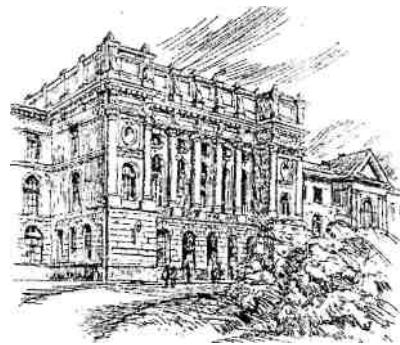


1 (73) 2009



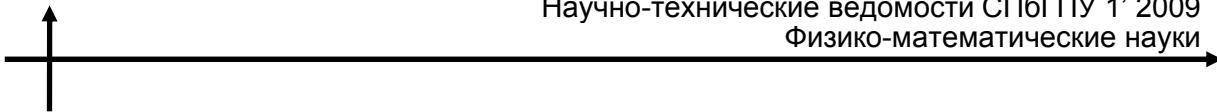
Научно-технические ведомости СПбГПУ

Физико-математические науки

Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета

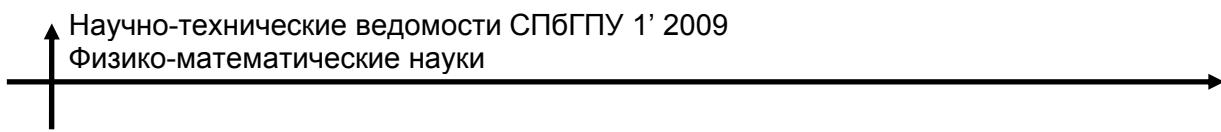
Федеральное агентство по образованию

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет



СОДЕРЖАНИЕ

<i>Президенту Санкт-Петербургского государственного политехнического университета академику Ю.С. Васильеву 80 лет</i>	7
Теоретическая физика	
П.И. Яцышин, В.К. Иванов, Р.Г. Полозков, А.В. Соловьев. Структура электрон-позитронных кластеров. Приближение Хартри – Фока	9
А.Н. Ипатов. Нелинейное резонансное фотопоглощение металлическими кластерами в сильном лазерном поле	17
Физика молекул	
С.В. Валуева, Л.Н. Боровикова. Самоорганизация и морфологические характеристики селенсодержащих наноструктур на основе сильных поликислот	29
Т.П. Степанова, А.С. Артамонова, В.М. Капралова. Дипольный момент и структура целлюбиозы в полярных растворителях с водородной связью	35
Физика конденсированного состояния	
А.Ф. Березняк. Мониторинг качества гетероперехода $AlGaN/GaN$ с помощью длинноканального полевого гетеротранзистора	43
М.А. Зеликман. Пиннинг линейных вихрей в трехмерной упорядоченной джозефсоновской среде	48
Л.Г. Герчиков, Ю.А. Мамаев, Ю.П. Яшин, В.В. Кузьмичев. Источник поляризованных электронов на основе напряженной сверхрешетки $AlInGaAs/AlGaN$	59
О.В. Александров, В.В. Козловский. Диффузионно-реакционная модель взаимодействия силицидообразующего металла с карбидом кремния	64
О.С. Комарова, О.А. Мартынова, Н.В. Агеев, В.Э. Гасумянц. Модификация кинетических коэффициентов с помощью легирования кальцием в системе $Y_{1-x}Ca_xBa_{1,5}La_{0,5}Cu_3O_y$	71
С.В. Кузьмин, Н.Т. Сударь. Влияние материала подложки на переходы диэлектрик – проводник в тонких пленках полианилина	77
В.Г. Федотов, Т.А. Уклеев, А.В. Селькин. Резонансное брэгговское отражение света от трехмерных фотонных кристаллов в режиме многоволновой дифракции	80
Математическое моделирование физических процессов	
В.И. Иордан, Ю.В. Лукьянова, Д.А. Мершалов. Анализ механизма лучистого теплообмена и моделирование эволюции ультрадисперсной высокопористой структуры СВС-материалов в процессе СВ-синтеза	86
В.И. Иордан, Д.А. Мершалов. Исследование структуры температурного профиля горения в нелинейной пористой среде СВ-синтеза с помощью параллельных вычислений	94



