykh poley i signalov i ikh ispolzovaniye v zadachakh aeroakustiki* [On modeling of uniform random fields and signals and their use in the aeroacoustic problems], *Matematicheskoye modelirovaniye*. 2007. 19 (10) (2007) 76–88.
- [4] S.M. Prigarin, *Metody chislennogo modelirovaniya sluchaynykh protsessov i poley* [Methods of numerical modeling of random processes and fields], Novosibirsk, Izdatelstvo IVM i MG SO RAN, 2005.
- [5] I.N. Amiantov, *Izbrannyye voprosy statisticheskoy teorii svyazi* [Selected topics of the statistical communication theory], Moscow, Sovetskoye radio, 1971.
- [6] A.A. Koronovskiy, A.E. Khramov, *Nepreryvnyy veyvletnyy analiz i yego prilozheniya* [Continuous wavelet analysis and its applications], Moscow, Fizmatlit, 2003.
- [7] I. Dobeshi, *Desyat lektsiy po veyvletam* [Ten lectures on wavelets], Izhevsk, NITs 'Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika', 2001.

THE AUTHORS

LOBANOV Ivan D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
lobanov.111@yandex.ru

DENISOV ALEXANDER V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
A.V.Denisov@inbox.ru

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ПРИ ОПИСАНИИ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ АТОМА НАТРИЯ

В работе исследуется роль многоэлектронных корреляций в процессах фотопоглощения многоэлектронных атомов. Приведены результаты численных расчетов сечений фотоионизации атома натрия в приближении случайных фаз с обменом. Вычисления проводились с учетом многочастичных эффектов, таких как межканальные корреляции, проявляющиеся в появлении пиков автоионизационных резонансов, а также взаимодействия, связанные с поляризацией электронного остова атома. Поляризационные поправки к энергиям и волновым функциям электронов учитывались с использованием статического и динамического поляризационного потенциала. Также исследовалось влияние корреляций на положение и форму резонансных пиков в сечении фотопоглощения. Учет поляризационных поправок позволил добиться лучшего согласия результатов расчета с экспериментальными данными в широком диапазоне энергий, в особенности при использовании динамического поляризационного потенциала на основе уравнения Дайсона.

ПСФО, АТОМ НАТРИЯ, УРАВНЕНИЕ ДАЙСОНА, СЕЧЕНИЕ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ.

Введение

Бурное развитие радиоастрономии, лазерной техники и методов оптической спектроскопии требуют надежного теоретического фундамента, на основе которого можно расшифровать экспериментально полученные оптические спектры атомов, молекул, атомных кластеров, включений, квантовых точек в твердых телах и т. п. В процессах взаимодействия с участием многочастичных систем существенную роль играют корреляционные эффекты, учет которых необходим при построении соответствующей теоретической модели.

В представленной работе исследуется влияние многоэлектронных корреляций на оптические свойства атомов. В качестве конкретного примера приведены результаты численных расчетов сечений фотопоглощения атома натрия. Вычисления проводи-

лись с учетом многочастичных эффектов, таких как межканальные корреляции, проявляющиеся в появлении пиков автоионизационных резонансов, и взаимодействия, связанные с поляризацией электронного остова атома.

Данные о спектрах фотопоглощения и излучения атомов дают ключ к пониманию их строения и процессов, происходящих при их взаимодействии с электромагнитным полем. При этом структуру электронных оболочек можно определить только в рамках теории, обеспечивающей адекватную трактовку экспериментальных данных. В свое время ключевым моментом к пониманию строения атомов и молекул стало создание квантовой механики, волнового уравнения Шредингера и его обобщения на многоэлектронные атомы в виде уравнений Хартри – Фока (ХФ) [1 – 3]. Одночастич-

ное приближение ХФ позволяет рассчитать волновые функции и энергии основного и возбужденных состояний многоэлектронных систем. Однако данный подход имеет существенные недостатки. Собственные значения хартри-фоковского гамильтониана имеют смысл энергий ионизации соответствующих электронных оболочек, но, как показывают результаты расчетов, данные энергии всегда существенно отличаются от соответствующих экспериментальных значений. Кроме того, расчет возбужденных состояний производится в суммарном поле «замороженного остова» и образовавшейся вакансии, т. е. вычисление волновой функции возбужденного электрона происходит без учета перестройки самосогласованного поля, связанной с появлением дырки в структуре электронного остова, а также с поляризацией электронного остова выбитым электроном. Следует отметить, что представленные в данной работе методы применимы к описанию оптических свойств не только отдельных многоэлектронных атомов, но и более сложных структур.

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

Теоретический подход

Сечение фотопоглощения атома определяется следующей формулой [2]:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \sum_{i \leq F} \int |\langle v | \widehat{M}(\omega) | i \rangle|^2 \times \delta(\omega - E_v + E_i) dv, \quad (1)$$

где F – наивысший заполненный уровень (уровень Ферми) системы в основном состоянии, $\langle v | \widehat{M}(\omega) | i \rangle$ – матричный элемент перехода атомного электрона из состояния i в состояние v под воздействием внешнего электромагнитного поля в дипольном приближении.

Эти одночастичные амплитуды переходов учитывают изменение состояния только одного электрона, а именно взаимодействующего с электромагнитным полем. Расчеты с использованием дипольных амплитуд, учитывающих только взаимодействие электрон-дырка, показали, что дан-

ный подход дает адекватное качественное и количественное описание процессов фотопоглощения только в ограниченном ряде случаев. Так, методы, в основе которых лежит одночастичное приближение, не могут даже качественно объяснить ряд наблюдаемых явлений, в частности появление пиков автоионизационных резонансов в парциальных сечениях фотоионизации наружных оболочек атомов. В связи с этим возникла необходимость дальнейшего развития методов квантовой теории многих тел.

Одним из наиболее эффективных подходов к построению оператора взаимодействия атома с внешним полем, в рамках которого появилась возможность учета многоэлектронных корреляций, стало приближение случайных фаз с обменом (ПСФО), или по-английски – Random Phase Approximation with Exchange (RPAE) [2, 3, 5, 6]. В этом приближении впервые удалось рассчитать сечения фотопоглощения для значительного числа атомов, добившись хорошего соответствия между результатами расчетов и экспериментальными данными. В основе ПСФО лежит предположение о том, что возбуждаемый электрон не сразу переходит в конечное возбужденное состояние, а может проходить через ряд промежуточных короткоживущих (виртуальных) состояний. При этом виртуальные возбужденные состояния типа электрон-дырка взаимодействуют с рассматриваемым реальным возбуждением по кулоновскому закону с учетом обменного взаимодействия.

В операторной форме выражение для амплитуды взаимодействия в ПСФО записывается в виде [5]:

$$\widehat{D}(\omega) = \frac{\widehat{d}}{1 - \widehat{\chi}(\omega)\widehat{U}}. \quad (2)$$

В матричном виде это выражение может быть также записано в форме

$$\langle k | \widehat{D}(\omega) | i \rangle = \langle k | \widehat{d} | i \rangle + \left(\sum_{\substack{k' > F \\ i' \leq F}} - \sum_{\substack{i' > F \\ k' \leq F}} \right) D_{k'i'} U_{i'kk'i} \chi(\omega)_{k'i'}, \quad (3)$$

где

$$D_{k'i'} = \langle k | \widehat{D}(\omega) | i \rangle,$$

$$U_{i'kk'i} = \langle i'k | \hat{U}(\omega) | ik' \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k'i'} = \frac{1}{\omega - E_{k'} + E_{i'} + i\delta}.$$

Это же выражение можно представить на языке диаграммной техники, как показано на рис. 1 [5, 6]. Если убрать из суммы выражения (3) обменные члены, то получится приближение случайных фаз (ПСФ, или RPA), широко используемое в теории электронного газа [7].

Следует отметить важную особенность ПФСО – появление в операторном описании так называемого эффективного взаимодействия, которое отличается от чисто кулоновского взаимодействия с электронами остова введением поправок, связанных с появлением виртуальных электрон-дырочных возбуждений [2]:

$$\hat{\Gamma} = \frac{\hat{U}}{1 - \hat{\chi}(\omega)\hat{U}}. \quad (4)$$

В матричной форме выражение для элементов эффективного взаимодействия может быть получено из (3) путем замены дипольной одночастичной амплитуды кулоновским взаимодействием [8, 9]:

$$\langle kk' | \hat{\Gamma}(\omega) | ii' \rangle = U_{kk'ii'} + \left(\sum_{\substack{k'' > F \\ i'' \leq F}} - \sum_{\substack{i'' > F \\ k'' \leq F}} \right) \Gamma_{kk''ii''} U_{i''k''k''k'} \chi(\omega)_{k''i''}, \quad (5)$$

где

$$U_{kk'ii'} = \langle kk' | \hat{U} | ii' \rangle,$$

$$\Gamma_{kk''ii''} = \langle kk'' | \hat{\Gamma}(\omega) | ii'' \rangle,$$

$$U_{i''k''k''k'} = \langle i''k'' | \hat{U} | k''i'' \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k''i''} = (\omega - E_{k''} + E_{i''} + i\delta)^{-1}.$$

Как уже упоминалось, ПСФО позволяет описать профили линий автоионизационных резонансов в спектрах фотопоглощения. Эти явления обусловлены межканальными корреляциями и проявляются в сплошном спектре фотоионизации внешних оболочек в областях энергий, близких к энергиям дискретных переходов из внутренних оболочек. Форма контура пика может быть описана формулой Фано [3, 4]:

$$\sigma = \sigma_0 \left(1 - \rho^2 + \rho^2 \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} \right), \quad (6)$$

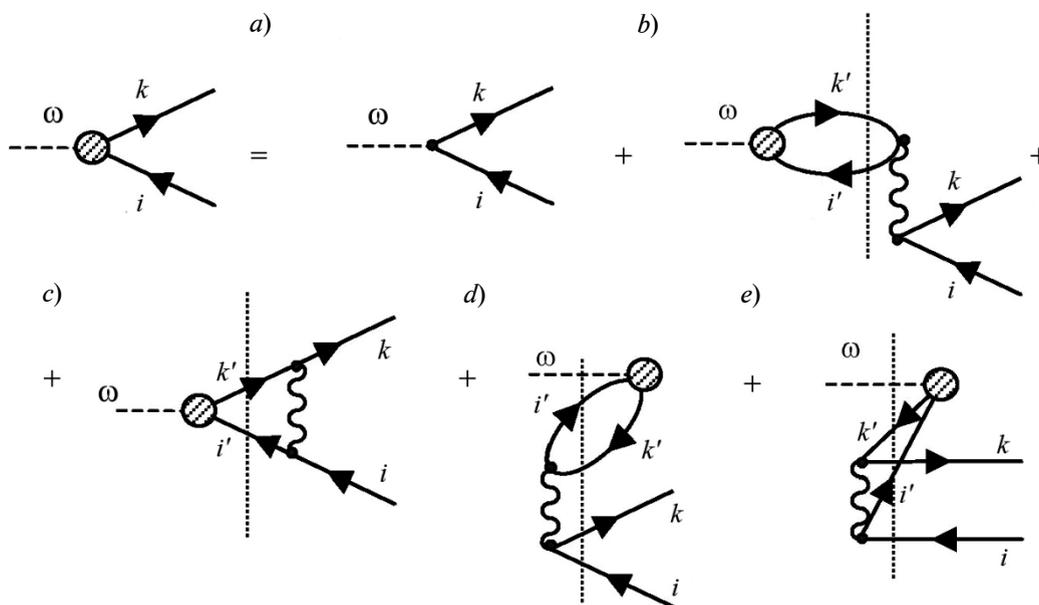


Рис. 1. Диаграммное представление амплитуды взаимодействия в ПСФО: *a* – одночастичная дипольная амплитуда; *b, c* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «вперед во времени»; *d, e* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «назад во времени»; ω – частота фотона; k', i' – состояния промежуточных (виртуальных) электрона и дырки; k, i – состояния электрона и дырки, образующихся в результате процесса фотопоглощения

где σ_0 – сечение фотопоглощения в окрестности пика; ρ^2 – индекс интерференции, показывающий, насколько сильно каналы вовлечены в резонанс; q – индекс формы, определяющий профиль резонансной линии.

