



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

2(242) 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;
Каприлова 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;
Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Привалов В.Е., 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.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2016

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics
and Mathematics

2(242) 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.
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;
V.E. Privalov – 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-tekhnicheskie 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.

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2016

Содержание

Физика конденсированного состояния

Романов Н.М., Захарова И.Б. Состав и структура тонких пленок на основе металлопорфириновых комплексов	9
Слуцкер А.И., Поликарпов Ю.И., Каров Д.Д. Энергетика упругих деформаций в полимерных нанокристаллах	19
Панькин Д.В., Смирнов М.Б. Возможность применения спектроскопии комбинационного рассеяния света для оценки толщины интерфейсного слоя в сверхрешетках AlN/GaN.....	27
Неласов И.В., Липницкий А.Г. Исследование диффузии по межфазной границе медь – ниобий методом молекулярной динамики (статья на английском языке)	37
Картамышев А.И., Дат Д.В., Липницкий А.Г. Теоретическое исследование взаимодействия между примесями легких атомов и вакансиями в решетках титана и алюминия (статья на английском языке).....	44

Физическая электроника

Павлов В.В., Краснова Н.К. Построение полевых структур для транспортировки потоков заряженных частиц	55
Кораблев В.В., Дубов В.В. Формирование угловых зависимостей неупругорассеянных электронов при их квантовом транспорте вблизи поверхности твердого тела.....	65

Биофизика и медицинская физика

Егорова П.А., Власова О.Л., Безпрозванный И.Б. Ограничение импульсной активности клеток Пуркинье мозжечка лабораторных мышей путем активации SK-каналов <i>in vivo</i>	72
---	----

Физика атмосферы

Октябрьский В.П. Новый взгляд на парниковый эффект	82
---	----

Математика

Хохлюк В.И. Принципы построения дизъюнктивных сечений	87
Пастухов А.А., Прокофьев А.А. Применение самоорганизующихся карт Кохонена для формирования представительской выборки при обучении многослойного персептрона	95
Березин С.В. Об аналитических свойствах характеристической функции процесса, заданного системой стохастических дифференциальных уравнений.....	108

Механика

Шарифулин А.Н., Полудницин А.Н. Численное определение границ существования аномального конвективного течения в наклоняемом прямоугольном цилиндре	116
Тихомиров В.В. Полубесконечная трещина моды III в биматериальном клине.....	126

Радиофизика

Лобанов И.Д., Денисов А.В. Точное аналитическое решение задачи о среднем числе выбросов узкополосного гауссовского случайного процесса	136
---	-----

Хроника

Вадим Константинович Иванов (к семидесятилетию со дня рождения)	141
---	-----

Авторский указатель	145
---------------------------	-----

Contents

Condensed matter physics

Romanov N.M., Zakharova I.B. <i>The composition and the structure of thin films based on metal porphyrin complexes.....</i>	9
Slutsker A.I., Polikarpov Yu.I., Karov D.D. <i>Elastic strain energy behavior in the polymer nanocrystals.....</i>	19
Pankin D.V., Smirnov M.B. <i>The applicability of Raman spectroscopy for estimation of interfaces thickness in the AlN/GaN superlattices.....</i>	27
Nelasov I.V., Lipnitskii A.G. <i>The study of Cu/Nb interface diffusion using molecular dynamics simulation</i>	37
Kartamyshev A.I., Dat D.V., Lipnitskii A.G. <i>The interactions between light impurity atoms and vacancies in titanium and aluminum metals: a DFT study</i>	44

Physical electronics

Pavlov V.V., Krasnova N.K. <i>Synthesis of electrostatic fields for transportation of charged particle beams</i>	55
Korablev V.V., Dubov V.V. <i>The formation of the angular dependences of the inelastically scattered electrons by their quantum transport near the surface of a solid.....</i>	65

Biophysics and medical physics

Egorova P.A., Vlasova O.L., Bezprozvanny I.B. <i>The limitation of the Purkinje cell's impulse activity in the laboratory mice's vermis by in vivo activation of SK channels</i>	72
---	----

Atmosphere physics

Oktyabrskiy V.P. <i>A new opinion of the greenhouse effect</i>	82
---	----

Mathematics

Khokhlyuk V.I. <i>Principles for constructing the disjunctive cuts</i>	87
Pastukhov A.A., Prokofiev A.A. <i>Kohonen self-organizing map application to representative sample formation in the training of the multilayer perceptron.....</i>	95
Berezin S.V. <i>On analytic characteristic functions and processes governed by SDEs.....</i>	108

Mechanics

Sharifulin A.N., Poludnitsin A.N. <i>The borders of existence of anomalous convection flow in the inclined square cylinder: numerical determination.....</i>	116
Tikhomirov V.V. <i>A semi-infinite crack of mode III in the bimaterial wedge</i>	126

Radiophysics

Lobanov I.D., Denisov A.V. <i>The exact analytical solution of the problem on the average number of spikes of the narrowband Gaussian stochastic process</i>	136
---	-----

Chronicle

<i>Vadim K. Ivanov (on the occasion of his 70th birthday)</i>	141
<i>Author index</i>	145

DOI: 10.5862/JPM.242.1

УДК: 538.951

Н.М. Романов, И.Б. Захарова

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

СОСТАВ И СТРУКТУРА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОПОРФИРИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ

Исследованы пленки на основе металлопорфириновых комплексов CuTPP, ZnTPP и FeClTPP (TPP — тетрафенилпорфирин), полученные вакуумным напылением в квазиравновесных условиях. Структуру и состав объектов определяли методом растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного микроанализа. Установлено, что при конденсации пленка CuTPP образует нанонити диаметром около 20 нм и длиной до 5 мкм; для пленок же ZnTPP и FeClTPP выявлены особенности их структуры и морфологии поверхности. Предложена теоретическая интерпретация полученных данных, которая позволяет связать структуру пленок с их составом.

ОРГАНИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА, ТОНКАЯ ПЛЕНКА, МЕТАЛЛОПОРФИРИНОВЫЙ КОМПЛЕКС.

Введение

В последнее время органические материалы находят все большее применение в микро- и оптоэлектронике для создания свето- и фотодиодов, сенсорных датчиков, радиочастотных меток и других устройств. При этом особый интерес вызывают соединения, которые могут иметь над классическими полупроводниками некоторые преимущества: простоту и дешевизну способов получения структур в массовом производстве, возможность создания гибких и прозрачных устройств, а также модификации свойств и варьирования зонной структуры молекул [1].

Сочетание органических материалов позволяет создавать донорно-акцепторные комплексы, молекулярные и объемные гетеропереходы, необходимые в органической фотонике и наноэлектронике [2]. Среди таких материалов металлопорфирины занимают важное место и считаются перспективными для указанных целей [3].

Порфирины — это производные порфина $C_{20}H_{14}N_4$, молекулы которого образованы четырьмя пиррольными кольцами, связанными между собой метинными мостиками. Порфирины легко образуют металлокомплексы (хелаты), при этом в центр тетрапиррольного макроцикла встраивается ион металла, замещая два атома водорода. Макроциклическая структура с большой степенью π -сопряжения порфиринов обуславливает высокую степень поглощения света в УФ и видимой областях спектра, а также обеспечивает порфиринам и их производным хорошие донорные свойства [4]. Металлопорфирины, полученные методом осаждения из растворов, проявляют способность к супрамолекулярной самоорганизации [5], причем тип самоорганизации конечной структуры зависит от природы растворителя [5]. Самоорганизация может происходить за счет различных межмолекулярных взаимодействий (силы Ван-дер-Ваальса, (π - π)-стэкинг, водородная связь), а в конденсированном состоянии приводить

к формированию молекулярных ансамблей или агрегатов. Их люминесцентные, фотохимические и другие физические свойства отличаются от мономолекулярных конденсатов, что необходимо учитывать при разработке приборных структур.

Основной интерес с точки зрения практического применения органических материалов вызывают тонкие пленки, получаемые промышленными методами [6]. В настоящее время существует несколько наиболее технологичных подходов к созданию тонких пленок из различных органических материалов. Такие пленки можно получать путем термического напыления молекул в техническом вакууме с использованием различных испарителей, нанесения полимерных пленок из центрифуги (центрофугирование), методом полиионной сборки в растворе, применяя технологию Ленгмюра — Блоджетт, и прочими способами. Однако в пленках, полученных методом Ленгмюра — Блоджетт, самоорганизация может приводить к появлению 2D- и 3D-агрегатов и потере функциональных свойств [7]. Это означает, что одной из нерешенных технологических задач является разработка прецизионного и воспроизводимого метода создания органических тонких пленок с заданной структурой.

В настоящее время остаются практически неизученными процессы самоорганизации, их влияние на структуру пленок, изменения состава порфиринов-содержащих тонких пленок, полученных методом вакуумного напыления. Анализ указанных процессов и является целью настоящей работы.

Методика эксперимента

С целью изучения структуры и состава тонких металлопорфириновых пленок Me^{II} мезотетрафенилпорфиринов (MeTPP), они были получены методом вакуумного напыления (модифицированным методом горячей стенки), в квазиравновесных условиях при интенсивном обмене между конденсатом вещества и его паровой фазой. Эти условия, в отличие от метода напыления из молекулярного пучка, способствуют самоорганизации и позволяют формироваться упорядоченным структурам органи-

ческого комплекса. К достоинствам этого метода относятся однородность пленок, полученных в одном технологическом цикле, хорошая воспроизводимость свойств пленок, полученных при одинаковых технологических режимах. Известно, что порфирины стабильны вплоть до высоких температур, значительно превосходящих температуру сублимации, которая лежит в диапазоне 500 — 700 К (в зависимости от типа металла).

В качестве исходной шихты нами использовали коммерчески доступные порошки химических соединений CuTPP , ZnTPP (фирмы Sigma-Aldrich), а также координированный комплекс $\text{Fe}^{\text{III}}\text{ClTPP}$ (получен в Институте химической физики (ИХФ) РАН, г. Москва). Выбор объектов исследований определялся уже известным широким применением тетрафенилпорфиринов меди и цинка в органической электронике и других сферах. Новый комплекс порфирина трехвалентного железа с координированным атомом хлора, синтезированный в ИХФ РАН, был выбран как слабо изученный объект с возможными интересными магнитными свойствами.

Пленки толщиной 200 — 600 нм наносились в вакууме (10^{-6} Торр) на различные подложки:

стекло с покрытием оксида индия-олова (ITO) (аморфные проводящие);

кремний (111) с дырочной электропроводностью, легированный бором (КДБ-10) (кристаллические полупроводниковые);

свежий скол слюды, КВг (диэлектрические).

Значения температуры испарителя и подложки подбирались с учетом поставленной задачи — способствовать процессам самоорганизации при росте пленок. При этом температура конденсации пленок должна была быть максимально приближенной к температуре испарителя и составлять от нее более двух третей. Несмотря на высокую температуру подложки, из-за высокой плотности газодинамического потока пара скорость роста пленок была довольно высокой, около 2 нм/с, что позволяло осуществлять процесс получения чистых пленок не в сверхвысоком, а в техническом вакууме.

Таблица 1

Состав и условия получения исследованных объектов

№ образца	Состав	Масса, мг	Подложка	T_{ev} , К	T_{sub} , К	t_{ev} , мин
1	CuTPP в растворе толуола	—	—	—	—	—
175	CuTPP	2,0	ITO, КДБ-10, KBr	673	468	3
176	CuTPP	3,0	ITO, КДБ-10	673	470	4
178	FeClTPP	3,0	ITO, КДБ-10, KBr	673	473	3
182	FeClTPP	1,5	ITO, КДБ-10	577	413	6
189	ZnTPP	2,0	ITO, КДБ-10	563	468	4

Обозначения: T_{ev} , t_{ev} — температура и время испарения при изготовлении пленки, T_{sub} — температура подложки.

В табл. 1 приведены составы, значения массы и основные условия получения образцов.

Для исследования процессов самоорганизации и изучения морфологии поверхности использовался растровый электронный микроскоп JEOL JSM-6390 с предельным разрешением 3 нм. Процессы переноса и состав пленок в выбранных областях исследовали с помощью энергодисперсион-

ной приставки микроанализа к растровому электронному микроскопу Oxford INCA Energy с предельной чувствительностью 0,1 % вес. Поверхность пленок и их компонентный состав изучались с использованием электронных пучков с энергиями 5 и 8 кэВ в основном на образцах с кремниевыми (Si) подложками, так как это обеспечивало оптимальное «стекание» накопленного заряда и, как следствие, — наилучшее отно-

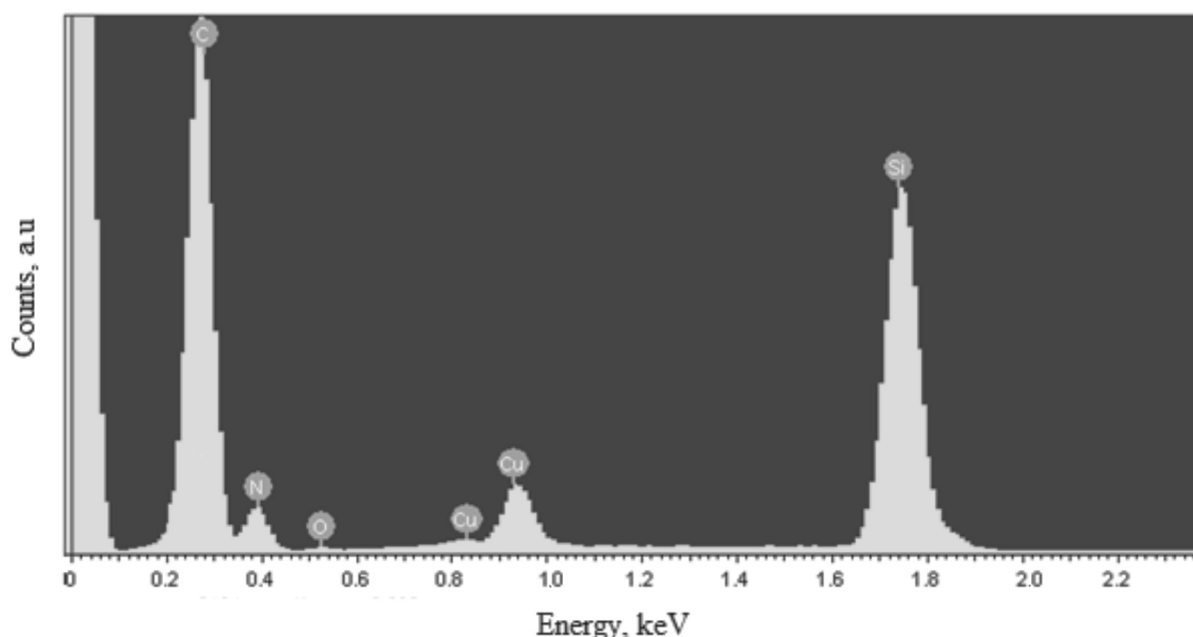


Рис. 1. Спектры рентгеноспектрального микроанализа пленок CuTPP на кремниевой подложке, несущие информацию об их элементном составе

шение сигнал/шум для данного метода.

Для уточнения экспериментальных результатов и подтверждения однородности исследуемых образцов спектры накапливались на нескольких больших (около 200 (мкм)²) площадках в нескольких (примерно в 5–7) областях; при подтверждении однородности пленки в дискретных точках экспериментальные данные усреднялись, обобщались и использовались для дальнейшего анализа.

При изучении тонких пленок и использовании данных ускоряющих напряжений регистрируемый элементный состав искажался присутствием дополнительного сигнала характеристического рентгеновского излучения от Si-подложки, поэтому для интерпретации экспериментальных данных полученные результаты, относящиеся к весовому составу, нормализовались на 100 %, затем производилась их перенормировка (также на 100 %), исключая вклад Si-подложки. Отметим, что данный метод не позволяет детектировать водород, присутствующий в органическом материале, и его весовой вклад в конечный результат; тем самым в измерение неизбежно вносится систематическая приборная погрешность. На рис. 1 представлен характерный экспериментальный спектр рентгеновского микроанализа элемент-

ного состава пленки CuTPP на кремниевой подложке.

Исследование состава тонких металлопорфириновых пленок

Для выяснения однородности состава тонких пленок (получены методом вакуумного напыления) по площади проводился их рентгеновский микроанализ в разных точках. Типичные значения содержания элементов в пленке CuTPP на кремниевой подложке приведены в табл. 2. Разброс экспериментальных значений содержания различных элементов по площади образца составил, например, для углерода и меди 0,4 и 0,5 % соответственно, что близко к погрешности метода. Существенно большая (около 5 %) неоднородность наблюдалась в распределении содержания азота. Такое распределение может быть связано с присутствием избыточного азота, содержащегося в адсорбированном воздухе (сверх количества азота в самом органическом веществе). В пользу такого объяснения служит и отмеченное содержание кислорода в следовых количествах (также из воздуха).

Если принять за основу содержание атмосферного кислорода в образце в количестве 0,3 % вес., то можно оценить вклад атмосферного адсорбированного азота как

Таблица 2

Результаты элементного анализа образца тонкой пленки CuTPP в трех точках его площади

Элемент	Содержание, % вес.			
	1	2	3	Среднее
C	57,67	57,57	57,04	57,43
N	13,09	12,42	13,08	12,87
Si	21,75	22,42	22,14	22,11
Cu	6,21	6,17	6,23	6,19
O	0	0,44	0,35	0,26
Cl	1,28	0,98	1,16	1,14
Суммарное содержание, % вес.	100	100	100	100

Примечания. 1. Толщина пленки – 500 мкм, подложка КДБ-10.
2. Данные получены из спектров рентгеновского микроанализа.



1,0 – 1,2 % вес. Неоднородность его распределения может существенно влиять на разброс данных, приведенных в табл. 2, но в целом можно считать пленку достаточно однородной.

Аналогичные результаты, относящиеся к однородности пленок, получены для всех остальных образцов. В табл. 3 представлены данные, позволяющие сравнить расчетный стехиометрический состав элементов с усредненными экспериментальными результатами. Анализ данных табл. 3 позволяет заключить, что в образцах CuTPP и ZnTPP наблюдается примерное соответствие содержания элементов в тонких пленках с расчетными значениями. Содержание меди в CuTPP оказывается незначительно (примерно на 1 % вес.) меньшим, а цинка в ZnTPP – большим, по сравнению с расчетными значениями. Существенно большие отклонения наблюдаются в содержании примеси азота, причем его увеличенное содержание по сравнению со стехиометрией отмечается только для пленок CuTPP. Это может быть связано с различным содержа-

нием в пленках адсорбированного воздуха, которое существенно зависит от структуры пленки и, соответственно, площади поверхности конденсата. Для пленок CuTPP, как будет показано ниже, характерна более развитая поверхность и, как следствие, они могут адсорбировать значительно большее количество воздуха. Различия в структуре и морфологии поверхности пленок различных тетрафенилпорфиринов будут обсуждаться далее.

Компонентный анализ образцов тонких пленок координированного комплекса FeClTPP выявил две его отличительные особенности, по сравнению с металлопорфиринами меди и цинка. Во-первых, тонкие пленки комплекса существенно (примерно в три раза) обеднены хлором. Во-вторых, в этих пленках отмечается наличие значительного количества кислорода (до 7 % вес.), что на порядок больше значений содержания адсорбированного кислорода в пленках тетрафенилпорфиринов меди и цинка. Квантовохимические расчеты, проведенные для комплекса с FeCl, показали,

Таблица 3

Сравнение стехиометрического состава тонкопленочных образцов с полученным экспериментально

Комплекс	Элемент	Содержание элемента, % вес.	
		Стехиометрическое	Экспериментальное
CuTPP	Cu	9,37	8,05
	C	77,93	75,17
	H	4,43	—
	N	8,27	16,21
	O	—	0,57
FeClTPP	Fe	7,97	8,16
	Cl	4,98	1,60
	C	75,11	80,39
	H	3,98	—
	N	7,96	5,74
	O	—	4,11
ZnTPP	Zn	9,62	7,58
	C	77,72	83,74
	H	4,42	—
	N	8,24	8,04
	O	—	0,64

что атом Cl слабо связан с остальной структурой (порядок связи Fe–Cl по Майеру в координированном комплексе составляет значение 0,2). В работе [9] для сходного по строению порфирина Mn^{III}Cl показано, что для адсорбированного монослоя [SAc]P–Mn^{III}Cl на Ag(100) при нагревании до 498 K происходит полная потеря атомов хлора, координированных на металле, однако без потери атомов металла и без разрушения макроциклов. Таким образом, в процессе сублимации, при температурах порядка 600 K атомы могут частично отрываться от металлопорфирина, а образованные при этом свободные радикалы могут эффективно взаимодействовать с остаточным кислородом и, возможно, с гидроксильными группами, формируя достаточно прочные химические связи. На рис. 2 показаны возможные сценарии замещения хлора кислородом и образования сложных

структур с μ -мостиковыми комплексами [8], формированием оксихлорида железа, гидроксила. Однако все эти сценарии могли бы объяснить повышение содержания кислорода в пленках максимум до 2,3 % даже в случае полного замещения хлора на кислородсодержащие комплексы. При этом избыточное содержание кислорода не может быть связано с адсорбированным на поверхности воздухом, так как оно не сопровождается соответствующим повышенным его содержанием в пленках азота. Однако в работе [10] при изучении спектров ЭПР порфиринов кобальта была отмечена возможность образования связи Co^{II}TRP с молекулярным лигандом O₂, координированным на атом металла. Наличие такого связанного молекулярного кислорода в наших образцах могло бы объяснить столь высокие значения содержания кислорода в пленках FeClTPP. Таким образом, точное

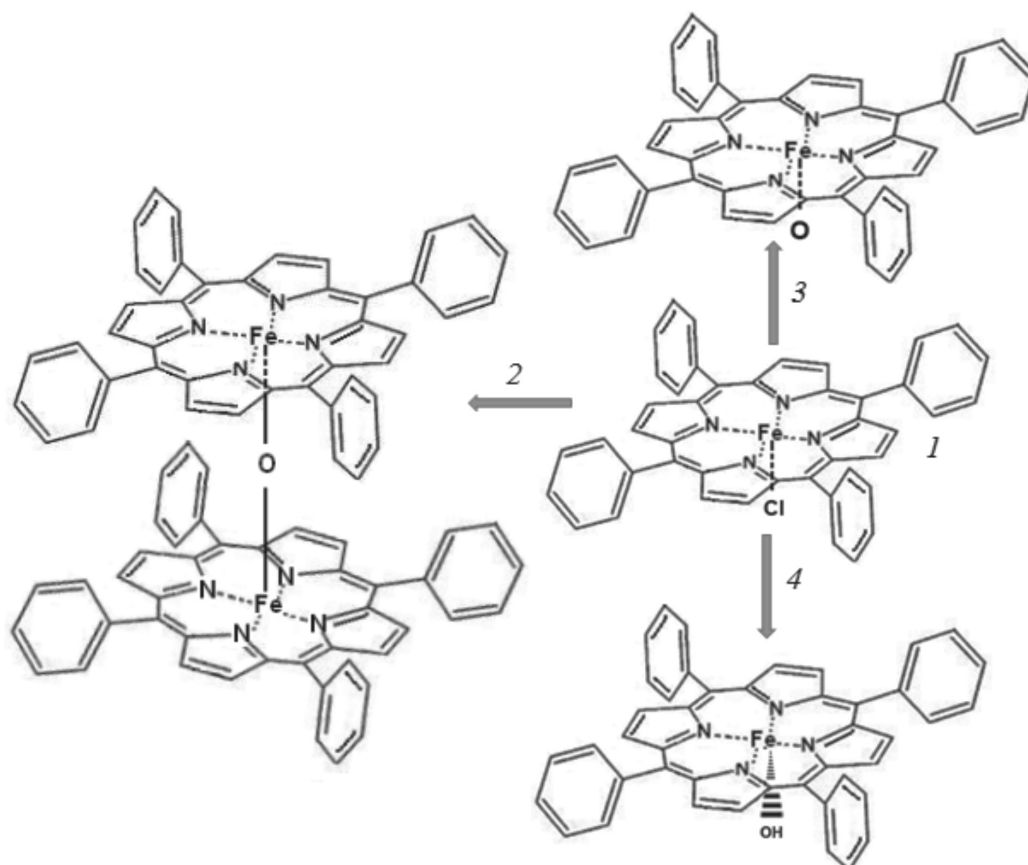


Рис. 2. Схематические варианты структурных изменений комплекса FeClTPP: исходный (1), кислородозамещенный (2), его кислородные димеры (3), гидрозамещенный (4); приведены возможные изменения при вакуумном напылении



определение химического строения пленок, полученных путем испарения комплекса FeClTPP, требует дальнейшего изучения. Следует отметить, что и магнитные характеристики таких пленок будут существенно зависеть от способа их изготовления.

Морфология поверхности пленок металлопорфиринов

Электронно-микроскопическое исследование морфологии поверхности пленок толщиной 500 нм, полученных из шихты ZnTPP (рис. 3,*a*), показало, что пленки имеют ровную поверхность и состоят из крупных столбчатых кристаллитов длиной до 2 мкм, плотно упакованных и образующих плотную пленку. На дефекте (сколе) пленки видно, что кристаллизация характеризуется вытянутой осью кристаллита и предпочтительно происходит параллельно подложке.

Для морфологии образцов, полученных из шихты FeClTPP (рис. 3,*b*), характерна значительно большая неоднородность поверхности, на которой наблюдаются включения более крупных кристаллитов, а также отсутствуют столбчатые структуры. Поскольку мы предполагаем, что в данной пленке сосуществуют различные типы порфиринов железа (содержащие как хлор, так и кислород в той или иной форме), то различные наблюдаемые кристаллические

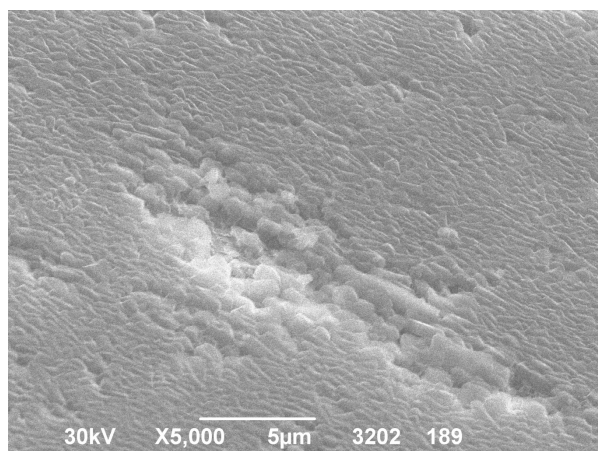
структуры могут соответствовать разным фазам одного и того же соединения. Общим же свойством этих двух типов образцов является формирование сплошной пленки с относительно ровной поверхностью.

Принципиально иную структуру мы наблюдаем при изучении поверхности пленки CuTPP. Полученные в идентичных технологических режимах пленки самоорганизуются в кристаллические нанонити толщиной около 20 нм и длиной до 5 мкм (рис. 4,*a*). Следует отметить, что в работе [11], где исследовалась структура пленок CuTPP, полученных методом обычного термического испарения (т. е. в отсутствие квазиравновесных условий), авторы получили нанокристаллическую неупорядоченную структуру со средним размером кристаллитов около 60 нм, при этом никаких выделенных нанонитей или наностержней не было обнаружено.

Наблюдаемые нами различия в структуре пленок различных металлопорфиринов, полученных в условиях, близких к равновесным, могут объясняться различием в энергии формирования критического зародыша, и, вероятно, различным строением (анизотропией) критического зародыша.

Для сравнения структур и анизотропии конденсатов CuTPP, изготовленных путем испарения из газовой фазы и из раствора, мы изучили методом растровой элект-

a)



b)

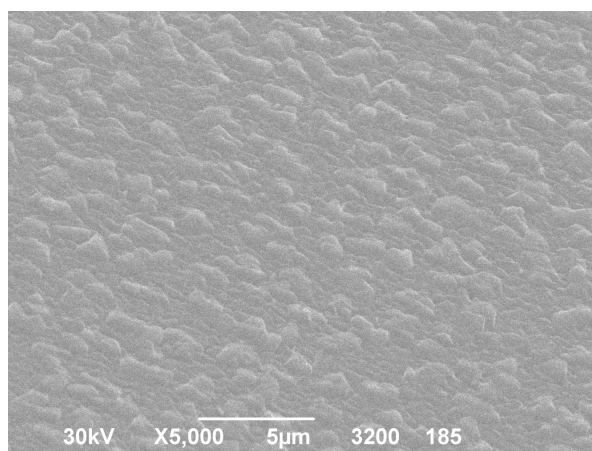
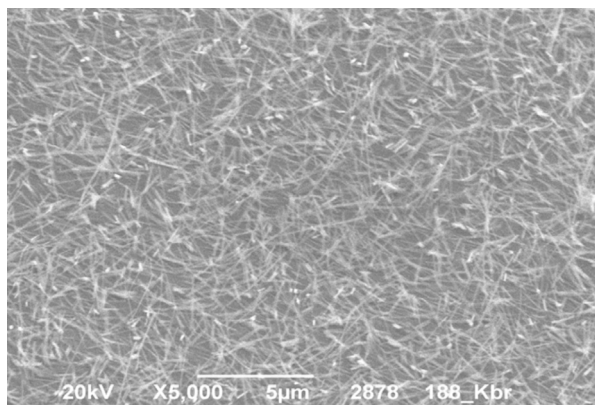


Рис. 3. Морфология поверхности пленок по данным растровой электронной микроскопии, полученных из шихты ZnTPP (*a*) и FeClTPP (*b*) (образцы 189 и 182 соответственно, см. табл. 1)

a)



b)

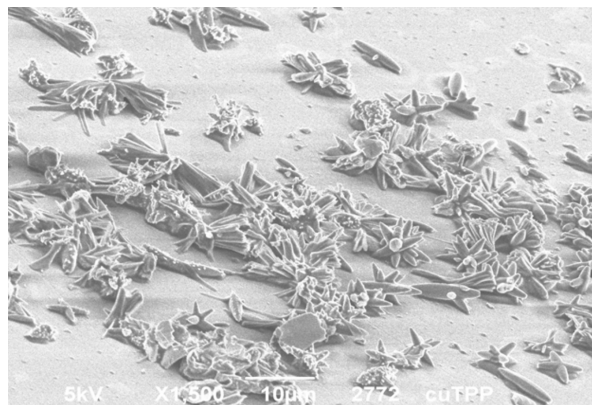


Рис. 4. Самоорганизация пленок CuTPP, полученных методом квазиравновесного вакуумного напыления (a) и конденсацией из раствора толуола (b)
(образцы 175 и 1 соответственно, см. табл. 1)

тронной микроскопии пленки порфирина CuTPP на кремниевой подложке, полученные методом конденсации из раствора (полива), т. е. при медленном испарении из раствора в толуоле $C_6H_5CH_3$ (рис. 4,b). Такие кристаллы тоже имеют ярко выраженную анизотропию и формируются из наностержней диаметром около 1 мкм и длиной до 10 мкм, однако следует учитывать, что при конденсации из раствора молекулы порфиринов всегда сольватированы молекулами растворителей, поэтому кристаллические фазы могут существенно различаться.

Выводы

Исследования состава и структуры пленок различных металлопорфиринов, полученных испарением в вакууме в квазиравновесных условиях, позволило сделать следующие выводы.

Пленки порфиринов меди и цинка имеют состав, соответствующий стехиометрическому (в пределах точности метода). Наблюдаемые различия в содержании азота в конденсате, по-видимому, могут быть связаны с адсорбцией воздуха, поскольку хорошо коррелируют со структурой пленки.

рой пленки.

В пленках порфирина меди, имеющих более развитую поверхность, наблюдается повышенное содержание азота по сравнению со стехиометрическим составом.

Установлено, что при вакуумном напылении координированного комплекса FeClTPP атомы хлора частично теряются в процессе напыления, при этом отмечается значительное увеличение содержания в пленке кислорода, которое нельзя объяснить только физической адсорбцией, а связано, по-видимому, с формированием различных окисленных форм железа или присоединением молекулярного кислорода.

Впервые изучены структура пленок и процессы их самоорганизации при росте кристаллитов CuTPP, которые приводят в случае конденсации в квазиравновесных условиях к формированию неориентированных порфириновых нанонитей диаметром около 20 нм и длиной до 5 мкм. При этом пленки других изученных металлопорфиринов имеют крупнокристаллическую (размеры кристаллитов составляют 1 – 5 мкм) структуру с плотной упаковкой кристаллитов без выраженной анизотропии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Suzuki A., Nishimura K., Oku T. Effects of germanium tetrabromide addition to zinc tetraphenyl porphyrin / fullerene bulk heterojunction solar cells

// Electronics. 2014. Vol. 3. No. 1. Pp. 112–121.

[2] Peumans P., Yakimov A., Forrest S. Small molecular weight organic thin-film photodetectors



and solar cells // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93. No. 7. Pp. 3693–3723.

[3] **Katz E.A.** Nanostructured materials for solar energy conversion; ed. T. Soga. Amsterdam: Elsevier, 2006. 600 p.