Научно-технические ведомости СПбГПУ 1' 2009
Физико-математические науки

- Д.Е. Онопко. Метод конечных разностей высокого порядка и его использование для исследования кластеров ковалентных кристаллов 101

Приборы и техника физического эксперимента

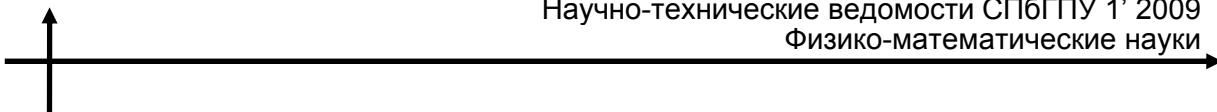
- Я.А. Бердников, А.В. Головин, Д.О. Спирин. Реализация метода дуальной энергии в рентгеновской томографии 111

Биофизика и медицинская физика

- А.Ю. Сетейкин, И.В. Красников, А.П. Попов, А.Э. Фотиади. Температурная реакция содержащих наночастицы биотканей на облучение светом УФ-А и УФ-В диапазонов 115

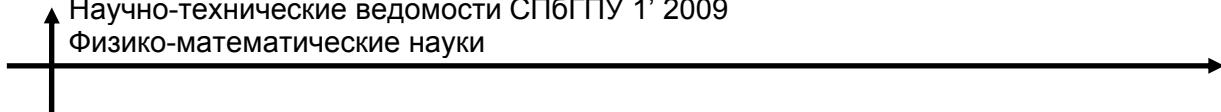
- Сведения об авторах, контактные данные 121

- Аннотации, ключевые слова 124



CONTENTS

<i>On the occasion of the 80^{-th} birthday of Yu.S. Vasil'ev, a member of the Russian Academy of Sciences, the President of the SPbSPU.....</i>	7
Theoretical physics	
P.I. Yatsyshin, V.K. Ivanov, R.G. Polozkov, A.V. Solov'yov. <i>The structure of electron-positron clusters. Hartree – Fock approximation</i>	9
A.N. Ipatov. <i>Nonlinear resonance photoabsorption by metallic clusters in an intense laser field</i>	17
Molecular physics	
S.V. Valueva, L.N. Borovikova. <i>Self-organization and morphological characteristics of the selenium-containing nanostructures on the basis of strong polyacids</i>	29
T.P. Stepanova, A.S. Artamonova, V.M. Kapralova. <i>Dipole moment and structure of cellobiose in polar solvents with hydrogen bond</i>	35
Condensed matter physics	
A.F. Bereznyak. <i>AlGaN/GaN heterojunction quality monitoring with large-area heterostructure field-effect transistor</i>	43
M.A. Zelikman. <i>Line vortex pinning and their spacing in a 3D ordered Josephson medium</i>	48
L.G. Gerchikov, Yu.A. Mamaev, Yu.P. Yashin, V.V. Kuz'michev. <i>Spin polarized electron source based on strained AlInGaAs/AlGaN superlattice</i>	59
O.V. Aleksandrov, V.V. Kozlovsky. <i>Diffusion-reaction model of the interaction of silicide-forming metal with the silicon carbide</i>	64
O.S. Komarova, O.A. Martynova, N.V. Ageev, V.E. Gasumyants. <i>Modification of the transport coefficients under calcium doping in the $Y_{1-x}Ca_xBa_{1,5}La_{0,5}Cu_3O_y$ system</i>	71
S.V. Kuzmin, N.T. Sudar. <i>The influence of the substrate material on the transitions dielectric-conductor in thin films of polyaniline</i>	77
V.G. Fedotov, T.A. Ukleev, A.V. Sel'kin. <i>Resonant Bragg reflection of light from 3D photonic crystals in the multiple-wave diffraction regime</i>	80
Simulation of physical processes	
V.I. Jordan, Yu.V. Lukianova, D.A. Merschalov. <i>The analysis of radiant heat exchange mechanism and modelling of evolution of ultradispersive high-porous structure of SHS-materials in the course of SH-synthesis</i>	86
V.I. Jordan, D.A. Merschalov. <i>Research of the temperature profile structure of combustion in the nonlinear porous medium of SH-synthesis by means of parallel calculations</i>	94