Безразмерная величина ε определяется соотношением

$$\varepsilon = \frac{2(E - E_F)}{\gamma}, \quad (7)$$

где γ – ширина резонансной линии; E_F – энергия дискретного перехода, взаимодействие с которым учитывается в процессе ионизации внешней оболочки.

При описании формы пиков автоионизационных резонансов в рамках ПСФО значения $\gamma, E_F, \rho^2, \varepsilon$ и q выражаются через действительные и мнимые части матричных элементов операторов \hat{D} и \hat{G} и их линейные комбинации [3].

Соответствие расчетных и экспериментальных данных также можно улучшить путем включения дополнительных эффектов, обусловленных поляризацией электронного остова системы. Возбужденный электрон создает собственное поле, которое искажает самосогласованное поле атомного остова и порождает виртуальные электрон-дырочные пары, взаимодействующие с электроном.

Один из методов учета поляризации атомного остова и, соответственно, ее влияния на волновые функции основного и возбужденных состояний, основан на использовании статического эффективного поляризационного потенциала в следующей форме [3]:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{(b^2 + r^2)^2}, \quad (8)$$

где α – статическая дипольная поляризуемость атома; b – феноменологический параметр, позволяющий избежать расходимости на малых расстояниях от атома. При этом значение дипольной поляризуемости берется, как правило, из экспериментальных данных, а параметр b подбирается таким образом, чтобы энергия наружной оболочки основного состояния наиболее точно соответствовала экспериментальной энергии ионизации.

Другой подход, позволяющий учесть поляризационные поправки, был ранее широко использован при теоретическом изучении процессов рассеяния медленных электронов на многоэлектронных атомах [8]. Динамический поляризационный потенциал описывается собственно-энергетической частью функции Грина возбужденного электрона $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, зависящей от энергии налетающего электрона и двух координат, т. е., в отличие от статического потенциала (8), является нелокальным. Во втором порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию выражение для матричного элемента $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ может быть представлено в виде

$$\langle i | \Sigma_E | i' \rangle = \left(\sum_{\substack{k_1 > F \\ k_2 > F \\ k_3 \leq F}} \sum_{\substack{k_1 \leq F \\ k_2 \leq F \\ k_3 > F}} + \sum_{\substack{k_1 \leq F \\ k_2 \leq F \\ k_3 > F}} \right) U_{ik_3k_2k_1} \times \\ \times V_{k_1k_2k_3i'} \chi(\omega)_{k_1k_2k_3}, \quad (9)$$

где

$$U_{ik_3k_2k_1} = \langle ik_3 | \hat{U} | k_2k_1 \rangle,$$

$$V_{k_1k_2k_3i'} = \langle k_1k_2 | \hat{V} | k_3i' \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k_1k_2k_3} =$$

$$= (\omega - E_{k_1} - E_{k_2} + E_{k_3} + i\delta(1 - 2n_{k_1}))^{-1}.$$

Здесь первое слагаемое в скобках соответствует диаграммам «вперед во времени», а второе – «назад во времени» [3, 5, 6].

На языке диаграмм выражение (9) схематически изображено на рис. 2. Для нахождения новой волновой функции электрона, движущегося в поле поляризованного остова, используется уравнение Дайсона:

$$(\hat{H}^{HF} - E)\Psi_E(\mathbf{r}) = \int \Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi_E(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (10)$$

где E – энергия фотоэлектрона (дырки), $\Psi_E(\mathbf{r})$ – его волновая функция, $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – неприводимая собственно-энергетическая часть функции Грина [3, 5, 6].

Уравнение (10) можно переписать в форме

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \psi_E(\mathbf{r}) + \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \frac{\Psi_\gamma(\mathbf{r})\Psi_\gamma^*(\mathbf{r}')}{E - \xi_\gamma + i0} \times \\ \times \Sigma_E(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')\Psi_E(\mathbf{r}'')d\xi_\gamma, \quad (11)$$

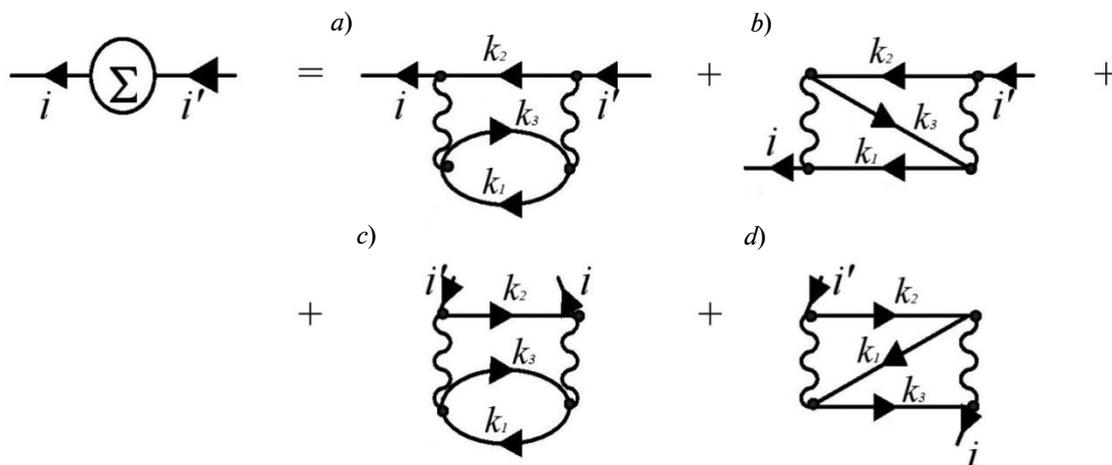


Рис. 2. Диаграммное представление матричного элемента собственно-энергетической части функции Грина: *a, b* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «вперед во времени»; *c, d* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «назад во времени»

где $\psi_\gamma(\mathbf{r})$ – одночастичные волновые функции в приближении ХФ, соответствующие гамильтониану \hat{H}^{HF} и образующие полный набор волновых функций, по которому производится интегрирование, включая все заполненные и возбужденные состояния.

С помощью формул (10) и (11) выражение для матричного элемента дипольного оператора \hat{d} можно представить в виде

$$\langle \Psi_E | \hat{d} | \Psi_n \rangle = \frac{1}{1 + i\pi \langle \Psi_E | \tilde{\Sigma}_E | \Psi_E \rangle} \times \left(d_{En} + \int \frac{\tilde{\Sigma}_{E\gamma} d_{\gamma n}}{E - \xi_\gamma} d\xi_\gamma \right), \quad (12)$$

где

$$d_{En} = \langle \Psi_E | \hat{d} | \Psi_n \rangle, \\ \tilde{\Sigma}_{E\gamma} = \langle \Psi_E | \tilde{\Sigma}_E | \Psi_\gamma \rangle, \\ d_{\gamma n} = \langle \Psi_\gamma | \hat{d} | \Psi_n \rangle.$$

Здесь $\tilde{\Sigma}_E$ – приводимая собственно-энергетическая часть функции Грина; интегрирование вновь ведется по всему набору состояний ХФ.

Таким образом, с помощью уравнения (12) можно найти амплитуды дипольных переходов с учетом поляризационных поправок в рамках модели динамического поляризационного потенциала.

Следует отметить, что данный подход применим для нахождения возмущенных

состояний как фотоэлектрона, так и дырки, т. е. позволяет уточнить энергии электронных оболочек основного состояния системы по сравнению с их хартри-фоковскими значениями.

Положение пиков автоионизационных резонансов в спектре фотопоглощения зависит от энергий дискретных переходов из внутренних оболочек атома. Эти энергии, в свою очередь, обычно зависят от спинового состояния возбужденной системы. Так, в случае атома натрия, линия автоионизационного резонанса, обусловленного дискретным переходом $2s \rightarrow 3p$, расщепляется на два пика, положение которых соответствует конечным триплетному и синглетному состояниям. Учет этого расщепления можно осуществить в так называемой спин-поляризованной версии ХФ и ПСФО – СПХФ и СППСФО (SPHF, SPR-PAE) соответственно, где каждая атомная оболочка разделяется на две подоболочки, которые заполняются электронами с одинаковыми проекциями спина [10].

Обсуждение результатов численных расчетов

Перечисленные выше методики использовались для расчета сечений фотопоглощения атома натрия. Волновые функции и энергии основного и возбужденных состояний были вычислены в рамках нерелятивистского приближения ХФ. В табл. 1 приведены значения энергий ионизации

Таблица 1

Сравнение расчетных значений энергий ионизации атома натрия с экспериментальными данными

Электронная оболочка	Энергия, эВ			
	без учета поляризации	с учетом СПП	с учетом ДПП	Эксперимент [11]
1s	-1101,48	- 1101,66	–	-1079
2s	- 76,11	- 76,30	-71,95	-70,90
2p	- 41,31	- 41,50	-38,70	-38,46
3s	- 4,955	- 5,14	-5,14	-5,14

Принятые сокращения: СПП – статистический поляризационный потенциал, ДПП – динамический поляризационный потенциал.

атомных оболочек, рассчитанные без учета поляризационных поправок и с их учетом, а также соответствующие экспериментальные значения [11].

Для построения эффективного статического поляризационного потенциала (8) было использовано экспериментальное значение статической дипольной поляризуемости основного состояния атома натрия, 162 а.е. Параметр $b = 11,687$ а.е. подбирался таким образом, чтобы расчетный потенциал ионизации оболочки 3s с высокой точностью совпадал с экспериментальным значением, равным $-5,14$ эВ.

Были вычислены парциальные и полные сечения фотопоглощения для энергий фотонов до 100 эВ. При этом были обнаружены ярко выраженные автоионизационные пики, что показало оправданность учета межканальных корреляций при проведении расчетов сечений фотоионизации наружных оболочек. При численном моделировании процесса фотовозбуждения атома натрия учитывалось четыре парциальных канала ионизации: $2s \rightarrow np$, $2p \rightarrow ns$, $2p \rightarrow nd$ и $3s \rightarrow np$ (канал $1s \rightarrow np$ не принимался в расчет, так как энергия ионизации 1s-оболочки выпадает из рассматриваемого диапазона энергий).

Амплитуды переходов и парциальные сечения вычислялись в рамках ПСФО для энергий фотонов до 100 эВ. Для уточнения численных результатов были также проведены расчеты амплитуд и сечений с использованием волновых функций, полученных с

учетом поляризационных поправок. Расчет формы и точного положения автоионизационных пиков, обусловленных дискретными переходами $2s \rightarrow 3p(^2P)$, $2s \rightarrow 3p(^1P)$, $2s \rightarrow 4p(^2P)$ и $2s \rightarrow 4p(^1P)$ производился в рамках подхода СППСФО.