[4] **Walter M.G., Rudineb A.B., Wamser C.C.** Porphyrins and phthalocyanines in solar photovoltaic cells // J. Porphyrins Phthalocyanines. 2010. Vol. 14. No. 7. Pp. 759–792.

[5] **Cai J., Chen H., Huang J., et al.** Controlled self-assembly and photovoltaic characteristics of porphyrin derivatives on silicon surface at solid-liquid interfaces // Soft Matter. 2014. Vol. 10. No. 15. Pp. 2612–2618.

[6] **Захарова И.Б., Зиминов В.М., Романов Н.М. и др.** Оптические и структурные свойства пленок фуллерена с добавлением теллурида кадмия // Физика твердого тела. 2014. Т. 56. Вып. 5. С. 1024–1029.

[7] **Valkova L.A., Erokhin V.V., Glibin A.S., Koifman O.I.** The influence of molecular structure and π -system extent on nano and microstructure of Langmuir layers of copper azaporphyrins // Journal

of Porphyrins and Phthalocyanines. 2011. Vol. 15. No. 10. Pp. 1044–1051.

[8] **Faraon V., Bunghez R.I., Pop S.F., et al.** Photodegradation of organic compounds using TiO₂-based impregnated photocatalysts // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. 2011. Vol. 13. No. 7. Pp. 917–920.

[9] **Turner M., Vaughan O.P.H., Kyriakou G., et al.** Deprotection, tethering, and activation of a one-legged metalloporphyrin on a chemically active metal surface: NEXAFS, synchrotron XPS, and STM study of [SAC]P-Mn(III)Cl on Ag(100) // J. Am. Chem. Soc. 2009. Vol. 131. No. 41. Pp. 14913–14919.

[10] **Baumgarten M., Winscom C.J., Lubitz W.** Probing the surrounding of a cobalt(II) porphyrin and its superoxo complex by EPR techniques // Appl. Magn. Reson. 2001. Vol. 20. No. 1. Pp. 35–70.

[11] **El-Nahass M.M., Farag A.A.M., El-Metwally M.F.S.H., et al.** Structural, absorption and dispersion characteristics of nanocrystalline copper tetraphenyl porphyrin thin films. // J. Synthetic Metals. 2014. Vol. 5. Pp. 110–116.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РОМАНОВ Николай Михайлович — аспирант кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
nikromanov.90@gmail.com

ЗАХАРОВА Ирина Борисовна — 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
zakharova@rphf.spbstu.ru

Romanov N.M., Zakharova I.B. THE COMPOSITION AND THE STRUCTURE OF THIN FILMS BASED ON METAL PORPHYRIN COMPLEXES.

Thin films based on CuTPP, ZnTPP and FeCITPP (TPP — TetraPhenylPorphyrin) complexes and manufactured by vacuum deposition under quasi-equilibrium conditions have been investigated. The hot-wall epitaxy method was chosen for the preparation of samples. The structure of objects and their composition were examined by scanning electron microscopy (SEM) and energy dispersive microanalysis (EDX). The CuTPP film was established to form whiskers about 20 nm in diameter and 5 μ m in length. The structural features and morphology of ZnTPP and FeCITPP films' surface were revealed. The theoretical interpretation of obtained results was proposed that made possible to relate the film structure with its composition.

ORGANIC ELECTRONICS, THIN FILM, METAL-PORPHYRIN COMPLEX.

REFERENCES

[1] **A. Suzuki, K. Nishimura, T. Oku,** Effects of germanium tetrabromide addition to zinc tetraphenyl porphyrin/fullerene bulk heterojunction solar cells, Electronics. 3(1) (2014) 112–121.

[2] **P. Peumans, A. Yakimov, S. Forrest,** Small molecular weight organic thin-film photodetectors

and solar cells, J. Appl. Phys. 93(7) (2003) 3693–3723.

[3] **E.A. Katz,** Nanostructured materials for solar energy conversion, ed. T. Soga, Amsterdam, Elsevier, 2006.

[4] **M.G. Walter, A.B. Rudineb, C.C. Wamser,**

Porphyrins and phthalocyanines in solar photovoltaic cells, *J. Porphyrins Phthalocyanines*. 14 (7) (2010) 759–792.

[5] **Jinhua Cai, Haihui Chen, Jiange Huang, et al.**, Controlled self-assembly and photovoltaic characteristics of porphyrin derivatives on silicon surface at solid-liquid interfaces, *Electronic Supplementary Material (ESI) for Soft Matter*. 10(15) (2014) 2612–2618.

[6] **I.B. Zakharova, V.M. Ziminov, N.M. Romanov, et al.**, Optical and structural properties of fullerene films doped with cadmium telluride, *Physics of Solid State*. 56 (5) (2014) 1064–1070.

[7] **L.A. Valkova, V.V. Erokhin, A.S. Glibin, O.I. Koifman**, The influence of molecular structure and π -system extent on nano and microstructure of Langmuir layers of copper azaporphyrins, *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*. 15(10) (2011) 1044–1051.

[8] **V. Faraon, R.I. Bunghez, S.F. Pop, et al.**,

Photodegradation of organic compounds using TiO₂-based impregnated photocatalysts, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 13(7) (2011) 917–920.

[9] **M. Turner, O.P.H. Vaughan, G. Kyriakou, et al.**, Deprotection, tethering, and activation of a one-legged metalloporphyrin on a chemically active metal surface: NEXAFS, synchrotron XPS, and STM study of [SAC]P-Mn(III)Cl on Ag(100), *Am. Chem. Soc.* 131 (41) (2009) 14913.

[10] **M. Baumgarten, C.J. Winscom, W. Lubitz**, Probing the surrounding of a cobalt(II) porphyrin and its superoxo complex by EPR techniques, *Appl. Magn. Reson.* 20 (1) (2001) 35–70.

[11] **M.M. El-Nahass, A.A.M. Farag, M. El-Metwally, et al.**, Structural, absorption and dispersion characteristics of nanocrystalline copper tetraphenyl porphyrin thin films, *Elesh Synthetic Metals*, 09/2014; 195:110–116. DOI: 10.1016/J. Synthmet. 2014. 05. 013

THE AUTHORS

ROMANOV Nikolay M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
nikromanov.90@gmail.com

ZAKHAROVA Irina B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zakharova@rphf.spbstu.ru



DOI: 10.5862/JPM.242.2

УДК: 536.4, 539.3

*А.И. Слуцкер¹, Ю.И. Поликарпов², Д.Д. Каров²*¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ЭНЕРГЕТИКА УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ В ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ

В нанокристаллах полиэтилена методами рентгеновской дифрактометрии и рамановской спектроскопии измерены изменения осевой и контурной длин скелетных межатомных связей в цепных молекулах как при механическом (растяжение), так и при термическом (нагревание) воздействиях. Проведен анализ измеренных силовых и температурных зависимостей, который позволил получить расчетные описания деформации и энергетики полимерного нанокристалла. При этом для термического воздействия получены оригинальные результаты. Определены составляющие потенциальной энергии деформированного полимерного кристалла, относящиеся как к растяжению скелетных связей, так и к изгибу цепных молекул. Установлено резкое различие между соотношениями этих составляющих при механическом нагружении и термическом воздействии.

РАСТЯЖЕНИЕ, НАГРЕВАНИЕ, ОСЕВАЯ ДЛИНА ЦЕПНОЙ МОЛЕКУЛЫ, ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ.

Введение

Полимерные кристаллы строятся из распрямленных участков цепных молекул, уложенных параллельно вдоль оси ориентирующей их силы [1]. Линейные размеры этих участков составляют от 20 до 100 нм [2]; таким образом, эти кристаллические образования представляют собой нанокристаллы, отличительной особенностью которых является резкая анизотропия механических и термических свойств в продольном (вдоль осей распрямленных молекул) и поперечном (ортогонально осям молекул) направлениях. Так, жесткости кристаллических решеток и характеристические температуры колебаний в продольном направлении значительно выше, чем в поперечном [3]. Уже это обстоятельство обуславливает определенные особенности деформационной реакции полимерных кристаллов на механическое и термическое воздействия. Кроме того, цепное строение молекул приводит к специфическим видам жесткости полимерного материала: жесткости растяжения (увеличение контурной длины молекулы) и изгибной жесткости

(изменение «кривизны» участков цепной молекулы, ведущей к изменению ее осевой длины). Однако, несмотря на большое количество исследований [1], связанных с описанием деформационной реакции полимерных нанокристаллов на механическое (нагружение) и термическое (нагревание) воздействия, остается ряд вопросов, которые нуждаются в дальнейшем выяснении. В частности, остаются неясными детали поведения скелетных межатомных связей участков макромолекул, образующих данные нанокристаллы, когда их подвергают указанным воздействиям. Для получения необходимой информации целесообразно воспользоваться такими методами исследования молекулярной динамики, как дифрактометрия (рентгеновская, электронная, нейтронная) и рамановская спектроскопия. Последняя, как известно, чувствительна к влиянию разного рода воздействий на скелеты полимерных молекул [4, 5]. Сочетание рентгеновского и рамановского методов исследования ведет к уточнению на молекулярном уровне механики и энергетики полимерных нанокристаллов, подвергшихся указанным воздействиям.

Объекты и методы исследования

Исследования проводились на ориентированных образцах кристаллизующихся полимеров (полиэтилен (ПЭ), полипропилен (ПП), поликапроамид (найлон-6)). В данной работе представлены результаты, полученные только для ПЭ, так как для двух других полимеров они были аналогичными.

Образцы ПЭ подвергались воздействию двух видов:

- 1) растягивающее нагружение вдоль оси ориентации при температуре $T = 90$ К;
- 2) нагревание свободных от нагрузки образцов от $T = 90$ К до $T = 300\text{--}350$ К.

Выбор значения $T = 90$ К был обусловлен тем, что тепловая молекулярная динамика в нанокристаллах ПЭ при такой температуре еще остается фактически невозбужденной; она практически не возбуждается и при более низких температурах, измерения при которых требуют однако более сложного экспериментального оборудования.

При упругом растягивающем напряжении ($T = 90$ К) с помощью метода рентгеновской дифрактометрии регистрировали угловое смещение рефлекса (002) в сторону уменьшения угла. По полученным значениям указанного углового смещения определяли увеличение расстояния между скелетными атомами углерода вдоль оси молекулы ПЭ [6]. Методом рамановской спектроскопии регистрировали смещение в сторону низких частот полосы $\Delta\nu$, имеющей при $T = 90$ К частоту $\nu = 1130 \text{ см}^{-1} \approx 3,4 \cdot 10^{13}$ Гц, которая отвечает валентным колебаниям (С–С)-связей в скелете молекулы ПЭ. Важно отметить, что изменение частоты данных колебаний обусловлено изменением только контурной длины этих связей, тогда как изменение валентного угла на результат не влияет. Таким образом, относительное изменение частоты $\varepsilon_\nu = \Delta\nu / \nu$ этих колебаний в ПЭ от растягивающего напряжения σ должно свидетельствовать об относительном изменении контурной длины (С–С)-связей $\varepsilon_c = \Delta l_c / l_c$ при нагружении. В связи с тем, что связь между этими изменениями, как было установлено в работе [8], имеет вид

$$\varepsilon_c \approx -0,3\varepsilon_\nu, \quad (1)$$

то измеренная линейная зависимость относительного изменения (а именно уменьшения) частоты ε_ν от растягивающего напряжения σ в диапазоне от 0,4 до 1,8 ГПа (коэффициент пропорциональности $\sim 5 \cdot 10^{-3} (\text{ГПа})^{-1}$) свидетельствует о контурном растяжении (С–С)-связей под воздействием приложенного напряжения, причем с тем же самым коэффициентом пропорциональности.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Известно [7], что углеродный скелет распрямленной молекулы ПЭ, имеет форму плоского зигзага (рис. 1). Здесь $O-O$ является осью молекулы, $l_c = 0,154$ нм – собственная (контурная) длина (С–С)-связи; $\theta = 109^\circ$ – валентный угол между (С–С)-связями. Проекция (С–С)-связи на ось молекулы (осевая длина (С–С)-связи) выражается как

$$l_{ax} = l_c \sin \theta / 2;$$

при $T = 90$ К $l_{ax} = 0,127$ нм.

Таким образом, при продольном упругом растяжении и осевая, и контурная длина молекулы ПЭ в кристаллах возрастают.

При нагревании ПЭ из измеренной методом рентгеновской дифрактометрии зависимости смещения рефлекса (002) от температуры было установлено, что осевая длина (С–С)-связи уменьшается с повышением T . Ее относительное изменение описывается выражением

$$\varepsilon_\Sigma = \Delta l_\Sigma / l_\Sigma,$$

где l_Σ , Δl_Σ – осевая длина (С–С)-связи и ее изменение в новых обозначениях.

Введение новых обозначений обусловлено тем, что при термическом воздействии изменяется также наклон оси молекулы, в силу чего дополнительно изменяется и проекция длины (С–С)-связи на ось ориентации ПЭ. Подчеркнем, что при $T = 90$ К справедливо выражение

$$l_\Sigma = l_{ax} = l_c \sin \theta / 2.$$

Методом рамановской спектроскопии

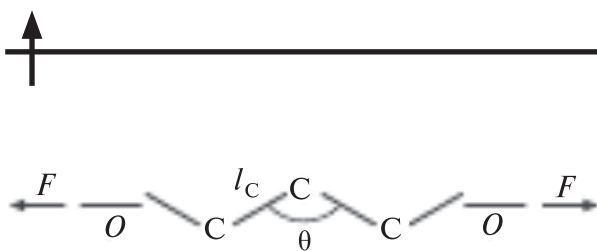


Рис. 1. Схема скелета распрямленной молекулы полиэтилена: $O-O$ ось молекулы, l_c – собственная (контурная) длина $(C-C)$ -связи; F – растягивающие силы

ПЭ по изменению частоты с помощью соотношения (1) было установлено, что контурная длина $(C-C)$ -связи возрастает при нагревании полимера.

Таким образом, при нагревании ПЭ, в отличие от изменений при растягивающем нагружении, для системы характерно наличие противоположных знаков изменения осевой и контурной длины молекулы ПЭ в кристаллах.

Полученные экспериментальные данные по деформации (изменение осевой и

контурной длин) цепных молекул в нанокристаллах ПЭ позволили детально проанализировать процессы, происходящие в этих структурных образованиях. Для указанного анализа использовались модели влияния воздействий на данный объект (рис. 2), с помощью которых и удалось извлечь из полученных данных детальную количественную информацию о деформационных процессах и распределении энергии в деформирующихся молекулах в полимерном кристалле.

На атомах C_1 и C_2 (рис. 2,а) показано разложение растягивающей силы F (параллельна оси молекулы $O-O$) на две составляющие: вдоль (C_1-C_2) -связи действует сила F_c , которая выражается формулой

$$F_c = F \sin(\theta/2),$$

а ортогонально линии связи приложена сила F_θ , равная

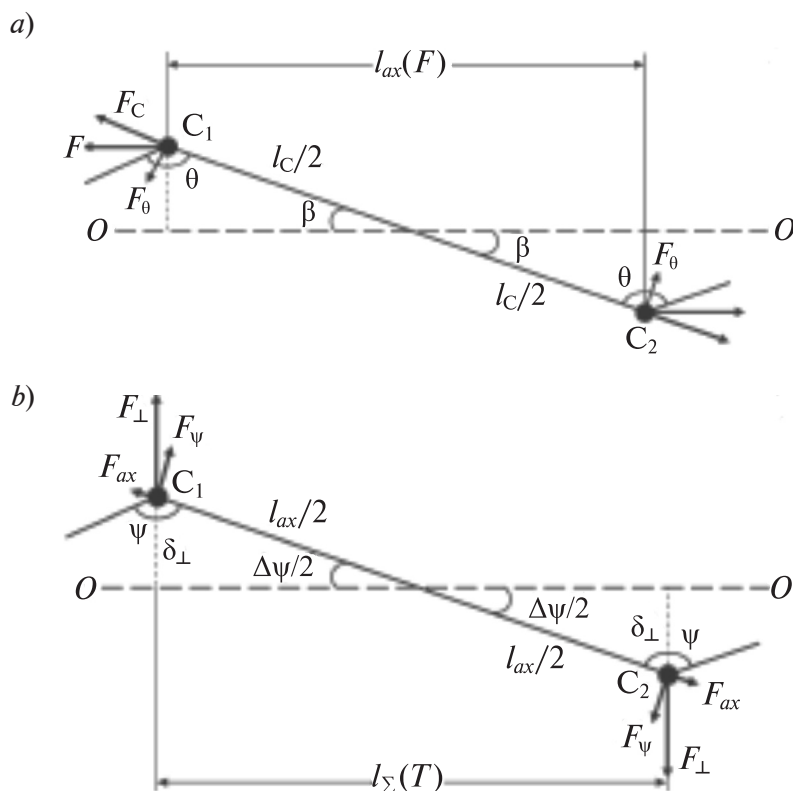


Рис. 2. Модель воздействия на молекулу ПЭ в кристалле ПЭ: а – растягивающее продольное нагружение исходного зигзагообразного скелета молекулы ПЭ; б – возбуждение поперечных колебаний в молекуле ПЭ при нагревании.

C_1, C_2 – атомы углерода, $O-O$ – ось молекулы (обозначения даны в тексте)

$$F_{\theta} = F \cos(\theta/2),$$

где валентный угол у вершин зигзага $\theta = 109^{\circ}$ при $T = 90$ К [7].

Силы F_C вызывают удлинение (C_1-C_2) -связи величиной

$$\Delta l_C = F_C / f_C,$$

где $l_C = 0,154$ нм – исходная длина (C_1-C_2) -связи при $T = 90$ К, f_C – силовая постоянная растяжения (C_1-C_2) -связи.

Силы F_{θ} , приложенные к соседствующим атомам C_1 и C_2 , образуют пару с крутящим моментом

$$M = F_{\theta} l_C / 2 = (F \cos(\theta/2)) l_C / 2$$

на плечах $l_C/2$.

Действие этой пары вызывает уменьшение угла наклона (C_1-C_2) -связи к оси молекулы на величину

$$\delta\beta = -M / f_{\beta},$$

а это приводит к изменению валентного угла θ на величину

$$\begin{aligned} \delta\theta = -2\delta\beta &= 2M / f_{\beta} \approx [F \cos(\theta/2)] l_C / f_{\beta} \approx \\ &\approx [F \cos(\theta/2)] l_C / 2f_{\theta}, \end{aligned}$$

где f_{β} , $f_{\theta} = f_{\beta}/2$ – силовые постоянные изменения соответственно углов β и θ .

В итоге было получено выражение, связывающее изменение осевой длины молекулы с приложенной силой F :

$$\begin{aligned} \Delta l_{ax}(F) = F \{ [\sin^2(\theta/2)] / f_C + \\ + [l_C^2 \cos^2(\theta/2)] / 4f_{\theta} \}. \end{aligned} \quad (2)$$

Данное выражение показывает, что в осевое растяжение молекулы вносят вклад разные виды деформации молекулы:

1) растяжение самих **$(C-C)$ -связей** (слагаемое, включающее силовую постоянную $f_C = 4,4 \cdot 10^2$ Н/м для ПЭ [9]);

2) увеличение валентного угла (слагаемое, включающее силовую постоянную $f_{\theta} = 8,2 \cdot 10^{-19}$ Н/м для ПЭ [9]).

Проведенный нами расчет показал, что при продольном растягивающем нагружении доля вклада от удлинения $(C-C)$ -связи составляет 0,39, а доля вклада от увеличения валентного угла – 0,61. Нетрудно видеть, что вклады соизмеримы по своей величине.

Характер же термического воздействия на цепные молекулы в кристалле отличается от действия сосредоточенной постоянной силы, оказываемого в процессе продольного растяжения при $T = 90$ К, когда практически отсутствует тепловая колебательная динамика молекул. С повышением температуры от 90 К возбуждаются поперечные колебания в цепных молекулах. Такие смещения приближенно можно представить как результаты «силовых ударов» по скелетным атомам в поперечном направлении. Модель термического воздействия на молекулы мы также представляем в виде поперечных «ударов», наносимых по скелетным атомам с разных сторон. Принимаем, что все удары одинаковы по величине. Допускаем также, что удары по соседствующим атомам производятся в противоположных направлениях, но по одной оси, ортогональной оси молекулы. Тогда, если исходно модель молекулы была прямолинейной (без зигзагообразности), то в результате поперечных ударов модель цепной молекулы становится зигзагообразной (рис. 2,б). Поступаем теперь по аналогии с анализом механического продольного растяжения молекул ПЭ: производим разложение сил на составляющие вдоль оси молекулы (но не вдоль $(C-C)$ -связи, как в предыдущем случае) и ортогонально оси молекулы (а не ортогонально $(C-C)$ -связи). Сила удара $F_{\perp}$ одинаково действует с двух сторон (и слева, и справа) на прилегающие к ударяемому атому половины межатомного участка молекулы (по $l_{ax}/2$). Поэтому на каждый (из двух) прилегающий участок молекулы «приходится» $F_{\perp}/2$. Именно такую силу и разложим для атомов C_1 и C_2 (с одной стороны у каждого) на составляющие (рис. 2,б). Образующееся подобие валентного угла обозначаем как

$$\psi = \pi - \Delta\psi$$

(уточним, что до удара $\psi = \pi$). Угол наклона «нагретой» оси к исходной оси молекулы имеет величину $\Delta\psi/2$. Тогда составляющая силы $F_{\perp}/2$ вдоль оси молекулы следует выражению

$$F_{ax} = [F_{\perp} \sin(\Delta\psi/2)]/2 \approx F_{\perp} \Delta\psi / 4$$



(так как $\Delta\psi$ мало). Составляющая силы $F_{\perp}/2$, ортогональная оси молекулы, будет равна

$$F_{\psi} = [F_{\perp} \cos(\Delta\psi / 2)]/2 \approx \\ \approx F_{\perp} [1 - (\Delta\psi/2)^2 / 2] / 2 \approx F_{\perp} / 2.$$

Каждая из сил F_{ψ} , приложенных к соседствующим атомам, создает на плече $l_{ax}/2$ крутящий момент $M = F_{\psi} l_{ax} / 2$. Действие этой пары сил приводит к повороту всего участка молекулы (C_1-C_2) по часовой стрелке вокруг центральной точки данного участка, что вызывает увеличение наклона оси молекулы к исходному (до нагревания) направлению оси. Соответственно происходит уменьшение проекции осевой длины (C_1-C_2)-связи $l_{ax}(T)$ на исходную ось $O-O$ молекулы.

Проекция длины такого участка C_1-C_2 обозначается как $l_{\Sigma}(T)$ и показана на рис. 2,б. Еще раз отметим, что до нагревания $l_{\Sigma} = l_{ax}$ при $T = 90$ К. Изменение проекции осевой длины участка молекулы C_1-C_2 на ось $O-O$ $\Delta l_{\Sigma}(T)$ из-за действия двух факторов (увеличение как осевой длины (C_1-C_2)-связи, так и угла наклона участка C_1-C_2 к оси $O-O$ ($\Delta\psi(T)/2$) составляет при малом значении угла $\Delta\psi$

$$\Delta l_{\Sigma}(T) = l_{\Sigma}(T) - l_{\Sigma}(T = 90 \text{ К}) = \\ = l_{ax}(T) \cos(\Delta\psi/2) - l_{ax}(T = 90 \text{ К}) \approx \quad (3) \\ \approx F_{ax}(T)/f_{ax} - l_{ax} \Delta\psi^2(T)/8.$$

Структура выражения (3) для случая нагревания кристалла ПЭ имеет тот же смысл, что и структура выражения (2) для механического нагружения. Действительно, первое слагаемое является вкладом в $\Delta l_{\Sigma}(T)$ изменения (возрастания) осевой длины (C_1-C_2)-связи (т. е. растяжения осевой длины (C_1-C_2)-связи); второе (отрицательное) слагаемое является вкладом в $\Delta l_{\Sigma}(T)$ изменения (уменьшения) «валентного угла» ψ .

В выражении (2) все входящие в него величины являются известными, а в выражении (3) ситуация оказывается несколько иной. Из входящих в него величин исходно известны только две: осевая длина ($C-C$)-связи $l_{ax} = 0,127$ нм при $T = 90$ К и силовая постоянная осевого растяжения ($C-C$)-связи $f_{ax} = 2,8 \cdot 10^2$ Н/м. Сила осе-

вого растяжения ($C-C$)-связи F_{ax} и изменение $\Delta\psi$ «валентного» угла в вершинах «квазизигзага», образующегося в результате боковых тепловых ударов, известны только при исходной температуре $T = 90$ К:

$$F_{ax} \sim 0, \quad \Delta\psi \sim 0.$$

При повышенных температурах ($T > 90$ К) значения F_{ax} и $\Delta\psi$ необходимо найти. Проведенный несложный теоретический анализ показал, что

$$\Delta\psi / 2 = [\epsilon_{ax}(T) - \epsilon_{\Sigma}(T)]^{1/2},$$

и, следовательно, этот угол можно рассчитать.

Сила F_{ax} , приложенная к участку C_1-C_2 молекулы ПЭ (рис. 2,б), приводит к удлинению этого участка, а значит к увеличению контурной длины ($C-C$)-связи $\epsilon_C(T)$ с температурой. Как было показано в работе [8], $\epsilon_C(T)$ связано с ϵ_{ax} и ϵ_v соотношением

$$\epsilon_{ax} \approx 2,5 \epsilon_C \approx -2,5 \cdot 0,3 \epsilon_v.$$

Тогда легко рассчитать

$$\Delta l_{ax}(T) = l_{ax} \epsilon_{ax}(T),$$

а, следовательно, также

$$F_{ax} = f_{ax} \Delta l_{ax}(T), \quad F_{\perp} \approx 4 F_{ax} / \Delta\psi$$

и по формуле (3) — значение $\Delta l_{\Sigma}(T)$.

Как следует из рассмотрения реакции полимерного кристалла на механическое и термическое воздействия, в цепных молекулах возникают два вида деформации: растяжение элементов структуры цепных молекул и изменение кривизны этих элементов. Каждый из этих видов характеризуется соответствующей величиной потенциальной энергии. Таким образом, наступившее в результате воздействий возрастание потенциальной энергии полимерного кристалла W_{pot} состоит из суммы двух составляющих: энергии растяжения W_{str} и энергии изгиба W_{bend} :

$$W_{pot} = W_{bend} + W_{str}.$$

Оценим соотношение этих составляющих потенциальной энергии, приходящейся на одно звено в цепной молекуле ПЭ (группу CH_2):

$$W_{str} / W_{pot} ; W_{bend} / W_{pot}.$$

При механическом растяжении из соотношения (2) следует, что доли энергии растяжения и «изгибания» в потенциальной энергии натянутого звена молекулы ПЭ относятся так же, как и доли соответствующих деформаций.

Из выражения (3) можно также оценить отношение долей данных деформаций при нагревании; оно составило 2,1 при $T = 300$ К. Отношение же

$$W_{bend} / W_{str} \sim 6 \cdot 10^2$$

при нагревании кристалла ПЭ до $T = 300$ К.

Таким образом, для нагретого кристалла ПЭ потенциальная энергия теплового происхождения главным образом представляет собой энергию «изгибания» молекулы ПЭ, происходящего вследствие поперечных колебаний цепных молекул.

Заключение

Результатом работы явилась детализация с использованием рентгеновской дифрактометрии и рамановской спектроскопии деформационных процессов, про-

исходящих в полимерном кристалле при двух различных видах воздействия: механическом нагружении и нагревании. Для случая механического нагружения при низкой температуре, когда все скелетные колебания заморожены, особенности деформационных процессов обусловлены зигзагообразной формой скелета цепных молекул.

При нагревании решающую роль в возникающей деформации полимерных нанокристаллов играет возбуждение тепловых поперечных колебаний, приводящее к резкому отличию силовых и энергетических характеристик от наблюдаемых при механическом нагружении.

Экспериментальные данные по силовым и температурным зависимостям осевых и контурных деформаций в нанокристаллах поликапроамида и полипропилена подобны аналогичным данным, приведенным в настоящей работе для нанокристаллов полиэтилена. Таким образом, приводимый здесь анализ экспериментальных результатов и оценка энергетики упругих деформаций для ПЭ вполне справедливы и для других полимерных нанокристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Джейл Ф.Х. Полимерные монокристаллы. Л.: Химия, 1968. 426 с.
- [2] Энциклопедия полимеров. Под ред. Кабанова В.А. М.: Сов. энциклопедия, 1974. Т. 2. С. 100.
- [3] Годовский Ю.К. Теплофизика полимеров: М.: Химия, 1982. 322 с.
- [4] Журков С.Н., Веттегрень В.И., Новак И.И., Кашинцева К.Н. Изучение механически напряженных связей в полимере методом инфракрасной спектроскопии // ДАН СССР. 1967. Т. 176. № 3. С. 623–626.
- [5] Vettegren V.I., Titenkov L.S., Bronnikov S.V. Thermophysical properties of macromolecules in the block state // J. Thermal Anal. 1992. Vol. 38. No. 5. Pp. 1031–1045.
- [6] Слуцкер А.И., Гиляров В.Л., Дадобаев Г., Лайус Л.А., Гофман И.В., Поликарпов Ю.И. Отрицательное продольное расширение и амплитуда продольных колебаний в кристаллах полиэтилена // ФТТ. 2002. Т. 44. № 5. С. 923–929.
- [7] Bunn C.W. The crystal structure of long-chain normal paraffin hydrocarbons. The 'shape' of the $>CH_2$ group // Trans. Faraday Soc. 1939. Vol. 35. Pp. 482–491.
- [8] Слуцкер А.И., Веттегрень В.И., Кулик В.Б., Гиляров В.Л., Поликарпов Ю.И., Каров Д.Д. Детализация деформационных процессов в полимерных кристаллах // ФТТ. 2015. Т. 57. № 11. С. 2236–2244.
- [9] Rasmusen R.S. Vibrational frequency assignments for paraffin hydrocarbons; infra-red absorption spectra of the butanes and pentanes // J. Chem. Phys. 1948. Vol. 16. No. 7. Pp. 712–722.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЛУЦКЕР Александр Ильич — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, профессор кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Alexander.Slutsker@mail.ioffe.ru



ПОЛИКАРПОВ Юрий Иванович — кандидат физико-математических наук, инженер кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

yuryi.polikarpov@yandex.ru

КАРОВ ДМИТРИЙ ДМИТРИЕВИЧ — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры интегральной электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

dmkarov@yandex.ru

Slutsker A.I., Polikarpov Yu.I., Karov D.D. ELASTIC STRAIN ENERGY BEHAVIOR IN THE POLYMER NANOCRYSTALS.

In the paper, the changes in the axial and the contour lengths of skeletal interatomic bonds in the chain molecules of polyethylene nanocrystals have been measured using X-ray diffractometry and Raman spectrometry. In the course of the measurements the samples were subjected to stretching and heating (mechanical and thermal actions). The measured force and temperature dependences were analyzed and the calculated description of the polymer nanocrystal's strain was inferred from them. In so doing the original results were obtained for the thermal action. The potential energy components related to both the skeletal-bond stretching and the chain-molecule bending were determined for the strained polymer crystal. The sharp distinction between the ratios of these components for the object under mechanical and thermal actions was found.

STRETCHING, HEATING, AXIAL LENGTH OF CHAIN MOLECULE, POTENTIAL ENERGY.

REFERENCES

- [1] **F.Kh. Dzheyl**, Polimernyye monokristally [Polymer monocrystals], Leningrad, Khimiya, 1968.
- [2] Entsiklopediya polimerov [Encyclopedia of polymer], Moscow, Sov. entsiklopediya, 1974. Vol. 2. P. 100
- [3] **Yu.K. Godovskiy**, Teplofizika polimerov [Thermophysics of polymer], Moscow, Khimiya, 1982.
- [4] **S.N. Zhurkov, V.I. Vettegren, I.I. Novak, K.N. Kashintseva**, Izucheniye mekhanicheskikh napryazhennykh svyazey v polimere metodom infrakrasnoy spektroskopii [The study of mechanical stressed bonds in the polymer using infrared spectroscopy], DAN SSSR. 176(3) (1967) 623– 626.
- [5] **V.I. Vettegren, L.S. Titenkov, S.V. Bronnikov**, Thermophysical properties of macromolecules in the block state, J. Thermal Analys. 38 (5) (1992) 1031–1045.
- [6] **A.I. Slutsker, V.L. Gilyarov, G. Dadobayev, et al.**, Negative longitudinal expansion and the amplitude of longitudinal vibrations in poly(ethylene) crystals, Physics of Solid State. 44 (5) (2002) 964– 971.
- [7] **C.W. Bunn**, The crystal structure of long-chain normal paraffin hydrocarbons. The 'shape' of the >CH₂ group, Trans. Faraday Soc. 35 (1939) 482–491.
- [8] **A.I. Slutsker, V.I. Vettegren', V.B. Kulik, et al.**, Detailing of deformation processes in polymeric crystals, Physics of Solid State. 57 (11) (2015) 2305–2313.
- [9] **R.S. Rasmusen**, Vibrational frequency assignments for paraffin hydrocarbons; infra-red absorption spectra of the butanes and pentanes, J. Chem. Phys. 16 (7) (1948) 712–722.