D.E. Onopko. *Higher-order finite-difference method and its application to investigation of clusters of covalent crystals* 101

Experimental technique and devices

Ya.A. Berdnikov, A.V. Golovin, D.O. Spirin. *Realization of dual energy method in X-rays tomography* 111

Biophysics and medical physics

A.Yu. Seteikin, I.V. Krasnikov, A.P. Popov, A.E. Fotiadis. *Temperature reaction of the nanoparticle-containing biotissue caused by UV-A and UV-B irradiation* 115

About the authors, contact information 121

Abstracts, key words 124

Кузьмин С.В., Сударь Н.Т. ВЛИЯНИЕ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА ПЕРЕХОДЫ ДИЭЛЕКТРИК – ПРОВОДНИК В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИАНИЛИНА.

Рассмотрены особенности перехода диэлектрик – проводник в тонких пленках полианилина. Показано, что в зависимости от материала подложки такой переход может происходить при различных значениях рН дипирирующего раствора.

ДИЭЛЕКТРИКИ. ПРОВОДЯЩИЕ ПОЛИМЕРЫ. ПОЛИАНИЛИН. ПЛЕНКИ.

Онопко Д.Е. МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА И ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ КОВАЛЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ.

Предложенная ранее методика учета граничных условий для кластеров кристаллов со значительной ковалентной составляющей химической связи реализована на основе метода конечных разностей высокого порядка. В кластерном приближении исследуются особенности электронной структуры и геометрического строения регулярных кристаллов (GaAs, Si), а также соответствующих примесных центров замещения (GaAs:Si, Si:P, Si:S). Рассматривается стабильность дефекта и характер его возможной реконструкции, а также влияние изменения заряда центра на его устойчивость. Получено достаточно хорошее соответствие с результатами эксперимента и кристаллического подхода (метод расширенной ячейки).

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ КЛАСТЕРОВ КОВАЛЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ. МЕТОД КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА. ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ В КРИСТАЛЛАХ. РЕКОНСТРУКЦИЯ.

Сетейкин А.Ю., Красников И.В., Попов А.П., Фотиади А.Э. ТЕМПЕРАТУРНАЯ РЕАКЦИЯ СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ БИОТКАНЕЙ НА ОБЛУЧЕНИЕ СВЕТОМ УФ-А- И УФ-В-ДИАПАЗОНОВ.

На основе разработанной математической модели кожи с наночастицами диоксида титана диаметрами 62 и 122 нм получено и проанализировано распределение плотности поглощенной энергии по глубине кожи при ее УФ-облучении на длинах волн 310 и 400 нм. Установлено, что увеличение поглощения в роговом слое кожи (слое с частицами) приводит к его нагреву. Показано, что температура на поверхности кожи с учетом теплового стока на границе раздела кожа – воздух повышается до 42 °С.

НАНОЧАСТИЦЫ. БИОТКАНИ. УФ-ОБЛУЧЕНИЕ. КОЖА. РОГОВОЙ СЛОЙ. ЭПИДЕРМИС.

Степанова Т.П., Артамонова А.С., Капралова В.М. ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ И СТРУКТУРА ЦЕЛЛОБИОЗЫ В ПОЛЯРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ С ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ.