Одним из критериев достоверности расчета является степень совпадения расчетного и экспериментального положений куперовских минимумов [3]. На рис. 3 представлены зависимости сечений фотопоглощения атома натрия от энергии фотоэлектронов. Из приведенных зависимостей видно, что учет поляризационных поправок позволяет улучшить соответствие расчетного и экспериментального [12, 13] положений куперовских минимумов. Однако существенное улучшение соответствия экспериментальных и расчетных сечений фотопоглощения было достигнуто лишь при использовании модели динамического поляризационного потенциала.

На рис. 4 показаны зависимости полного сечения от энергии фотоэлектрона. Как видно из экспериментальной зависимости, опубликованной в работе [14], для энергий фотона ниже 38,5 эВ интенсивность фотоионизации мала, поскольку в этом диапазоне энергий в процессе ионизации задействован только электрон с наружной 3s-оболочки. Исключением являются области энергий, в которых расположены пики автоионизационных резонансов. Так, при энергии 31 эВ наблюдается очень интенсивный пик, обусловленный резонансным взаимодействием

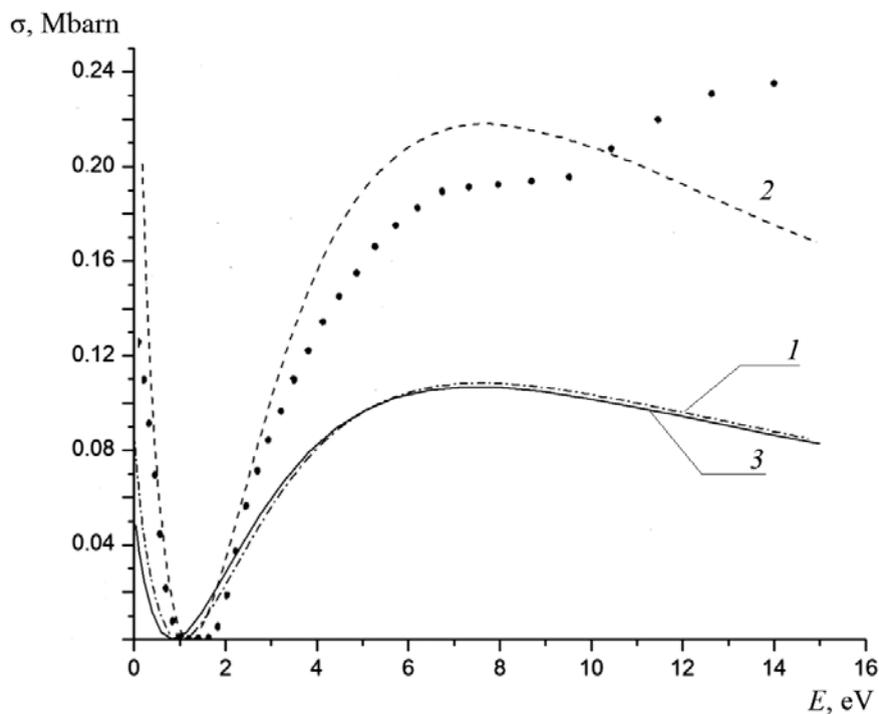


Рис. 3. Расчетные (линии) и экспериментальная (точки) зависимости полного сечения фотопоглощения атома натрия от энергии фотоэлектрона. Используются различные приближения: ПФСО с учетом статического поляризационного потенциала (1), СППСФО с учетом динамического поляризационного потенциала (2), ПСФО без поляризации (3)

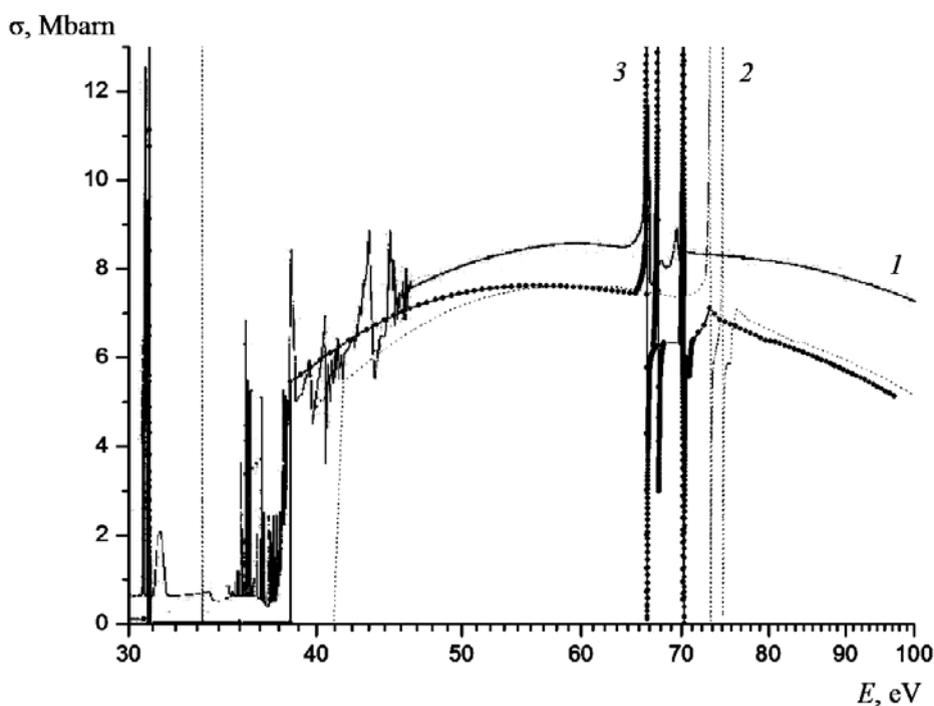


Рис. 4. Экспериментальная [14] (1) и расчетные зависимости полного сечения фотопоглощения атома натрия от энергии фотона. Используются различные приближения: ПФСО без поляризации (2) и СППСФО с учетом динамического поляризационного потенциала (3)

Таблица 2

Рассчитанные параметры для построения контуров Фано

Электронный переход	Энергия перехода E_p , эВ	Ширина линии γ , 10^{-3} эВ	Параметр асимметрии q
$2p \rightarrow 3s$	30,96	0,14	-754,34
$2s \rightarrow 3p(^2P)$	66,37	34,4	-1,60
$2s \rightarrow 3p(^1P)$	67,59	39,6	-1,64
$2s \rightarrow 4p(^2P)$	70,29	8,2	-1,80
$2s \rightarrow 4p(^1P)$	70,18	6,1	-1,70

с дискретным возбуждением $2p \rightarrow 3s$.

Были исследованы форма и положение этого пика, а также вычислены параметры, необходимые для построения контура Фано (6) (табл. 2).

Расчетное положение пика находится в хорошем согласии с экспериментом, однако, к сожалению, из-за его узости и высокой интенсивности нельзя что-либо конкретно утверждать относительно совпадения высоты и формы. Рассчитанные резонансные линии и соответствующие им контуры Фано представлены на рис. 5.

В области 33,0 – 38,5 эВ наблюдаются очень узкие и тесно расположенные пики, обусловленные резонансом канала $3s \rightarrow np$ с дискретными переходами $2p \rightarrow ns$ и $2p \rightarrow nd$. Выше энергии 38,5 эВ, соответствующей энергии связи $2p$ -оболочки, начинается ее ионизация, которая происходит по двум каналам: $2p \rightarrow ns$ и $2p \rightarrow nd$. В области энергий 38,5 – 45,5 эВ в экспериментальном сечении наблюдается ряд пиков, наличие которых может быть объяснено двухэлектронными возбуждениями, при которых одновременно с электронами $2p$ -оболочки возбуждается электрон $3s$ -оболочки [14].

Далее, после 70,9 эВ начинается фотоионизация $2s$ -оболочки. При этом возбуждения $2s$ -электронов в область непрерывного спектра дают незначительный вклад в общее сечение фотоионизации, однако дискретные переходы $2s \rightarrow 3p$ и $2s \rightarrow 4p$ приводят к появлению пиков автоионизационных резонансов в диапазоне энергий 63 – 71 эВ.

Были проведены численные расчеты и исследованы формы и положения пиков автоионизационных резонансов, обусловленных взаимодействием с дискретными переходами $2s \rightarrow 3p$ и $2s \rightarrow 4p$. На экспериментальной кривой [14] видно, что каждый из этих пиков в свою очередь расщеплен на две линии, соответствующие определенному спиновому состоянию – триплетному и синглетному. В связи с этим расчет положения этих пиков проводился в рамках СППСФО. Вычисления, проведенные в этом приближении, показали, что энергии дискретных переходов $2s \rightarrow 3p(^2P)$, $2s \rightarrow 3p(^1P)$, $2s \rightarrow 4p(^2P)$ и $2s \rightarrow 4p(^1P)$ равны 70,53, 71,75, 74,45 и 74,34 эВ, соответственно. Последующий учет динамического поляризационного потенциала позволил сдвинуть положение $2s$ -уровня с энергии -76,11 на -71,95 эВ, т. е. энергии переходов уменьшились на 4,16 эВ и стали равными 66,37, 67,59, 70,29 и 70,175 эВ, соответственно.

Примечательно, что, согласно проведенным расчетам, для перехода $2s \rightarrow 4p$ энергия синглетного состояния оказалась ниже, чем триплетного. Этот факт требует перепроверки с использованием многоконфигурационного приближения Хартри – Фока. В экспериментальных и расчетных формах пиков есть несоответствия. Рассчитанные получились более интенсивными, и после каждого пика наблюдается характерный провал в сечениях фотопоглощения. Возможно, это связано с тем, что при проведении эксперимента в данном энергетическом диапазоне был взят недостаточно