THE AUTHORS

SLUTSKER Alexander I.

Ioffe Physical Technical Institute of RAS

26 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation

Alexander.Slutsker@mail.ioffe.ru

POLIKARPOV Yuri I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

yuryi.polikarpov@yandex.ru

KAROV DMITRY D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

dmkarov@yandex.ru

*Д.В. Панькин, М.Б. Смирнов*

Санкт-Петербургский государственный университет

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ДЛЯ ОЦЕНКИ ТОЛЩИНЫ ИНТЕРФЕЙСНОГО СЛОЯ В СВЕРХРЕШЕТКАХ AlN/GaN

В рамках модели диэлектрического континуума рассматривается поведение полярных оптических фононов в четырехслойных периодических системах со слоями GaN, AlN и твердым раствором на их основе. Аналитически установлен вид векового уравнения, описывающего свойства данного типа фононов в системах с различным отношением значений толщины слоев в практически важном короткопериодном пределе. Модель бинарной слоистой структуры, традиционно применяемая ранее для описания свойств сверхрешеток (СР), дополнена двумя слоями, имеющими диэлектрические свойства, характерные для твердого раствора $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$. Такую модель можно применять для описания тонкопериодных бинарных СР с размытыми интерфейсами. На основании полученных результатов сделано заключение, что введение дополнительного слоя приводит к появлению дополнительных слабоинтенсивных мод в спектрах комбинационного рассеяния, величина частотного расщепления которых зависит от толщины переходного слоя. В то же время значения частот основных интенсивных мод в указанных спектрах слабо зависят от толщины интерфейса, но весьма чувствительны к отношению значений толщины слоев GaN и AlN.

ПОЛЯРНЫЙ ФОНОН, МОДЕЛЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОНТИНУУМА, НИТРИДНАЯ СВЕРХРЕШЕТКА.

Введение

Широкозонные нитридные полупроводниковые соединения обладают рядом выдающихся свойств, открывающих широкие возможности их использования в оптоэлектронных приборах [1 – 3]. Большая величина запрещенной зоны позволяет таким устройствам работать в условиях высоких напряжений и температур [4, 5]. В настоящее время светоизлучающие диоды на основе широкозонных нитридов часто используются в оптоэлектронных устройствах спектрального диапазона от зеленой до УФ области [6, 7]. Наноструктуры на основе таких соединений позволяют существенно расширить возможности применения данных материалов.

Ключевым моментом, влияющим на эффективность оптоэлектронных приборов на основе гетероструктур, является качество структуры выращенных образцов [8, 9]. Спектроскопия комбинационного

рассеяния света (КР) считается в настоящее время перспективным методом для неразрушающего бесконтактного контроля качества и изучения выращенных структур. Высокая разрешающая способность современных КР-спектрометров вместе с высокой чувствительностью детекторов и соответствующим лазерным оборудованием позволяют регистрировать с высокой спектральной точностью даже очень слабые сигналы. Однако, наряду с задачей регистрации КР-сигнала, важным моментом является интерпретация полученного спектра.

В данной работе рассматривается возможность применения КР для контроля сверхрешеток (СР) на базе вюрцитных кристаллических нитридов GaN, AlN и их твердых растворов. По мере уменьшения периода таких СР все более актуальным становится вопрос о границе раздела [8] и об учете ее возможного несовершенства. Настоящее исследование рассматривает

изменение спектра делокализованных полярных оптических фононов при наличии размытого интерфейса. Моделирование размытости интерфейса осуществляется путем введения дополнительного слоя с промежуточными свойствами, характерными для твердого раствора $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$. Такой подход превращает стандартную задачу о двухслойной бинарной СР в задачу о четырехслойной СР. Результаты, полученные в рамках модели диэлектрического континуума (МДК), интерпретируются на основании анализа амплитуд атомных смещений и индуцированного ими электрического поля.

Модель диэлектрического континуума

С целью моделирования свойств полярных оптических фононов мы используем модель диэлектрического континуума. Основы данной модели были заложены в работе [10]. Применение данного подхода для описания поведения интерфейсных и квазиконфайнментных фононов в бинарных СР GaN/AlN можно найти в работах [11, 12]. Данная модель основана на классических уравнениях электродинамики. Для случая непроводящей среды, в которой отсутствуют объемные заряды, уравнения для напряженности и индукции электрического поля имеют следующий вид:

$$\text{rot}\mathbf{E} = 0, \quad (1)$$

$$\text{div}\mathbf{D} = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon\mathbf{E}. \quad (3)$$

На границе раздела двух сред должны выполняться условия непрерывности тангенциальной (соответствующее направление обозначено индексом x) составляющей напряженности электрического поля и нормальной (соответствующее направление обозначено индексом z) составляющей вектора индукции электрического поля:

$$E_{1,x} = E_{2,x}, \quad (4)$$

$$\epsilon_{zz}^{(1)} E_{1,z} = \epsilon_{zz}^{(2)} E_{2,z}, \quad (5)$$

где $\epsilon^{(1)}$ и $\epsilon^{(2)}$ — диэлектрические проницаемости граничащих сред.

В МДК предполагается, что частотную зависимость диэлектрической проницаемо-

сти можно выразить как

$$\epsilon = \epsilon^\infty \frac{\omega_{\text{LO}}^2 - \omega^2}{\omega_{\text{TO}}^2 - \omega^2}. \quad (6)$$

Выражение (6) описывает диэлектрическую функцию одномодового кристалла в области фононных частот [13]. Здесь ω_{LO} , ω_{TO} — частоты продольных и поперечных оптических фононов; ϵ^∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость материала.

В зависимости от направления поляризации полярные фононы в нитридных СР можно отнести либо к типу A_1 (атомы осциллируют вдоль оси СР), либо к дважды вырожденному типу E_1 (атомы осциллируют в направлениях, параллельных плоскости интерфейса). В зависимости от угла между волновым вектором $\mathbf{q}$ и вектором поляризации $\mathbf{P}$ фононы разделяются на продольные (LO) и поперечные (TO). Соответственно, мы имеем четыре типа полярных фононов: при $\mathbf{q} \parallel z$ — это $A_1(\text{LO})$ и $E_1(\text{TO})$, при $\mathbf{q} \parallel x$ — $A_1(\text{TO})$ и $E_1(\text{LO})$.

МДК основана на поиске решений уравнений (1) — (6) в виде плоских волн:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}_0 \exp(i\omega t + i\mathbf{q}\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i\omega t + i\mathbf{q}\mathbf{r}).$$

Характерной особенностью СР с плоской границей раздела является возможность разделения решений на два принципиально разных типа в зависимости от направления волнового вектора $\mathbf{q}$. К первому типу относятся решения с волновым вектором, перпендикулярным плоскости интерфейса. Как показано в работе [12], такие фононы локализованы в слоях одного типа, а их частоты близки к значениям в соответствующих объемных материалах. Сдвиги частот таких фононов несут информацию об упругих деформациях в материалах соответствующих слоев [14]. Кроме того, путем подсчета числа гармоник таких стоячих волн можно оценить толщину слоев, в которых они локализованы [15]. Однако интенсивности высших гармоник таких мод в спектрах КР могут быть низкими, что приводит к размыванию этих линий на фоне других сигналов, например сигналов от буферных слоев.



К другому типу решений относятся фоновые моды с волновым вектором, лежащим в плоскости интерфейса. Напряженность электрического поля, индуцированного такими модами, экспоненциально спадает по мере удаления от интерфейса в глубь слоя. Такой спад интенсивности наиболее ярко выражен в изолированных гетеропереходах или длиннопериодных СР. Поэтому данный тип фоновых мод получил название интерфейсных. Частоты таких фононов, как показывают многочисленные экспериментальные и теоретические работы (см., например, [11, 12]), чувствительны к соотношению толщин слоев и могут быть использованы для характеристики выращенной структуры. Дальнейшему их изучению и будет посвящена данная статья.

Случай четырехслойной структуры

Переход от бинарной СР к четырехслойной вызван необходимостью учета того, что в короткопериодных структурах, характерные толщины которых не превышают десятка монослоев, уже нельзя пренебрегать размытостью интерфейсов. Интерфейс представляет собой дополнительный переходный слой, в котором одна структура постепенно перестраивается в другую. Как следствие, эти интерфейсные слои обладают промежуточными характеристиками. Для описания таких структур в МДК нами был введен дополнительный переходный слой с параметрами, характерными для твердого раствора $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$.

В общем случае в нитридных сверхрешетках возможны два типа полярных оптических фоновых мод [11]:

1) амплитуды фоновых мод имеют экспоненциальный характер в обоих слоях (так называемые интерфейсные моды (IF));

2) амплитуда фоновой моды имеет экспоненциально затухающий характер в одном из слоев и распространяющийся в другом (так называемый случай квазиконфайнментных мод (QC)).

В области фоновых частот диэлектрическая функция может принимать как положительные, так и отрицательные зна-

чения (см. формулу (6)). В анизотропных кристаллах, к которым относятся и рассматриваемые нами нитриды, изменения знака компонент ϵ_{xx} и ϵ_{zz} происходят на разных частотах. Поэтому знак произведения $\epsilon_{xx}\epsilon_{zz}$ меняется в зависимости от частоты. Как было показано в работе [11], характер фоновой моды (ее отнесение к типу 1 или 2) зависит от знака произведения $\epsilon_{xx}\epsilon_{zz}$, который меняется в зависимости от частоты (это показано на рис. 1). Фоновое поведение твердого раствора, как и в случае основных материалов GaN и AlN, тоже является одномодовым [16]. Частоты оптических фононов в таких СР, как и в случае бинарных СР (см. рис. 1) лежат в двух интервалах: ТО-диапазон (от A_{ITO} -GaN до E_{ITO} -AlN) и LO-диапазон (от A_{ILO} -GaN до E_{ILO} -AlN). Тем не менее, наличие промежуточного слоя с характеристиками твердого раствора приводит к усложнению деления ТО- и LO- диапазонов.

Как видно из рис. 1, введение двух дополнительных слоев из твердого раствора приводит к тому, что в области частот от E_{ITO} -GaN до A_{ITO} -AlN появляются моды, для которых характер атомных движений в переходных слоях является распространяющимся. Частоты таких мод лежат в ТО-диапазоне от A_{ITO} - $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ до E_{ITO} - $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$, а в LO-диапазоне — от A_{ILO} - $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ до E_{ILO} - $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$. Остальная частотная область в диапазоне от E_{ITO} -GaN до A_{ITO} -AlN и от E_{ILO} -GaN до A_{ILO} -AlN соответствует фононам, для которых электрические поля проявляют экспоненциальный характер. Определение частот этих мод состоит в нахождении корней определителя матрицы, элементы которой составлены из коэффициентов граничных условий вида (4), (5) на интерфейсах, и условия периодичности.

С практической точки зрения наиболее важным является случай короткопериодных структур, т. е. структур с характерными размерами слоев порядка единиц — десятков нанометров. Для таких структур оправдано длинноволновое приближение, в котором параметр $s = qd \rightarrow 0$, где q — модуль волнового вектора фонона, d — толщина периода СР.

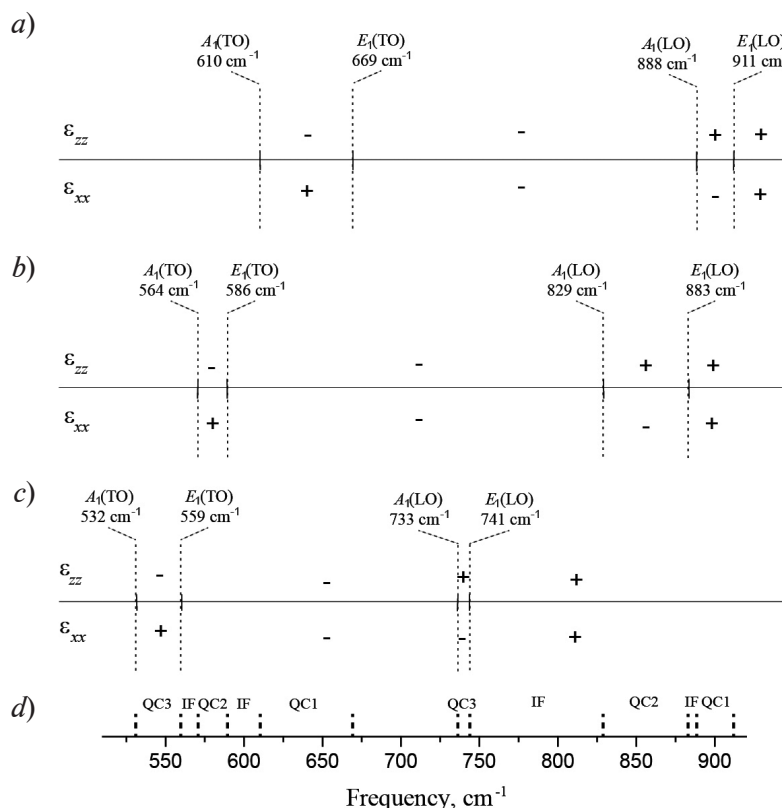


Рис. 1. Изменение знака величин диэлектрической проницаемости для слоев AlN (a), $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (b), GaN (c); d – типы фононных мод: интерфейсная (IF), квазиконфайнментная с распространяющимся характером в i -м слое (QC i , $i = 1$ (для AlN), 2 (для $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$), 3 (для GaN)) и затухающим характером в остальных слоях

Применение МДК для описания полярных оптических фононов в четырехслойных структурах

В длинноволновом приближении мы можем пренебречь пространственными изменениями электрического поля и в каждом из слоев считать поле однородным. Направление роста нитридных СР совпадает с направлением гексагональной оси объемных составляющих. Поэтому можно считать, что и сама СР имеет симметрию C_{3v} [20]. Как следствие, полярные фононные моды можно разделить на два неприводимых представления: невырожденный тип A (с поляризацией вдоль оси роста) и дважды вырожденный E (с поляризацией в плоскости интерфейса). В зависимости от направления волнового вектора эти фононы могут быть продольными (LO) или поперечными (TO). Для LO-фононов волновой вектор параллелен вектору поляризации, а для

ТО-фононов – перпендикулярен. Согласно дисперсионному соотношению (6), для LO-фононов мы имеем равенство

$$\bar{\varepsilon} = 0, \quad (7)$$

а для ТО-фононов должно выполняться другое равенство:

$$\bar{\varepsilon} = \infty. \quad (8)$$

Условие (4) означает, что напряженность поля в плоскости интерфейса во всех слоях одинакова (здесь и далее в формулах для обозначения величин, относящихся к определенным слоям, используются следующие подстрочные индексы: 1 – для слоя AlN, 2 – для слоя $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, 3 – для слоя GaN):

$$E_{x,1} = E_{x,2} = E_{x,3} = \bar{E}_x,$$

где $E_{x,m}$ ($m = 1, 2, 3$) – напряженность поля в плоскости интерфейса в слое m .

Из этого следует выражение для среднего значения диэлектрической проницаемости в плоскости интерфейса:

$$\overline{\epsilon}_{xx} = \frac{1}{d}(d_1\epsilon_{xx,1} + d_3\epsilon_{xx,3} + 2d_2\epsilon_{xx,2}), \quad (9)$$

где d_m ($m = 1, 2, 3$) – толщина, а $\epsilon_{xx,m}$ ($m = 1, 2, 3$) – диэлектрическая проницаемость в плоскости в слое m .

Условие (5) означает, что вектор смещения вдоль оси роста СР во всех слоях одинаков:

$$D_{z,1} = D_{z,1} = D_{z,1} = \overline{D}_z,$$

где $D_{z,m}$ ($m = 1, 2, 3$) – вектор смещения вдоль оси роста СР в слое m .

Из этого следует выражение для среднего значения обратной продольной диэлектрической проницаемости вдоль оси роста СР:

$$\frac{1}{\overline{\epsilon}_{zz}} = \frac{1}{d} \left(\frac{d_1}{\epsilon_{zz,1}} + \frac{d_3}{\epsilon_{zz,3}} + \frac{2d_2}{\epsilon_{zz,2}} \right), \quad (10)$$

где $\epsilon_{zz,m}$ ($m = 1, 2, 3$) – диэлектрическая проницаемость вдоль оси роста СР в слое m .

В случае СР с идеальными интерфейсами ($d_2 = 0$) формулы (9), (10) переходят в формулы, приведенные в работе [12].

Как было отмечено выше, в нитридных СР полярные оптические моды можно разбить на четыре типа: $A(\text{TO})$, $E(\text{LO})$, $A(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$. Для каждого из этих типов должно выполняться либо условие (7), либо условие (8). Для фононов с разными типами симметрии эти условия перечислены в табл. 1. Используя условия, приведенные в правом столбце табл. 1, соотношения (9), (10), диэлектрические функции (6) с параметрами из табл. 2, мы получаем уравнения для определения частот фононов для каждого из четырех типов.

В данной работе изложены результаты моделирования спектра полярных фононов в четырехслойной структуре. В ходе расчета фиксировалась общая длина периода СР и варьировалось отношение толщин слоев

Таблица 1

Соотношения между типами фононной моды и особенностями диэлектрической функции

Симметрия фонона	Диэлектрическая функция
$A(\text{TO})$	$\overline{\epsilon}_{zz} = \infty$
$E(\text{LO})$	$\overline{\epsilon}_{xx} = 0$
$A(\text{LO})$	$\overline{\epsilon}_{zz} = 0$
$E(\text{TO})$	$\overline{\epsilon}_{xx} = \infty$

Таблица 2

Фононные характеристики материалов

Материал	$\omega, \text{см}^{-1}$				ϵ^∞
	$A_1(\text{LO})$	$A_1(\text{TO})$	$E_1(\text{LO})$	$E_1(\text{TO})$	
GaN [17]	733	532	741	559	5,35
$\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ [18]	829	564	883	586	5,06*
AlN [19]	888	610	911	669	4,76

*) Среднее между значениями для объемных материалов GaN и AlN.

Обозначения: ω – частота фонона; A_1 , E_1 – типы мод; LO, TO – продольная и поперечная моды соответственно; ϵ^∞ – высокочастотная диэлектрическая постоянная материала.

GaN и AlN при фиксированной толщине переходных слоев $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$. В расчетах использованы безразмерные координаты s . Значение периода СР в относительных единицах составляло $s = qd = 0,12$ при толщине переходного слоя $s_2 = 0,01$. Таким образом, толщины слоев GaN и AlN менялись в пределах $0,01 - 0,09$. Для удобства анализа вводится безразмерный параметр

$$h = d_2/(d_1 + d_3),$$

где d_m — значения толщины слоев в размерных единицах ($m = 1, 2, 3$).

В полученных решениях можно выделить две группы фоновых мод (I и II). Эти моды имеют следующие частоты:

I. близкие к соответствующим значениям в объемных составляющих и локализованные в одном из слоев;

II. сильно зависящие от соотношения толщин слоев и делокализованные по всей СР.

К первому типу решений относятся фононы симметрии $A(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$. В фононах этой симметрии частоты полярных фононов близки к частотам фононов в объемных материалах GaN, AlN, $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ (см. табл. 2). Отличие от случая бинарной СР AlN/GaN состоит в том, что в спектрах четырехслойных структур появляются фононы с частотами, характерными для материала промежуточного слоя. Как и в случае бинарной СР, частоты этих мод не изменяются при изменении относительной толщины слоев GaN и AlN.

Качественно иной характер проявляют моды симметрии $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$. Данные типы мод чувствительны к соотношению толщин слоев. Рассчитанные частоты таких мод в четырехслойных и бинарных СР приведены на рис. 2.

Для мод $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ в четырехслойной периодической структуре мы получили по три решения. Одно из них попадает в «нормальный» диапазон: для $A(\text{TO})$ моды оно лежит в диапазоне ТО-частот, а для $E(\text{LO})$ моды — в диапазоне ЛО-частот. Частоты двух других решений оказываются в «аномальном» диапазоне: для $A(\text{TO})$ мод одно лежит в диапазоне ЛО-частот, а другое, для $E(\text{LO})$ мод, — в диапазоне ТО-частот.

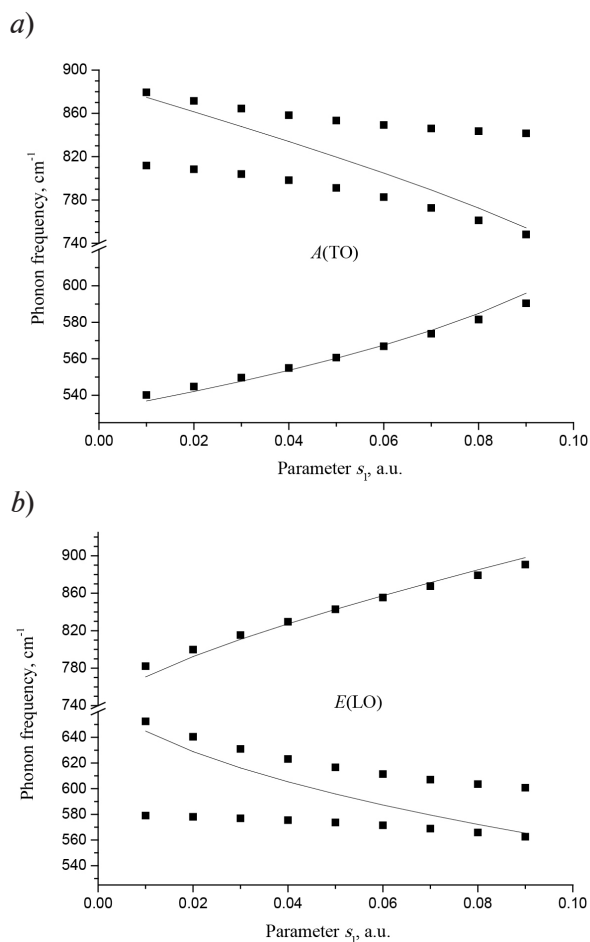


Рис. 2. Зависимости частот $A(\text{TO})$ (а) и $E(\text{LO})$ (б) фононов от параметра $s_1 = qd_1$ в ТО- и ЛО-диапазонах. Показаны случаи СР, содержащих переходные слои $\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ с фиксированными толщинами $s_2 = 0,01$ (символы) и не содержащих, $s_2 = 0$ (линии).

В обоих случаях фиксированный период СР составлял $s = qd = 0,12$

«Нормальные» моды характеризуются синфазными амплитудами атомных смещений, а потому, как и в случае бинарной СР [12], являются наиболее интенсивными в спектрах КР (далее указанные моды будут обозначаться соответственно $A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$). Присутствующие промежуточные слои начинают оказывать заметное влияние на эти моды лишь в случае, когда толщина одного из слоев становится сопоставимой с толщиной переходного слоя. Но в большом диапазоне отношений толщин слоев GaN и AlN частоты этих мод почти не зависят

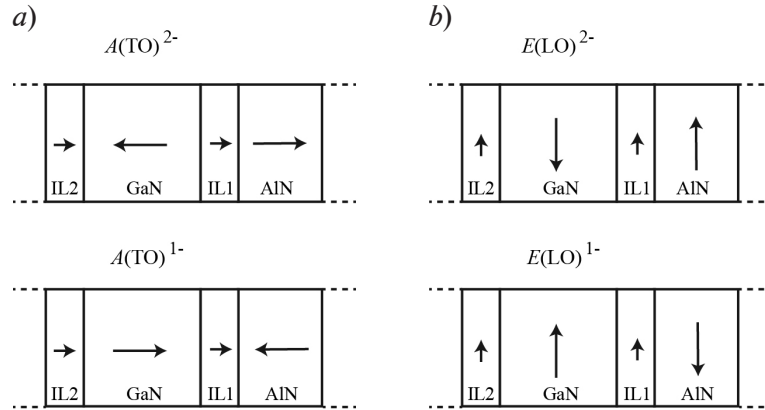


Рис. 3. Распределения амплитуд атомных смещений в периоде четырехслойной CP (IL1 и IL2 – переходные слои $Al_{0,5}Ga_{0,5}N$). Представлены моды $A(TO)^{1-}$ и $A(TO)^{2-}$ (a), $E(LO)^{1-}$ и $E(LO)^{2-}$ (b). Стрелки отражают фазовые соотношения между атомными смещениями в слоях CP

от наличия промежуточного слоя. Этот результат подтверждает возможность использования этих мод для характеристики структуры выращенных образцов.

Теперь обратимся к анализу «аномальных» мод. Обозначим их соответственно $A(TO)^{1-}$, $A(TO)^{2-}$ и $E(LO)^{1-}$, $E(LO)^{2-}$. В таких модах амплитуды атомных смещений в слоях GaN и AlN антифазны. Введение между ними промежуточного слоя приводит к тому, что данные моды расщепляются по сравнению с бинарной CP. Расщепление связано с тем, что в случае фононов с более высокой частотой ($A(TO)^{1-}$, $E(LO)^{1-}$) атомы в переходном слое движутся синфазно с атомами в слое GaN и антифазно с AlN, а в случае фононов с меньшей частотой ($A(TO)^{2-}$, $E(LO)^{2-}$) атомы в переходном слое движутся синфазно с атомами в слое AlN и антифазно с атомами GaN (рис. 3).

Как видно из рис. 4, величина расщепления частот «аномальных» мод увеличивается с ростом толщины интерфейса и достигает величины 50 cm^{-1} при $h = 0,10$. Моделирование четырехслойных систем с различными толщинами переходных слоев показывает, что величина частотного расщепления этих мод несет информацию об относительных толщинах переходных слоев (см. рис. 4).

Результаты и выводы

По результатам моделирования спектра полярных оптических фононов в четырех-

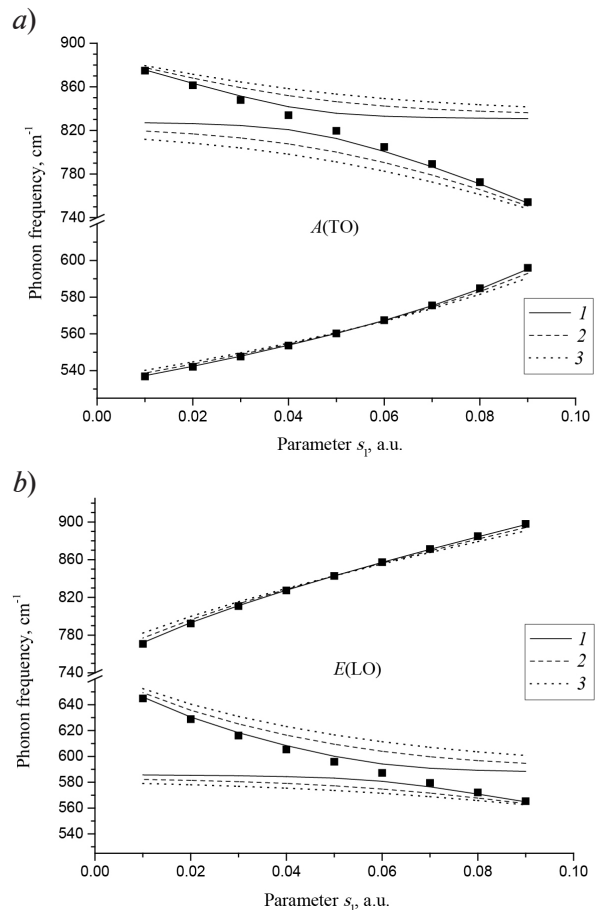


Рис. 4. Зависимости частот полярных фононных мод $A(TO)$ (a) и $E(LO)$ (b) в бинарных CP GaN/AlN с размытым интерфейсом от толщины слоя AlN s_1 , выраженной в безразмерных единицах, при разных значениях параметра h : 0 (символы), 0,01 (1), 0,05 (2), 0,10 (3)

слоистых СР предсказано появление дополнительных (по сравнению с бинарными СР) фоновых мод, несущих информацию о размерах переходного слоя. Показано, что в четырехслойных СР в фоновых спектрах симметрии $A(\text{TO})$ и $E(\text{LO})$ присутствует несколько мод, соответствующих разным фазовым отношениям атомных смещений как в слоях основных материалов, так и переходных слоях. Зависимость частот наиболее интенсивных линий $A(\text{TO})^+$ и $E(\text{LO})^+$ от отношения толщин слоев GaN/AlN практически совпадает с таковой для случая бинарной СР. Поэтому

эти линии могут быть использованы для определения отношения толщин основных слоев GaN/AlN даже при наличии размытых интерфейсов. Величины расщепления слабоинтенсивных мод ($A(\text{TO})^{1-}$, $A(\text{TO})^{2-}$ и $E(\text{LO})^{1-}$, $E(\text{LO})^{2-}$) могут быть использованы для определения относительной толщины переходного слоя. Таким образом, экспериментальное определение частот полярных оптических фононов открывает возможность оценки относительных размеров как основных слоев выращенной структуры, так и степени размытости интерфейса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Hofstetter D., Baumann E., Giorgetta F.R., et al. High frequency measurements on an AlN/GaN-based intersubband detector at 1550 and 780 nm // *Appl. Phys. Lett.* 2008. Vol. 92. No. 1. Pp. 231104–231106.
- [2] Nikishin S., Holtz M., Temkin H. Digital alloys of AlN/AlGaIn for deep UV light emitting diodes // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2005. Vol. 44. No. 10. Pp. 7221–7226.
- [3] Razeghi M., Henini M. Optoelectronic devices: III – nitrides. Oxford (England): Elsevier, 2004.
- [4] Maier D., Alomari M., Grandjean N.J.-F., et al. Testing the temperature limits of GaN-based HEMT devices // *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability.* 2010. Vol. 10. No. 4. Pp. 427–436.
- [5] Jiang H.X., Lin J.Y. III-nitride quantum devices – microphotonics // *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences.* 2003. Vol. 28. No. 2. Pp. 131–183.
- [6] Ponce F.A., Bour D.P. Nitride-based semiconductors for blue and green light emitting devices // *Nature.* 1997. Vol. 386. No. 6623. Pp. 351–359.
- [7] Nakamura S., Krames M.R. History of gallium-nitride-based light-emitting diodes for illumination // *Proceedings of the IEEE.* 2013. Vol. 101. No. 10. Pp. 2211–2220.
- [8] Zanato D., Gokden S., Balkan N., et al. The effect of interface-roughness and dislocation scattering on low temperature mobility of 2D electron gas in GaN/AlGaIn // *Semiconductor Science and Technology.* 2004. Vol. 19. No. 3. Pp. 427–432.
- [9] Kruger R., Kruse C., Dennemarck J., et al. Characterization and structuring of nitride-based heterostructures for vertical-cavity surface-emitting lasers // *14th Conference on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford, England, Oxford University Press.* 2005. No. 1. Pp. 79–82.
- [10] Rytov S.M. Electromagnetic properties of a finely stratified medium // *Soviet Physics JETP.* 1956. Vol. 2. No. 3. Pp. 466–475.
- [11] Gleize J., Renucci M.A., Frandon J., Demangeot F. Anisotropy effects on polar optical phonons in wurtzite GaN/AlN superlattices // *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 60. No. 23. Pp. 15985–15992.
- [12] Смирнов М.Б., Карпов С.В., Давыдов В.Ю. и др. Колебательные спектры сверхрешеток AlN/GaN: теория и эксперимент // *Физика твердого тела.* 2005. Т. 47. № 4. С. 716–727.
- [13] Born M., Huang K. Dynamical theory of crystal lattices. First ed. Oxford (England): Clarendon Press, 1954.
- [14] Darakchieva V., Valcheva E., Paskov P.P., et al. Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 71. No. 11. Pp. 115329–115337.
- [15] Shields A.J., Chamberlain M.P., Cardona M.N., Eber K. Raman scattering due to interface optical phonons in GaAs/AlAs multiple quantum wells // *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 51. No. 24. Pp. 17728–17739.
- [16] Grille H., Schnittler Ch., Bechstedt F. Phonons in ternary group –III nitride alloys // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 61. No. 9. Pp. 6091–7105.
- [17] Davydov V.Yu., Kitaev Yu.E., Goncharuk I.N., et al. Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 58. No. 19. Pp. 12899–12907.
- [18] Давыдов В.Ю. Оптическое исследование полупроводниковых структур на основе нитридов металлов III группы и разработка коли-



чественных методик их диагностики. Автореф. дис. докт. физ.-мат. наук. СПб, 2009. 13 с.

[19] Kuball M., Hayes J.M., Prins A.D., et. al. Raman scattering studies on single-crystalline bulk AlN under high pressures // Appl. Phys. Lett. 2001.

Vol. 78. No. 6. Pp. 724 –726.

[20] Kitaev Yu.E., Limonov M.F., Tronc P., Yushin G.N. Raman-active modes in wurtzite (GaN)_m(AlN)_n superlattices // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 57. No. 22. Pp. 14209 –14212.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАНЬКИН Дмитрий Васильевич – аспирант кафедры физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9
dima-pankin@mail.ru

СМИРНОВ Михаил Борисович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики твердого тела Санкт-Петербургского государственного университета.

199034, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9
smirnomb@rambler.ru

Pankin D.V., Smirnov M.B. THE APPLICABILITY OF RAMAN SPECTROSCOPY FOR ESTIMATION OF INTERFACES THICKNESS IN THE AlN/GaN SUPERLATTICES.