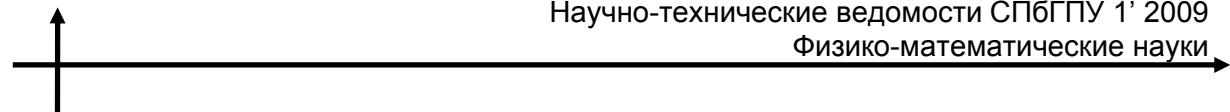
Представлены результаты исследования дипольных моментов целлобиозы в разбавленных растворах в диметилацетамиде и воде. Установлено влияние природы растворителя и температуры на величины дипольных моментов целлобиозы; показана роль водородных связей в формировании молекулы целлобиозы и структуры сольватов.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ. ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ. РАСТВОР. СОЛЬВАТ. ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ. ЦЕЛЛОБИОЗА. ДИМЕТИЛАЦЕТАМИД. ВОДА.

Федотов В.Г., У克莱ев Т.А., Селькин А.В. РЕЗОНАНСНОЕ БРЭГГОВСКОЕ ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ОТ ТРЕХМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ В РЕЖИМЕ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ.

Исследованы особенности распространения (с учетом отражения и преломления) электромагнитных волн в трехмерных фотонных кристаллах (ФК), обладающих высоким диэлектрическим контрастом, в условиях, когда становится существенным режим многоволновой брэгговской дифракции. Проведено детальное со-поставление измеренных и рассчитанных контуров отражения с энергетическим спектром собственных мод пространственно ограниченного ФК. Показано, что дублетная структура пиков брэгговского отражения, проявляющаяся в некотором интервале углов наклонного падения света, формируется за счет резонансного возбуждения дополнительных мод, обусловленных дифракцией света на наклонных по отношению к поверхности ФК кристаллических плоскостях.

ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ. МНОГОВОЛНОВАЯ ДИФРАКЦИЯ. БРЭГГОВСКОЕ ОТРАЖЕНИЕ.



Яцышин П.И., Иванов В.К., Полозков Р.Г., Соловьев А.В. СТРУКТУРА ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННЫХ КЛАСТЕРОВ. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ – ФОКА.

Изучен малоисследованный физический объект – конечная пространственно-ограниченная система из одинакового числа электронов и позитронов. Рассмотрены свойства электрон-позитронных кластеров в зависимости от их размера (до ста пар частиц). Для расчетов использовано приближение Хартри – Фока, в котором система связана нелокальным обменным взаимодействием, включая самодействие. В результате самосогласованной процедуры, учитывающей взаимодействия с частицами одноименного и противоположного зарядов, получен базис одночастичных волновых функций.

КЛАСТЕР. МНОГОЧАСТИЧНАЯ ЗАДАЧА. ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ – ФОКА. МОДЕЛЬ ЖЕЛЕ. ОПТИМИЗИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ЖЕЛЕ. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ.

ABSTRACTS KEY WORDS

Aleksandrov O.V., Kozlovsky V.V. DIFFUSION-REACTION MODEL OF THE INTERACTION OF SILICIDE-FORMING METAL WITH THE SILICON CARBIDE.

A quantitative model of the interfacial interaction of a silicide-forming metal – nickel with single-crystal silicon carbide has been developed on the basis of interdiffusion of components with account of the Kirkendall effect and the volume reactions of the formation of silicides. The model describes satisfactorily the basic features of component redistribution in the system Ni-SiC under bombardment by protons at elevated temperatures.

SILICIDE-FORMING METAL. SILICON CARBIDE. OHMIC CONTACTS. DIFFUSION EQUATIONS.

Berdnikov Ya.A., Golovin A.V., Spirin D.O. REALIZATION OF DUAL ENERGY METHOD IN X-RAYS TOMOGRAPHY.

The solution of a problem of errors minimization in X-rays tomography by means of a dual energy method is proposed. It is shown that this method allows one to determine simply the object composition and its space structure in comparison with the X-rays tomography.