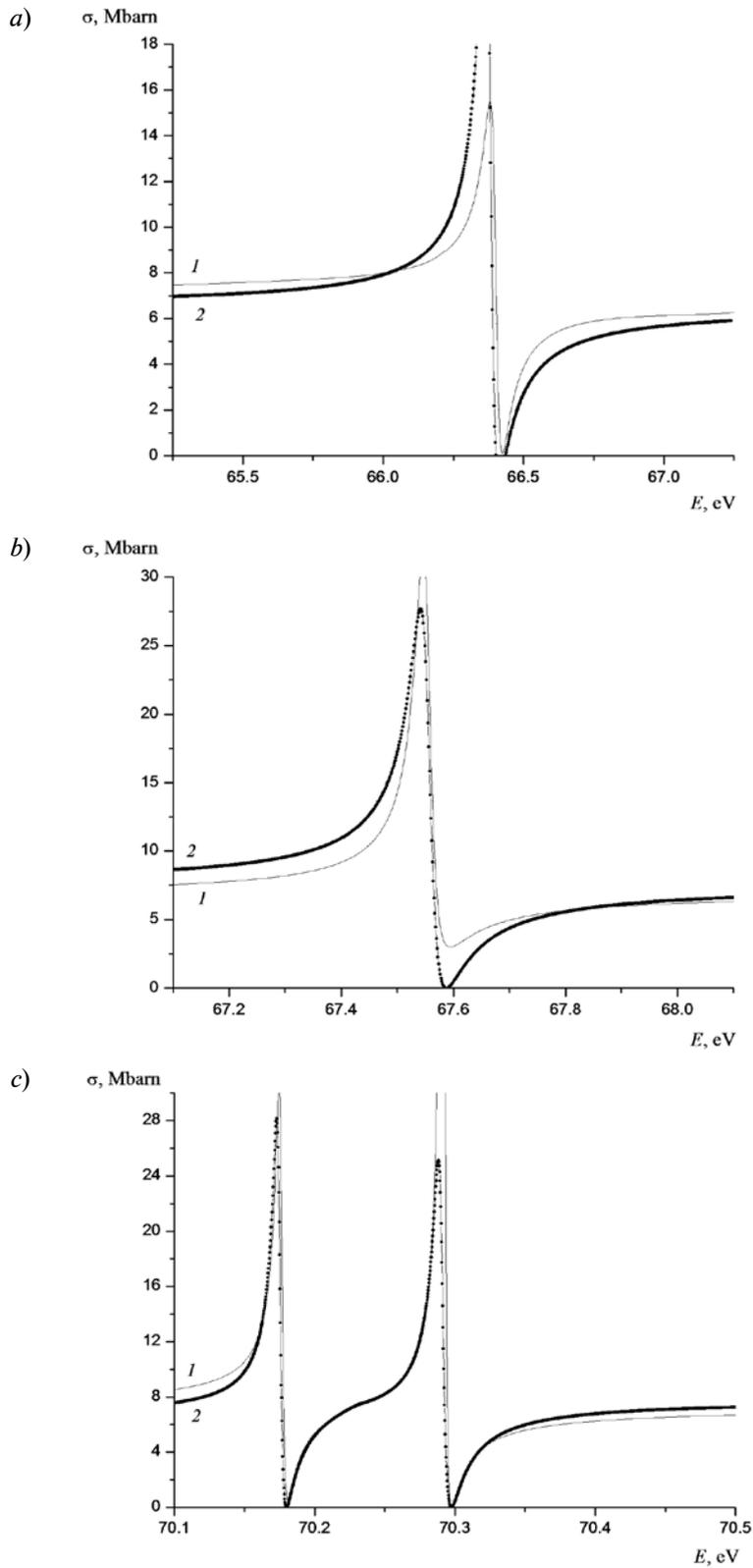


Рис. 5. Рассчитанный спектр автоионизационных резонансов (1) и соответствующие контуры Фано (2). Представлены резонансные пики, соответствующие переходам $2s \rightarrow 3p(^2P)$ (a), $2s \rightarrow 3p(^1P)$ (b), $2s \rightarrow 4p(^1P)$ и $2s \rightarrow 4p(^2P)$ (c)



малый шаг по энергии. В частности, это объясняет отсутствие на экспериментальной кривой пиков автоионизационных резонансов, обусловленных дискретными переходами $2s \rightarrow 5p$, $2s \rightarrow 6p$ и т. д.

Следует отметить, что учет поляризационных поправок не приводит к существенному улучшению соответствия экспериментальных и расчетных сечений в диапазоне энергий 30 – 100 эВ, однако позволяет уточнить положение пиков автоионизационных резонансов и пороги ионизации оболочек. В диапазоне 5,14 – 20,14 эВ включение поляризационных поправок с использованием динамического поляризационного потенциала оказалось вполне оправданным с точки зрения достигнутого улучшения соответствия расчетных и экспериментальных сечений. Таким образом, можно заключить, что эффекты, связанные с поляризацией атомного остова, оказывают заметное влияние на амплитуды переходов лишь при малых энергиях фотоэлектронов. К сожалению, полученное расчетное сечение фотопоглощения отличается от экспериментального, причем величина расхождения увеличивается с ростом энергии фотона. В диапазоне энергий 45 – 64 эВ соответствие сечений составляет 80 – 90 %, а в диапазоне энергий 70 – 100 эВ снижается до 70 %. Предположительно это может быть связано с тем, что расчет проводился в нерелятивистском приближении. Возможно, использование приближения Хартри – Фока – Дирака для расчета электронных волновых функций позволит улучшить соответствие расчета с экспериментом.

Заключение

Для нахождения волновых функций и одноэлектронных энергий атома натрия в основном и возбужденных состояниях использовался метод Хартри – Фока. Расчет амплитуд фотоионизации и сечений фотопоглощения для указанного атома произ-

водился в рамках ПСФО, учитывающего межканальные корреляции и объясняющего появление экспериментально наблюдаемых пиков автоионизационных резонансов. Для уточнения энергий и волновых функций основного и возбужденных состояний атома были использованы различные методы учета поляризационных поправок, в частности модель эффективного статического поляризационного потенциала и модель, использующая динамический поляризационный потенциал. Сравнение расчетных данных с экспериментальными показывает необходимость учета межэлектронных корреляций для качественного описания оптических свойств атомов и полезность учета поляризационных поправок при уточнении сечений фотопоглощения и энергий основного состояния. В частности, включение динамического поляризационного потенциала позволило существенно улучшить совпадение положения пиков автоионизационных резонансов с экспериментальными данными, однако для корректировки сечений фотопоглощения использование данной методики оказалось оправданным только для случая низких энергий. Предположительно, улучшить соответствие расчетных и экспериментальных сечений в областях высоких энергий можно при использовании релятивистского базиса. Также для дальнейшего уточнения положения пиков автоионизационных резонансов требуется выход за рамки метода Хартри – Фока, в частности, путем использования многоконфигурационного приближения Хартри – Фока и его релятивистского обобщения. Метод ПСФО может применяться при описании не только атомов, но и молекул, кластеров и других наноструктур [14 – 17].

Авторы выражают благодарность доктору физико-математических наук, профессору В.К. Иванову за оказанную помощь в подготовке статьи и полезное обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: Изд-во ИЛ, 1960.
[2] Amusia M.Ya., Chernysheva L.V. Computation of atomic processes. Bristol – Philadelphia: Institute

of Physics Publishing, 1997.

[3] Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987.

[4] Фано У., Фано Л. Физика атомов и моле-

кул. М.: Наука, 1980.

[5] **Амусья М.Я., Иванов В.К., Черепков Н.А., Чернышева Л.В.** Процессы в многоэлектронных атомах. СПб.: Наука, 2006.

[6] **Иванов В.К., Ипатов А.Н., Полозков Р.Г.** Квантовая теория многих тел. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013.

[7] **Lundquist S., March N.H.** (Eds.). Theory of the Inhomogeneous Electron Gas. New York – London: Plenum Press, 1983.

[8] **Amus'ya M.Ya., Cherepkov N.A., Chernysheva L.V.** Cross section for the photoionization of noble-gas atoms with allowance for multielectron correlations // JETP. 1971. Vol. 33. No. 1. Pp. 90 – 96.

[9] **Амусья М.Я., Иванов В.К.** Межоболочечное взаимодействие в атомах // УФН. 1987. Т. 152. Вып. 6. С. 185–230.

[10] **Амусья М.Я., Долматов В.К., Иванов В.К.** Фотоионизация атомов с полузаполненными оболочками // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. Вып. 1. С. 115–123.

[11] **Радциг А.А., Смирнов Б.М.** Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.

[12] **Dasgupta A., Bhatia A.K.** Photoionization

of sodium atoms and electron scattering from ionized sodium // Phys. Rev. A . 1985. Vol. 31. Iss. 2. Pp. 759–771.

[13] **Jwei-Jun Chang, Hugh P. Kelly.** Photoabsorption of the neutral sodium atom: A many-body calculation // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 12. Iss. 1. Pp. 92 – 98.

[14] **Wolff H.W., Radler K., Sonntag B., Haensel R.** Photoabsorption of Atomic Sodium in the VUV // Z. Physik. A. 1972. Vol. 257. Iss. 4. Pp. 353 – 368.

[15] **Semenov S.K., Cherepkov N.A.** Generalization of the atomic RPA method for diatomic molecules: H₂ photoionization cross-section calculation // Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 291. Iss. 3–4. Pp. 375–380.

[16] **Semenov S.K., Cherepkov N.A.** Photoionization of the H₂ molecule in the random phase approximation // J. Phys. B. 2003. Vol. 36. No. 7. Pp. 1409–1422.

[17] **Semenov S.K., Cherepkov N.A., Fecher G.H., Schunhense G.** Generalization of the atomic random-phase-approximation method for diatomic molecules: N₂ photoionization cross-section calculations // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 61. Iss. 3. P. 032704.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНОВАЛОВ Алексей Витальевич – студент Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alkonvit@yandex.ru

ИПАТОВ Андрей Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

Kononov A.V., Ipatov A.N. MANY-ELECTRON CORRELATIONS IN CALCULATIONS OF SODIUM ATOM PHOTOABSORPTION.

The role of many-electron correlations in photoabsorption processes has been investigated. The results of numerical calculations of photoionization cross sections of sodium atom are presented. The many-body effects such as interchannel correlations resulting in autoionization resonance peaks, as well as effects of atomic core polarization were taken into account in the calculations in terms of RPAE. Polarization corrections were accounted for using both static and dynamic polarization potentials. The influence of correlations on the position and the form of resonance peaks was studied. The obtained results demonstrate necessity of taking into account polarization effects, especially for clarification of autoionization resonance peaks position and the cross-section magnitudes in the low energy range. The best agreement with experimental data was reached with the model of dynamic polarization potential based on Dyson equation.

RPAE, SODIUM ATOM, DYSON EQUATION, PHOTOABSORPTION CROSS SECTION.

REFERENCES

[1] **D. Hartree**, The calculation of atomic structures, London, Chapman A. HALL, LTD, 1957.

[2] **M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva**, Computation of atomic processes, Bristol – Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.

- [3] **M.Ya. Amusya**, Atomic photoeffect, New-York, Plenum Press, 1990.
- [4] **U. Fano, L. Fano**. Physics of atoms and molecules: An Introduction to the structure of matter. Chicago: Chicago University Press, 1972.
- [5] **M.Ya. Amusya, V.K. Ivanov, N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva**, Processes in multielectron atoms, SPb., Nauka, 2006.
- [6] **V.K. Ivanov, A.N. Ipatov, R.G. Polozkov**, Many-body quantum theory, SPb.: Polytechnic university edition, 2013.
- [7] **S. Lundquist, N.H. March** (Eds.), Theory of the Inhomogeneous Electron Gas, Plenum Press, New York-London, 1983.
- [8] **M.Ya. Amus'ya, N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva**, Cross section for the photoionization of noble-gas atoms with allowance for multielectron correlations, JETP. 33 (1) (1971) 90 – 96.
- [9] **M.Ya. Amusya, V.K. Ivanov**, Intershell interaction in atoms, Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences) 152 (6) (1987) 185–230.
- [10] **M.Ya. Amusya, V.K. Dolmatov, V.K. Ivanov**, Photoionization of atoms with half-filled shells, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 85 (1) (1983) 115–123.
- [11] **A.A. Radtsig, B.M. Smirnov**, Parameters of atoms and atomic ions, Moscow, Energoatomizdat, 1986.
- [12] **A. Dasgupta, A.K. Bhatia**, Photoionization of sodium atoms and electron scattering from ionized sodium, Phys. Rev. A. 31 (2) (1985) 759–771.
- [13] **Jwei-Jun Chang, Hugh P. Kelly**, Photoabsorption of the neutral sodium atom: A many-body calculation, Phys. Rev. A. 12 (1) (1974) 92 – 98.
- [14] **H.F. Wolff, K. Radler, B. Sonntag, R. Haensel**, Photoabsorption of Atomic Sodium in the VUV, Z. Physik A. 257 (4) (1972) 353 – 368.
- [15] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov**, Generalization of the atomic RPA method for diatomic molecules: H_2 photoionization cross-section calculation, Chem. Phys. Lett. 291 (3-4) (1998) 375–380.
- [16] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov**, Photoionization of the H_2 molecule in the random phase approximation, J. Phys. B. 36 (7) (2003) 1409–1422.
- [17] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov, G.H. Fecher, G. Schunhense**, Generalization of the atomic random-phase-approximation method for diatomic molecules: N_2 photoionization cross-section calculations, Phys. Rev. A. 61 (3) (2000) 032704.