Polar optical phonons in quaternary nitride-based superlattices have been investigated in the framework of dielectric continuum model. In the considered systems, the superlattice period consisted of two main layers GaN and AlN and two interstitial layers Al_{0.5}Ga_{0.5}N. Such structure simulates binary superlattices with diffuse interfaces. The presence of the finite thickness interface layers was shown to give rise to appearance of several low-intensity additional phonon modes active in Raman scattering; frequency splitting of such modes is sensitive to relative thickness of intermediate layers. The fundamental Raman-intense polar phonon modes were also stated to be independent on the interface thickness, and these modes being very sensitive to the main layer thicknesses.

POLAR PHONON, DIELECTRIC CONTINUUM MODEL, NITRIDE-BASED SUPERLATTICE.

REFERENCES

[1] D. Hofstetter, E. Baumann, F.R. Giorgetta, et al., High frequency measurements on an AlN/GaN-based intersubband detector at 1550 and 780 nm, Applied Physics Letters. 92(1) (2008) 231104–231106.

[2] S. Nikishin, M. Holtz, H. Temkin, Digital alloys of AlN/AlGaIn for deep UV light emitting diodes, Japanese Journal of Applied Physics. 44(10) (2005) 7221–7226.

[3] M. Razeghi, M. Henini, Optoelectronic devices: III-nitrides, Elsevier, Oxford, England, 2004.

[4] D. Maier, M. Alomari, N. Grandjean, et al., Testing the temperature limits of GaN-based HEMT devices, IEEE Transactions on Device and Materials Reliability. 10 (4) (2010) 427–436.

[5] H.X. Jiang, J.Y. Lin, III-nitride quantum devices – microphotonics, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences. 28(2) (2003) 131–183.

[6] F.A. Ponce, D.P. Bour, Nitride-based semiconductors for blue and green light emitting devices, Nature. 386(6623) (1997) 351–359.

[7] S. Nakamura, M.R. Krames, History of

gallium-nitride-based light-emitting diodes for illumination, Proceedings of the IEEE. 101(10) (2013) 2211–2220.

[8] D. Zanato, S. Gokden, N. Balkan, et al., The effect of interface-roughness and dislocation scattering on low temperature mobility of 2D electron gas in GaN/AlGaIn, Semiconductor Science and Technology. 19(3) (2004) 427–432.

[9] R. Kruger, C. Kruse, J. Dennemarck, et al., Characterization and structuring of nitride-based heterostructures for vertical-cavity surface-emitting lasers, 14th Conference on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford, England, Oxford University Press. 1 (2005) 79–82.

[10] S.M. Rytov, Electromagnetic properties of a finely stratified medium, Soviet Physics JETP. 2(3) (1956) 466–475.

[11] J. Gleize, M.A. Renucci, J. Frandon, F. Demangeot, Anisotropy effects on polar optical phonons in wurtzite GaN/AlN superlattices, Phys. Rev. B. 60(23) (1999) 15985–15992.

[12] M.B. Smirnov, S.V. Karpov, V.Yu. Davydov, et al., Vibrational spectra of AlN/GaN superlattices:

theory and experiment, *Physics of the Solid State*. 47(4) (2005) 742–753.

[13] **M. Born, K. Huang**, *Dynamical theory of crystal lattices*, First ed., Clarendon Press, Oxford, England, 1954.

[14] **V. Darakchieva, E. Valcheva, P.P. Paskov, et al.**, Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices, *Phys. Rev. B*. 71(11) (2005) 115329–115337.

[15] **A.J. Shields, M.P. Chamberlain, M. Cardona, K. Eber**, Raman scattering due to interface optical phonons in GaAs/AlAs multiple quantum wells, *Phys. Rev. B*. 51(24) (1995) 17728–17739.

[16] **H. Grille, Ch. Schnittler, F. Bechstedt**, Phonons in ternary group –III nitride alloys, *Phys. Rev. B*. 61(9) (2000) 6091–7105.

[17] **V.Yu. Davydov, Yu.E. Kitaev, I.N. Goncharuk, et al.**, Phonon dispersion and Raman

scattering in hexagonal GaN and AlN, *Phys. Rev. B*. 58(19) (1998) 12899–12907.

[18] **V.Yu. Davydov**, *Opticheskoe issledovanie poluprovodnikovyyh struktur na osnove nitridov metallov III gruppy i razrabotka kolichstvennyh metodik ih diagnostiki*. [Optical investigation of semiconductor structures on the basis of group III metal nitrides and design of quantitative methods of its diagnostics], Diss.doct. fiz.-mat. Nauk, St. Petersburg, 2009.

[19] **M. Kuball, J.M. Hayes, A.D. Prins, et al.**, Raman scattering studies on single-crystalline bulk AlN under high pressures, *Appl. Phys. Lett.* 78(6) (2001) 724–726.

[20] **Yu.E. Kitaev, M.F. Limonov, P. Tronc, G.N. Yushin**, Raman-active modes in wurtzite (GaN)_m(AlN)_n superlattices, *Phys. Rev. B*. 57(22) (1998) 1420–14212.

THE AUTHORS

PANKIN Dmitrii V.

St. Petersburg State University

Universitetskaya Emb., 7-9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation
dima-pankin@mail.ru

SMIRNOV Mikhail B.

St. Petersburg State University

Universitetskaya Emb., 7-9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation
smirnomb@rambler.ru



THE STUDY OF Cu/Nb INTERFACE DIFFUSION USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

The peculiarities of interfacial boundary diffusion where the boundary goes between nonmiscible metals with body-centered cubic (BCC) and face-centered cubic (FCC) lattices have been studied taking, as a case in point, the Cu/Nb system, and using the molecular dynamics method. The diffusion atomic displacements were shown to occur mainly near the mismatch dislocations and their intersections. The diffusion of the high-melting component was found to be characterized by high anisotropy with the predominant atomic displacement along the dense-packed direction in the interfacial boundary plane being common to FCC and BCC lattices with the Kurdjumov-Sachs mutual orientation.

INTERFACE DIFFUSION, COPPER-NIOBIUM, MOLECULAR DYNAMICS, KURDYUMOV-SACHS MUTUAL ORIENTATION.

1. Introduction

Materials on the basis of the copper-niobium system with dimensions of structural elements in the nanoscale such as nanolaminates and nanowires [1] represent the prototype of materials for advanced practical applications, due to the combination of high strength characteristics, good electrical conductivity, possible use as superconductors and radiation resistance [2–4]. The radiation resistance of nanolaminates grows with a decrease in the thickness of the component layers [3], which indicates a significant influence of interfacial boundaries on the processes of annihilation of radiation defects. The role of diffusion conductivity of the interphase boundary for annihilation of defects in the copper-niobium system was confirmed by a study of low-temperature diffusion under irradiation [5]. However, the details of this process are yet to be understood completely. In this paper, we study the Cu/Nb system by atomistic simulations to establish the mechanism of interfacial diffusion.

2. Research technique

To perform a molecular-dynamic modeling of diffusion, a sample of Cu/Nb nanolaminate containing an interfacial boundary was used. The prismatic sample contained 36,000 atoms

and measured $8.9 \times 9.8 \times 6.0$ nm. The copper and niobium layers were 3.0 nm thick. The layers of the Cu-Nb sample had Kurdjumov-Sachs mutual orientation observed experimentally [6]. An example of such a structure is shown in Fig. 1, where the face-centered cubic (FCC) Cu plane (111) is bordered by the body-centered cubic (BCC) Nb plane (110), and the Cu direction [110] is parallel to the Nb one [111]. Periodic boundary conditions are used.

A procedure for constructing samples and interatomic potentials was successfully used in [7–9]. The well-approved copper potentials constructed by Mishin [10] were used in the molecular dynamic modeling by the embedded-atom method (EAM). The EAM potentials for niobium and the pairwise copper-niobium potentials have been constructed on the base of the experimental data and results of *ab initio* calculations and presented in our papers [7–9].

A molecular dynamic experiment was carried out with the use of a Verlet algorithm in velocity form [11] and the molecular dynamic simulation step was 2 fs (femtoseconds).

The sample with the minimized interfacial boundary energy was used for modeling. Then the required temperature of the modeling experiment was set: from the beginning, within 2,000 molecular dynamic steps, using the

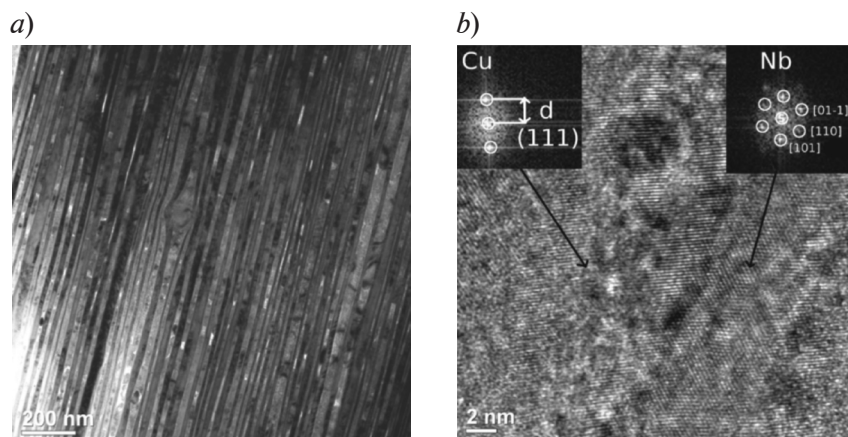


Fig. 1. An example of the structure under study:
a – microphotograph of nanolaminate Cu / Nb (18 nm thick averaged); *b* – Cu/Nb layers
 with the Kurdjumov-Sachs mutual orientation [13]

technique of velocity scaling, and then within 3,000 steps using a Nose-Hoover algorithm [12]. Temperatures were set in the range from 700 to 1200 K in increments of 50 K. After setting the required temperature, the sample was kept within 5,000 steps without affecting the system. At this time, temperature was controlled in the modeling process. The temperature fluctuation near the constant values with an amplitude not exceeding 0.08 % indicated the establishment of the thermodynamic equilibrium in the system under the specified conditions of the modeling.

Further, the diffusion experiment was carried out according to our developed procedure for a molecular dynamics computer experiment which was described in Ref. [14]. 20 starting positions of atoms for the states were separated by 5,000 molecular dynamics steps. Then, within 1.5 million molecular dynamic steps, the sum of squares for diffusion displacements of atoms for each of the initial moments was calculated. 300 points of the time dependence for the sum of squares of atom displacements on the modeling time were recorded. For each of these points, there was an averaging of 20 starts to reduce the impact of random fluctuations. As diffusion displacements of atoms, we took into account the displacement that was more than 1.5 the average distance between the nearest atoms in ideal copper lattice and 1.0 of the average distance between nearest atoms in the case of niobium. We showed the adequacy of such an approach for the diffusion

characteristics of interfacial boundaries in Ref. [15]. We took the time interval of modeling the diffusion experiment as equal to 3 ns.

The molecular dynamic investigation of the diffusion characteristics in nanocrystalline materials through the sum of squared atomic displacements has been successfully used by us in the studies in grain boundary self-diffusion in the high-purity copper and the diffusion of copper along the grain boundaries of niobium and achieved good agreement with the experimental data [9, 14]. This confirms the high reliability of the results obtained by this method.

3. Results and discussion

On the basis of the obtained time-dependence of the sum of squares of atomic displacements at various temperatures, the rate of diffusion displacements $\Delta Z/t$ for copper and niobium atoms was determined in the sample under study. The time-dependent sum of the squared atomic displacements is shown as an example in Fig. 2.

The growth rates $\Delta Z/t$ of the sum of atomic displacements squared as a function of $1/kT$ (k is the Boltzmann constant and T is the sample temperature), are logarithmically plotted for Cu and Nb (see Fig. 3). The construction procedure for these plots was presented in Refs [14, 15]. The activation energy of the diffusion processes at the interfacial boundary was found to be 0.7 ± 0.1 eV/atom for copper and

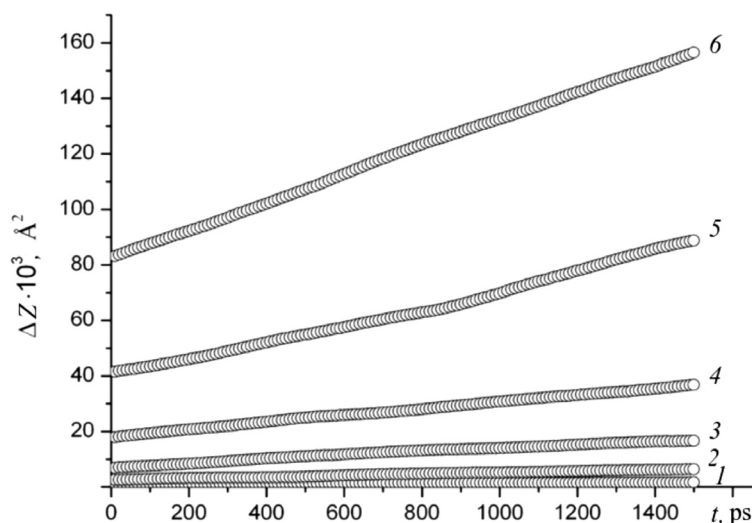


Fig. 2. The plots of ΔZ sum of Cu-atomic displacements squared in the Cu/Nb interfacial boundary versus the simulation time at various temperatures (in K): 700 (1), 800 (2), 900 (3), 1000 (4), 1100 (5), 1200 (6); obtained by molecular dynamics

1.1 ± 0.1 eV/atom for niobium (using the diagrams in Fig. 3).

It is interesting to note that the calculated activation-energy value for diffusion of Cu at the Cu/Nb interfacial boundary corresponds to that of the grain-boundary self-diffusion of Cu equal to 0.71 ± 0.01 eV/atom and the Cu diffusion along grain boundaries of Nb equal to 0.69 ± 0.07 eV/atom at appreciable concentrations of Cu in grain boundaries of Nb [9]. The activation energy for Nb diffusion at the Cu/Nb interface within the error coincides

with the activation energy of Cu diffusion equal to 1.2 ± 0.3 eV/atom in grain boundaries of niobium at a small concentration of copper. This indicates the crucial role of the less refractory metal Cu in the diffusion process at the grain boundaries of the Nb as well as at the interface of the Cu/Nb.

Analysis of the structure of the Cu/Nb interface boundary after the diffusion experiment (see Fig. 4) shows that the diffusion displacements of copper atoms occur only near the mismatch dislocations (see also Fig. 6 ,a)

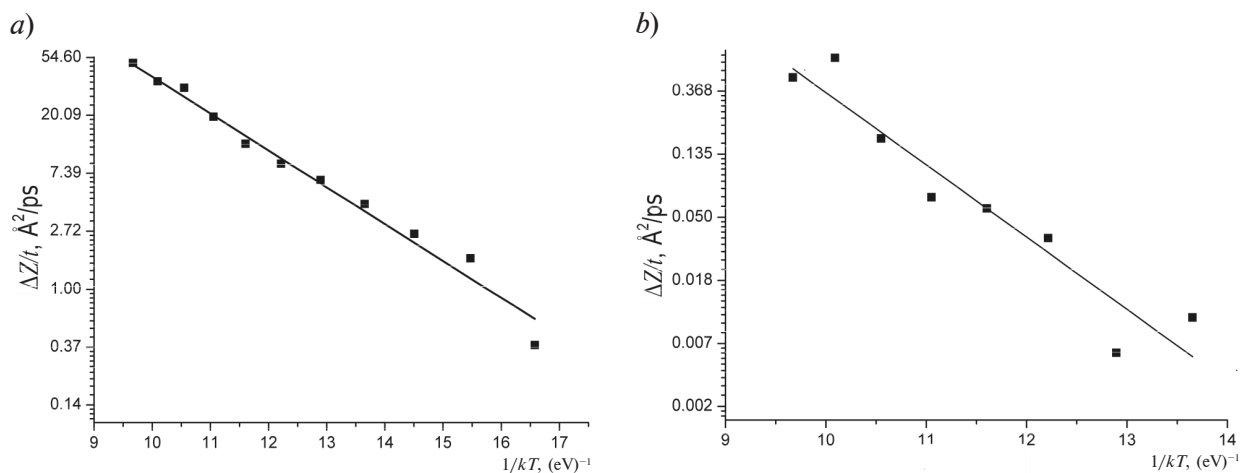


Fig. 3. The plots of the growth rate $\Delta Z/t$ of the sum of atomic displacements squared versus $1/kT$ for the interfacial diffusion of Cu (a) and Nb (b) in the Cu/Nb system obtained by molecular dynamics simulations

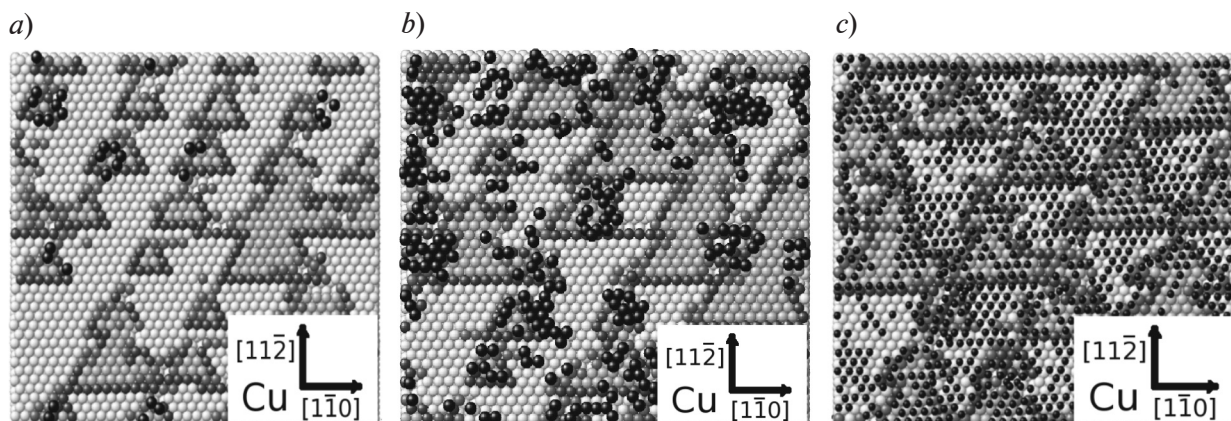


Fig. 4. Cu atoms in the boundary layer shifted at a distance of more than 3.83 Å (are given in black) on a background of the second Cu layer starting with the Cu/Nb interfacial boundary after the diffusion experiment at various temperatures, K: 700 (a), 950 (b), 1200 (c).

The white, the light gray, and the dark gray indicate Cu atoms with local environments which are typical of FCC, HCP, and defect structures, correspondingly

and their intersections, which limit the area of diffusion shifts of atoms. In Fig. 4 these areas are displayed by hexagonal close-packing (HCP) of atoms of the second layer, relative to the layer of copper atoms lying at the interface boundary. This leads to an inhomogeneous distribution of the copper atoms involved in the diffusion process in the boundary layer up to the temperature of ~950 K (0.75 of copper's melting point).

At higher temperatures, the diffusion displacements encompass all copper atoms which are in the boundary layer. In the case of the niobium diffusion (Fig. 5a,b), an

inhomogeneous distribution of the diffusion processes is marked at all examined temperatures, including the highest temperature of 1200 K (0.4 of Nb melting point). It can be explained by the higher melting point of niobium in comparison with that of the copper. The analysis of diffusion displacements of niobium (Fig. 5,b) permitted to identify two mechanisms of diffusion. The former is the vacancy mechanism implemented by structural vacancies formed in the boundary niobium layer. The latter is a new mechanism implemented by displacements of niobium atoms along the mismatch dislocations, which form channels with less dense arrangement

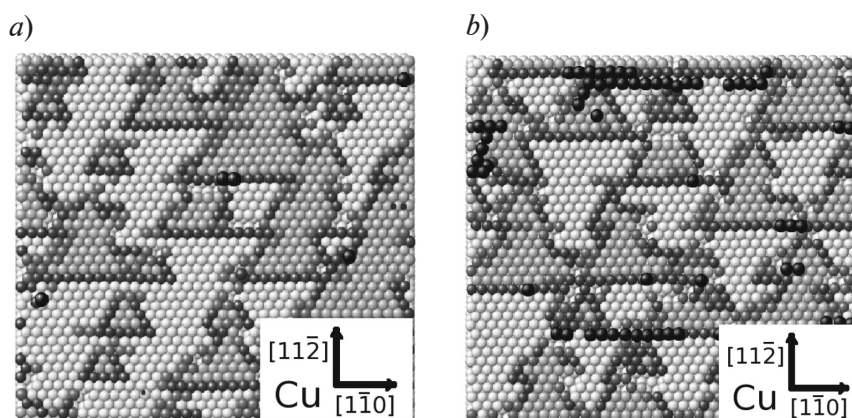


Fig. 5. Nb atoms in the boundary layer shifted at a distance of more than 2.85 Å (are highlighted in black) on a background of the second layer of Cu starting with the Cu/Nb interfacial boundary after the diffusion experiment at two temperatures, K: 950 (a), 1200 (b).

The white, the light gray, and the dark gray balls indicate the Cu atoms with local environments which are typical of FCC, HCP, and defect structures, correspondently

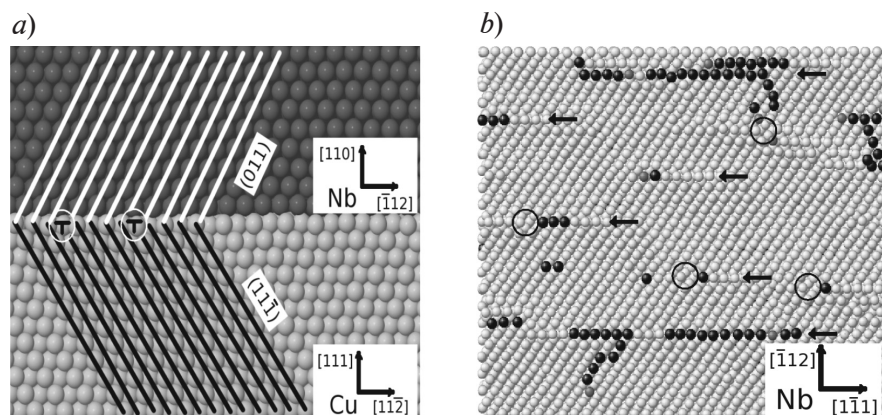


Fig. 6. The Cu/Nb interface boundary at 1200 K after the diffusion experiment; *a* – the mismatch dislocations (see the text), *b* – the boundary Nb layer.

The black balls indicate the Nb atoms shifted at a distance of more than 2.85 Å, the gray ones do the Cu atoms introduced in a close-packed row of Nb atoms near the mismatch dislocations, the black ones indicate vacancies in the boundary layer of Nb

of the copper atoms in the boundary copper layer. Chains of shifted atoms in Fig. 5,*b* are located in these channels, but the mechanism is implemented only in case of the introduction of a number of copper atoms in the close-packed rows of niobium atoms, which, thanks to the smaller radius of the copper atom, make an additional free volume in rows of niobium atoms (see Fig. 6,*b*). Figs. 5,*b* and 6,*b* show that the second diffusion mechanism of niobium in the Cu (111)/Nb (110) interfacial boundary with the Kurdjumov-Sachs mutual orientation is the primary one at temperatures up to 1200 K.

4. Summary

A new niobium diffusion mechanism at

the copper-niobium interfacial boundary characterized by the displacement of atoms along the mismatch dislocations has been established. Diffusion processes in niobium are activated by the introduction of a number of copper atoms in the rows of niobium atoms near the mismatch dislocations. The activation energy of the process within the error corresponds to that of the copper diffusion along the high-angle grain boundary of niobium. Up to the temperature of 1200 K, the vacancy mechanism of diffusion at the Cu/Nb boundary does not play a significant role.

The work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under contract No. 3.1282.2014/K.

REFERENCES

- [1] V.I. Betekhtin, Yu.R. Kolobov, B.K. Kardashev, et al., Elasto-plastic properties of Cu-Nb nanolaminate, *Technical Physics Letters*. 38 (2) (2012) 144 – 146.
- [2] X. Zhang, N. Li, O. Anderoglu, et al., Nanostructured Cu/Nb multilayers subjected to helium ion-irradiation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Sec. B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 261 (1-2) (2007) 1129–1132.
- [3] A. Misra, M.J. Demkowicz, X. Zang, R.G. Hoagland, The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites, *Journal of the Minerals. Metals and materials society*. 59(9) (2007) 62–65.
- [4] M.J. Demkowicz, R.G. Hoagland, J.P. Interface structure and radiation damage resistance in Cu-Nb multilayer nanocomposites, *Phys. Rev. Lett.* 100 (13) (2008) 136102.
- [5] R.S. Averbach, D. Peak, L.J. Thompson, Ion-beam mixing in pure and in immiscible copper bilayer systems, *Appl. Phys. A. Solids and Surfaces*. 39(1) (1986) 59–64.
- [6] M.J. Demkowicz, R.G. Hoagland, Structure of Kurdjumov–Sachs interfaces in simulations of a copper–niobium bilayer, *Journal of Nuclear Materials*. 372 (1) (2008) 45–52.
- [7] I.V. Nelasov, A.G. Lipnitskii, Yu. R. Kolobov, A molecular-dynamics simulation of grain-boundary diffusion of niobium and experimental investigation

of its recrystallization in a niobium-copper system, Russ. Phys. J. 52 (11) (2009) 1193–1198.

[8] **A.G. Lipnitskii, D.N. Maradudin, A.I. Kartamyshev, I.V. Nelasov**, Negative energy of Cu/Nb interface [in Russian] // Academic Bulletin of Belgorod State University. Series: Mathematics. Physics, 27(11) (2012), 169–176.

[9] **A.G. Lipnitskii, I.V. Nelasov, E.V. Golosov, et al.**, A molecular-dynamics simulation of grain boundary diffusion of niobium and experimental investigation of its recrystallization in a niobium-copper system, Russian Physics Journal. 56(3) (2013) 330–337.

[10] **Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, et al.**, Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations, Phys. Rev. B. 63 (22) (2001) 224106–224122.

[11] **M.P. Allen, D.J. Tildesley**, Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.

[12] **W.G. Hoover**, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, Phys. Rev. A. 31 (1695) (1985) 1697.

[13] **D.N. Klimenko, Yu.R. Kolobov, M. Karpov, et al.**, Grain boundary and interfacial sliding in Cu/Nb nanolaminates, Nanotechnologies in Russia. 8 (11–12) (2013) 783–788.

[14] **Yu.R. Kolobov, A.G. Lipnitskii, I.V. Nelasov, G.P. Grabovetskaya**, Investigations and computer simulations of the intergrain diffusion in submicro- and nanocrystalline metals, Russian Physics Journal. 51(4) (2008) 385–399.

[15] **A.G. Lipnitskii, I.V. Nelasov, Yu.R. Kolobov**, Self-diffusion parameters of grain boundaries and triple junctions in nanocrystalline materials, Defect and Diffusion Forum. 309-310 (2011) 45–50.

THE AUTHORS

NELASOV Ivan V.

Belgorod National Research University

85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russian Federation

nelasov@bsu.edu.ru

LIPNITSKII Aleksey G.

Belgorod National Research University

85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russian Federation

lipnitskii@bsu.edu.ru

Неласов И.В., Липницкий А.Г. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ПО МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ МЕДЬ – НИОБИЙ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Особенности диффузии по межфазной границе несмешиваемых металлов имеющих гранецентрированную кубическую (ГЦК) и объемноцентрированную кубическую (ОЦК) решетки, изучены на примере системы медь–ниобий методом молекулярной динамики. Показано, что диффузионные смещения атомов происходят преимущественно вблизи дислокаций несоответствия и их пересечений. Было установлено, что диффузия тугоплавкого компонента характеризуется высокой анизотропией с преимущественным смещением атомов вдоль плотно упакованного направления в плоскости межфазной границы, которое является общим для ГЦК- и ОЦК- решеток с взаимной ориентацией Курдюмова – Закса.

МЕЖФАЗНАЯ ДИФФУЗИЯ, МЕДЬ–НИОБИЙ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, ВЗАИМНАЯ ОРИЕНТАЦИЯ КУРДЮМОВА – ЗАКСА.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Бетехтин В.И., Колобов Ю.Р., Кардашев Б.К. и др.** Исследование упруго-пластических свойств наноламината системы Cu-Nb // Письма в журнал технической физики. 2012. Т. 38. No. 2. С. 88–94.

[2] **Zhang X., Li N., Anderoglu O., et al.** Nanostructured Cu/Nb multilayers subjected to helium ion-irradiation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam interactions with materials and atoms. 2007.

Vol. 261. No. 1-2. Pp. 1129–1132.

[3] **Misra A., Demkowicz M.J., Zang X., Hoagland R.G.** The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites // Journal of the Minerals and Materials Society. 2007. Vol. 59. No. 9. Pp. 62–65.

[4] **Demkowicz M.J., Hoagland R.G., J.P.** Interface structure and radiation damage resistance in Cu-Nb multilayer nanocomposites // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. No. 13. P. 136102.



- [5] Averbach R.S., Peak D., Thompson L.J. Ion-beam mixing in pure and in immiscible copper bilayer systems // Appl. Phys. A: Solids and Surfaces. 1986. Vol. 39. No.1. 39. Pp. 59–64.
- [6] Demkowicz M.J., Hoagland R.G. Structure of Kurdjumov–Sachs interfaces in simulations of a copper–niobium bilayer // Journal of Nuclear Materials. 2008. Vol. 372. No. 1. Pp. 45–52.
- [7] Неласов И.В., Липницкий А.Г. Исследование эволюции межфазной границы Cu/Nb методом молекулярной динамики // Известия вузов. Физика. 2009. Т. 52. № 11. С. 73–78.
- [8] Липницкий А.Г., Марадудин Д.Н., Картамышев Д.Н., Неласов И.В. Отрицательная энергия межфазной границы Cu/Nb // Научные ведомости БелГУ. Сер. Математика. Физика. 2012. Т. 27. № 11. С. 169–176.
- [9] Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Неласов И.В. и др. Молекулярно-динамическое моделирование диффузии по границам зерен ниобия и экспериментальное исследование рекристаллизации ниобия в системе ниобий – медь// Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 3. С. 84–90.
- [10] Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63. No. 22. Pp. 224106.
- [11] Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [12] Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions // Phys. Rev. A. 1985. Vol. 31. No. 3. Pp. 1695–1697.
- [13] Клименко Д.Н., Колобов Ю.Р., Карпов М.И. и др. Исследование процессов зернограничного и межфазного проскальзывания в наноламинатах системы Cu/Nb // Nanotechnologies in Russia, 2013. Vol. 8. No. 11–12. Pp. 91–95.
- [14] Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Неласов И.В., Грабовецкая Г.П. Исследование и компьютерное моделирование процесса межзеренной диффузии в субмикро- и нанокристаллических металлах // Известия вузов. Физика. 2008. Т. 51. № 4. С. 73 –78.
- [15] Lipnitskii A.G., Nelasov I.V., Kolobov Yu.R. Self-diffusion parameters of grain boundaries and triple junctions in nanocrystalline materials // Defect and Diffusion Forum. 2011. Vol. 309-310, Pp. 45–50.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НЕЛАСОВ Иван Викторович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии» Белгородского государственного национального исследовательского университета.

308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

nelasow@bsu.edu.ru

ЛИПНИЦКИЙ Алексей Геннадьевич — доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии» Белгородского государственного национального исследовательского университета.

308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

lipnitskii@bsu.edu.ru

DOI: 10.5862/JPM.242.5

UDC 538.9

A.I. Kartamyshev¹, D.V. Dat², A.G. Lipnitskii¹

¹ Belgorod National Research University, Russian Federation

² Ton Duc Thang University, Ho Chi Minh City, Vietnam

THE INTERACTIONS BETWEEN LIGHT IMPURITIES AND VACANCIES IN TITANIUM AND ALUMINUM METALS: A DFT STUDY

In this paper, we present binding energies between an atom of hydrogen (H), carbon (C), nitrogen (N) and oxygen (O) with a vacancy in the hexagonal closed-packed (HCP) lattice of titanium (Ti) and the face centered cubic (FCC) lattice of aluminum (Al), calculated using the density functional theory (DFT). We have also investigated the trapping of up to five hydrogen atoms by a vacancy and the reduction of the vacancy formation energy, due to the formation of a hydrogen–vacancy complex. We used the molecular-dynamics modeling with consecutive relaxation at 0 K to obtain an atomic configuration of the vacancy–impurity complex, corresponding to the global energy minimum. According to our calculations, C–V, H–V, C–(H–V), N–(H–V) complexes are stable in the Al lattice with only H–V complex being stable in Ti. The formation of C–(H–V) and N–(H–V) complexes in the Al lattice results in the negative vacancy formation energy. The formation of H–V complex decreases the vacancy formation energy by 0.26 eV in the Ti lattice. A vacancy in the Ti lattice can trap up to four hydrogen atoms.

TITANIUM, ALUMINIUM, VACANCY, IMPURITY, DENSITY FUNCTIONAL THEORY.