X-RAYS TOMOGRAPHY. DUAL ENERGY METHOD. MODELING.

Bereznyak A.F. AlGaN/GaN HETEROJUNCTION QUALITY MONITORING WITH LARGE-AREA HETEROSTRUCTURE FIELD-EFFECT TRANSISTOR.

A new method of AlGaN/GaN heterojunction quality monitoring is proposed for manufacturing of powerful heterostructure field-effect transistors (HFETs).

METHOD. MEASUREMENT. AlGaN/GaN. HETEROJUNCTION. HETEROSTRUCTURE. HFET. QUALITY.

Fedotov V.G., Ukleev T.A., Sel'kin A.V. RESONANT BRAGG REFLECTION OF LIGHT FROM 3D PHOTONIC CRYSTALS IN THE MULTIPLE-WAVE DIFFRACTION REGIME.

The propagation features of electromagnetic waves in 3D photonic crystals (PhC) possessing high dielectric contrast are studied with an account of reflection and refraction of light for the case when the multiple-wave Bragg diffraction regime is of great importance. Comparison of measured and calculated reflectance contours with the energy spectrum of eigenmodes of spatially finite PhC is performed in details. The doublet structure of the Bragg reflectance peaks appeared over some range of incidence angles is shown to be shaped due to the additional eigenmodes which are resonantly excited by diffraction of light on the crystal planes inclined to the lateral ones.

PHOTONIC CRYSTALS. MULTIPLE DIFFRACTION. BRAGG REFLECTION.

Gerchikov L.G., Mamaev Yu.A., Yashin Yu.P., Kuz'michev V.V. SPIN POLARIZED ELECTRON SOURCE BASED ON STRAINED AlInGaAs/AlGaAs SUPERLATTICE.

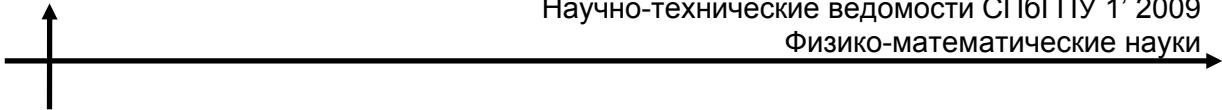
The optimized AlInGaAs/AlGaAs superlattice composition with strained quantum wells has been developed for the polarized electron source (application). The choice of hetero-layer composition and thickness is based on the calculations of superlattice band energy spectrum, photoabsorption spectrum and transport properties. The electron emission from the developed photocathodes demonstrates the maximal polarization to be above 90 %.

POLARIZATION. PHOTOEMISSION. SUPERLATTICE.

Ipatov A.N. NONLINEAR RESONANCE PHOTOABSORPTION BY METALLIC CLUSTERS IN AN INTENSE LASER FIELD.

A theoretical study of non-linear effects during the interaction of microscopic metallic clusters with the intense laser field is presented. The theoretical model, based on the separation of motion of the center of mass and internal excitations, is proposed. The mechanism of the resonance line shift in a nonlinear regime is investigated. The resonance photoabsorption cross sections and the angular distributions for the photoelectrons are calculated for various laser field intensities.

RESONANCE PHOTOABSORPTION. NONLINEAR EFFECTS. MICROSCOPIC CLUSTERS. LASER FIELD.



Jordan V.I., Lukianova Yu.V., Merschalov D.A. THE ANALYSIS OF RADIANT HEAT EXCHANGE MECHANISM AND MODELLING OF EVOLUTION OF ULTRADISPERSIVE HIGH-POROUS STRUCTURE OF SHS-MATERIALS IN THE COURSE OF SH-SYNTHESIS.

The role of radiation heat exchange mechanism in the process of SH-synthesis of ultradispersive high-porous structure of SHS-materials is considered; the technique of structure modeling for particles packing in a mixture of metal powders and their evolution in the process of SH-synthesis is represented. The estimations of porosity for modeled structures of particle mixtures are confirmed by testing by means of "VideoTest" system.