THE AUTHORS

KONOVALOV Aleksey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alkonvit@yandex.ru

IPATOV Andrey N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
andrei_ipatov@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.237.9

УДК: 621

Т.А. Габрикова, В.А. Зыков, Д. А. Фирсов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ИТОГИ XVII ВСЕРОССИЙСКОЙ МОЛОДЕЖНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ ПО ФИЗИКЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И НАНОСТРУКТУР, ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ОПТО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Подведению итогов XVII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (23 – 27 ноября 2015 года, СПбПУ, Санкт-Петербург) предшествует перечисление организаторов и спонсоров конференции. Приведен аналитический обзор работ, представленных на шести секциях конференции. Поименно названы работы, отмеченные Программным комитетом конференции дипломами и денежными премиями. Представлен список докладов, рекомендованных 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.

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА, ОПТОЭЛЕКТРОНИКА, ГЕТЕРОСТРУКТУРА, НАНОСТРУКТУРА.

В Санкт-Петербурге с 23 по 27 ноября 2015 года прошла Семнадцатая всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. Организаторами конференции выступили Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербургский академический университет – научно-образовательный центр нанотехнологий РАН, Санкт-Петербургский государственный университет и ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН. Конференция проведена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ грант 15-32-10297 мол_г) и ЗАО «Полупроводниковые приборы».

Большую работу по организации конференции провели Программный комитет (председатель – академик РАН, доктор

физико-математических наук Р.А. Сурис, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН) и Организационный комитет (председатель – доктор физико-математических наук, профессор Л.Е. Воробьев, СПбПУ).

В работе конференции приняли участие более 200 человек, которые представляли 30 вузов и научных центров из 13 городов России, включая крупные научно-образовательные центры Сибири (Новосибирск, Томск), Урала (Екатеринбург) и Европейской части России (Москва, Санкт-Петербург, Нижний Новгород, Волгоград, Воронеж, Казань, Саратов, Пенза). Впервые в работе конференции приняли участие молодые ученые Российско-Армянского Славянского университета (г. Ереван).

В программе Семнадцатой всероссийской молодежной конференции представле-

ны основные научные направления развития современной физики полупроводников и наноструктур, полупроводниковой оптики и наноэлектроники в России. Это исследование электрических, магнитных, оптических, люминесцентных, фотоэлектрических свойств объемных материалов и пленочных структур, изучение поверхности полупроводников и границ раздела. Большое число работ представлено по проблемам нанoeлектроники. В частности, на конференции были представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований структур с квантовыми ямами, квантовыми нитями, квантовыми точками и нанокластерами, исследований нанокompозитов и других новых материалов и структур. По-прежнему не ослабевает интерес к структурам на основе углеродных материалов (фуллерены, углеродные трубки, графен), а также к нанопористым и композиционным материалам, особенно с наномасштабными включениями. Отмечается заметный рост числа работ, посвященных проблемам технологии изготовления полупроводниковых структур и приборов на их основе.

В программу конференции были включены два приглашенных доклада, прочитанные ведущими российскими учеными и знакомящие молодых ученых с современным состоянием исследований в области физики полупроводников и наноструктур, полупроводниковой оптики и нанoeлектроники. С приглашенными докладами выступили: доктор физико-математических наук С.А. Тарасенко (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН), тема доклада – «Двумерные и трехмерные топологические изоляторы»; доктор физико-математических наук М.В. Максимов (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Академический университет), тема доклада – «Полупроводниковые лазеры со сверхузкой диаграммой направленности».

На девяти пленарных заседаниях были представлены 42 устных доклада студентов и аспирантов. Состоялась также стендовая сессия, на которой было представлено 88 докладов молодых ученых 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 нанoeлектроники», «Новые материалы».

Сборник тезисов [1], а также программа конференции изданы тиражом 200 экз.

Аналитический обзор представленных докладов

Анализ вопросов, рассмотренных на секции «Объемные свойства полупроводников», позволяет отметить повышенный интерес исследователей к магнитным свойствам материалов. Интерес вызывают в равной мере как спиновые свойства носителей заряда, так и проявления магнитных свойств атомов в полупроводниковых соединениях и твердых растворах. Здесь следует отметить экспериментальные исследования структуры, особенностей электронного транспорта, магнитных свойств в легированных манганитах $\text{PrSmnO}_3:\text{Y}$, $\text{LaMnO}_3:\text{Sr}$ и $\text{CeMnO}_3:\text{Sr}$ – материалах, перспективных для создания магнитоуправляемых устройств электроники; исследование магнитных свойств $\text{CdHgTe}:\text{Mn}$ и $\text{HgSe}:\text{Cr}$; исследования магнитопротекания и магнитоотражения в кристаллах твердых растворов $\text{HgCr}_2\text{Se}_4\text{-CdCr}_2\text{Se}_4$ со структурой шпинели, которым свойственны высокая степень поляризации спинов электронов, гигантские эффекты Фарадея и Керра; теоретические исследования, показавшие возможность спиновой поляризации носителей спиновой фильтрацией электронов парамагнитными примесными центрами в объемных полупроводниках; теоретические исследования эффекта Холла при рассеянии носителей тока на магнитном скирмионе, актуальные при решении задач увеличения плотности информации в магнитных системах; экспериментальные исследования спиновых шумов.

Заслуживают внимания результаты работ, посвященных изучению физических свойств и технологии материалов и структур на основе нитридов элементов III В подгруппы Периодической системы:

теоретические и экспериментальные исследования влияния плазмон-фононного взаимодействия на оптические свойства

в нитриде галлия GaN в инфракрасном и терагерцовом диапазонах спектра, показавшие, в частности, что спектры отражения в области плазмон-фононных мод служат чувствительным инструментом для бесконтактной характеристики образца;

изучение спектров и кинетики фотовозбуждения в нитриде индия;

экспериментальное исследование винтовых дислокаций в GaN как эффективных источников ультрафиолетового излучения.

Интересны результаты экспериментальных исследований, относящихся к влиянию примеси индия на электрофизические свойства пленок $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, которые используются в энергонезависимых устройствах фазовой памяти; связанных с изучением структурных свойств твердых растворов GaP(As)N в качестве составляющей части системы InGaPAsN (хорошо согласуется по параметру решетки с кремнием); посвященных изучению старения TiO_2 , легированного азотом; интересны результаты экспериментального изучения пассивации глубоких дислокационных уровней в кремнии водородом — процедуры, которая существенно повышает качество монокристаллических пластин кремния, используемых для изготовления солнечных элементов.

Работы, представленные на секции «Процессы роста, поверхность, границы раздела», охватывают широкий круг исследований, посвященных изучению морфологии поверхности, образования нанокластеров, массивов квантовых нитей и квантовых точек; изучению на атомном уровне начальных стадий роста, в том числе учитывающему реконструкцию поверхности, формирование границ раздела в гетероструктурах.

В представленных работах использовались самые современные технологические методы: молекулярно-пучковая эпитаксия (МПЭ), газофазная и жидкофазная эпитаксия (ГФЭ и ЖФЭ), магнетронное распыление, плазмохимическое осаждение и другие. Наиболее яркие работы в этом направлении посвящены экспериментальному исследованию возможности синтеза массивов полупроводниковых нитевидных нанокристаллов арсенида галлия GaAs с использо-

ванием коллоидных наночастиц золота методом молекулярно-пучковой эпитаксии; изучению магнитооптических эффектов в двумерных плазмонных структурах, представляющих собой квадратные решетки частиц золота в пленках железо-иттриевого граната; исследованию спинодального распада твердых растворов InGaAsP, выращенных методом газофазной эпитаксии с участием металлорганических соединений на подложках фосфида галлия GaP; разработке алгоритма учета реконструкции поверхности типа (2×1) при росте эпитаксиальных слоев на подложках с ориентацией (100) ; исследованию структурных и оптических свойств 2D-плазмонных структур; исследованию процессов самоорганизации и переноса состава фуллерен-металлопорфириновых комплексов при вакуумном напылении, а также их электронной структуры, оптических и магнитных свойств; моделированию самокаталитического роста по механизму пар — жидкость — кристалл нитевидных кристаллов арсенидов индия и галлия из каталитических капель-затравок элементов пятой группы; экспериментальному исследованию оптических и структурных свойств однослойных и двухслойных пленок серебра и золота.

Ряд работ посвящен разработке технологии полупроводниковых структур:

технологии выращивания высококачественных эпитаксиальных слоев германия на подложках кремния методом «горячей проволоки»;

низкотемпературному методу плазмохимического осаждения слоев фосфида галлия на кремнии;

технологии роста наноразмерных слоев оксида меди методом высокочастотного магнетронного распыления, актуальной для создания новых типов солнечных элементов;

экспериментальным исследованиям превращения разупорядоченных нанодисперсных пленок германия на поверхности кремния Si(001) в гетероструктуры Ge/Si(001);

особенностям формирования нанокристаллов CdS в процессе отжига матрицы Лэнгмюра — Блоджетт.

Программным комитетом отмечена практическая значимость результатов исследований процессов деградации запассивированной водородом альфа-кремниевой подложки при формировании тыльного алюминиевого контакта, актуальных для повышения эффективности кремниевых солнечных элементов.

Традиционно большое количество докладов было представлено на секции «Гетероструктуры, сверхрешетки, квантовые ямы». На этой секции представлены и наиболее яркие работы конференции. Это в первую очередь относится к сообщению о результатах исследования оптических свойств гибридных структур ферромагнетик – полупроводник в системе кобальт – квантовая яма на основе теллурида кадмия, указавших на новый механизм обменного взаимодействия, не связанный с перекрытием волновых функций дырок в квантовой яме и d -электронов в ферромагнетике (премия Гросса). Это исследование находится в ряду работ, связанных с популярным направлением спинтроники, состоящим в интегрировании магнетизма в полупроводниковую архитектуру современных компьютеров. Эта проблематика находит отражение и в ряде других представленных работ:

в экспериментальном изучении когерентной спиновой динамики двумерных электронов в режиме квантового эффекта Холла при нечетных факторах заполнения;

в исследовании эффектов обменного взаимодействия в транспортных свойствах магнитных гетероструктур GaAs/InGaAs/GaAs с пространственно-отделенным дельта-слоем марганца в режиме дрейфовой проводимости;

в изучении конверсии поляризации света при отражении от структур ZnSe/ZnMgSSe с одиночной квантовой ямой.