1. Introduction

One of the outstanding implications of introducing hydrogen into metal is the possibility of increasing of the vacancy concentration in this material by several orders of magnitude, so-called superabundant vacancy (SAV) formation. The physical kernel of this effect is a trapping of hydrogen atoms into vacancies, leading to a decrease in the vacancy formation energy, until in 1993 the SAV was first discovered experimentally by Fukai and co-workers (in Pd [1] and Ni [2]). Since then SAV has been observed in many metallic systems such as Cu [3], Ti [4], Pd and Pd alloys [5 – 8], Al [9], Mn [10], Fe [10, 11], Mo [12], Cr [13], Co [10], Ni [14], Ni-Fe alloy [15], Nb [16 – 18].

In some cases, the concentration of vacancies can become as large as 10 % and more [10, 19, 20]. One of the reasons for this behavior is the formation of different defects, e.g., voids [21] as in the case of Al [9], Ni [22], Fe [23, 24], steels [25], and/or dislocation loops [26 – 28].

It is important to note, that H atoms may

have a high number of configurations inside a vacancy, leading to a higher configuration entropy of a crystal with H–vacancy complexes compared with a crystal with single vacancies and interstitial H atoms. To investigate the effects of SAV formation on materials from a theoretical point of view, one has to consider the positions of hydrogen atoms inside a vacancy and the maximum number of hydrogen atoms that can be trapped by this vacancy. In the aluminum lattice, it was observed that a hydrogen atom diffuses towards the lattice vacancy to occupy it [29]. Instead of occupying the lattice site from which an aluminum atom has been removed during vacancy formation, the hydrogen atom locates at some asymmetrical point which is away from the vacancy's center. Lu and Kaxiras [30] suggested that, in principle, up to 12 atoms can be accommodated in a single vacancy in the Al lattice. More recently, Gunaydin, et al. [31] reported that trapping of multiple H atoms in a single vacancy in Al is possible only for extreme H loading condition, i.e., for H concentration, it is many orders of magnitude above the solubility limit given by the equilibrium with H₂.



gas at ambient conditions (10^{-9} at 300 K and 1 atm). Instead, under H-loading conditions used in most diffusion experiments, empty vacancies would coexist with the vacancies filled by one or at most two H atoms. Reviewing the conflicting results, from Lu and Kaxiras [30] on one hand and from Gunaydin et al. [31] on the other hand, Lars Ismer et al. studied the interactions between hydrogen impurities and vacancies in FCC Al lattice by first-principle (*ab initio*) methods but with a more critical estimation on the binding energy of the H–vacancy complex [32]. They found that a single vacancy in Al lattice can trap 10 hydrogen atoms, not 12 as reported in the work of Lu and Kaxiras [30]. The difference occurs because of the definition of the trapping energy of hydrogen impurities in vacancies of each author. However, we can see the common result in the two works that hydrogen atoms can interact with the vacancies forming H–vacancy complexes. Moreover, trapping of multiple H atoms in a single vacancy in Al lattice decreases the vacancy formation energy and this phenomenon could be related to the observed hydrogen-induced superabundant vacancy formation and vacancy clustering.

However, until now combined influence on SAV of H and other light elements such as C, O and N as well as trapping of H atoms by the monovacancy in the Ti lattice were poorly studied. At the same time the possibility of such influence is indicated by experimental data on Al lattice with C and H impurities [33]. Number of pores increases after preliminary annealing. In this connection, in the present article, we investigate combined influence of H, C, N and O atoms on formation of their complexes with monovacancy and vacancy formation energy from first principles (*ab initio*). The investigation has been performed for FCC Al and HCP Ti lattices, their alloys being widely used because of their high specific strength and corrosion resistance.

2. Calculation method

Calculations were performed in the framework of the density functional theory (DFT) [34, 35] within the generalized gradient approximation (GGA) using the functional of J.P. Perdew et al. [36, 37] for description of

the exchange-correlation energy and the projected augmented wave (PAW) method [38] as implemented in ABINIT code [39]. Point defects were considered within supercell model. The list of point defects included an impurity atom in the interstitial site, a monovacancy and monovacancy–impurity complexes. Brillouin-zone (BZ) integrals were approximated using the special k -point sampling of H.J. Monkhorst and J.D. Pack [40]. Full energies of supercells were calculated after relaxation to equilibrium positions of atoms and volumes at 0 K. Relaxation was performed in several steps. Initial configurations included an impurity atom in the center of a monovacancy and the impurity atom in the center of interstitial site of the HCP lattice. Molecular-dynamics modeling were performed for initial configurations with using L. Verlet algorithm [41] at 300 K and consecutive cooling down to 100 K with using Nose–Hoover thermostat [42]. Final equilibrium configurations were determined by relaxation of supercells with the Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno method [43] to the full energy minimum at 0 K. The relaxation was stopped when all forces acting on the atoms were converged to within 2.5 meV/Å.

The favorable occupation site of an impurity is defined by a difference of solution energies of this impurity at different positions (ΔE_s). The solution energy is calculated by the following formula:

$$E_s^X = E[X^{T/O} + M_n] - E[M_n] - \frac{1}{2} E[X_2], \quad (1)$$

where $E[X^{T/O} + M_n]$ are the total energies of the system with n atoms of metal M ($M = \text{Ti, Al}$) when atom X is at tetrahedral (T) or octahedral (O) interstitial site, $E[M_n]$ is the energy of pure system with n atoms of metal M , $E[X_2]$ is the energy of molecule X_2 ($X = \text{H, C, N and O}$) in the vacuum or in the case of carbon – the energy of graphene cell with two atoms.

In the case of vacancy–impurity system, the stability of each configuration is defined by the binding energy which was calculated by the following formula:

$$E_c^{X-V} = E[X^{T/O} + M_n] + E[V + M_{n-1}] - E[M_n] - E[X^{T/O} - V + M_{n-1}], \quad (2)$$

where $E[X^{T/O} + M_n]$ is the total energy of the supercell with n atoms of metal M ($M = \text{Al, Ti}$) and the impurity X in the T/O site ($X = \text{H, C, N}$ and O), $E[M_n]$ is the total energy of the supercell with n atoms of metal, $E[V + M_{n-1}]$ is the total energy of the supercell with $(n - 1)$ metal atoms and one vacancy, $E[X^{T/O} - V + M_{n-1}]$ is the total energy of the supercell with the complex X – vacancy and $(n - 1)$ metal atoms. In the case of the $X - (\text{H} - V)$ complexes V is replaced by $(\text{H} - V)$ in this equation.

Formation vacancy energies were calculated as follows:

$$E_V^f = E[V + M_{n-1}] - \frac{n-1}{n} E[M_n], \quad (3)$$

$$E_V^f[X] = E_V^f - E_C^{X-V}. \quad (4)$$

Here E_V^f and $E_V^f[X]$ are vacancy formation energies in pure metal and in the metal with $(X - V)$ complexes, correspondingly. In the case of the $(X - (\text{H} - V))$ complexes $E_C^{X-\text{H}-V}$ must be additionally subtracted from E_V^f .

L. Ismer et al. [32] suggested to determine changing of the energetic characteristics of $(V - n\text{H})$ complex (a vacancy and n atoms of hydrogen) stepwise form by adding impurity atoms one by one. Using this approach we can write the cohesive energy between a hydrogen atom and the $(V - (n - 1)\text{H})$ complex as follows:

$$E(n) = E[V - (n - 1)\text{H} + M_{n-1}] + E[\text{H}^0 + M_n] - E[V - n\text{H} + M_{n-1}] - E[M_n], \quad (5)$$

where $E[V - (n - 1)\text{H} + M_{n-1}]$ is the total energy of the supercell with $(V - (n - 1)\text{H})$ complex, $E[V - n\text{H} + M_{n-1}]$ is the total energy of the supercell with $(V - n\text{H})$ complex.

3. Vacancy – impurity interactions in the aluminum lattice

The supercell contained $2 \times 2 \times 2$ cubic unit cells of the FCC aluminum lattice. The calculations were performed using an energy cutoff of 600 eV for the plane-wave basis set and $2 \times 2 \times 2$ k -points grid in the Brillouin zone. Such a choice of the main parameters ensures an energy convergence to 1 meV/atom. The solution energies of C, N, O and H atoms in the tetrahedral and octahedral sites calculated

Table 1

Calculated solution energies of light elements in the tetrahedral and octahedral sites in the aluminum lattice

Atom	E_T	E_O
	eV	
H	0.70	0.85
C	1.31	1.25
N	– 2.87	– 2.00
O	– 3.70	Unstable

Table 2

The binding energies between impurity atoms and vacancies (V) or hydrogen–vacancy complexes ($\text{H}-V$) in the aluminum lattice

Interaction	E_b , eV
$\text{H}-V$	0.39
$\text{C}-V$	0.18
$\text{N}-V$	– 0.69
$\text{O}-V$	0.02
$\text{C}-(\text{H}-V)$	0.77
$\text{N}-(\text{H}-V)$	0.56
$\text{O}-(\text{H}-V)$	– 0.07

by Eq. (1) are shown in Table 1.

Solution energies for H atoms are consistent with the known experimental data (from 0.65 to 0.71 eV) [44 – 47]. We found O atom moving from octahedral to tetrahedral interstitials sites during simulation and so the corresponding solution energy was not calculated.

Energetic properties of the impurity–vacancy complexes in the aluminum lattice calculated by Eq. (2) are shown in Table 2.

The calculated binding energy $E_C^{\text{H}-V}$ between a hydrogen atom and a vacancy is close to the experimental value of 0.43 eV [48]. The negative binding energy for the $\text{N}-V$ complex means that there is a repulsive interaction between them and a nitrogen atom is not responsible for an increase in the vacancy concentration. However, in the presence of a hydrogen atom the binding energy becomes positive and the formation of $(\text{N}-(\text{H}-V))$ complex is energetically favorable. The calculated N–H bond length of 1.04 Å

Table 3

Vacancy formation energies
in the aluminum lattice with
impurities and in the pure one

Impurity	E_v^f , eV
C	0.37
H	0.16
H, C	-0.61
H, N	-0.40
0 (pure)	0.55

in the (N-(H-V)) complexes is close to the experimental data of $1.01 - 1.03 \text{ \AA}$ [49]. A considerable increase in the binding energy was found for (C-(H-V)) complex in contrast to

the (C-V) one.

The vacancy formation energies in pure aluminum and those in the presence of impurities calculated by Eqs. (3) and (4) are listed in Table 3.

We can see from Table 3 that the vacancy formation energy values reduce from 0.55 eV in the pure aluminum to 0.37 eV in the presence of the vacancy-carbon complex and to 0.16 eV in the presence of the vacancy-hydrogen one. This explains an increase in the vacancy concentration in aluminum with hydrogen and carbon impurities [33]. Moreover, formations of the (C-(H-V)) and the (N-(H-V)) complexes result in the negative vacancy formation energies.

These vacancies are no longer thermally

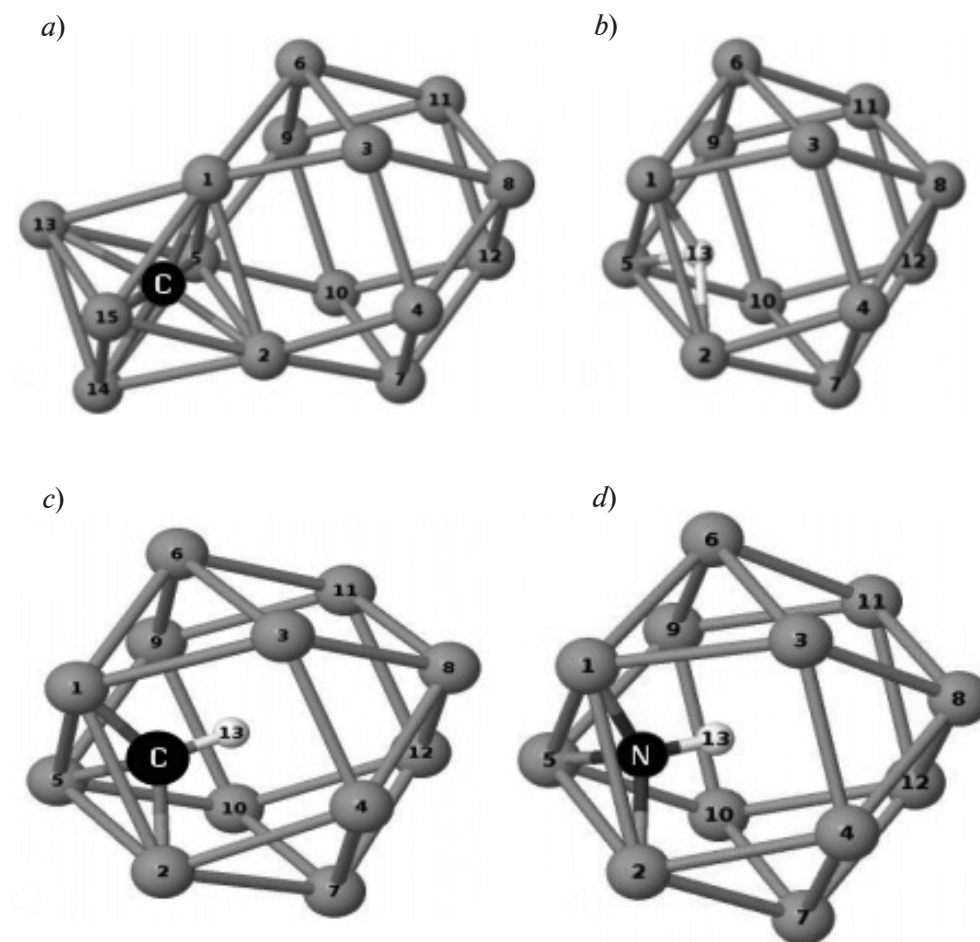


Fig. 1. The configurations of the vacancy-impurity complexes
C-V (a), H-V (b), C-(H-V) (c), N-(H-V) (d) in the aluminum lattice.
H atoms are shown by white balls; C, N atoms are black ones; 12 Al atoms form the 1st coordination
sphere around the vacancy (V) site of the lattice

activated and new free vacancies are formed in order to keep the equilibrium concentration of the free vacancies. This mechanism can explain SAV formation in the aluminum lattice at the presence of both C and H impurities as reported in paper [33]. Configurations of stable complexes of the point defects are shown in Fig. 1.

4. Vacancy – impurity interactions in the titanium lattice

The supercell contained $3 \times 3 \times 2$ unit cells of the HCP titanium lattice. The calculations were performed using an energy cutoff of 600 eV for the plane-wave basis set and $4 \times 4 \times 4$ k -points grid in the Brillouin zone. Such a choice of the main parameters ensures energy convergence to 1 meV/atom.

In the case of a hydrogen atom

$$\Delta E_s = 0.06 \text{ eV } (\Delta E_s = E_s^X(tet.) - E_s^X(oct.)).$$

This value is in good agreement with the results of other DFT calculations being equal to 0.01 eV [50] and 0.12 eV [51]. Carbon, nitrogen and oxygen atoms also occupy octahedral interstitial sites with values of ΔE_s equal to 2.13, 1.70, and 1.16 eV correspondingly. We can see that the solution energy for hydrogen is less than the corresponding value for other impurities by the order of magnitude. Hence, we can expect a higher cohesive energy of a hydrogen atom with crystal defects (including vacancies) in comparison with that of carbon, nitrogen and oxygen atoms.

The energy properties of the impurity – vacancy complexes in the titanium lattice calculated by Eq. (2) are shown in Table 4.

As we can see from Table 4, the H–V complex only has positive binding energy,

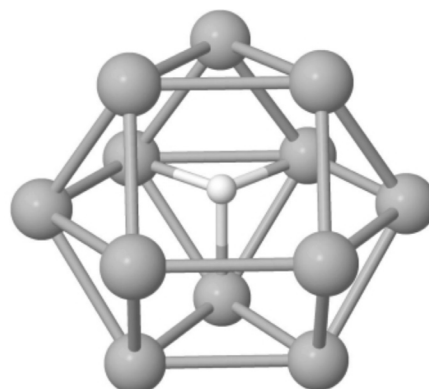


Fig. 2. Configuration of the H–V complex in the Ti lattice.

H atom is shown by a white ball; 12 Ti atoms form the 1st coordination sphere around the vacancy (V) site of the lattice

whereas other impurity – vacancy complexes being unstable. The negative binding energy between other impurities and vacancy shows that there will be repulsive interaction between them. The configuration of H–V complex in the Ti lattice is presented in Fig. 2.

From our calculations by Eq. (3) $E_v^f = 2.12$ eV. Difference between this value and other DFT calculations [52] is less than 1 %. Using Eq. (4) we found that the formation of H–V complex reduces the vacancy formation energy by 0.26 eV. It is considerably higher than the average kinetic energy of atoms $\sim 3/2 k_B T = 0.039$ eV at 300 K.

The binding energies E_b calculated by Eq. (5) for the titanium lattice are presented in Table 5.

We can conclude from Table 5 that the maximum number of hydrogen atoms that can be trapped by a monovacancy in HCP titanium

Table 4

The binding energies between an impurity atom and a vacancy (V) in the titanium lattice

Interaction	E_b , eV
H–V	0.26
C–V	– 0.84
N–V	– 1.72
O–V	– 1.15

Table 5

The n -dependence of binding energies between a hydrogen atom and the V – (n – 1)H complex

n	E_b , eV
2	0.25
3	0.38
4	0.08
5	–0.05



lattice is four. Earlier DFT calculations [51] have shown that a monovacancy in HCP titanium lattice can contain up to three these atoms. The difference between our calculations and those of Ref. [51] is explained by the simplified relaxation of initial atomic configurations of complexes used in Ref. [51] that led to a configuration in the local energy minimum. Using molecular-dynamics modeling before relaxation at 0 K we obtained more energetically favorable atomic configurations with number of hydrogen atoms more than three. Trapping of hydrogen atoms by vacancies can lead to reduction of the vacancy formation energy and consequently to an increase in the vacancy concentration by several orders of magnitude as was found by Y. Fukai in the nickel lattice for the first time [2].

5. Conclusions

Using density functional theory calculations, we investigated the interactions of the impurity atoms of hydrogen, carbon, nitrogen and oxygen with monovacancies in the HCP titanium and FCC aluminum lattices. The results of this work can be summarized as follows:

1. Impurities such as hydrogen, carbon, nitrogen and oxygen atoms occupy octahedral interstitial sites in the both Al and Ti lattices except for hydrogen and oxygen atoms in the Al one that occupy tetrahedral sites.

2. The $C-V$, $H-V$, $C-(H-V)$, and $N-(H-V)$ complexes are stable in the Al lattice. Except for the $H-V$ complex with positive cohesive energy, other impurity–vacancy complexes are unstable in the Ti lattice.

3. The formation of $C-(H-V)$ and $N-(H-V)$ complexes in Al results in the negative vacancy formation energy. The formation of $H-V$ complex in the HCP titanium lattice decreases the vacancy formation energy by 0.26 eV. This leads to an increase in the vacancy concentration and can result in the pore formation at the presence of corresponding impurities.

4. According to our calculations the maximum number of hydrogen atoms that can be trapped by a monovacancy in the HCP Ti lattice is four.

The work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under contract No. 3.1282.2014/K.

(Государственное задание № 3.1282.2014/K Министерства образования и науки РФ)

REFERENCES

- [1] Y. Fukai, N. Ōkuma, Formation of superabundant vacancies in Pd hydride under high hydrogen pressures, *Phys. Rev. Lett.* 73 (12) (1994) 1640–1643.
- [2] Y. Fukai, N. Ōkuma, Evidence of copious vacancy formation in Ni and Pd under a high hydrogen pressure, *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, Part 2. No. 9A (1993). L1256–L1259.
- [3] Y. Fukai, M. Mizutani, S. Yokota, et al., Superabundant vacancy–hydrogen clusters in electrodeposited Ni and Cu, *J. Alloys Compd.* 356–357 (2003) 270–273.
- [4] K. Nakamura, Y. Fukai, High-pressure studies of high-concentration phases of the TiH system, *J. Alloys Compd.* 231 (1-2) (1995) 46–50.
- [5] dos D. Santos, S. Miraglia, D. Fruchart, A high pressure investigation of Pd and the Pd–H system, *J. Alloys Compd.* 291 (1-2) (1999) L1–L5.
- [6] Y. Fukai, Y. Ishii, Y. Goto, et al., Formation of superabundant vacancies in Pd–H alloys, *J. Alloys Compd.* 313 (1-2) (2000) 121–132.
- [7] K. Watanabe, N. Ōkuma, Y. Fukai, et al., Superabundant vacancies and enhanced diffusion in Pd–Rh alloys under high hydrogen pressures, *Scr. Mater.* 34 (4) (1996) 551–557.
- [8] K. Sakaki, R. Date, M. Mizuno, et al., The effect of hydrogenated phase transformation on hydrogen-related vacancy formation in $Pd_{1-x}Ag_x$ alloy, *Acta Mater.* 54 (17) (2006) 4641–4645.
- [9] H.K. Birnbaum, C. Buckley, F. Zeides, et al., Hydrogen in aluminum, *J. Alloys Compd.* 253–254 (1997) 260–264.
- [10] Y. Fukai, T. Haraguchi, E. Hayashi, et al., Hydrogen-induced superabundant vacancies and diffusion enhancement in some FCC metals, *Defect Diffus. Forum.* 194–199 (2001) 1063–1068.
- [11] Y. Fukai, K. Mori, H. Shinomiya, The phase diagram and superabundant vacancy formation in Fe–H alloys under high hydrogen pressures, *J. Alloys Compd.* 348 (1-2) (2003) 105–109.
- [12] Y. Fukai, Y. Kurokawa, H. Hiraoka, Superabundant vacancy formation and its consequences in metal–hydrogen alloys, *J. Japan Inst. Met. Mater.* 61 (8) (1997) 663–670.
- [13] Y. Fukai, M. Mizutani, Phase diagram and superabundant vacancy formation in Cr–H alloys, *Mater. Trans., JIM.* 43 (5) (2002) 1079–1084.
- [14] Y. Fukai, Y. Shizuku, Y. Kurokawa,

Superabundant vacancy formation in Ni–H alloys, *J. Alloys Compd.* 329 (1-2) (2001) 195–201.

[15] **Y. Fukai, T. Hiroi, N. Mukaibo, et al.**, Formation of hydrogen-induced superabundant vacancies in electroplated nickel-iron alloy films, *J. Japan Inst. Met. Mater.* 71 (4) (2007) 388–394.

[16] **H. Koike, Y. Shizuku, A. Yazaki, et al.**, Superabundant vacancy formation in Nb–H alloys; resistometric studies, *J. Phys. Condens. Matter.* 16 (8) (2004) 1335–1349.

[17] **T. Iida, Y. Yamazaki, T. Kobayashi, et al.**, Enhanced diffusion of Nb in Nb–H alloys by hydrogen-induced vacancies, *Acta Mater.* 53 (10) (2005) 3083–3089.

[18] **J. Čížek, I. Procházka, F. Bečvář, et al.**, Hydrogen-induced defects in bulk niobium, *Phys. Rev. B.* 69 (22) (2004) 224106.

[19] **Y. Fukai**, Formation of superabundant vacancies in M–H alloys and some of its consequences: a review, *J. Alloys Compd.* 356–357 (2003) 263–269.

[20] **Y. Fukai**, Superabundant vacancies formed in metal-hydrogen alloys, *Phys. Scr. T103* (1) (2003) 11.

[21] **A.M. Cuitiño, M. Ortiz**, Ductile fracture by vacancy condensation in f.c.c. single crystals, *Acta Mater.* 44 (2) (1996) 427–436.

[22] **H. Osono, T. Kino, Y. Kurokawa, et al.**, Agglomeration of hydrogen-induced vacancies in nickel, *J. Alloys Compd.* 231 (1-2) (1995) 41–45.

[23] **I.M. Bernstein**, Hydrogen-induced cracking in iron: Morphology and crack path dependence, *Metall. Trans.* 1 (11) (1970) 3143–3150.

[24] **B.B. Rath, I.M. Bernstein**, The relation between grain-boundary orientation and intergranular cracking, *Metall. Trans.* 2 (10) (1971) 2845–2851.

[25] **Q.-Z. Chen, W. Chu, Y. Wang, et al.**, *In situ* tem observations of nucleation and bluntness of nanocracks in thin crystals of 310 stainless steel, *Acta Metall. Mater.* 43 (12) (1995) 4371–4376.

[26] **Y. Fukai**, Formation of superabundant vacancies in metal hydrides at high temperatures, *J. Alloys Compd.* 231 (1-2) (1995) 35–40.

[27] **V.G. Gavriljuk, V. Bugaev, Y. Petrov, et al.**, Hydrogen-induced equilibrium vacancies in FCC iron-base alloys, *Scr. Mater.* 34 (6) (1996) 903–907.

[28] **T.B. Flanagan, J. Clewley, H. Noh, et al.**, Hydrogen-induced lattice migration in Pd–Pt alloys, *Acta Mater.* 46 (6) (1998) 2173–2183.

[29] **B.E.F. Constance, B.K. Rao**, Position of hydrogen atom in a vacancy in aluminum metal – an AB initio study, *Rev. Adv. Mater. Sci.* 5 (1) (2003) 17–23.

[30] **G. Lu, E. Kaxiras**, Hydrogen embrittlement of aluminum: the crucial role of vacancies, *Phys.*

Rev. Lett. 94 (15) (2005) 155501.

[31] **H. Gunaydin, S. Barabash, K. Houk, et al.**, First-principles theory of hydrogen diffusion in aluminum, *Phys. Rev. Lett.* 101 (7) (2008) 075901.

[32] **L. Ismer, M. Park, A. Janotti, et al.**, Interactions between hydrogen impurities and vacancies in Mg and Al: A comparative analysis based on density functional theory, *Phys. Rev. B.* 80 (18) (2009) 184110.

[33] **Y. Shimomura, I. Mukuoda, Q. Chen, et al.**, Impurity atoms responsible for the void formation in quenched pure aluminum, *Mater. Trans., JIM.* 36 (3) (1995) 413–419.

[34] **P. Hohenberg, W. Kohn**, Inhomogeneous electron gas, *Phys. Rev. B.* 136 (3) (1964) 864–871.

[35] **W. Kohn, L.J. Sham**, Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys. Rev. A.* 140 (4) (1965) 1133–1138.

[36] **J.P. Perdew, K. Burke, Y. Wang**, Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system, *Phys. Rev. B.* 1996. 54 (23) (1996) 16533–16539.

[37] **J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof**, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77 (18) (1996) 3865–3868.

[38] **P.E. Blöchl**, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B.* 50 (24) (1994) 17953–17979.

[39] **X. Gonze, J. Beuken, R. Caracas, et al.**, First-principles computation of material properties: the ABINIT software project, *Comput. Mater. Sci.* 25(3) (2002) 478–492.

[40] **H.J. Monkhorst, J.D. Pack**, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B.* 13 (12) (1976) 5188–5192.

[41] **L. Verlet**, Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, *Phys. Rev.* 1967. 159 (1) (1967) 98–103.

[42] **D.J. Evans, B.L. Holian**, The Nose–Hoover thermostat, *J. Chem. Phys.* 83 (8) (1985) 4069.

[43] **J.D. Head, M.C. Zerner**, A Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno optimization procedure for molecular geometries, *Chem. Phys. Lett.* 122 (3) (1985) 264–270.

[44] **R.A.H. Edwards, W. Eichenauer**, Reversible hydrogen trapping at grain boundaries in superpure aluminium, *Scr. Metall.* 14 (9) (1980) 971–973.

[45] **W. Eichenauer, K. Hattenbach, A. Pebler**, The solubility of hydrogen in solid and liquid aluminum, *Zeitschrift Für Met.* 52 (1961) 682–684.

[46] **H. Sugimoto, Y. Fukai**, Solubility of hydrogen in metals under high hydrogen pressures: Thermodynamical calculations, *Acta Metall. Mater.*



40 (9) (1992) 2327–2336.

[47] **M. Ichimura, H. Katsuta, Y. Sasajima, et al.**, Hydrogen and deuterium solubility in aluminum with voids, *J. Phys. Chem. Solids*. 49 (10) (1988) 1259–1267.

[48] **S. Linderöth**, Hydrogen diffusivity in aluminium, *Philos. Mag. Lett.* 57 (4) (1988) 229–234.

[49] **X. Zhao, J. Sudmeier, W. Bachovchin, et al.**, Measurement of NH bond lengths by fast magic-angle spinning solid-state NMR spectroscopy: a new method for the quantification of hydrogen bonds, *J.*

Am. Chem. Soc. 123 (44) (2001) 11097–11098.

[50] **J.H. Dai, Y. Song, R. Yang**, Influence of impurities on phase stability of martensites in titanium, *Philos. Mag.* 92 (18) (2012) 2272–2285.

[51] **D. Connétable, J. Huez, É. Anrieu, et al.**, First-principles study of diffusion and interactions of vacancies and hydrogen in hcp-titanium, *J. Phys. Condens. Matter*. 23 (40) (2011) 405401.

[52] **G. Vérité, F. Willaime, C.C. Fu**, Anisotropy of the vacancy migration in Ti, Zr and Hf hexagonal close-packed metals from first principles, *Solid State Phenom.* 129 (2007) 75–81.

THE AUTHORS

KARTAMYSHEV Andrey I.

Belgorod National Research University

85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russian Federation

andrei_kart@mail.ru

DAT Duy Vo

Ton Duc Thang University

19 Nguyen Huu Tho Str., Tan Phong Ward, District 7, Ho Chi Minh City, Vietnam

duydat_bel@yahoo.com

LIPNITSKII Alexey G.

Belgorod National Research University

85 Pobeda St., Belgorod, 308015, Russian Federation

lipnitskii@bsu.edu.ru

Картамышев А.И., Дат Д.В., Липницкий А.Г. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ПРИМЕСЯМИ ЛЕГКИХ АТОМОВ И ВАКАНСИЯМИ В РЕШЕТКАХ ТИТАНА И АЛЮМИНИЯ.

В данной работе мы представляем значения энергии связи между атомами водорода, углерода, азота и кислорода с вакансией (V) в гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетке титана (Ti) и в гранецентрированной кубической (ГЦК) решетке алюминия (Al); значения рассчитаны в рамках теории функционала плотности. Мы также исследовали захват вакансией вплоть до пяти атомов водорода и уменьшение энергии образования вакансии в связи с формированием комплекса водород – вакансия. Использовано моделирование методом молекулярной динамики с последующей релаксацией при 0 К для получения атомной конфигурации комплекса вакансии – примесь, соответствующего глобальному минимуму энергии. Согласно нашим расчетам, комплексы C– V , H– V , C–(H– V), N–(H– V) стабильны в решетке Al, тогда как только комплекс H– V устойчив в решетке Ti. Образование комплексов C–(H– V) и N–(H– V) в ГЦК решетке Al приводит к отрицательной энергии образования вакансии. Формирование комплекса H– V уменьшает энергию образования вакансии на 0,26 эВ в решетке Ti. Вакансия в ГПУ решетке титана может захватывать до четырех атомов водорода.

ТИТАН, АЛЮМИНИЙ, ВАКАНСИЯ, ПРИМЕСЬ, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Fukai Y., Okuma N.** Formation of superabundant vacancies in Pd hydride under high hydrogen pressures, *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 73. No. 12. Pp. 1640–1643.

[2] **Fukai Y., Okuma N.** Evidence of copious vacancy formation in Ni and Pd under a high hydrogen pressure // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1993. Vol. 32, Part 2. No. 9A. Pp. L1256–L1259.