ANALYSIS. RADIANT HEAT EXCHANGE. SELF-EXTENDING HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS (SHS). STRUCTURE. PACKING. POROSITY. MODELLING. EVOLUTION.

Jordan V.I., Merschalov D.A. RESEARCH OF THE TEMPERATURE PROFILE STRUCTURE OF COMBUSTION IN THE NONLINEAR POROUS MEDIUM OF SH-SYNTHESIS BY MEANS OF PARALLEL CALCULATIONS.

The mathematical model of combustion process in terms of quasilinear equation of heat conductivity with exothermal source of heat generation in the porous medium of SH-synthesis is considered; the parallel algorithm of its numerical decision is developed. Computer simulation of modes of combustion with sharpening in the nonlinear porous medium has allowed finding out dynamics of dissipative structures in the temperature profile.

COMBUSTION PROFILE. NONLINEAR POROUS MEDIUM. QUASILINEAR EQUATION OF HEAT CONDUCTIVITY. PARALLEL CALCULATIONS.

Komarova O.S., Martynova O.A., Ageev N.V., Gasumyants V.E. MODIFICATION OF THE TRANSPORT COEFFICIENTS UNDER CALCIUM DOPING IN THE $Y_{1-x}Ca_xBa_{1.5}La_{0.5}Cu_3O_y$ SYSTEM.

The results of a comparative study of the temperature and concentration dependences of the resistivity, thermo-emf, Hall and Nernst – Ettingshausen coefficients in the $Y_{1-x}Ca_xBa_{1.5}La_{0.5}Cu_3O_y$ ($x=0\div0.4$) system are presented. On the basis of narrow-band model the complex quantitative analysis of the obtained experimental data is performed; the parameters of the band spectrum and charge-carrier system in the investigated samples are determined; the character of their variations with increasing calcium content is analysed.

HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS. CRITICAL TEMPERATURE. ELECTRON TRANSPORT PHENOMENA. BAND-SPECTRUM. DOPING.

Kuzmin S.V., Sudar N.T. THE INFLUENCE OF THE SUBSTRATE MATERIAL ON THE DIELECTRIC – CONDUCTOR TRANSITIONS IN THIN FILMS OF POLYANILINE.

The peculiarities of the dielectric – conductor transition in the thin films of polyaniline are considered. It is shown that such a transition in thin films can occur at various pH values of the solution depending on material of a substrate.

DIELECTRICS. CONDUCTIVE POLYMERS. POLYANILINE. FILMS

Onopko D.E. HIGHER-ORDER FINITE-DIFFERENCE METHOD AND ITS APPLICATION TO INVESTIGATION OF CLUSTERS OF COVALENT CRYSTALS.

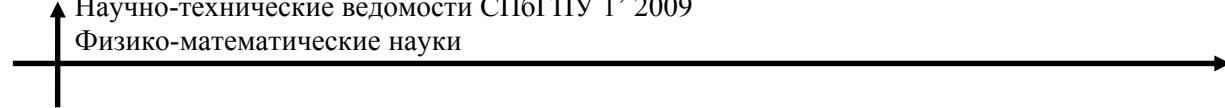
The previously suggested procedure for the account of boundary conditions for clusters of covalent crystals has been realized on the basis of high-order finite-difference method. In cluster approximation the peculiarities of the electron structure and space structure of regular crystals (GaAs, Si) as well as the impurity centers (GaAs:Si, Si:P, Si:S) are studied. We consider the defect stability, its probable reconstruction and also the influence of the center charge on its stability. The reasonably good agreement with the results of experiment as well as with the conclusions of crystalline approach (expanded cell method) has been obtained.

BOUNDARY CONDITIONS FOR CLUSTERS OF COVALENT CRYSTALS. HIGHER-ORDER FINITE-DIFFERENCE METHOD. IMPURITY CENTERS IN CRYSTALS. RECONSTRUCTION.