По-прежнему большое внимание уделяется получению и исследованию структур на основе полупроводниковых соединений A^3B^5 и A^2B^6 и твердых растворов на их основе. Ряд работ посвящен оптимизации параметров наноструктур для различных приборных приложений. Среди экспериментальных работ следует отметить изуче-

ние поглощения света и фотолюминесценции в сильных электрических полях в множественных туннельно-связанных квантовых ямах GaAs/AlGaAs; отработку технологических режимов МПЭ роста сильно напряженных квантовых ям на основе слоев InAlGaAs на подложке InP с целью формирования активной области гетероструктур на длину волны 1,55 мкм; исследования длинноволновой люминесценции в эпитаксиальных слоях твердых растворов HgCdTe, показавшие перспективность использования структур для создания длинноволновых лазеров; исследования, показавшие возможность создания излучающих структур на диапазон длин волн 1,3 – 1,5 мкм с метаморфными буферными слоями GaAsSb и квантовой ямой InGaAs.

Среди теоретических работ следует отметить исследования дисперсных свойств фотонных кристаллов с большим количеством слоев переменного периода; изучение поглощения света дырками в глубоких квантовых ямах AlSb/InAlSb/AlSb в рамках четырехзонной модели Кейна; исследования параметров лазера с пассивной синхронизацией мод на полупроводниковых гетероструктурах; моделирование стационарных состояний электронов в наногетероструктурах с плавным профилем потенциала и сложной геометрией в электрических и магнитных полях; исследование полярных фононов в множественных квантовых ямах со слоями нитридов галлия и алюминия при переходе от одиночной ямы к сверхрешетке с целью разработки методов контроля структур.

При рассмотрении работ, представленных на секции «Квантовые точки, квантовые нити и другие низкоразмерные системы» по материаловедческому принципу явно просматриваются два направления в изучении наноструктур: на основе углеродных материалов (фуллерены, углеродные нанотрубки) и на основе преимущественно алмазоподобных полупроводников. Из работ по «углеродной» тематике необходимо отметить следующие:

экспериментальные исследования электронной структуры ультракороткой углеродной нанотрубки (0, 9) в электрическом поле;

исследования агрегации фуллеренов C_{60} и C_{70} в неравновесных условиях;

разработка методики прецизионного выращивания одиночных углеродных нанотрубок;

разработка конструкции мемристорной структуры на основе вертикально ориентированной углеродной нанотрубки;

исследования возможности модифицирования золь-гель-системы на основе SiO_2 и SnO_2 путем введения водорастворимых форм фуллерена – фуллеренолов $C_{60}(OH)_n$.

По данной тематике представлено значительное количество теоретических работ. Среди них отметим следующие:

исследование спиновых свойств закрытых углеродных одностенных нанотрубок (0, 9);

изучение распределения электронной плотности нанотрубок при взаимодействии с электромагнитным полем;

построение модели двумерных световых пучков в брэгговской среде с гармонической модуляцией показателя преломления с углеродными нанотрубками;

исследования вибрационного эффекта Штарка в фуллеренах C_{60} и C_{70} . Сюда же можно отнести теоретические исследования межплоскостных расстояний в сжатом мультиграфене.

Для классических полупроводниковых наносистем спектр экспериментальных исследований достаточно широк и включает как непосредственное изучение свойств нанобъектов, так и изучение условий их изготовления.

К числу наиболее интересных работ можно отнести следующие:

исследования динамики релаксации оптического поглощения в квантовых точках Ge/Si;

разработка метода формирования упорядоченных металлических и диэлектрических наночастиц с использованием фемто-секундных импульсных лазеров;

исследования особенностей фазовых переходов первого рода в нитевидных нанокристаллах индия, олова и цинка в порах анодного Al_2O_3 ;

исследования фотоэлектрических свойств структур на основе коллоидных

квантовых точек сульфида свинца;

экспериментальное изучение электронного строения массивов нитевидного кремния, сформированных металл-ассистированным химическим травлением;

исследование роли дефектов в формировании фотоотклика массива квантовых нитей GaAs/AlGaAs со структурой ядро-оболочка;

исследование фотоэлектрических свойств гетероструктур InGaN/GaN с латеральным ограничением;

исследование лазерной генерации в микродисковых InAlAs-резонаторах с решеточно-согласованными квантовыми точками InP, образующимися при металл-органической газовой эпитаксии слоя InP на поверхности InAlAs.

Кроме того, следует отметить ряд технологических работ, посвященных разработке методики синтеза одномерных фотонных кристаллов, лазерной печати резонансных полупроводниковых частиц, бескатализного и автокаталитического метода роста упорядоченных массивов нитевидных нанокристаллов на основе арсенида галлия.

В числе теоретических работ отметим исследования свойств управляемой квантовой точки на границе 2D-топологического изолятора как новый тип кубита; решение задачи об особенностях энергетического спектра электронов в квантовом штрихе в форме параллелепипеда; развитие модельных представлений о физических эффектах, возникающих при различном соотношении между частотой фундаментального излучательного перехода в квантовой точке и частотой плазмонного резонанса металлических наночастиц, расположенных на различных расстояниях относительно слоя квантовых точек.

В докладах, представленных на секции «Приборы опто- и наноэлектроники», отражен широкий спектр прикладных направлений современной опто- и наноэлектроники. Со стороны практического применения наиболее значимыми представляются разработки и исследования лазерных структур. В этот цикл работ можно включить такие исследования:

влияние сульфидной пассивации на



люминесценцию микродисков с активными областями, состоящими либо из серии квантовых ям GaAs/AlAs, либо из слоя квантовых точек InAs/InGaAs;

анализ характеристик излучения лазерных диодов на основе структуры $p\text{-AlGaAs/GaAs}/n\text{-AlGaAs}$ в условиях одноосного сжатия;

исследование стабилизации поляризации выходного излучения вертикально-излучающих лазеров с ромбовидной токовой апертурой;

изучение параметров акустооптических модуляторов с различными типами возбуждения ультразвука — устройств управления характеристиками лазерного излучения;

численное моделирование модового состава кольцевых микрорезонаторов, сформированных на лазерных гетероструктурах InGaAs/AlGaAs/GaAs;

теоретическое исследование влияния эффекта Парселла на генерацию третьей гармоники нелинейным слоем, размещенным в резонаторе.

По-прежнему не ослабевает интерес к приборным структурам на основе широкозонных полупроводников. Здесь следует отметить экспериментальные исследования спектрального состава излучения мощных ультрафиолетовых светоизлучающих диодов на основе нитрида галлия; результаты изучения влияния текстурирования на эффективность вывода излучения из нитридных светоизлучающих структур; разработку технологии мощных СВЧ-силовых транзисторов на основе нитрида галлия.

На конференции была широко представлена проблематика преобразования солнечной энергии в электрическую.

Среди экспериментальных работ заслуживают внимания результаты исследования многопереходных солнечных элементов InGaP/Ga(In)As/Ge, позволившие создать структуры с кпд более 35 % при кратности концентрирования солнечного излучения 10 — 100; разработка технологии изготовления метаморфных буферных областей GaInAs на подложках GaAs на основе МОС-гидридной эпитаксии для многопереходных солнечных элементов (достигнуты значения кпд 34%); разработка фотоприемника ла-

зерного излучения на основе гетероструктур InGaAsP/InP для беспроводной передачи электроэнергии; изучение влияния материалов и конфигурации омических контактов на фотоэлектрические характеристики солнечных элементов GaInP/GaAs/Ge.

Среди теоретических работ Программным комитетом отмечена практическая значимость результатов моделирования тандемных солнечных элементов GaPN/Si с массивом нитевидных нанокристаллов нитрида галлия в качестве верхнего эмиттерного слоя.

Ряд работ направлен на решение конкретных прикладных задач. Это исследования циркулярно-поляризованной электролюминесценции светоизлучающих диодов на основе гетероструктур со слоем магнитного полупроводника GaMnSb/GaSb/InGaAs, а также спиновых светодиодов с ферромагнитным инжектором CoPt, представляющих интерес как элементы новых приборов на спин-поляризованных носителях; разработка технологии изготовления транзистора с каналом на основе графена; исследование возможности улучшения динамических характеристик переключения силовых высоковольтных $p\text{-}i\text{-}n$ -диодов GaAs за счет применения гетероэпитаксиального эмиттера AlGaAs вместо гомоэпитаксиального GaAs; разработка оптоэлектронного датчика водорода на основе оптопары Pd-оксид — InP-светодиод.

Следует отметить высокое качество и практическую перспективность работ, представленных на указанной секции: две работы были поддержаны грантами по результатам конкурса в рамках программы «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («УМНИК») в номинации «Научные результаты, обладающие существенной новизной и сверхсрочной перспективой их коммерциализации», восемь работ были поддержаны грантами РФФИ, Минобрнауки и другими.

Практически все работы, представленные на секции «Новые материалы», посвящены разработке и исследованию свойств композиционных материалов. Специфической особенностью нового поколения композиционных материалов является та,

что они представляют собой однородные матрицы с наноразмерными включениями либо более сложные образования, обязательно содержащими наноразмерный объект.

В качестве примера можно привести работы, посвященные созданию и исследованию новых метаматериалов на основе полупроводниковой матрицы AlGaAs, содержащей неупорядоченные массивы металлических нановключений AsSb; исследованию электронного строения, фазового состава и оптических свойств гидрированных аморфных пленок субоксида кремния с нанокристаллами кремния; разработке медно-алмазных композитов на основе имплантных алмазов, актуальных для создания кристаллодержателя для отвода тепла от микросхем терагерцовой и СВЧ-техники; синтезу и исследованию свойств композитных материалов на основе аморфного диоксида и коротких углеродных нанотрубок малого диаметра.

Большой интерес вызвали результаты исследований эффектов резистивного переключения и памяти в композитных пленках на основе полифункциональных полупроводниковых и диэлектрических полимеров, используемых в качестве матрицы для чешуек графена и оксида графена, показавшие возможность построения структур с энергонезависимой одноразовой памятью.

Вопросы, которым была посвящена конференция, охватывают основные области физики полупроводников, полупроводниковой опто- и наноэлектроники. В их число можно включить изучение квантово-размерных структур, гетероструктур и приборов на их основе. Повышенный интерес проявляется к проблемам спинтроники. Не менее важным направлением является разработка новых материалов: органических полупроводников, нанопористых материалов, а также композитных, в том числе с нановключениями.

Представленные на конференции сообщения отражают приоритетные направления в мировой науке в области полупроводниковой электроники. Это, в частности, подтверждается тем обстоятельством, что ряд работ выполнен в рамках грантов, под-

держанных российскими и иностранными научными фондами. Было представлено 20 работ, поддержанных Российским фондом фундаментальных исследований, 14 – грантами Министерства образования и науки Российской Федерации, 6 – грантами Российского научного фонда. Ряд участников конференции получили финансовую поддержку за счет других фондов, правительственных и ведомственных программ (3 работы), 2 работы выполнены в рамках программы по международному сотрудничеству.

Следует отметить высокий уровень докладов и актуальность их тематики, а также подчеркнуть, что ряд лучших докладов явился результатом совместных исследований представителей вузов и институтов РАН. Участники конференции констатируют важность проведения научной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике для студентов и аспирантов как с точки зрения представления и обсуждения научных результатов, так и установления научных контактов и организации совместных научных исследований.

Доклады, отмеченные Программным комитетом

Программный комитет отметил дипломами и премиями следующие работы аспирантов и студентов.