- [3] Fukai Y., Mizutani M., Yokota S., et al. Superabundant vacancy–hydrogen clusters in electrodeposited Ni and Cu // *J. Alloys Compd.* 2003. Vol. 356–357. Pp. 270–273.
- [4] Nakamura K., Fukai Y., High-pressure studies of high-concentration phases of the TiH system // *J. Alloys Compd.* 1995. Vol. 231. No. 1-2. Pp. 46–50.
- [5] dos Santos D., Miraglia S., Fruchart D. A high pressure investigation of Pd and the Pd–H system // *J. Alloys Compd.* 1999. Vol. 291. No.1-2. Pp. L1–L5.
- [6] Fukai Y., Ishii Y., Goto Y., et al. Formation of superabundant vacancies in Pd–H alloys // *J. Alloys Compd.* 2000. Vol. 313. No. 1-2. Pp. 121–132.
- [7] Watanabe K., Okuma N., Fukai Y. et al. Superabundant vacancies and enhanced diffusion in Pd–Rh alloys under high hydrogen pressures // *Scr. Mater.* 1996. Vol. 34. No. 4. Pp. 551–557.
- [8] Sakaki K., Date R., Mizuno M., et al. The effect of hydrogenated phase transformation on hydrogen-related vacancy formation in Pd_{1-x}Ag_x alloy // *Acta Mater.* 2006. Vol. 54. No. 17. Pp. 4641–4645.
- [9] Birnbaum H.K., Buckley C., Zeides F., et al. Hydrogen in aluminum // *J. Alloys Compd.* 1997. Vol. 253–254. Pp. 260–264.
- [10] Fukai Y., Haraguchi T., Hayashi E., et al. Hydrogen-induced superabundant vacancies and diffusion enhancement in some FCC metals // *Defect Diffus. Forum.* 2001. Vol. 194–199. Pp.1063–1068.
- [11] Fukai Y., Mori K., Shinomiya H. The phase diagram and superabundant vacancy formation in Fe–H alloys under high hydrogen pressures // *J. Alloys Compd.* 2003. Vol. 348. No. 1-2. Pp. 105–109.
- [12] Fukai Y., Kurokawa Y., Hiraoka H. Superabundant vacancy formation and its consequences in metal-hydrogen alloys // *J. Japan Inst. Met. Mater.* 1997. Vol. 61. No. 8. Pp. 663–670.
- [13] Fukai Y., Mizutani M. Phase diagram and superabundant vacancy formation in Cr–H alloys // *Mater. Trans. JIM.* 2002. Vol. 43. No. 5. Pp. 1079–1084.
- [14] Fukai Y., Shizuku Y., Kurokawa Y. Superabundant vacancy formation in Ni–H alloys // *J. Alloys Compd.* 2001. Vol. 329. No. 1-2. Pp. 195–201.
- [15] Fukai Y., Hiroi T., Mukaibo N., et al. Formation of hydrogen-induced superabundant vacancies in electroplated nickel-iron alloy films // *J. Japan Inst. Met. Mater.* 2007. Vol. 71. No. 4. Pp. 388–394.
- [16] Koike H., Shizuku Y., Yazaki A., et al. Superabundant vacancy formation in Nb–H alloys; resistometric studies // *J. Phys. Condens. Matter.* 2004. Vol. 16. No. 8. Pp. 1335–1349.
- [17] Iida T., Yamazaki Y., Kobayashi T., et al. Enhanced diffusion of Nb in Nb–H alloys by hydrogen-induced vacancies // *Acta Mater.* 2005. Vol. 53. No. 10. Pp. 3083–3089.
- [18] Čížek J., Procházka I., Bečvář F., et al. Hydrogen-induced defects in bulk niobium // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 69. No. 22. P. 224106.
- [19] Fukai Y. Formation of superabundant vacancies in M–H alloys and some of its consequences: a review // *J. Alloys Compd.* 2003. Vol. 356–357. Pp. 263–269.
- [20] Fukai Y. Superabundant vacancies formed in metal-hydrogen alloys // *Phys. Scr.* 2003. Vol. T103. No. 1. P. 11.
- [21] Cuitiño A.M., Ortiz M. Ductile fracture by vacancy condensation in f.c.c. single crystals // *Acta Mater.* 1996. Vol. 44. No. 2. Pp. 427–436.
- [22] Osono H., Kino T., Kurokawa Y., et al. Agglomeration of hydrogen-induced vacancies in nickel // *J. Alloys Compd.* 1995. Vol. 231. No. 1-2. Pp. 41–45.
- [23] Bernstein I.M. Hydrogen-induced cracking in iron: Morphology and crack path dependence // *Metall. Trans.* 1970. Vol. 1. No.11. Pp. 3143–3150.
- [24] Rath B.B., Bernstein I.M. The relation between grain-boundary orientation and intergranular cracking // *Metall. Trans.* 1971. Vol. 2. No. 10. Pp. 2845–2851.
- [25] Chen Q.-Z., Chu W., Wang Y., et al. *In situ* tem observations of nucleation and bluntness of nanocracks in thin crystals of 310 stainless steel // *Acta Metall. Mater.* 1995. Vol. 43. No. 12. Pp. 4371–4376.
- [26] Fukai Y. Formation of superabundant vacancies in metal hydrides at high temperatures // *J. Alloys Compd.* 1995. Vol. 231. No. 1-2. Pp. 35–40.
- [27] Gavriljuk V.G., Bugaev V., Petrov Y., et al. Hydrogen-induced equilibrium vacancies in FCC iron-base alloys // *Scr. Mater.* 1996. Vol. 34. No. 6. Pp. 903–907.
- [28] Flanagan T.B., Clewley J., Noh H., et al. Hydrogen-induced lattice migration in Pd–Pt alloys // *Acta Mater.* 1998. Vol. 46. No. 6. Pp. 2173–2183.
- [29] Constance B.E.F., Rao B.K. Position of hydrogen atom in a vacancy in aluminum metal – an AB initio study // *Rev. Adv. Mater. Sci.* 2003. Vol. 5. No. 1. Pp. 17–23.
- [30] Lu G., Kaxiras E. Hydrogen embrittlement of aluminum: the crucial role of vacancies // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. No. 15. P. 155501.
- [31] Gunaydin H., Barabash S., Houk K.,



et al. First-principles theory of hydrogen diffusion in aluminum // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101. No. 7. P. 075901.

[32] Ismer L., Park M., Janotti A., et al. Interactions between hydrogen impurities and vacancies in Mg and Al: A comparative analysis based on density functional theory // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 80. No. 18. P. 184110.

[33] Shimomura Y., Mukuoda I., Chen Q., et al. Impurity atoms responsible for the void formation in quenched pure aluminum // Mater. Trans. JIM. 1995. Vol. 36. No. 3. Pp. 413–419.

[34] Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. B. 1964. Vol. 136. No. 3. Pp. 864–871.

[35] Kohn W., Sham L.J., Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. A. 1965. Vol. 140. No. 4. Pp. 1133–1138.

[36] Perdew J.P., Burke K., Wang Y. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. No. 23. Pp. 16533–16539.

[37] Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. No. 18. Pp. 3865–3868.

[38] Blöchl P.E. Projector augmented-wave method, Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50. No. 24. Pp. 17953–17979.

[39] Gonze X., Beuken J., Caracas R., et al. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project // Comput. Mater. Sci. 2002. Vol. 25. No. 3. Pp. 478–492.

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

[41] Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. No. 1. Pp. 98–103.

[42] Evans D.J., Holian B.L. The Nose–Hoover thermostat // J. Chem. Phys. 1985. Vol. 83. No. 8.

P. 4069.

[43] Head J.D., Zerner M.C. A Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno optimization procedure for molecular geometries // Chem. Phys. Lett. 1985. Vol. 122. No. 3. Pp. 264–270.

[44] Edwards R.A.H., Eichenauer W. Reversible hydrogen trapping at grain boundaries in superpure aluminium // Scr. Metall. 1980. Vol. 14. No. 9. Pp. 971–973.

[45] Eichenauer W., Hattenbach K., Pebler A., The solubility of hydrogen in solid and liquid aluminum // Zeitschrift Für Met. 1961. Vol. 52. Pp. 682–684.

[46] Sugimoto H., Fukai Y., Solubility of hydrogen in metals under high hydrogen pressures: Thermodynamical calculations // Acta Metall. Mater. 1992. Vol. 40. No. 9. Pp. 2327–2336.

[47] Ichimura M., Katsuta H., Sasajima Y., et al. Hydrogen and deuterium solubility in aluminum with voids // J. Phys. Chem. Solids. 1988. Vol. 49. No. 10. Pp. 1259–1267.

[48] Linderöth S. Hydrogen diffusivity in aluminium // Philos. Mag. Lett. 1988. Vol. 57. No. 4. Pp. 229–234.

[49] Zhao X., Sudmeier J., Bachovchin W., et al. Measurement of NH bond lengths by fast magic-angle spinning solid-state NMR spectroscopy: a new method for the quantification of hydrogen bonds // J. Am. Chem. Soc. 2001. Vol. 123. No. 44. Pp. 11097–11098.

[50] Dai J.H., Song Y., Yang R. Influence of impurities on phase stability of martensites in titanium // Philos. Mag. 2012. Vol. 92. No. 18. Pp. 2272–2285.

[51] Connétable D., Huez J., Anrieu É., et al. First-principles study of diffusion and interactions of vacancies and hydrogen in hcp-titanium // J. Phys. Condens. Matter. 2011. Vol. 23. No. 40. P. 405401.

[52] Vêrité G., Willaime F., Fu C.C., Anisotropy of the vacancy migration in Ti, Zr and Hf hexagonal close-packed metals from first principles // Solid State Phenom. 2007. Vol. 129. Pp. 75–81.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КАРТАМЫШЕВ Андрей Игоревич — лаборант-исследователь кафедры наноматериалов и нанотехнологий Белгородского государственного национального исследовательского университета.

308015, Российская Федерация, г. Белгород, ул. Победы, 85
andrei_kart@mail.ru

ДАТ Дуй Во — физик-исследователь Университета имени Тон Дык Тханга, г. Хошимин, Вьетнам.

19 Nguyen Huu Tho St., Tan Phong Ward, District 7, Ho Chi Minh City, Vietnam
duydat_bel@yahoo.com

ЛИПНИЦКИЙ Алексей Геннадьевич — доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии» Белгородского государственного национального исследовательского университета.

308015, Российская Федерация, г. Белгород, ул. Победы, 85
lipnitskii@bsu.edu.ru

ПОСТРОЕНИЕ ПОЛЕВЫХ СТРУКТУР ДЛЯ ТРАНСПОРТИРОВКИ ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

В работе освещается подход к построению корпускулярно-оптических систем, способных осуществлять транспортировку и преобразование потоков заряженных частиц. В его основе лежит обратная задача, сформулированная на базе уравнения Гамильтона — Якоби. Исследуется движение в плоскости симметрии трехмерного поля. Представленный алгоритм, основанный на аналитических методах, позволяет определять электрические поля, которые обеспечивают движение заряженных частиц по интересующим нас траекториям. Ключом к этому алгоритму служит понятие конформного преобразования из теории функций комплексного переменного. Методика проиллюстрирована примерами. Показаны функции конформного преобразования, порождающие из квадратичного потенциала полевые структуры, которые обеспечивают поворот сфокусированного потока частиц на произвольный угол, трансформацию расходящегося потока в параллельный. Полученные двумерные потенциалы восстанавливались в пространство путем разложения в ряд по поперечной координате. На основе рассчитанных полевых структур обсуждаются возможные варианты реализации приборов.

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДИНАМИКИ, ОПТИКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ, КОНФОРМНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ, ИДЕАЛЬНАЯ ФОКУСИРОВКА.

Введение

Электронная спектроскопия и масс-спектрометрия являются на сегодняшний день основными инструментами для анализа веществ и материалов. Они играют важную роль не только в научных исследованиях, но и имеют обширное производственно-прикладное применение. Независимо от вида исследования и типа изучаемого объекта анализу подвергается поток заряженных частиц. Для эффективности работы анализируемые пучки должны быть сформированы сообразно геометрии и конфигурации энерго- и масс-анализаторов [1 — 3]. Кроме того, поскольку именно заряженные частицы несут всю информацию об исследуемом образце, требуется свести к минимуму потери электронов или ионов на всех

этапах, предшествующих непосредственно их анализу. Здесь и возникает задача создания корпускулярно-оптического согласующего элемента, способного обеспечить максимальный сбор заряженных частиц у источника и их передачу с минимальными потерями на вход анализатора. Отчасти эту задачу решают электростатические и магнитные линзы [4], но их использование предполагает построение прямолинейного тракта, что в свою очередь ведет к увеличению общих габаритов системы. Применение зеркал или различных отклоняющих систем не является вполне удовлетворительным, поскольку не всегда удастся обеспечить требуемую конфигурацию потока частиц.

Настоящая работа демонстрирует под-

ход для синтеза устройств, которые выполняют функции одновременно и поворотных устройств, и линз, фокусирующих и транспортирующих пучок. Успешный поиск таких систем осуществляется на идеологии обратных задач динамики, аналитическая теория которых разработана профессором Санкт-Петербургского политехнического университета Ю.К. Голиковым и нашла свое практическое воплощение при конструировании приборов с рекордными характеристиками и уникальными свойствами [5].

Постановка задачи

Создание спектрометра состоит в построении ионно- или электронно-оптического тракта определенным образом. При этом требуется, чтобы все входящие в него элементы (источник, анализатор и другие) работали в своем оптимальном режиме; здесь важна роль сопрягающих элементов. Задача синтеза таких устройств и есть предмет настоящей работы.

В самом общем виде задача формулируется как необходимость доставки пучка анализируемых частиц из точки A в точку B . Кроме того, могут быть выдвинуты и особые требования по организации пакета частиц на входе в анализатор, например с фиксированным разбросом по углам.

Предлагаемая стратегия синтеза таких устройств состоит в том, чтобы найти новые электрические поля, обеспечивающие нужную трансформацию потока, — чтобы весь поток, выходящий из одной точки, фокусировался бы также в одну другую точку. Положение обеих точек задается расположением элементов спектрометра — источником и анализатором. Пусть искомое поле обладает плоскостью симметрии и идеальная фокусировка частиц осуществляется в этой плоскости.

Наша стратегия синтеза предполагает выбор исходного поля, потенциал которого задан аналитически и в котором идеальная фокусировка имеет место хотя бы в плоскости симметрии. И теперь, применяя аналитические методы преобразования (большей частью из теории функций комплексного переменного), мы хотим получить новые

потенциальные структуры, где бы идеальная фокусировка потока сохранялась. Наше исследование построено на методе, связанном с использованием конформных преобразований координат, поэтому обсудим данный вопрос подробнее.

Конформное преобразование координат

Идеология принципа конформного преобразования координат в уравнении Гамильтона — Якоби и его применение для синтеза электростатических полей, сочетающих идеальную фокусировку в плоскости симметрии и энергетические дисперсионные свойства, излагались в работе [6]. Впервые этот алгоритм преобразования потенциальных структур предложил, а в дальнейшем и ввел в практику синтеза корпускулярно-оптических систем Ю.К. Голиков [5]. Представим основные положения этого метода и дадим необходимые комментарии к используемым терминам и уравнениям.

Исторически механика развивалась по двум основным направлениям. Одна ветвь, которую принято называть классической механикой, исходит непосредственно из ньютоновских законов движения. Задача заключается в определении поведения заряженной частицы, если действующие силы известны в каждый момент времени, и имеет однозначное решение. Согласно второму подходу, обычно называемому аналитической механикой [7], изучение равновесия и движения исходит из двух основных величин: кинетической энергии и силовой функции; при этом последняя часто заменяется потенциальной энергией. Эти два фундаментальных скаляра содержат в себе полную динамику наиболее сложных материальных систем, однако при условии, что эти скаляры кладутся в основу некоторого принципа, а не просто уравнения.

Пусть в моменты времени t_1 и t_2 частица занимает определенные положения, характеризуемые двумя наборами значений координат P_1 и P_2 . Тогда между этими точками частица движется таким образом, чтобы интеграл по времени от разности между кинетической и потенциальной энергиями имел наименьшее возможное значение.



ние. Подынтегральная функция называется функцией Лагранжа данной системы, а интеграл — действием. Принцип наименьшего действия утверждает:

Действительным движением, реализующимся в природе, является то, для которого действие принимает наименьшее значение.

Математическая задача минимизации некоторого интеграла связана с особой ветвью математики, называемой вариационным исчислением. Векторная и вариационная механики — это два различных математических описания одной и той же совокупности явлений природы. Теория Ньютона базируется на двух основных векторах: на импульсе и силе; вариационная теория на двух скалярных величинах: на кинетической энергии и силовой функции. Помимо математической целесообразности возникает вопрос об эквивалентности этих двух теорий. В случае свободных частиц, движение которых не ограничено заданными связями, эти два способа описания приводят к аналогичным результатам. Однако для систем со связями аналитический подход оказывается более экономичным и простым. Заданные связи учитываются здесь естественным путем, так как рассматриваются движения системы лишь вдоль таких траекторий, которые не противостоят связям. При векторном подходе нужно учитывать силы, поддерживающие связи, а потому приходится вводить различные гипотезы относительно этих сил.

В своем исследовании мы работаем в рамках вариационной механики, поскольку для аналитического подхода синтеза новых корпускулярно-оптических систем более органично использовать именно эту идеологию.

Кроме того, необходимо отметить, что все расчеты ведутся с безразмерными величинами. Целесообразность и разный характер вводимых безразмерных величин в зависимости от типа задачи обстоятельно освещается в монографиях [5, 8]. Мы же рассмотрим частный случай, имеющий непосредственное отношение к нашим исследованиям, когда в задаче фигурирует только электростатическое поле.

Реальное движение частицы, проис-

ходящее в евклидовом пространстве с декартовыми координатами X, Y, Z и в текущем времени t , зависит от ее заряда, массы, действующих электрических полей и начальных условий. Все это выражается размерными величинами и в совокупности составляет физическую модель корпускулярно-оптической системы. Между тем, расчеты и восприятие результатов легко упростить за счет отказа от стандартных физических единиц измерения и введения новых специальных единиц, унифицирующих все соотношения и делающих их сугубо безразмерными. Переход к безразмерным величинам заменит реальную физическую задачу более простой математической моделью движения и позволит вести исследования с максимально возможной общностью. Каждой физической траектории $X(t), Y(t), Z(t)$ ставится в соответствие безразмерная кривая $x(\tau), y(\tau), z(\tau)$. Чтобы найти по безразмерной кривой истинную размерную траекторию, нужно всего лишь умножить функции $x(\tau), y(\tau), z(\tau)$ на заданный линейный масштаб l . Покажем переход к безразмерной модели движения для нашей задачи.

Запишем уравнение Гамильтона — Якоби для движения частицы с зарядом q и массой m в электростатическом поле с потенциалом $\Phi(x, y)$ в плоскости (x, y) :

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 \right] + q \cdot \Phi(x, y) = E, \quad (1)$$

где E — полная энергия частицы, S — действие (скалярная величина).

Учитывая, что частные производные от действия по координатам равны соответствующим импульсам

$$\frac{\partial S}{\partial x} = p_x, \quad \frac{\partial S}{\partial y} = p_y, \quad (2)$$

уравнение (1) можно переписать в виде

$$\frac{m}{2} \left[\left(\frac{dX}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dY}{dt} \right)^2 \right] + q \cdot \Phi(x, y) = E. \quad (3)$$

Введем размерную величину l , которая будет неким характерным габаритом прибора, и используем ее как связь между раз-

мерными декартовыми координатами X, Y и безразмерными числами x, y :

$$X = l \cdot x; Y = l \cdot y. \quad (4)$$

Помимо l зададим характерное значение потенциала Φ_0 , например максимальный по модулю потенциал на границе системы:

$$\Phi = \Phi_0 \cdot \varphi(x, y). \quad (5)$$

Безразмерное время τ и безразмерную полную энергию h введем по формулам

$$t = T \cdot \tau; E = H_0 \cdot h, \quad (6)$$

где T — некое характерное время (пока не определенное нами), H_0 — полная энергия частицы.

Тогда уравнение (3) можно переписать в следующей форме, заменив при этом точкой дифференцирование по безразмерному времени:

$$\frac{ml^2}{T^2} \cdot \frac{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}{2} + q \cdot \Phi_0 \cdot \varphi(x, y) = H_0 \cdot h. \quad (7)$$

В силу произвольности параметра T зададим следующую связь между появившимися множителями:

$$\frac{ml^2}{T^2} = H_0 = |q\Phi_0|; \quad (8)$$

тем самым обеспечивается выделение общего множителя в уравнении (7), который можно опустить.

Уравнение Гамильтона в безразмерных величинах примет вид

$$\frac{S_x^2 + S_y^2}{2} + \varphi(x, y) = h. \quad (9)$$

Предлагаемая методика синтеза новых потенциальных структур с полезными свойствами (идеальная фокусировка по углу в выбранной плоскости) представляется алгоритмом со следующими шагами.

1. Выбор исходного потенциала $\varphi(x, y)$.
2. Задание комплексной функции преобразования $z(\omega)$.
3. Вычисление потенциальной структуры согласно выражениям

$$\begin{aligned} 2 \frac{\partial S}{\partial \omega} \frac{\partial S}{\partial \bar{\omega}} &= \frac{S_u^2 + S_v^2}{2} = -\varphi^{**}(u, v) = \\ &= -\left| \frac{dz}{d\omega} \right|^2 \cdot (\varphi^*(z, \bar{z}) - h) \end{aligned} \quad (10)$$

(вывод этой формулы можно найти в работе [6]).

4. Определение пространственного распределения поля.

5. Анализ поведения электронных потоков и выбор оптимального режима работы согласующего устройства.

Уравнение Гамильтона — Якоби для действия, которое можно определить как укороченное, поскольку оно зависит только от координат, но не от времени, в случае плоского движения (9) преобразуется к конформным координатам u и v посредством аналитической функции от комплексной переменной ω :

$$z = z(\omega), \omega = u + i \cdot v. \quad (11)$$

Таким образом, старые координаты x, y есть функции новых — u и v . Уравнение (10) можно трактовать физически как реальное уравнение Гамильтона — Якоби в новых координатах u, v , описывающее движение в плоскости, происходящее под действием поля с потенциалом $\varphi^{**}(u, v)$ при нулевой полной энергии $h^* = 0$.

Все траектории на плоскости (x, y) фиксированной энергии h при этом преобразовании трансформируются в траектории с нулевой полной энергией на плоскости (u, v) . Для определения этих траекторий достаточно воспользоваться формулами преобразования

$$u = u(x, y), v = v(x, y), \quad (12)$$

подставив в них выражения траекторий $x(t), y(t)$ на плоскости (x, y) . Семейства изоэнергетических траекторий деформируются в зависимости от $z(\omega)$, но некоторые их свойства сохраняются.

Конформные отображения, как известно, сохраняют углы пересечения кривых и сокращают (либо увеличивают) малые отрезки в зависимости от величины модуля производной аналитической функции в месте расположения отрезка [9].

Отсюда следуют два важных физических вывода. Во-первых, пучок траекторий, выходящий из точки, отображается на плоскость (u, v) в другой пучок, выходящий из точки и имеющий такую же угловую ширину, как и первоначальный. Во-вторых, если

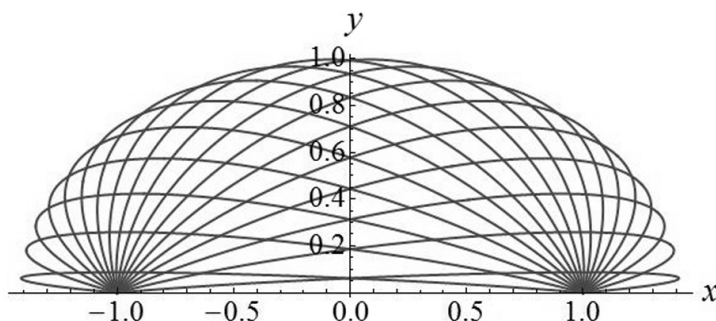


Рис. 1. Траектории частиц в гармоническом поле $\Phi = x^2 + y^2 - 2z^2$

пучок на плоскости (x, y) был сфокусирован на малый отрезок, то преобразованный пучок будет сфокусирован в плоскости (u, v) на другой малый отрезок, уменьшенный (либо увеличенный) с коэффициентом, равным модулю производной отображающей функции $z(\omega)$.

В тех случаях, когда плоскости (x, y) и (u, v) рассматриваются как плоскости симметрии двух различных трехмерных гармонических полей, а функции $\phi(x, y)$ и $\phi^{**}(u, v)$ — как распределение потенциалов в этих плоскостях, указанный способ преобразования одних полей в другие позволяет очень гибко перестраивать структуру поля в окрестности плоскости симметрии. Проиллюстрируем это утверждение примерами.

Примеры преобразования полей

Выберем в качестве исходного потенциала двумерную функцию

$$\phi(x, y) = x^2 + y^2. \quad (13)$$

В реальности такое распределение получится для гармонического поля гиперболоидов вращения $\Phi = x^2 + y^2 - 2z^2$ в плоскости симметрии $\phi = \Phi|_{z=0}$.

Несложно убедиться, что частицы, вылетевшие под разными углами из точки (x_0, y_0) , попадут в симметричную относительно начала координат точку $(-x_0, -y_0)$ через время $t = \pi / \sqrt{2}$. Например, если взять в качестве старта точку $(1, 0)$, то через указанный промежуток времени все частицы сфокусируются в точке $(-1, 0)$. Траектории частиц, рассчитанные в программе Mathematica [10], представлены на рис. 1.

Рассмотрим изменения ансамбля тра-

екторий частиц, используя различные конформные преобразования.

Вариант 1. Преобразуем потенциал (13) логарифмической функцией

$$\omega = \ln(z + 1) \quad (14)$$

по формуле (10). Положив полную энергию $h = 1$ и принимая во внимание, что $\phi = z\bar{z}$, получим:

$$\begin{aligned} \phi^{**}(u, v) = & \exp(4u) - 2 \cdot \exp(3u) \times \\ & \times \cos(v) - \exp(2u). \end{aligned} \quad (15)$$

Определить траектории в новом потенциале можно как по формулам преобразования (12), так и интегрируя уравнения движения. Траектории частиц показаны на рис. 2. Видно, что конформное преобразование (14) превращает расходящийся поток частиц в параллельный.

В настоящей работе рассматривались потоки заряженных частиц в малой окрестности плоскости симметрии, что позволило

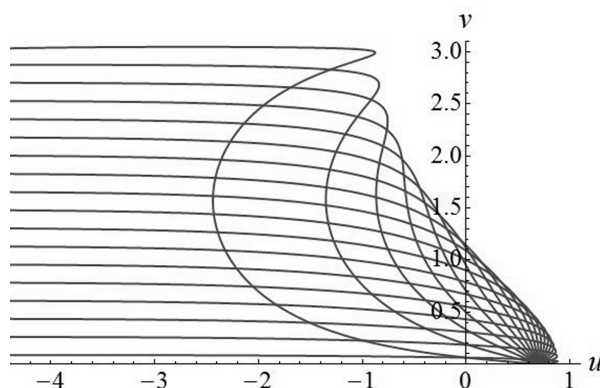


Рис. 2. Траектории частиц, рассчитанные в поле с потенциалом (15)

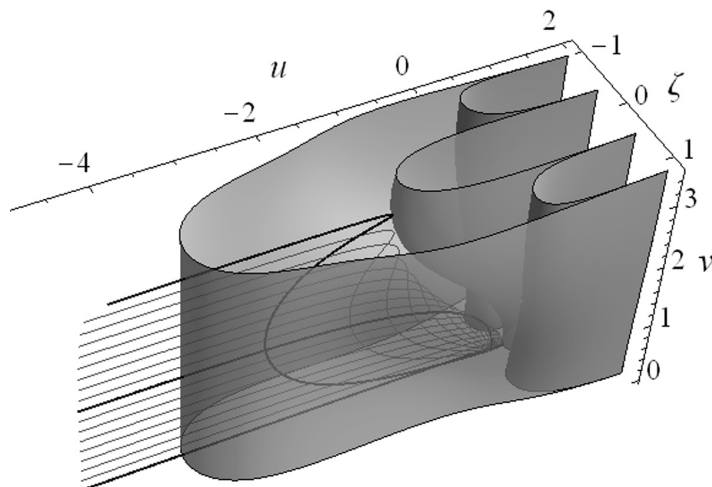


Рис. 3. Электроды, задающие поле системы, и ансамбль траекторий в этой системе

применить приближенный расчет распределения полевой структуры в пространстве; при этом использовалось хорошо известное разложение в ряд по степеням малой величины z :

$$\varphi(x, y, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \Delta_{xy}^k \varphi(x, y) \cdot z^{2k}; \quad (16)$$

$$\Delta_{xy} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Исследование степени точности трехмерных потенциалов, полученных по формуле (16), и их применимости для расчета потоков заряженных частиц вблизи плоскости симметрии при различном числе членов ряда было проведено ранее, и результаты опубликованы в статье [11]. Ошибка в задании трехмерного потенциала несколькими членами ряда разложения (16) вместо бесконечного их числа укладывается в пределы точности, требуемой и реализуемой при изготовлении электродов системы сложной формы. Мы проводили расчеты полей в приближении до членов шестой степени по z включительно.

Для практической реализации рассчитанной системы желательно выбрать эквипотенциальные поверхности, образующие замкнутую область. На роль таковых подходят эквипотенциали со значениями $\varphi^{**} = -0,001$ и $\varphi^{**} = -10$. На рис. 3 представ-

лены полезадающие электроды системы и ансамбль траекторий в ней.

Вариант 2. Пусть преобразование выражается формулой

$$\omega = \sqrt{z}. \quad (17)$$

Применяя формулу (10) к потенциалу (13) при $h = 1$, получим:

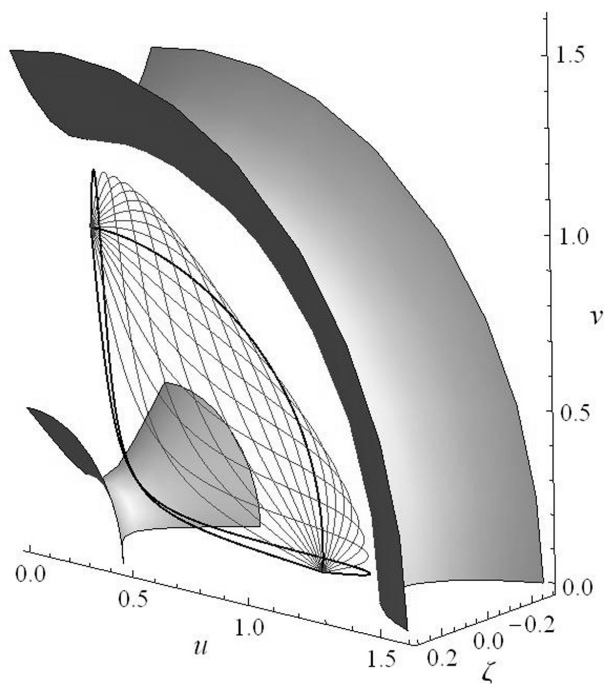


Рис. 4. Траектории частиц в электростатическом поле, выраженном формулой (18)

$$\varphi^{**}(u, v) = 4((u^2 + v^2)^3 - 2(u^2 + v^2)). \quad (18)$$

Траектории частиц в таком поле показаны на рис. 4.

Вариант 3. В самом общем виде преобразование (17) может быть представлено как

$$\omega = z^\gamma. \quad (19)$$

Выберем $\gamma = 3/4$ и применим конформное преобразование к потенциалу (13), тогда

$$\varphi^{**}(u, v) = \frac{16}{9}(u^2 + v^2)^{\frac{1}{3}} \cdot \left((u^2 + v^2)^{\frac{4}{3}} - 2 \right). \quad (20)$$

Поток заряженных частиц в поле (20) приобретает конфигурацию, представленную на рис. 5.

Расходящийся пучок переводится в точку, при этом точка фокусировки повернута на $3/4$ полуокружности относительно позиции старта.

Вопросы практической реализации

Для того чтобы реализовать одну из полученных структур, необходимо выбрать пару эквипотенциальных поверхностей, между которыми проходит поток заряжен-

ных частиц. Затем произвести обратное масштабирование в какую-либо размерную систему единиц и воспроизвести форму эквипотенциалей металлическими электродами. Подавая на эти электроды соответствующие потенциалы и направляя поток частиц в область поля, удастся обеспечить движение заряженных частиц по рассчитанным траекториям.

Продемонстрированные конфигурации пока являются лишь примерами применения методики, основанной на конформном преобразовании координат. Для испытания экспериментальных макетов, выполненных на основе этих конфигураций, необходимо провести оптимизацию режимов и конструкции.

Для потенциалов, синтезированных в плоскости симметрии, не гарантируется устойчивость траекторий вне центральной плоскости. Исследование этого вопроса должно проводиться отдельно для каждой полученной полевой структуры. Решением здесь может быть замена рассчитанного потенциала на близкий по своей структуре потенциал, который бы обеспечивал устойчивость траекторий относительно поперечной координаты ценой снижения

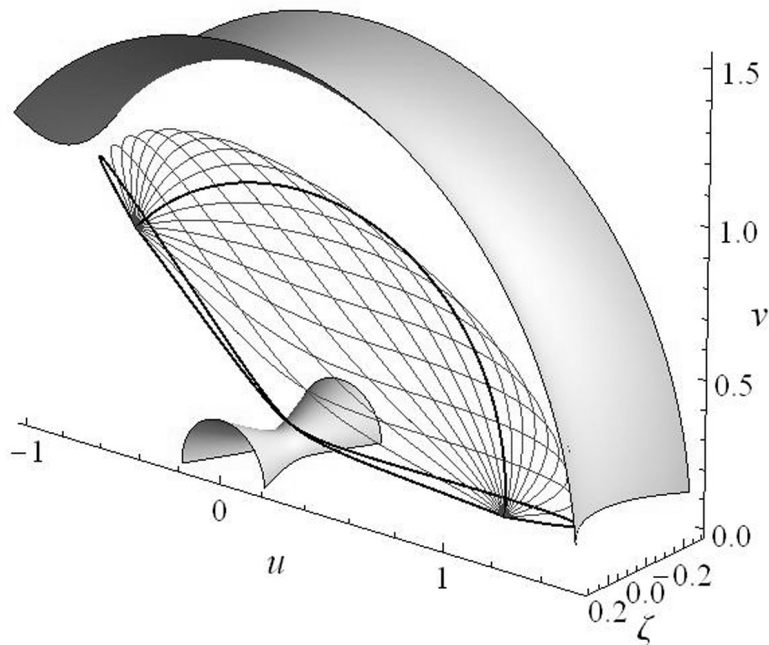


Рис. 5. Конфигурация потока заряженных частиц в поле, выраженном формулой (20)

качества фокусировки или небольшого изменения конфигурации потока в центральной плоскости. В качестве альтернативного варианта можно предложить подбор такой преобразующей функции, которая бы порождала полевую структуру, удовлетворяющую достаточному критерию устойчивости траекторий в средней плоскости [12], или применение дополнительного конформного преобразования, превращающего неустойчивые решения в устойчивые.