Seteikin A.Yu., Krasnikov I.V., Popov A.P., Fotiadis A.E. TEMPERATURE REACTION OF THE NANOPARTICLE-CONTAINING BIOTISSUE CAUSED BY UV-A AND UV-B IRRADIATION.

On the basis of developed mathematical model of skin containing TiO₂-nanoparticles (62 and 122 nm in diameter) the skin-depth-distribution of the absorbed energy density of UV-irradiation at 310 and 400 nm wavelengths has been obtained and analysed.

NANOPARTICLES. BIOTISSUE. UV-IRRADIATION. SKIN. SURFACE LAYER. EPIDERMIS.



Stepanova T.P., Artamonova A.S., Kapralova V.M. DIPOLE MOMENT AND STRUCTURE OF CELLOBIOSE IN POLAR SOLVENTS WITH HYDROGEN BOND.

The dipole moments of cellobiose in dilute dimethylacetamide and aqueous solutions have been studied. The influence of the temperature and the nature of a solvent on a value of the molecular dipole moment of cellobiose were determined. The obtained data clarify the effects of hydrogen bonds on the molecular conformation of cellobiose and on the structure of solvates.

DIELECTRIC PERMITTIVITY. DIPOLE MOMENT. SOLUTION. SOLVATE. HYDROGEN BOND. CELLOBIOSE. DIMETHYLACETAMIDE. WATER.

Valueva S.V., Borovikova L.N. SELF-ORGANIZATION AND MORFOLOGICAL CHARACTERISTICS OF THE SELENIUM-CONTAINING NANOSTRUCTURES ON THE BASIS OF STRONG POLYACIDS.

This paper represents the results of the study, carried out by the methods of molecular optics, of nanostructures formed in a process of reduction of ionic selenium in selenite-ascorbate redox system in aqueous solutions of high molecular polymeric stabilizers of anion type. We conclude that due to adsorption of macromolecules of strong acids on the nanoparticles of selenium the spherical nanoparticles of similar morphological types with similar dimensions, densities and widths of a polymer shell are formed.

NANOSTRUCTURES. MOLECULAR OPTICS. IONIC SELENIUM. REDOX SYSTEM. HIGH-MOLECULAR STABILIZERS.

Yatsyshin P.I., Ivanov V.K., Polozkov R.G., Solov'yov A.V. THE STRUCTURE OF ELECTRON-POSITRON CLUSTERS. HARTREE – FOCK APPROXIMATION.

The electron-positron cluster, a new physical object is investigated. In the metallic phase clusters considered consist of equal numbers of delocalized electrons and positrons bounded by attractive Coulomb potential and the potential of particles mutual polarization. We focus on investigating the cluster properties dependent on their size (up to one hundred electron-positron pairs). Our calculations have been carried out within the Hartree – Fock approximation in which clusters are bounded by nonlocal exchange interactions. The set of the basis wave functions has been obtained by means of the self-consistent procedure taking into account the interactions between cluster particles of both similar and opposite charges.

CLUSTER. MANY-BODY PROBLEM. HARTREE – FOCK APPROXIMATION. JELLUM MODEL. OPTIMIZED JELLUM MODEL. MANY ELECTRON CORRELATIONS.

Zelikman M.A. LINE VORTEX PINNING AND THEIR SPACING IN A 3D ORDERED JOSEPHSON MEDIUM.

The method of solution of the system of finite-difference equations for interacting line vortices in a three-dimensional ordered Josephson medium is proposed. The critical values of the pinning parameter at which two vortices keep their given spacing and the maximum pinning forces for different configurations are calculated. It is shown that the pinning force decreases near the parallel vortices and increases near the antiparallel ones.

PINNING. JOSEPHSON MEDIUM. LINE, PARALLEL AND ANTIPARALLEL VORTICES. CRITICAL VALUE.