Премией им. Е.Ф. Гросса за лучшую работу в области оптики полупроводников была награждена

Калитухо Инна Викторовна, студентка Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета («ЛЭТИ»), руководитель – доктор физико-математических наук В.Л. Коренев, ведущий научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, за доклад «Эффект близости в гибридах ферромагнетик-полупроводник» (премия 5000 руб.).

Дипломами I степени и премией (4500 руб.) награждены:

Денисов Константин Сергеевич, аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, руководитель – доктор физико-математических

наук Н.С. Аверкиев, заведующий сектором ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, за доклад «Аномальный эффект Холла при рассеянии носителя на магнитном скирмионе»;

Фадеев Михаил Александрович, студент Нижегородского государственного университета, руководитель – кандидат физико-математических наук С.В. Морозов, заведующий лабораторией Института физики микроструктур РАН, за доклад «Длинноволновая фотолюминесценция и стимулированное излучение в структурах на основе твердых растворов HgCdTe».

Дипломами II степени и премиями (3500 руб.) награждены:

Рыбальченко Дмитрий Васильевич, аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, руководитель – кандидат физико-математических наук С.А. Минтаиров, научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, за доклад «Метаморфные GaInAs-фотоэлектрические преобразователи, полученные методом МОС-гидридной эпитаксии на подложках GaAs»;

Шайманов Алексей Николаевич, аспирант Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, руководители – кандидат физико-математических наук А.В. Барышев, начальник оптической лаборатории научно-исследовательского отдела «Лаборатория разработки оптических устройств нового поколения» Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова, и доктор физико-математических наук Т.В. Мурзина, начальник лаборатории нелинейной оптики наноструктур и фотонных кристаллов МГУ, за доклад «Магнитооптические эффекты в двумерных плазмонных структурах»;

Степанец-Хуссейн Эльдар, студент Московского физико-технического института, руководитель – кандидат физико-математических наук А.В. Ларионов, старший научный сотрудник лаборатории неравновесных электронных процессов Института физики твердого тела РАН, за доклад «Спиновая когерентность в квантовом холловском ферромагнетике»;

Хабаров Кирилл Михайлович, студент Московского физико-технического института, руководитель – кандидат физико-математических наук А.В. Барышев, начальник оптической лаборатории научно-исследовательского отдела «Лаборатория разработки оптических устройств нового поколения» Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова, за доклад «Структурные и оптические свойства 2D-плазмонных структур».

Дипломами III степени и премиями (2500 руб.) награждены:

Павлов Николай Владимирович, аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, руководитель – доктор физико-математических наук Г.Г. Зегря, главный научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, за доклад «Внутризонное поглощение излучения дырками в глубоких квантовых ямах»;

Шиляева Юлия Игоревна, аспирантка Национального исследовательского университета «Московский институт электронной техники (МИЭТ)», руководитель – доктор технических наук С.А. Гаврилов, профессор, заведующий кафедрой материалов функциональной электроники МИЭТ, за доклад «Исследование особенностей фазовых переходов I рода в нитевидных нанокристаллах в порах анодного Al₂O₃»;

Высотский Никита Владимирович, студент Санкт-Петербургского государственного университета (соавтор – А.С. Лошаченко, аспирант СПбГУ), руководитель – доктор физико-математических наук О.Ф. Вывенко, профессор СПбГУ, за доклад «Экспериментальное наблюдение колебательной моды моноатомного водорода на дислокациях в кремнии»;

Илькив Игорь Владимирович, студент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, руководитель – доктор физико-математических наук А.Д. Буравлев, главный научный сотрудник Санкт-Петербургского академического университета РАН, за доклад «МПЭ-синтез однородных массивов GaAs нитевидных нанокристаллов».

Поощрительными дипломами награждены:

Анисимов Андрей Николаевич, аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург;

Гуния Наала Юрьевна, аспирантка Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург;

Зарин Максим Алексеевич, аспирант Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург;

Матюшкин Лев Борисович, аспирант Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета («ЛЭТИ»);

Медведев Олег Сергеевич, аспирант Санкт-Петербургского государственного университета;

Муромец Анастасия Владимировна, аспирантка Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова;

Овешников Леонид Николаевич, аспирант Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Москва;

Сибирмовский Юрий Дмитриевич, аспирант Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», г. Москва;

Тучин Андрей Витальевич, аспирант Воронежского государственного университета;

Фролов Дмитрий Сергеевич, аспирант Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета («ЛЭТИ»);

Лебедев Дмитрий Владимирович, молодой ученый, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург;

Бабенко Яна Александровна, студентка Санкт-Петербургского государственного университета;

Дмитриев Павел Алексеевич, студент Научно-исследовательского университета информационных технологий, механики и оптики, г. Санкт-Петербург;

Каспер Юлия Викторовна, студентка Воронежского государственного университета;

Кириленко Олег Игоревич, студент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого;

Комаров Алексей Владимирович, студент Московского физико-технического института;

Котова Любовь Викторовна, студентка Балтийского государственного технического университета «Военмех», г. Санкт-Петербург;

Крылов Павел Станиславович, студент Академического университета РАН, г. Санкт-Петербург;

Фетисова Марина Вадимовна, студентка Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого;

Шумилов Александр Алексеевич, студент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого;

Ячников Денис Юрьевич, студент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Пять докладов рекомендованы для участия в конкурсе по Программе «Участник молодежного научно-инновационного конкурса» («УМНИК») в номинации «Научные результаты, обладающие существенной новизной и сверхсрочной перспективой их коммерциализации» с последующим финансированием Фондом содействия малых форм предприятий в научно-технической сфере.

Далее представлен перечень этих докладов.

Балезин Михаил Алексеевич, студент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, доклад «Влияние сульфидной пассивации на люминесценцию микродисков с квантовыми ямами и квантовыми точками»;

Дергун Карина Ильдаровна, студентка Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, доклад «Исследование методом фотолюминесценции деградации запассивированной α -Si:H кремниевой подложки при формировании тыльного алюминиевого контакта»;

Котляр Константин Павлович, студент Академического университета, г. Санкт-Петербург, доклад «Оптоэлектронные



свойства гетероструктур InGaN/GaN с латеральным ограничением»;

Левицкий Ярослав Вадимович, аспирант ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, доклад «Управление селекцией мод кольцевых микрорезонаторов»;

Можаров Алексей Михайлович, аспирант Академического университета, г. Санкт-Петербург, доклад «Моделирование тандемных солнечных элементов GaPN/Si, с массивом нитевидных нанокристаллов нитрида галлия в качестве верхнего эмиттерного слоя».

Благодарности

Организаторы конференции выражают благодарность сотрудникам Научно-образовательного комплекса «СПбФТНОЦ РАН» за создание всех условий для работы конференции.

Очередную Всероссийскую молодежную конференцию по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой оптики и нанoeлектронике предполагается провести в г. Санкт-Петербурге в ноябре 2016 г.; информация будет размещена на сайте www.semicond.spbstu.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Физика полупроводников и наноструктур, полупроводниковая опто- и нанoeлектроника. Тез. докл. 17-й Всерос. молод. конф.

23 –27 ноября 2015 года. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2015. 142 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГАВРИКОВА Татьяна Андреевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
tatgavrik@mail.ru

ЗЫКОВ Валерий Андреевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zykov@rphf.spbstu.ru

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dmfir@rphf.spbstu.ru

Gavrikova T.A., Zykov V.A., Firsov D.A. RESULTS OF 17-TH ALL-RUSSIAN YOUTH CONFERENCE ON SEMICONDUCTOR AND NANOSTRUCTURE PHYSICS, AND SEMICONDUCTOR OPTO- AND NANOELECTRONICS.

The paper summarizes the results of the 17th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and Nanostructure Physics, and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics that took place in St. Petersburg on November 23 – 27, 2015. The organizers and the sponsors of the conference have been listed. The reports presented in the 6 sections of the Conference have been reviewed analytically. The participants whose reports were awarded certificates and money prizes by the Conference Program Committee have been mentioned. The list of reports recommended to take part in the ‘UMNIK’ contest (the acronym for the youth science and innovation contest means “a clever person” in Russian) is presented in the nomination “Scientific results which have significant novelty and the prospect of commercialization” and shall be further funded by the Foundation for Assistance to Small Innovative Enterprises in Science and Technology.

SEMICONDUCTOR PHYSICS, NANOELECTRONICS, OPTOELECTRONICS, HETEROSTRUCTURE, NANOSTRUCTURE.

REFERENCES

- [1] Fizika poluprovodnikov i nanostruktur, poluprovodnikovaya opto- i nanoelektronika [Physics of semiconductors and nanostructures, semiconductor opto- and nanoelectronics]. Abstracts of the 17th All-Russian Youth Conference, November, 23-27, 2015. St. Petersburg University Publishing House, St. Petersburg, 2015.

THE AUTHORS

GAVRIKOVA Tatiana A.

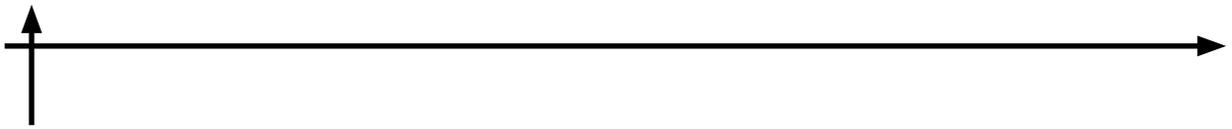
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
tatgavrik@mail.ru

ZYKOV Valery A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zykov@rphf.spbstu.ru

FIRSOV Dmitry A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
dmfir@rphf.spbstu.ru



В.К. Иванов

ПАМЯТИ НИКОЛАЯ МИХАЙЛОВИЧА КОЖЕВНИКОВА

27 января 2016 года Политехнический университет понес невосполнимую утрату. После тяжелой болезни на 69-м году ушел из жизни потомственный политехник Николай Михайлович Кожевников, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. Не стало биться сердце известного ученого-оптика, прекрасного педагога, яркого и талантливое человека, внесшего огромный вклад в дело физического образования Политехнического университета и всей современной России.

Николай Михайлович Кожевников родился 2 июля 1947 года, в день рождения своего отца Михаила Петровича Кожевникова (1908 – 1971), профессора гидротехнического факультета Ленинградского политехнического института им. М.И. Калинина (ныне СПбПУ Петра Великого). Мать Николая Михайловича Мария Петровна (1920 – 1998) в 1941 году добровольно ушла на фронт. В 1945 году Михаил Петрович и Мария Петровна встретились во время освобождения Калининграда (Кенигсберга), поженились и вернулись в Ленинград. В 1953 году М.П. Кожевников с женой и двумя детьми уехал в Китайскую Народную Республику налаживать учебный процесс в

институте Цинхуа (Пекин). Там Коля пошел в первый класс средней школы при посольстве СССР в КНР.