Рассмотренный метод синтеза оперирует с моноэнергетическими потоками, поэтому устройства, созданные на его основе, будут осуществлять монохроматизацию пучка частиц. Для количественной оценки указанной особенности требуется изучение диспергирующих свойств по энергии. Поскольку диспергирующим элементом предлагаемых устройств являются электростатические поля, то траектории для заряженных частиц разной массы будут одинаковыми. В отношении масс-спектрометрии подобные устройства могут найти свое применение в совокупности с масс-анализаторами без фокусировки по энергии.

Немаловажным является и вопрос об оптических свойствах приборов и влиянии на них малых вариаций исходных данных: угловой расходимости пучка относительно центральной плоскости, разброса заряженных частиц по энергии и величине заряда, неточности изготовления электродов. Оценка влияния первеанса пучка на конфигурацию траекторий позволит сделать заключение о применимости таких систем для сильноточных потоков заряженных частиц.

Возможен также и другой подход для практического воплощения предлагаемых систем. Поверхности задающих электродов «заменяются» геометрическими фигурами с более простыми по форме поверхностями — шарами, кубами, торами и т. п. В этом случае нарушается режим идеальной фокусировки в плоскости симметрии, но появляется возможность упростить конструкцию, чтобы ее было легче изготовить. Такой подход является сам по себе сложной задачей, ее решение требует дополнительного времени и разработки эв-

ристических методов и подходов, большей частью аналитических, и выходит за рамки настоящей статьи.

Заключение

В статье изложен подход к построению транспортирующих корпускулярно-оптических систем. При рассмотрении электростатических полей с плоскостью симметрии в основе такого подхода лежит обратная задача, сформулированная на базе уравнения Гамильтона — Якоби.

Для нахождения электрических полей, обеспечивающих движение заряженных частиц по необходимым нам траекториям, применен алгоритм, использующий приемы теории функций комплексного переменного, а именно — конформное преобразование. Исходный потенциал после применения преобразующей функции трансформируется в новую полевую структуру. Соответствующим образом изменяются и траектории, причем между ними существует связь, выражаемая в аналитической форме. Путем правильного подбора преобразующей функции можно обеспечить трансформацию потока, необходимую в рамках той или иной задачи.

Описанный алгоритм проиллюстрирован на примере трех функций преобразования: логарифмической и двух степенных с разными рациональными показателями степени. Конформное преобразование посредством логарифмической функции переводит расходящийся поток частиц в параллельный.

Полученные двумерные потенциалы, являющиеся распределением в плоскости симметрии некоего трехмерного гармонического поля, распространялись в пространство путем разложения в ряд по поперечной координате. На основе полученных структур представлены примеры возможной реализации корпускулярно-оптических приборов.

Применение описанных систем вместо традиционных сопрягающих элементов при построении как электронно-оптического тракта различного назначения, так и ионного для масс-спектрометрических исследований, дает целый ряд преимуществ. За-



мена нескольких согласующих электронных или магнитных линз на один из приборов, предложенных в работе, позволит упростить и удешевить конструкцию тракта, а также, учитывая возможности по трансформации и транспортировке потока заряженных частиц, уменьшить его размеры. Особо следует отметить значительное снижение трудоемкости по юстировке и настройке установки. Еще одним достоинством является понижение требований к электропитанию. Все вышеизложенное указывает

на перспективность разработки подобных устройств и их применения для оптики заряженных частиц.

Благодарности

Исследования выполнены при финансовой поддержке Комитета по науке и высшей школе при правительстве Санкт-Петербурга (грант для студентов вузов, расположенных на территории Санкт-Петербурга, аспирантов вузов, отраслевых и академических институтов).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Афанасьев В.П., Явор С.Я.** Электростатические энергоанализаторы для пучков заряженных частиц. М.: Наука, 1978. 224 с.
- [2] **Hoffmann E.D., Stroobant V.** Mass spectrometry: principles and applications (2nd ed.). Toronto: John Wiley & Sons, Ltd, 2001. 420 p.
- [3] **Сысоев А.А., Чупахин М.С.** Введение в масс-спектрометрию. М.: Атомиздат, 1977. 304 с.
- [4] **Кельман В.М., Явор С.Я.** Электронная оптика. Л.: Наука, 1968. 488 с.
- [5] **Голиков Ю.К., Краснова Н.К.** Теория синтеза электростатических энергоанализаторов. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. 409 с.
- [6] **Павлов В.В.** Принцип конформного преобразования электростатических полей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. Физико-математические науки. 2011. № 4(134). С. 110–117.
- [7] **Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.** Механика. М.: Наука, 1965. 204 с.
- [8] **Голиков Ю.К., Уткин К.Г., Чепарухин В.В.** Расчет элементов электростатических электронно-оптических систем. Учеб. пос. Л.: Издательство ЛПИ, 1984. С. 5–15.
- [9] **Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.** Методы теории функций комплексного переменного. М.: Физматгиз, 1958. 688 с.
- [10] Wolfram Mathematica 9 [Электронный ресурс]. Режим доступа: www.wolfram.com.
- [11] **Краснова Н.К., Павлов В.В., Соловьев К.В.** Об одном классе идеально фокусирующих систем для энергетического анализа заряженных частиц // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 1(213). С. 121–127.
- [12] **Бердников А.С., Краснова Н.К.** Достаточный критерий устойчивости и компактности плоских ионных пучков в трехмерных электрических и магнитных полях с плоскостью симметрии // Научное приборостроение. 2015. Т. 25. № 2. С. 69–90.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАВЛОВ Владимир Владимирович — аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vova-gt@yandex.ru

КРАСНОВА Надежда Константиновна — доктор физико-математических наук, доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.k.krasnova@mail.ru

Pavlov V.V., Krasnova N.K. SYNTHESIS OF ELECTROSTATIC FIELDS FOR TRANSPORTATION OF CHARGED PARTICLE BEAMS.

In the article, an approach to creation of corpuscular-optical devices for transportation and transformation of charged particle beams has been elucidated. These devices are able to optimize and create the most convenient configuration of ionic or electron path. The approach relies upon the inverse dynamics problem

formulated on a basis of the Hamilton-Jacobi equation. The motion in the symmetry plane of a three-dimensional (3D) field was considered. The problem was solved by analytical methods. An algorithm for construction electric fields providing the particle motion on the desired trajectories was described. A key to this algorithm lies with a concept of conformal transformation from complex variable theory. This procedure was illustrated by examples. Quadratic potential was chosen as a basis. Three functions of conformal transformation were considered, they providing the rotation of the focused charged particle beam at fixed angle, the transformation of divergent flow to parallel one. The calculated two-dimensional potentials were extended into 3D-space by power series expansion on transverse coordinate. Device embodiments were suggested on a basis of the calculated field structures.

INVERSE DYNAMICS PROBLEM, CHARGED PARTICLE OPTICS, CONFORMAL TRANSFORMATION, IDEAL FOCUSING.

REFERENCES

- [1] V.P. Afanasyev, S.Ya. Yavor, *Elektrostaticheskiye energoanalizatory dlya puchkov zaryazhennykh chastits* [Electrostatic energy analyzers for charged particle beams], Moscow, Nauka, 1978.
- [2] E.D. Hoffmann, V. Stroobant, *Mass spectrometry: principles and applications* (2nd ed.). Toronto: John Wiley & Sons, Ltd, 2001.
- [3] A.A. Sysoyev, M.S. Chupakhin, *Vvedeniye v mass-spektrometriyu* [Introduction to mass spectrometry]. Moscow, Atomizdat, 1977.
- [4] V.M. Kelman, S.Ya. Yavor, *Elektronnaya optika* [Electronic optics]. Leningrad, Nauka, 1968.
- [5] Yu.K. Golikov, N.K. Krasnova, *Teoriya sinteza elektrostaticheskikh energoanalizatorov* [Theory of synthesis of electrostatic energy analyzers], SPb.: Izdatelstvo Politehnicheskogo Universiteta, 2010.
- [6] V.V. Pavlov, A principle of the conformal transformation of electrostatic fields, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal, Physics and Mathematics*. No. 4(134) (2011) 110–117.
- [7] L.D. Landau, E.M. Livshits, *Mekhanika*. [Mechanics], Moscow, Nauka, 1965.
- [8] Yu.K. Golikov, K.G. Utkin, V.V. Cheparukhin, *Raschet elementov elektrostaticheskikh elektronno-opticheskikh sistem* [The calculation of elements of electrostatic electronic and optical systems], *uchebnoye posobiye*, Leningrad, Izdatelstvo LPI, 1984. P. 5–15.
- [9] M.A. Lavrentyev, B.V. Shabat, *Metody teorii funktsiy kompleksnogo peremennogo* [Methods of complex variable theory], Moscow, Fizmatgiz, 1958.
- [10] Wolfram Mathematica 9 [Elektronnyy resurs]. Rezhim dostupa: www.wolfram.com.
- [11] N.K. Krasnova, V.V. Pavlov, K.V. Solovyev, On a class of ideal focusing systems for energy analysis, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal, Physics and Mathematics*. No. 1(213) (2015) 121–127.
- [12] A.S. Berdnikov, N.K. Krasnova, Dostatochnyy kriteriy ustoychivosti i kompaktnosti ploskikh ionnykh puchkov v trekhmernykh elektricheskikh i magnitnykh polyakh s ploskostyu simmetrii [Sufficient buckling and compactness criterion for flat ionic beams in the 3D electrostatic and magnetic fields with symmetry plane], *Nauchnoye priborostroyeniye*. 25 (2) (2015) 69–90.

THE AUTHORS

PAVLOV Vladimir V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vova-gt@yandex.ru

KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politehnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
n.k.krasnova@mail.ru



DOI: 10.5862/JPM.242.7

УДК: 530.145+539.1

В.В. Кораблев, В.В. Дубов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ФОРМИРОВАНИЕ УГЛОВЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ НЕУПРУГОРАССЕЯННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ИХ КВАНТОВОМ ТРАНСПОРТЕ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Рассмотрены особенности формирования угловых зависимостей электронов, вышедших из неупорядоченного твердого тела и испытавших неупругое рассеяние. Такого рода тонкие особенности зависимостей формируются за счет процессов квантового транспорта эмитируемых частиц. Рассмотрены случаи двух- и многочастичных неупругих процессов. Проведены качественные и количественные оценки относительных вкладов различных групп частиц. Показано, что обычно эффекты, связанные с квантовым транспортом электронов, выражены более ярко в случае регистрации электронов, генерируемых внутри твердого тела при неупругом рассеянии электронов первичного пучка. Это относится как к электронам, генерируемым при ионизационных процессах, так и к оже-электронам. Полученные результаты указывают на перспективность использования описанного эффекта в прикладной эмиссионной электронной спектроскопии.

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ, КВАНТОВЫЙ ТРАНСПОРТ, СЛАБАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ, ПОВЕРХНОСТЬ ТВЕРДОГО ТЕЛА.

Введение

Выяснение физических причин формирования поправок к столкновительному члену кинетического уравнения Больцмана, связанных с явлением квантовой интерференции, представляет собой одну из самых интересных и продуктивных тем исследований в области физики рассеяния частиц. Проблема эта изучалась как в ее классическом волновом аспекте, так и в квантовом, особенно когда кинетическое уравнение Больцмана начали выводить из квантового уравнения для матрицы плотности. Оказалось, что при описании переноса излучения на основе волновых уравнений и на основе стандартной теории переноса результаты не всегда совпадают. Наиболее отчетливо это различие проявилось при описании процесса отражения электромагнитных волн от неоднородных сред в направлении точно назад [1 – 6]. Увеличение вероятности такого рассеяния и проявление слабой локализации электронов в неупорядоченных средах имеют одну и ту же физическую причину. Объяснение эффектов с корпускулярных позиций связано с их квантовым транспортом.

Квантовый транспорт электронов есть их движение в среде, в процессе которого они испытывают столкновения, причем последующее начинается раньше, чем заканчивается предыдущее. Это движение может совершаться как под действием приложенного внешнего поля, так и благодаря запасенной электронами начальной кинетической энергии. Тот аспект квантового транспорта, который связан с явлением слабой локализации, универсален; он проявляется и в известных задачах теории проводимости, и в задачах переноса излучения и вещества. Если движение электронов или фотонов происходит в неупорядоченной среде, то такая интерференция приводит не просто к количественным поправкам к результатам, полученным с помощью кинетического уравнения Больцмана, но к качественно новым эффектам. В самом известном случае эти эффекты связаны с андерсоновской локализацией [7, 8].

В последние годы квантовый транс-

порт и, в частности, слабая локализация интенсивно изучаются экспериментально и теоретически. Отрицательное аномальное магнетосопротивление в физике твердого тела и слабая локализация света в классической электродинамике могут считаться двумя основными экспериментальными свидетельствами реальности описываемых своеобразных интерференционных явлений, наблюдаемых при рассеянии в неупорядоченных средах.

Обычная слабая локализация электронов обусловлена их упругими столкновениями с центрами рассеяния. Неупругие столкновения, как до сих пор было принято считать, подавляют квантовые интерференционные процессы, связанные с сохранением фазовой памяти электронов. Неупругое рассеяние определяет диссипативные процессы при движении частиц в средах. Долгое время считалось, что именно эти процессы диссипации являются основным следствием неупругого рассеяния частиц в твердых телах. Это несомненно верно в отношении обычной слабой локализации андерсоновского типа. Однако неупругие процессы, как оказалось, могут одновременно быть источником новых квантовых интерференционных явлений, что нашло свое выражение в возможности существования слабой локализации нового типа.

Новый вид квантового транспорта, как было показано в работах [3, 9, 10], проявляется четко для электронов, имеющих энергию от десятков электронвольт до единиц килоэлектронвольт. Это связано с тем, что, в отличие от обычной слабой локализации, которой соответствует увеличение рассеяния электронов назад в очень узкую область телесных углов порядка λ/l , преимущественное рассеяние электронов происходит в более широком интервале углов: $(\lambda/l) \cdot (E/\hbar\omega)$. Здесь λ — длина волны де Бройля; l — длина свободного пробега электрона; E — энергия электрона; $\hbar\omega$ — энергия, им потерянная.

Возможность наблюдать эффекты квантового транспорта нового типа в канале неупругого рассеяния была предсказана в предположении, что движение электронов осуществляется так, что кроме неупругого

рассеяния они испытывают однократное рассеяние на большой угол. Затем было показано, что слабая локализация нового типа сохраняется и в условиях упругого многократного рассеяния на произвольные углы [3]. Было также установлено, что роль поверхности в теории квантового транспорта нового типа не деструктивна, а в отдельных случаях может даже стать определяющей. Вопросы указанной сохранности и роли поверхности являются принципиальными в отношении проявления слабой локализации нового типа в природных процессах, а также возможности прямого наблюдения эффекта.

Ранее была показана возможность наблюдения описанного эффекта при регистрации электронов, выходящих из твердого тела при облучении последнего пучком первичных электронов промежуточных (от десятков электронвольт до десятка килоэлектронвольт) энергий.

В отношении интересующих нас эффектов квантового транспорта электронов, которые проявляются при эмиссии электронов, мы уделяем основное внимание двум типам частиц, выходящих из твердого тела в вакуум.

Во-первых, это электроны первичного пучка, которые, рассеявшись в кристалле многократно упруго и неупруго (рассеяние последнего рода может быть однократным), затем покидают среду.

Во-вторых, электроны, генерируемые первичным пучком внутри твердого тела, а затем при движении к поверхности испытывавшие упругие и неупругие соударения. Отличие вторично-эмиссионных электронов, выходящих из твердого тела и испытывающих слабую локализацию нового типа, от электронов первого вида в отношении процессов квантового транспорта заключается в различном влиянии поверхности и приповерхностной области твердого тела на формирование угловых зависимостей частиц. Проведенный анализ квантового транспорта этих двух типов частиц позволил детально исследовать роль поверхности твердого тела в процессах слабой локализации нового типа.



Слабая локализация нового типа вблизи поверхности при эмиссии электронов

С целью более четкого выделения влияния поверхности на рассеяние частиц будем рассматривать электроны двух описанных типов, имеющие приблизительно одинаковые значения энергии. Это позволит, по возможности, исключить из рассмотрения несущественные энергетические различия количественных характеристик влияния поверхности на процессы рассеяния.

На рассеяние электронов первичного пучка, испытывающих наряду с упругим и неупругое рассеяние при взаимодействии с неупорядоченным твердым телом, будет оказывать существенное влияние поверхность образца, непосредственно около которой частица будет двигаться дважды до своего вылета из среды. Рассеяние же вторичных электронов, выходящих из твердого тела, должно быть менее чувствительно к влиянию его поверхности.

Эта уникальность вторичных электронов применительно к квантовому транспорту частиц в среде связана с тем, что они генерируются во внутрикристаллической области. Затем, двигаясь к поверхности, они рассеиваются (упруго и неупруго) и только после этого взаимодействуют непосредственно с поверхностью твердого тела. Безусловно, будет сказываться и влияние поверхности на угловые зависимости интенсивностей вторичных электронов. Как это будет проявляться для различных типов частиц (например, неупругорассеянных электронов первичного пучка и вторично-эмиссионных электронов), насколько качественно и количественно будут отличаться характеристики рассеяния, мы и исследуем в нашей работе. Общая группа причин, определяющих угловые зависимости, связана с обычными геометрическими факторами рассеяния и с численным различием параметров объемной и приповерхностной областей твердого тела. Однако нас в большей степени интересуют физические квантовомеханические причины различий между формированиями ориентационных зависимостей для частиц, неупруго отраженных кристаллом, и для эмиссионных частиц.

С точки зрения практического применения полученных в статье результатов также оказываются важными и количественные различия величин ориентационных эффектов, связанных со слабой локализацией нового типа неупруго рассеиваемых твердым телом частиц. Ранее авторами в работе [4] было показано при использовании модели изотропно рассеивающих силовых центров, что квантовый транспорт нового типа имеет место и в случае многократного рассеяния электронов на произвольные углы. При этом процесс сопровождается слабой локализацией электронов, рассеивающихся неупорядоченной средой. Использование модели изотропно рассеивающих центров не является обязательным [11].

Рассмотрим процессы рассеяния электронов, происходящие в неупорядоченном твердом теле при падении на него электронов промежуточных энергий. Твердое тело занимает полупространство $z > 0$.

Уравнение Шредингера для полной волновой функции системы, состоящей из частицы, взаимодействующей со средой, имеет вид

$$\Delta\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{r}) - U_e(\mathbf{R}) - U_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0, \quad (1)$$

где m — масса электрона; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор рассеиваемой частицы; $\mathbf{R}$ — набор тех координат частиц среды, которые связаны с реализацией ее внутренних степеней свободы; $U(\mathbf{r})$ — суммарный потенциал случайным образом расположенных центров рассеяния, на которых частица рассеивается упруго и неупруго; оператор $U_e(\mathbf{R})$ описывает взаимодействие частиц среды; оператор $\Delta = \Delta_r + \Delta_R$; $U_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ — энергия взаимодействия рассматриваемой рассеиваемой частицы со всеми частицами среды. В общем случае потенциал $U(\mathbf{r})$ будет комплексным (так называемый оптический потенциал), его мнимая часть дает дополнительную возможность усредненно учитывать влияние неупругих процессов на динамические параметры первичного пучка частиц. Мнимая часть $U'(\mathbf{r})$ описывает усредненное затухание рассеивающегося пучка частиц за счет неупругих процессов.

Безусловно, разбиение общего потенциала взаимодействия внешнего электрона с частицами среды на $U(\mathbf{r})$ и $U(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ условно. Полное рассеяние внешней частицы (упругое и неупругое) происходит на суммарном потенциале, создаваемом средой. Решать следует именно самосогласованную задачу.

Однако мы будем использовать общепринятое приближение, когда упругие (когерентные и некогерентные) каналы рассеяния описываются потенциалом $U(\mathbf{r})$, а «основной» неупругий канал связывать с потенциалом $U(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Через него определяется матричный элемент $T(\mathbf{r}, m \rightarrow n)$ неупругого взаимодействия электрона со средой:

$$T(\mathbf{r}, m \rightarrow n) = \int \Phi_n^*(\mathbf{R}) U_{ee}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Phi_m(\mathbf{R}) d^3 R. \quad (2)$$

В случае рассеяния электрона на твердом теле такой подход оправдан тем фактом, что обычно мы имеем возможность независимо наблюдать (регистрировать) интенсивности различных групп электронов, испытавших неупругое рассеяние разных типов. Например, это случай электронов, возбуждавших в твердом теле коллективные колебательные моды (плазмоны и т. п.) либо участвующих в процессах ионизации определенных уровней, в оже-процессах и т. п.

Волновые функции среды $\Phi_n(\mathbf{R})$, входящие в выражение (2), удовлетворяют уравнению

$$\Delta_{\mathbf{R}} \Phi_n(\mathbf{R}) + \frac{2m}{\hbar^2} [\varepsilon_n - U_e(\mathbf{R})] \Phi_n(\mathbf{R}) = 0, \quad (3)$$

в котором $\varepsilon_n = \hbar\omega$ есть потерянная частицей и приобретенная средой энергия.

Волновая функция $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ может быть разложена в ряд по полному ортонормированному набору $\Phi_n(\mathbf{R})$:

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R}), \quad (4)$$

что позволяет записать уравнение (1) в виде

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{r}} \psi_m(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \varepsilon_m - U(\mathbf{r})] \psi_m(\mathbf{r}) = \\ = \sum_n \frac{2m}{\hbar^2} \psi_n(\mathbf{r}) T(\mathbf{r}, n \rightarrow m). \end{aligned} \quad (5)$$

Если начальное состояние i является основным состоянием среды, а ее единственное возбужденное состояние — n , то

уравнение (5) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{r}} \psi_n(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \varepsilon_n - U(\mathbf{r})] \psi_n(\mathbf{r}) = \\ = \frac{2m}{\hbar^2} \psi_i(\mathbf{r}) T(\mathbf{r}, i \rightarrow n). \end{aligned} \quad (6)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \int G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \frac{2m}{\hbar^2} \psi_i(\mathbf{r}_1) T(\mathbf{r}_1, i \rightarrow n) d^3 r_1. \quad (7)$$

Функция Грина $G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ в формуле (7) описывает распространение частиц в условиях упругого рассеяния с энергией, равной $E - \varepsilon_n$, при этом

$$\begin{aligned} \Delta G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - \varepsilon_n - U(\mathbf{r})] \times \\ \times G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (8)$$

Ток неупругорассеянных электронов определяется матрицей плотности

$$\begin{aligned} \rho_{mn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') \rangle = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \times \\ \times \int \langle G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) \psi_i(\mathbf{r}_1) \psi_i^*(\mathbf{r}_2) \times \\ \times T(\mathbf{r}_1, i \rightarrow n) T^*(\mathbf{r}_2, i \rightarrow n) \rangle d^3 r_1 d^3 r_2. \end{aligned} \quad (9)$$

Угловые скобки в правой части равенства (9) соответствуют усреднению по расположению центров рассеяния.

Если неупругость не связана с возбуждением силовых центров, на которых электроны рассеиваются упруго, то фактор $T \cdot T^*$ может быть вынесен из под знака усреднения. Строго говоря, матрица плотности зависит не только от координат $\mathbf{r}$ рассеивающейся частицы, но также описывает состояние среды. Мы будем подразумевать суммирование по конечным состояниям среды, чему в дальнейшем будет соответствовать интегрирование по импульсу, полученному средой в акте неупругого рассеяния частицы. В свою очередь матрица плотности для рассматриваемых процессов определяется через соответствующие вершинные функции Γ :

$$\begin{aligned} \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \langle G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \times \\ \times G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) G_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) G_i^*(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4) \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

На рис. 1 представлены диаграммы, которые определяют искомые матрицы плотности. Используются общепринятые

обозначения [3]. Вклад в слабую локализацию нового типа вносят только кросс-диаграммы (см. рис. 1). Соответствующее кросс-диаграмме слагаемое в матрице плотности $\rho_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеет вид

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \left\{ G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_5) G_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) M_{in}(\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_6; \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8) \times \right. \\ & \quad \times G_i^*(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_6) T^*(\mathbf{r}_2, i \rightarrow n) \times \\ & \quad \times \rho_{ni}^0(\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8) d^3 r_2 d^3 r_3 d^3 r_6 d^3 r_7 d^3 r_8 + \\ & \quad + \int G_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) G_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_5) G_n^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_6) M_{in}(\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_6; \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8) \times \\ & \quad \times T(\mathbf{r}_1, i \rightarrow n) \rho_{in}^0(\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8) d^3 r_1 d^3 r_5 d^3 r_6 d^3 r_7 d^3 r_8 \left. \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

Полученные формулы позволяют провести расчет угловых зависимостей интенсивностей различных групп электронов, выходящих из кристалла при облучении последнего электронами промежуточных энергий.

Основные результаты

В представленной работе нас в первую очередь интересовали различия ориентационных зависимостей для электронов двух типов. Это электроны первичного пучка, которые, войдя в среду, испытали наряду с многократным упругим, акт неупругого рассеяния и отразились от среды назад. А также это электроны, генерируемые в сре-

де первичным пучком частиц, вышедшие затем из твердого тела в обратную полусферу телесных углов и испытавшие при этом кратные упругие и неупругое рассеяние. Источником таких электронов могут быть процессы атомной эмиссии узлов решетки, оже-электроны, электронные зоны и т. п.

Результаты расчета ориентационных зависимостей для случая движения частиц в бесконечной среде были представлены и обсуждались в работе [3]. В этом случае вклад в полную интенсивность рассеяния от процессов, описываемых кросс-диаграммами, по отношению к вкладу процессов, описываемых лестничными диаграммами, J_c / J_L , может быть получен аналитически при довольно общих предположениях [3]. Если величина импульса, передаваемого среде в процессе неупругого соударения, является фиксированной и не слишком малой по сравнению с импульсом частицы, то вклад кросс-диаграмм запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \frac{2}{ql_i \cos \frac{\theta}{2} \ln \left[\left(1 + \frac{1}{|\mu_f|} \right)^{\mu_f} \left(1 + \frac{1}{\mu_i} \right)^{\mu_i} \right]} \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\zeta} e^{-\left[\sqrt{1-\mu_f^2} + \sqrt{1-\mu_i^2} \frac{\lambda_0}{l_i} \frac{1+\mu}{\mu} \right] \zeta} \cos \left(\frac{\omega}{2E} \right) \times \end{aligned}$$

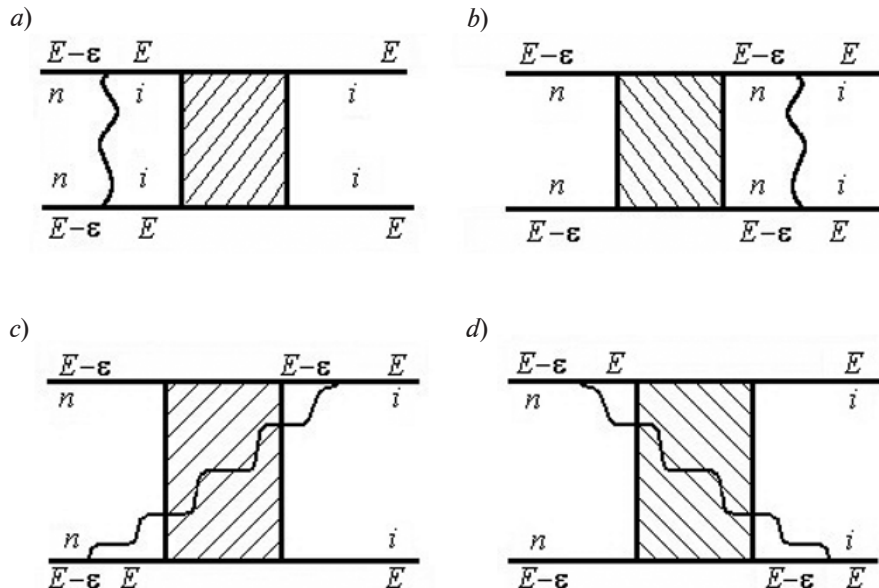


Рис. 1. Лестничные (a, b) и перекрестные (c, d) диаграммы, определяющие матрицу плотности в канале неупругого рассеяния (заштрихована область, соответствующая блоку M).

Перекрестные диаграммы описывают процессы квантового транспорта

$$\times \cos((\mu_i - |\mu_f|)\zeta) \sin\left(2q\lambda_0\zeta \cos\frac{\theta}{2}\right),$$

где μ_i , μ_f — конусы углов падения частиц на поверхность и вылета с нее по отношению к внутренней нормали к поверхности, θ — угол рассеяния частиц.

Зависимость параметра когерентности J_c / J_L от угла выхода частиц из твердого тела при углах падения около 75° приведена для электронов промежуточных энергий на рис. 2 (кривая 1). Для представленной зависимости проведено суммирование по всем возможным импульсам, передаваемым в процессе неупругого соударения; параметр $\lambda/l \approx 0,1$. Кривая 2 на рис. 2 есть результат компьютерного расчета параметра когерентности для таких же характеристик рассеяния в случае квантового транспорта электронов, эмитируемых средой. При этом энергия таких электронов сравнима с энергией неупругорассеянных первичных электронов. Видно, что ориентационный эффект для случая эмитируемых средой (так называемых вторичных) электронов оказывается более выраженным. Кривая 3 на рис. 2 демонстрирует результаты расчета параметра когерентности для оже-электронов, выходящих из твердого тела. Для таких электронов этот параметр также имеет более выраженную ориентационную зависимость.

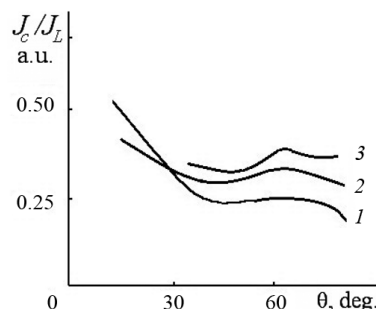


Рис. 2. Рассчитанные зависимости параметра когерентности от угла выхода частиц из твердого тела для электронов различного типа: неупругоотраженных (кривая 1), эмитируемых средой (2), оже-электронов (3). Использованы параметры: $\lambda/l \approx 0,1$, $\theta_i = 75$ град

Расчет показывает, что эффекты слабой локализации нового типа в случае выходящих из твердого тела (вторичных) электронов оказываются существеннее, чем для неупругорассеянных электронов первичного пучка, отраженных кристаллом. Одной из причин ослабления эффекта является в целом деструктивная роль поверхности в наблюдении слабой локализации нового типа. Проведенный расчет также показал, что эффекты квантового транспорта электронов промежуточных энергий в приповерхностной области твердого тела могут возрастать в случае эмиссии вторичных электронов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Апресян А.А., Кравцов Ю.А. Теория переноса излучения. М.: Наука, 1983. 216 с.
- [2] Рыгов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику. Ч. 2. М.: Наука, 1978. 463 с.
- [3] Rumyantsev V.V., Doubov V.V. Quantum transport of electrons scattered inelastically from disordered media // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49. No. 13. Pp. 8643–8655.
- [4] Дубов В.В., Кораблев В.В. Влияние поверхности твердого тела на квантовый транспорт электронов. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2001. 51 с.
- [5] Дубов В.В. Взаимодействие электронов промежуточных энергий с приповерхностной областью твердых тел. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2002. 157 с.
- [6] Sheng P. Scattering and localization of classical waves in random media. Singapore: World Scientific, 1990.
- [7] Anderson P.W. Absence of diffusion in certain random lattices // Phys. Rev. 1958. Vol. 109. No. 5. Pp. 1492–1505.
- [8] Rammer J. Quantum transport theory of electrons in solids: a single-particle approach // Rev. Mod. Phys. 1991. Vol. 63. No. 4. Pp. 781–817.
- [9] Либенсон Б.Н., Платонов К.Ю., Румянцев В.В. Новый тип слабой локализации электронов в неупорядоченных средах // ЖЭТФ. 1992. Т. 101. Вып. 2. С. 614–628.
- [10] Rumyantsev V.V., Orlenko E.A., Libenson B.N. On the theory of quantum interference between inelastic and elastic electron scattering events // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. Вып. 3. С. 1001–1015.
- [11] Пронин В.П. Упругое и неупругое взаимодействие электронов средних энергий с поверхностью твердого тела. Дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.07 и 01.04.04: защищена 26 декабря 2014 г. СПб. 2014. 281 с.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич — доктор физико-математических наук, советник ректора, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
korablev@spbstu.ru

ДУБОВ Виктор Викторович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dubov@spbstu.ru

Korablev V.V., Dubov V.V. THE FORMATION OF THE ANGULAR DEPENDENCES OF THE INELASTICALLY SCATTERED ELECTRONS BY THEIR QUANTUM TRANSPORT NEAR THE SURFACE OF A SOLID.