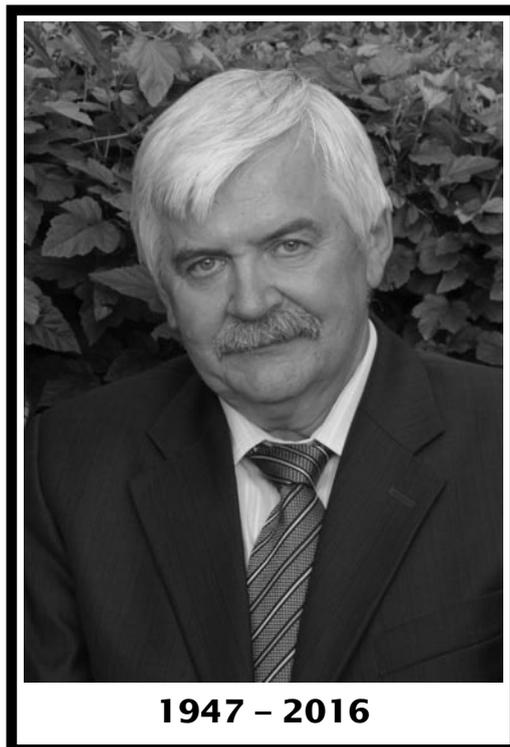
После возвращения на Родину Николай три года учился в 239-й школе (в настоящее время это известный физико-математический лицей). Тогда же в тесной

комнате на улице Майорова в семье Кожевниковых появилось пианино, игре на котором Колю начали обучать. Мария Петровна хорошо пела и мечтала приобщить к музыке своих детей.

В 1958 году Политехнический институт отремонтировал и предоставил нескольким своим преподавателям квартиры в одном из бывших общежитий. Кожевниковы переехали в одну из этих квартир. Коля стал учиться в общеобразовательной школе № 121 и одновременно поступил в Музыкальную школу для взрослых им. Н.А.

Римского-Корсакова. И в обеих школах он был среди лучших учеников. Достаточно сказать, что школу Коля окончил с золотой медалью, а после окончания музыкальной школы его рекомендовали к поступлению в консерваторию, минуя музыкальный техникум.

Учеба на «два фронта» продолжалась и в дальнейшем. В 1965 году Николай поступил на факультет радиоэлектроники ЛПИ им.



М.И. Калинина, а в 1968 году – на фортепианное отделение Ленинградской консерватории им. Н.А. Римского-Корсакова в класс профессора В.В. Нильсена. В течение нескольких лет Николаю приходилось сдавать по 10 экзаменов в сессию, и почти никогда он не переносил их на более поздний срок.

Политехнический институт Н.М. Кожевников окончил с отличием в 1971 году, и в том же году в Журнале технической физики появилась его первая научная статья. Через два года, в 1973 году, он успешно окончил Ленинградскую консерваторию и начал учебу в аспирантуре на кафедре квантовой электроники под руководством профессора В.Ю. Петрунькина.

Кандидатская диссертация, которую Н.М. Кожевников защитил в 1976 году, была посвящена поляризационным свойствам излучения твердотельных оптических квантовых генераторов. Одним из первых он применил матричный метод расчета анизотропных оптических резонаторов, который широко используется сейчас во всем мире. В известной монографии по поляризационной оптике есть ссылки и на работы Н.М. Кожевникова тех лет.

После окончания аспирантуры Н.М. Кожевников переходит на должность ассистента кафедры экспериментальной физики, и в это время активизируется его общественная деятельность: сначала на посту председателя Художественного совета института, а затем члена идеологического сектора партийного комитета ЛПИ, отвечающего за нравственно-эстетическое воспитание студентов. Второе, музыкальное, образование Николая Михайловича оказалось здесь очень востребованным. Это был период расцвета самодеятельного художественного творчества в ЛПИ. Ежегодные смотры-конкурсы, факультетские фестивальные вечера, концерты и спектакли студенческих коллективов до сих пор остались в памяти тех, кто учился и работал в те годы в Политехническом институте.

Десять лет (1976 – 1985) отдал этой общественной деятельности Н.М. Кожевников, а закончив ее, снова вернулся к активным научным исследованиям. В 1991 году он за-

вершил работу над докторской диссертацией на тему «Динамическая голографическая микрофазометрия». Его исследование оказалось на стыке сразу нескольких областей: оптики, радиофизики и биоорганической химии. Он заложил основы теории динамической голографии фазомодулированных световых пучков, позволяющей реализовывать уникальные возможности реверсивных фоточувствительных сред по повышению помехозащищенности и чувствительности оптических измерений. Идеи и методы этой диссертации до сих пор используются не только в фундаментальных исследованиях, но и в приложениях динамической голографии в системах оптической обработки информации. В эти годы он подготовил трех кандидатов физико-математических наук.

Преподавательской деятельностью Николай Михайлович занимался с момента перехода на кафедру экспериментальной физики. В течение 40 лет он проводил практические занятия и читал лекции сначала на электромеханическом, а затем на радиофизическом факультете. Его лекции отличались не только ясным изложением материала, но проводились с таким мастерством и изяществом, которое показывало красоту различных физических явлений и процессов. Это привлекало студентов его потоков к исследовательской работе, и уже на первом и втором курсах они с удовольствием выступали на проводимых в университете неделях науки с собственными докладами и разработками.

Много сил вложил Н.М. Кожевников в модернизацию кафедрального кабинета физики, которым он бессменно руководил с 1977 года и где собрана уникальная коллекция демонстрационных физических экспериментов. Он бережно относился к действующим установкам начала XX века, восстанавливал их, но в то же время оснащал многие разделы курса физики новыми современными демонстрациями. Так, установка по голографической интерферометрии была представлена на ВДНХ СССР в разделе достижений голографии и была отмечена бронзовой медалью. В настоящее время демонстрационный кабинет физики на кафедре экспериментальной физики



СПбПУ по праву считается одним из лучших в российских вузах. Николай Михайлович сам регулярно водил экскурсии по кабинету; здесь проводились многочисленные встречи со школьниками и учителями физики с обязательной демонстрацией физических опытов.

С 1995 года Н.М. Кожевников преподавал по совместительству в Санкт-Петербургском государственном университете экономики и финансов (СПбГУЭФ), являясь ведущим лектором новой дисциплины – «Концепция современного естествознания (КСЕ)», которая была введена с 1994 года в учебные программы всех гуманитарных направлений и специальностей. Накопленный в СПбГУЭФ опыт пригодился и в СПбГПУ, где программа Н.М. Кожевникова по этой дисциплине сейчас реализуется на нескольких факультетах гуманитарного профиля. Этот курс КСЕ совершенствовался им в течение двух десятилетий, его учебное пособие по КСЕ выдержало несколько изданий и используется во многих вузах страны.

В 2001 году Н.М. Кожевников стал заместителем заведующего кафедрой экспериментальной физики по учебной работе и проявил на этой сложной должности незаурядные административные способности. Многие годы он руководил методической работой на кафедре, проведением методических семинаров, изданием методических пособий. В 2002 году он становится ученым секретарем Научно-методического совета (НМС) по физике Министерства образования и науки Российской Федерации, во главе которого находился Нобелевский лауреат академик Ж.И. Алферов. Более 10 лет СПбГПУ являлся базовым университетом этого совета, определяя уровень преподавания физики в стране. Н.М. Кожевников уделял много времени организации работы этого совета, подготовке программы и материалов к заседаниям Президиума НМС, Пленумов НМС. В эти годы Николай Михайлович принимает активное участие в работе многих научно-методических всероссийских и международных конференций, становится членом их организационных и программных комитетов, выступает с до-

кладами на пленарных и секционных заседаниях.

С 2009 года Николай Михайлович являлся председателем Государственной аттестационной комиссии (ГАК) физического факультета РГПУ им. А.И. Герцена. Свои обязанности он выполнял с присущей ему добросовестностью и подходил очень ответственно к организации работы комиссии. Зачастую заседания ГАК переходили в настоящие научные дискуссии, на которых Николай Михайлович отличался своими обширными познаниями не только в области физики, но и в общечеловеческой культуре, а также в области педагогических технологий.

Через всю свою жизнь Николай Михайлович пронес любовь к классической музыке, сам часто выступал с концертными номерами на мероприятиях различного уровня. Его последнее выступление состоялось в Белом (актовом) зале Политехнического университета в декабре 2014 года на вечере, посвященном юбилею первого директора Политехнического института князя А.Г. Гагарина.

За многолетнюю научно-педагогическую и общественную работу Николай Михайлович был отмечен многочисленными благодарностями по Политехническому университету. Указом Президента РФ профессору Н.М. Кожевникову в 2004 году было присвоено почетное звание «Заслуженный работник высшей школы Российской Федерации». В 2007 году, в год его 60-летия, Николаю Михайловичу было присвоено почетное звание «Заслуженный профессор СПбГПУ». В 2013 году он становится лауреатом Премии Правительства Санкт-Петербурга «За выдающиеся успехи в области высшего и среднего профессионального образования». Он являлся членом Российского оптического общества имени Д.С. Рождественского. Н.М. Кожевников – автор более 120 научных трудов, 3 изобретений и 7 учебных пособий, главными из которых являются «Концепции современного естествознания» (5 изданий), «Физика. Интернет-тестирование базовых знаний», «Концепции современного естествознания. Интернет-тестирование базовых знаний»,

«Демонстрационные эксперименты по общей физике».

Наиболее ярко высокие человеческие качества Николая Михайловича — доброжелательность, интеллигентность, широкая научная эрудиция — проявлялись в такой неотъемлемой части жизнедеятельности ученого и педагога, как написание отзывов на дипломные работы, магистерские, кандидатские и докторские диссертации. Молодые ученые, аспиранты, соискатели охотно обращались к Н.М. Кожевникову за рецензиями и отзывами оппонента и всегда получали объективную и высококвалифицированную оценку своих трудов и достижений. Зачастую общение соискателя и оппонента перерастало в многолетнюю творческую дружбу. Многочисленные отзывы и рецензии, написанные Николаем Михайловичем за много лет, несомненно,

представляют собой самостоятельную часть его большого научного наследства.

Много лет Н.М. Кожевников был членом редколлегии нашего журнала, принимая активное участие в рецензировании статей по физике, представленных к опубликованию. Его рецензии отличались глубоким проникновением в суть затрагиваемых проблем, они повышали авторитет нашего журнала.

Вся жизнь Николая Михайловича была проведена в постоянном труде на благо отечественной науки, педагогики и своей Alma Mater. Светлая память о нем как талантливом ученом, незаурядном педагоге и неординарной творческой личности будет оставаться в сердцах тех, кто имел счастье общаться с ним, вместе работать, готовить специалистов и достигать новых научных результатов.



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Безпрозванный И.Б.	48	Коновалов А.В.	86
Бердников Я.А.	66	Копп В.Я.	16
Большакова А.В.	48	Корбан С.А.	48
Брагинец Ю.П.	66	Кузнецов И.А.	66
Вежлев Е.О.	66	Куканова Е.О.	48
Воронин В.В.	66	Ласица М.В.	66
Гаврикова Т.А.	98	Лобанов И.Д.	81
Гайнуллина А.Н.	48	Семенихин С.Ю.	66
Денисов А.В.	81	Федоров В.В.	66
Жемков В.А.	48	Фирсов Д.А.	98
Заморёнов М.В.	16	Game D.N.	41
Зыков В.А.	98	Ingale N.B.	41
Иванов В.К.	109	Omanwar S.K.	41
Ипатов А.Н.	86	Sakhare Y.S.	29
Карташов А.Л.	16	Thakare N.R.	29
Клюкин В.Ю.	16	Ubale A.U.	29
Кожанов Д.А.	7		

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 1 (237) 2016

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. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – 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 15.03.2016. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 14,02. Уч.-изд. л. 14,02. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
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 сдвоенными 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 международной системе 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. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (<http://journals.spbstu.ru>). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

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.

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 – Наталья Александровна
или по e-mail: physics@spbstu.ru**