Features of the formation of angular dependences of electrons emitted from a disordered solid and experienced inelastic scattering have been considered. Such fine details of the dependences are formed by the processes of the quantum transport of emitted particles. We took the cases of two-particle and multi-particle inelastic processes. Qualitative and quantitative assessments of the relative contributions of the different groups of particles were carried out. The effects related to quantum electron transport were shown to be generally more pronounced in the case of registration of electrons, generated inside the solid in the inelastic scattering of particles of the primary beam. This is true both to the electrons generated by ionization processes and Auger electrons. The obtained results point up the possibility of using this effect in the applied electron spectroscopy.

ELECTRON SCATTERING, QUANTUM TRANSPORT, WEAK LOCALIZATION, SURFACE OF A SOLID.

REFERENCES

- [1] A.A. Apresyan, Yu.A. Kravtsov, Teoriya perenosa izlucheniya [The emission transport theory], Moscow, Nauka, 1983.
- [2] S.M. Rytov, Yu.A. Kravtsov, V.I. Tatarskiy, Vvedenie v statisticheskuyu radiofiziku [The introduction to statistical radiophysics], Moscow, Nauka, 1978.
- [3] V.V. Rumyantsev, V.V. Dubov, Quantum transport of electrons scattered inelastically from disordered media, Phys. Rev. B. 49 (13) (1994) 8643–8655.
- [4] V.V. Dubov, V.V. Korablev, Vliyanie poverhnosti tverdogo tela na kvantovy transport elektronov [The effect of solid surface on the quantum electron transport], St. Petersburg, Izdatelstvo Politehnicheskogo Universiteta, 2001.
- [5] V.V. Dubov, Vzaimodeistvie elektronov promezhutochnykh energiy s pripoverhnostnoi oblastyu tverdykh tel [The interaction of intermediate-energy electrons with the near-surface region of solids], St. Petersburg, Izdatelstvo Politehnicheskogo Universiteta, 2002.
- [6] P. Sheng, Scattering and localization of classical waves in random media, World Scientific, Singapore, 1990.
- [7] P.W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, Phys. Rev. 109 (5) (1958) 1492–1505.
- [8] J. Rammer, Quantum transport theory of electrons in solids: a single-particle approach, Rev. Mod. Phys. 63 (4) (1991) 781–817.
- [9] B.N. Libenson, K.Yu. Platonov, V.V. Rumyantsev, New type of weak localization of electrons in disordered media, JETP. 101 (2) (1992) 614–628.
- [10] V.V. Rumyantsev, E.A. Orlenko, B.N. Libenson, On the theory of quantum interference between inelastic and elastic electron scattering events, JETP. 111 (3) (1997) 1001–1015.
- [11] V.P. Pronin, Uprugoye i neuprugoye vzaimodeystviye elektronov srednikh energiy s poverkhnostyu tverdogo tela [Elastic and inelastic interaction of medium-energy electrons with a solid surface], Diss. dok. fiz.—mat. nauk. SPb, 2014.

THE AUTHORS

KORABLEV Vadim V.

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

DUBOV Victor V.

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

DOI: 10.5862/JPM.242/8

УДК: 577.35

П.А. Егорова¹, О.Л. Власова¹, И.Б. Безпрозванный^{1,2}

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

² Юго-Западный медицинский центр университета Техаса, США

ОГРАНИЧЕНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ АКТИВНОСТИ КЛЕТОК ПУРКИНЬЕ МОЗЖЕЧКА ЛАБОРАТОРНЫХ МЫШЕЙ ПУТЕМ АКТИВАЦИИ SK-КАНАЛОВ *IN VIVO*

Изучено действие внутривенных инъекций активатора кальций-активируемых калиевых каналов малой проводимости 2-го и 3-го типов (SK2/SK3) СуРРА на частоту генерации активности клеток Пуркинье (КП) коры мозжечка шестимесячных лабораторных мышей-самцов. Методом внеклеточной регистрации активности КП *in vivo* было показано, что инъекции 1 мМ СуРРА приводят к уменьшению частоты активности КП на 16 % через час, на 49 % через два часа и на 61 % через три часа после введения активатора. Полученные результаты подтверждают важную роль SK-каналов в регуляции спонтанной активности КП *in vivo*. Поскольку нарушения биофизических и физиологических функций КП наблюдаются в случае церебеллярных атаксий, сделан вывод о том, что SK-каналы служат потенциальной мишенью для лечения подобных нарушений.

АТАКСИЯ, МОЗЖЕЧОК, КЛЕТКИ ПУРКИНЬЕ, SK-КАНАЛЫ, СУРРА.

Введение

Мозжечок является важным отделом головного мозга, который отвечает за координацию движений, моторные функции, мышечный тонус, регуляцию равновесия, а также за моторное обучение. Точная слаженность импульсной активности нейронов мозжечка во времени обуславливает быстроту реакции и четкость движений. Важную роль в контроле моторных функций играют проводящие пути мозжечка, поскольку именно по ним происходит передача информации другим отделам нервной системы [1]. Единственный эфферентный путь, идущий от коры мозжечка к его глубинным ядрам, осуществляется через аксональные отростки клеток Пуркинье (КП). Последние являются круп-

ными ГАМКергическими нейронами, т. е. клетками центральной нервной системы, основным тормозным нейромедиатором которых является γ -аминомасляная кислота (ГАМК). Таким образом, КП являются ключевыми элементами коры мозжечка, а правильное функционирование этих нейронов обеспечивает скорость и слаженность движений [2].

Действительно, поражение КП приводит к нарушению согласованности движений различных мышц, что является клиническим симптомом в случае таких нейродегенеративных заболеваний, как аутосомно-доминантные церебеллярные атаксии (АДЦА) [3]. У большинства пациентов, больных атаксией, на последних стадиях заболевания наблюдается практически



полная дегенерация КП [4]. Однако экспериментальные исследования показали, что симптомы АДЦА на ранних стадиях, возможно, вызваны не клеточной дегенерацией, а нарушениями биофизических и физиологических свойств КП. Подтверждением этой гипотезы служит потеря регулярности пейсмейкерной активности КП, обнаруженная на мышинных моделях АДЦА в случаях эпизодической атаки 2-го типа (ЭА2) [5], а также некоторых типов спиноцереbellарных атаксий (СЦА) [6, 7]. На основании полученных результатов было высказано предположение о положительном терапевтическом действии на пациентов препаратов, способных нормализовать регулярную активность КП.

Известно, что кальций-активируемые калиевые каналы малой проводимости (SK-каналы) участвуют в контроле пейсмейкерной активности КП [8]. Активация SK-каналов приводит к возникновению следовой гиперполяризации клеточной мембраны, что обуславливает регулярность генерации потенциала действия и ограничивает частоту импульсного сигнала КП [9]. Следовательно, семейство SK-каналов служит потенциальной фармакологической мишенью для лечения церебеллярных атаксий.

Некоторый терапевтический эффект активаторов SK-каналов был обнаружен в случае заболеваний ЭА2 [10, 11], СЦА2 [12] и СЦА3 [6] методами электрофизиологии

in vitro на мозжечковых срезах подопытных мышей. Однако крайне важным представляется изучение импульсной активности КП и их ответа на применение модуляторов SK-каналов в условиях проведения эксперимента *in vivo*. Кроме того, в мировой научной практике подобных исследований практически не проводили.

Цель работы состояла в выявлении влияния внутривенных инъекций активатора SK2/SK3-каналов СуРРА на импульсную активность КП коры мозжечка лабораторных мышей (СуРРА—циклогексил-2-(3,5-диметилпиразол)-6-метил-4-пиримидинамин (рис. 1)).

Постановка задачи

Предыдущие исследования показали, что модуляторы СуРРА и NS 309 (6,7-дихлор-1H-индол-2,3-дион-3-оксим) нормализуют спайковую активность КП СЦА2 мышей *in vitro*, обращая пачечную активность в тоническую. При этом действие на тоническую активность клеток выражалось в уменьшении частоты генерации спайков [12]. Затем было изучено влияние аппликаций растворов активаторов SK-каналов на активность КП *in vivo* [13]. В данных экспериментах наблюдался аналогичный эффект воздействия рассматриваемых модуляторов на частоту простых спайков (ПС) КП: действие модулятора NS 309 приводило к более существенному понижению частоты по сравнению с действием СуРРА. Данное наблюдение объясняется большей эффективностью связывания молекул NS 309 с SK-каналами по сравнению с СуРРА [14].

Итак, предыдущие исследования методом внеклеточной регистрации активности от одиночного отведения КП показали принципиальную возможность модуляции работы КП *in vivo* посредством поверхностной аппликации растворов активаторов SK-каналов [13]. Однако данный способ доставки потенциальных терапевтических средств не вполне приемлем для клинических испытаний. В связи с этим было решено провести серию экспериментов по внутривенному введению растворов одного из исследуемых веществ и оценить влияние активации SK-каналов на электрофизио-

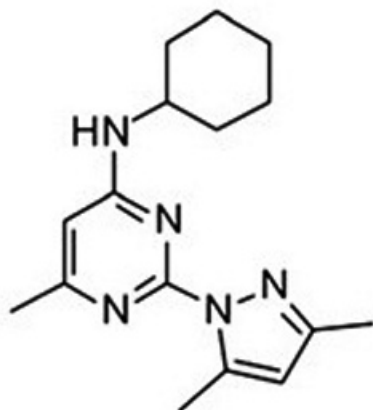


Рис. 1. Структурная химическая формула СуРРА — активатора SK-каналов

логические свойства КП *in vivo* в данном случае. В качестве тестируемого активатора SK-каналов было выбрано вещество CyPPA, поскольку данный модулятор имеет высокую специфичность активации SK-каналов 2-го и 3-го типов.

Методика экспериментов

Работа выполнялась на 35 беспородных лабораторных мышах-самцах шестимесячного возраста из когорты питомника Рапполово. Для проведения опытов использовалась техника внеклеточной регистрации импульсной активности КП от одиночного отведения *in vivo* (адаптирована из ранее опубликованной работы [13]). Внутривентрикулярная наркотизация подопытных животных проводилась дробным способом, с использованием уретана (Sigma-Aldrich, США) из расчета 1200 мг на килограмм массы тела для начальной инъекции. Затем через 40 минут данная концентрация увеличивалась до 1800 мг/кг. После достижения эффекта анестезии мышь закрепляли на стереотаксической установке (RWD Life Science, США). Температуру тела подопытного животного поддерживали на уровне 37 °С за счет подушки с подогревом (Harvard Apparatus, США), контролируемой по принципу обратной связи. Затем в области червя мозжечка снимался скальп под ламбовидным швом и просверливалась кость черепа. Внеклеточная регистрация импульсной активности выполнялась в IV – V дольках червя мозжечка с использованием стеклянных микроэлектродов сопротивлением 3 – 10 МОм из боросиликатного стекла (их внешний диаметр – 1,50 мм, внутренний – 0,86 мм; Sutter Instrument, США), заполненных 2,5 М раствором хлорида натрия NaCl. Погружение микроэлектрода в кору мозжечка осуществлялось с помощью одноосевого масляного гидравлического микроманипулятора (Narishige Group, Япония) на глубину до 5 мм. В работе исследовали влияние активатора SK2/SK3-каналов CyPPA (Sigma-Aldrich, США) на импульсную активность КП. Данное вещество сначала растворяли в ДМСО (диметилсульфоксид) с целью получения стокового раствора. Непосредственно пе-

ред экспериментом CyPPA растворяли в 0,9 %-м растворе NaCl (физиологический раствор) из замороженных аликвот стокового раствора. В качестве контроля использовали среду для тестируемого вещества, представляющую собой раствор ДМСО в физиологическом растворе.

Продолжительную регистрацию паттернов активности проводили от одиночной клетки. Активность КП идентифицировали по наличию в картине разряда сложного спайка (СС), а также по наличию тормозной паузы ПС после сложного разряда. Возникновение СС обусловлено синаптической активацией КП афферентами лазающих волокон, что приводит к генерации кальций-зависимых ПД в дендритах, тогда как ПС возникают в результате синаптической активации параллельными волокнами, известными также как аксоны гранулярных клеток [15]. Все опыты по внеклеточной регистрации активности КП проводили в течение временного периода продолжительностью не более пяти часов после последней инъекции анестетика. Регистрируемые электрические импульсы усиливали с помощью дифференциального усилителя (AC/DC Differential Amplifier, A-M Systems, Inc, США), обрабатывали с помощью фильтров высоких (10 кГц) и низких (100 Гц) частот, оцифровывали с помощью аналого-цифрового преобразователя NI PCI-6221 (National Instruments, США) и хранили для дальнейшего компьютерного анализа. Для регистрации электрофизиологической активности использовали программу **Bioactivity Recorder v. 5.9**. Характеристики импульсной активности оценивали с помощью программы Clampfit v10.3.1.5. Последующий статистический анализ осуществляли с помощью программ Origin и MS Excel.

Введение тестируемых веществ осуществляли путем внутривенной инъекции в хвостовую вену подопытного животного. Используемая концентрация раствора составляла 1 мМ CyPPA. Непрерывную запись активности проводили в течение 5 мин до инъекции препарата и 30 мин после нее. Также проводили короткие (30 с) записи через 60, 90, 120, 150 и 180 мин после



внутривенной инъекции. Влияние модулятора оценивали для каждой клетки через 30, 60, 90, 120, 150 и 180 мин после внутривенной инъекции по изменению частоты ПС. Всего в опытах было зарегистрировано 33 случая активности КП, из которых статистически было обработано 12 клеток, поскольку регистрируемая импульсная активность остальных нейронов не сохранялась в течение трех часов после внутривенной инъекции. Наши эксперименты были направлены на изучение влияния модулятора SK2/SK3-каналов СуРРА, при этом анализа частоты СС мы не проводили, поскольку известно, что SK-каналы вовлечены в генерацию ПС [8].

С целью анализа полученных данных определяли средние значения частоты ПС. Данные представляли в виде относительных частот с учетом среднеквадратичного отклонения, т. е. в виде $(F_i / F_0) \pm \sigma$, где F_0 — значение частоты ПС за 5 мин до инъекции тестируемого вещества, F_i — значение частоты ПС после его внутривенной инъекции (через 30, 60, 90, 120, 150 и 180 мин для каждой клетки), σ — среднеквадратичное отклонение.

Далее проводили проверку статистической гипотезы по критерию согласия Пирсона о том, что ряд экспериментальных данных в каждый момент времени имеет форму нормального распределения. Статистическую обработку полученных данных осуществляли с помощью однофакторного дисперсионного анализа (ANOVA) с последующим применением теста Бонферрони. Анализировали влияние исследуемых веществ на относительную частоту регистрируемой активности КП. В каждый рассматриваемый момент времени сравнивали влияние инъекции 1 мМ СуРРА на относительную частоту ПС, чтобы установить действие инъекции раствора ДМСО на этот же показатель в физиологическом растворе.

Основные результаты и их обсуждение

В рамках настоящей работы была проведена серия экспериментов по внеклеточной регистрации активности КП коры интактного мозжечка *in vivo* на беспородных лабораторных мышах-самцах в возрасте 6

мес. В большинстве экспериментов частота спонтанных ПС составляла значения в диапазоне 15 — 50 Гц, однако встречались и сигналы с частотой от 4 до 90 Гц. В качестве контрольных были проведены эксперименты, в которых делали внутривенную инъекцию чистым физиологическим раствором в хвостовую вену мыши. Характерный пример зарегистрированного паттерна разряда КП в течение пяти минут до внутривенной инъекции физиологического раствора и трех часов после нее приведен на рис. 2, а (кривая 1). Ниже на рис. 2, а представлена временная зависимость скользящего среднего частоты генерации ПС КП (кривая 2). Поведение частоты импульсной активности во времени было получено с шагом в 60 с. На рис. 2, б показаны фрагменты, которые соответствуют записи сигнала в контрольном эксперименте, через 1, 2 и 3 ч после внутривенной инъекции физиологического раствора. В каждом из фрагментов выявляются как простые, так и сложные спайки (обозначены точкой сверху). График скользящего среднего частоты генерации ПС (кривая 2 на рис. 2, а), а также увеличенные фрагменты записи активности (рис. 2, б) иллюстрируют незначительное уменьшение частоты генерации ПС. Присутствие в записи активности простых и сложных спайков, а также тормозной паузы после сложного разряда однозначно позволяет идентифицировать нейрон как КП.

Эксперименты по внутривенному введению 1 мМ СуРРА показали, что данный активатор SK-каналов способен модулировать электрофизиологические свойства КП *in vivo*. Характерный пример регистрации картины разряда КП до и после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА в хвостовую вену мыши в возрасте 6 мес. приведен на рис. 3. Рис. 3, а (кривая 1) иллюстрирует паттерн, который мы наблюдали в течение пяти минут до и трех часов после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА. Ниже на рис. 3, а представлено скользящее среднее частоты генерации ПС КП (кривая 2), график относится к соответствующей записи активности КП. Значения частоты активности вычислялись с шагом в 60 с. На рис. 3, б приведены фрагменты, которые

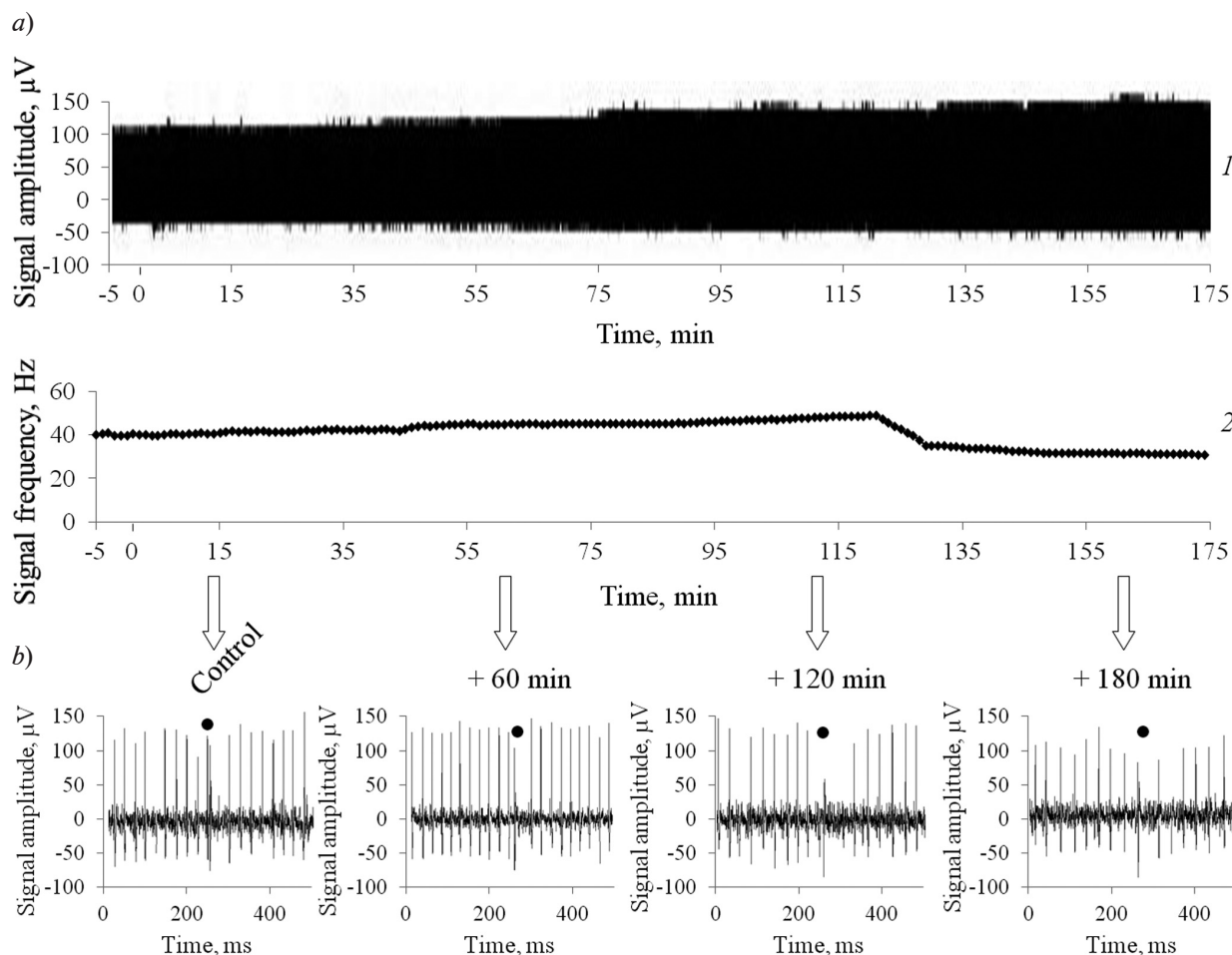


Рис. 2. Зависимость частоты генерации простых спайков клеткой Пуркинью (КП) от времени до и после внутривенной инъекции 0,9% NaCl. Приведены паттерн разряда КП (1) до и после инъекции, а также скользящее среднее частоты ПС (2) (см. также пояснения в тексте)

соответствуют записи сигнала в контрольном эксперименте через 1, 2 и 3 ч после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА. Графическое изображение скользящего среднего частоты импульсной активности (кривая 2 на рис. 3, а), а также увеличенные фрагменты записи активности (рис. 3, б) иллюстрируют значительное уменьшение частоты генерации ПС клеткой Пуркинью. Так, через три часа после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА в случае данной КП наблюдалось уменьшение генерации ПС приблизительно в 7 раз (кривая 2 на рис. 3, а).

На рис. 4 представлено обобщение данных, полученных в вышеописанных экспериментах. Так, было показано, что в течение

первого часа после внутривенной инъекции физиологического раствора ($n = 3$) наблюдается незначительное повышение частоты генерации ПС (примерно на 10 – 11 %), в течение второго часа после инъекции наблюдается незначительное уменьшение частоты импульсного сигнала относительно начального значения (примерно на 2 – 7 %), при этом в течение третьего часа после внутривенной инъекции 0,9 % NaCl наблюдается дальнейшее понижение частоты активности, достигающее в среднем до 25 %.

Полученные данные позволяют заключить, что сама процедура внутривенной инъекции и собственно физиологический раствор не оказывают существенного влияния на активность КП, то есть эффекты,

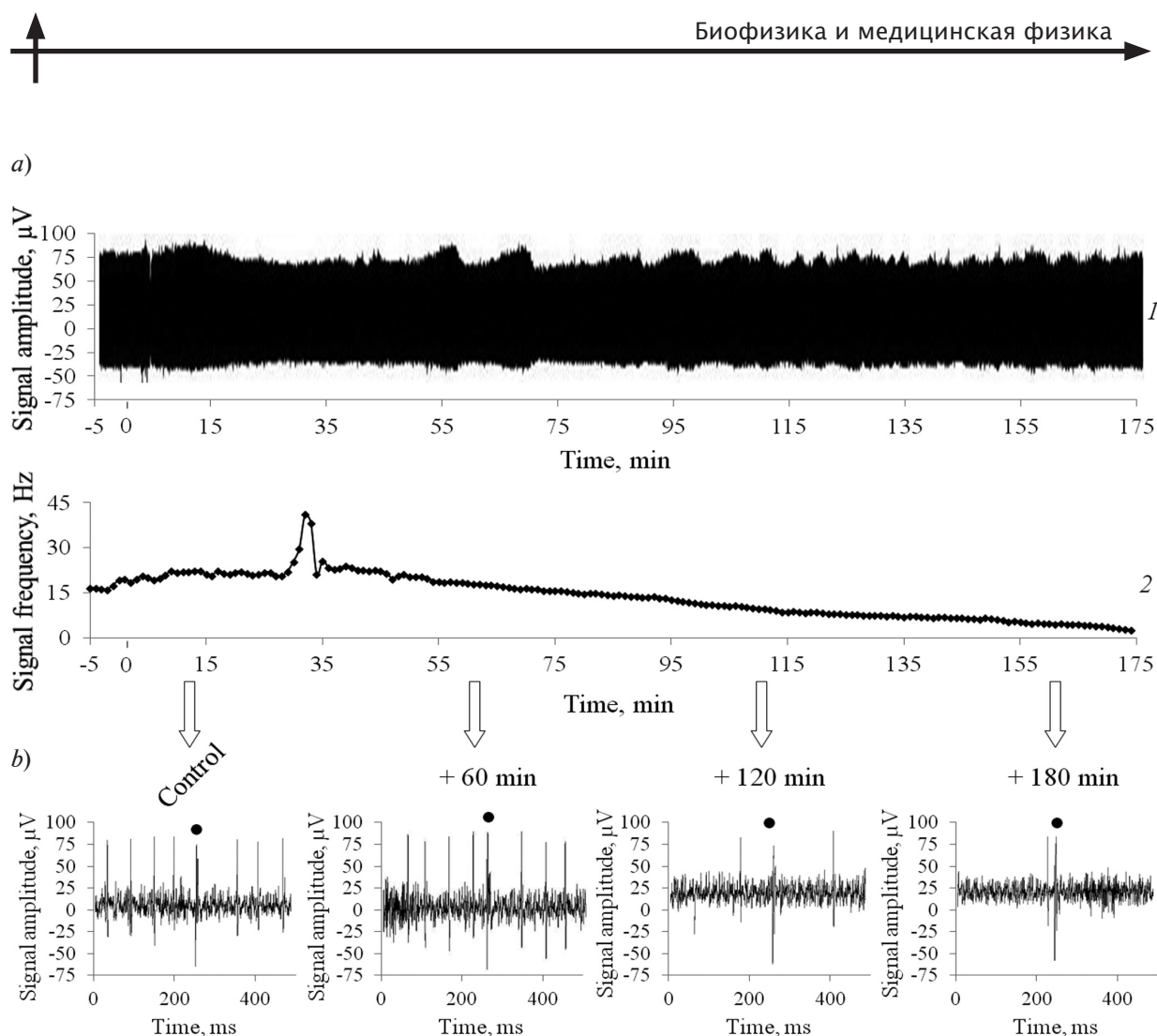


Рис. 3. Зависимость частоты генерации простых спайков клеткой Пуркинью (КП) от времени до и после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА. Приведены паттерн разряда КП (1) до и после инъекции, а также скользящее среднее частоты ПС (2) (см. также пояснения в тексте)

наблюдаемые при инъекции исследуемого активатора SK-каналов, вызваны его действием.

Также в представленных экспериментах исследовали влияние селективного для SK3/SK2-каналов модулятора СуРРА в концентрации 1 мМ. В результате этих экспериментов в ответ на инъекцию активатора наблюдалось два типа реакций КП. В первом случае это было прогрессивное понижение частоты генерации ПС КП, во втором — никаких существенных изменений электрофизиологических свойств КП. Согласно нашим предположениям, отсутствие реакции на инъекцию СуРРА было вызвано непопаданием шприцевой иглы в хвостовую вену (количество неудачных

экспериментов $n = 3$). В связи с этим анализ проводился только для первого указанного случая, т. е. для удачных внутривенных инъекций 1 мМ СуРРА (см. рис. 4 для $n = 6$). Статистическая обработка полученных экспериментальных данных показала, что в течение первых 30 мин после внутривенной инъекции 1 мМ СуРРА изменения частоты ПС не происходит; однако уже через 60 мин после инъекции активатора наблюдается понижение частоты генерации импульсов на 16 % относительно исходного значения (см. рис. 4). В дальнейшем наблюдается прогрессирующее снижение частоты активности КП. Так, через 90 мин после инъекции СуРРА наблюдается понижение частоты ПС в среднем на 32 % относитель-

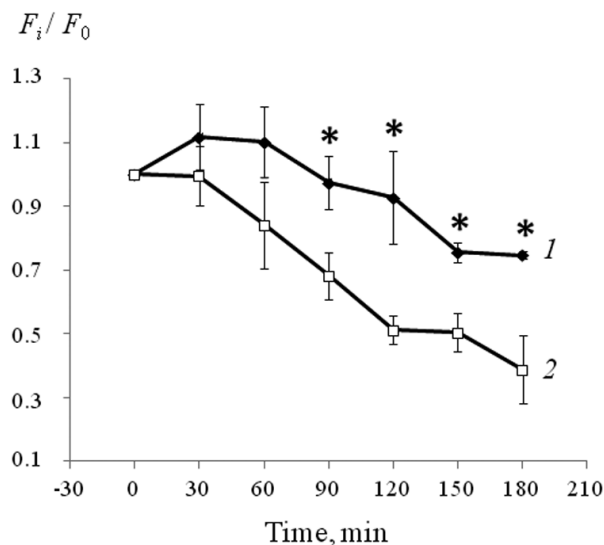


Рис. 4. Зависимость относительной частоты активности нейронов от времени после инъекции двумя препаратами: 0,9 % NaCl (1) и CuPPA (2).

Статистическое сравнение было представлено между указанными экспериментальными группами через каждые 30 мин после инъекции. Достоверность различий составила 95% (отмечена *)

но исходного значения, через 120 мин — на 49 %, через 150 мин — на 50 % и через 180 мин — на 61 % (см. рис. 4).

Статистический анализ всех данных показал (см. рис. 4), что воздействие CuPPA на активность КП достоверно отличается от влияния физиологического раствора уже через 90 мин от момента инъекции (достоверность составила 95 %) и продолжает отличаться с той же достоверностью до конца анализируемого трехчасового промежутка. При этом через три часа относительное значение частоты ПС после внутривенной инъекции физиологического раствора составляет в среднем 0,75, тогда как значение данного параметра через такой же временной интервал после инъекции CuPPA со-

ставляет 0,39 отн. ед. (см. рис. 4).

Заключение

В настоящем исследовании были представлены экспериментальные результаты по внутривенной доставке положительного модулятора SK-каналов CuPPA. Активация SK-каналов является потенциальным методом терапевтического лечения церебеллярных атаксий [6, 10–12]. Выбранный способ доставки продемонстрировал, что молекулы CuPPA способны непосредственно или опосредованно, через взаимодействие с другими метаболическими посредниками, контролировать активность КП *in vivo*. Полученные результаты крайне важны, поскольку внутривенное введение потенциального терапевтического агента является более приемлемым для клинических испытаний, чем методы, используемые ранее в аналогичных экспериментах по оценке влияния модуляторов SK каналов на активность КП *in vivo* [13].

Таким образом, в настоящей работе впервые было продемонстрировано, что в результате внутривенных инъекций активатора SK2/SK3-каналов CuPPA наблюдается статистически значимое понижение частоты генерации активности КП *in vivo*. Полученные данные означают, что внутривенное введение активатора SK-каналов способно регулировать электрофизиологическую активность КП *in vivo*, путем ограничения генерации импульсной активности КП.

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента РФ СП-3635.2016.4 (раздел работы, соответствующий разделу «Постановка задачи», гранта Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания № 17.1360.2014/К (раздел работы, соответствующий рис. 2), а также гранта Российского научного фонда № 14-25-00024 (раздел работы, соответствующий рис. 3 и рис. 4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Smeets C.J., Verbeek D.S. Climbing fibers in spinocerebellar ataxia: A mechanism for the loss of motor control // *Neurobiol. Dis.* 2016. Vol. 88. No. 1. Pp. 96–106.
[2] Ito M. Historical review of the significance of the cerebellum and the role of Purkinje cells in

motor learning // *Ann. NY Acad. Sci.* 2002. Vol. 978. No. 12. Pp. 273–288.
[3] Shakkottai V.G., Fogel B.L. Clinical neurogenetics: autosomal dominant spinocerebellar ataxia // *Neurol. Clin.* 2013. Vol. 31. No. 4. Pp. 987–1007.



- [4] Geschwind D.H., S. Perlman S., Figueroa C.P., et al. The prevalence and wide clinical spectrum of the spinocerebellar ataxia type 2 trinucleotide repeat in patients with autosomal dominant cerebellar ataxia // Am. J. Hum. Genet. 1997. Vol. 60. No. 4. Pp. 842–850.
- [5] Walter J.T., Alvina K., Womack M.D., et al. Decreases in the precision of Purkinje cell pacemaking cause cerebellar dysfunction and ataxia // Nat. Neurosci. 2006. Vol. 9. No. 3. Pp. 389–397.
- [6] Shakkottai V.G., do Carmo Costa M., Dell’Orco J.M., et al. Early changes in cerebellar physiology accompany motor dysfunction in the polyglutamine disease spinocerebellar ataxia type 3 // J. Neurosci. 2011. Vol. 31. No. 36. Pp. 13002–13014.
- [7] Kasumu A.W., Liang X., Egorova P., et al. Chronic suppression of inositol 1,4,5-triphosphate receptor-mediated calcium signaling in cerebellar purkinje cells alleviates pathological phenotype in spinocerebellar ataxia 2 mice // J. Neurosci. 2012. Vol. 32. No. 37. Pp. 12786–12796.
- [8] Womack M.D., Khodakhah K. Somatic and dendritic small-conductance calcium-activated potassium channels regulate the output of cerebellar Purkinje neurons // J. Neurosci. 2003. Vol. 23. No. 7. Pp. 2600–2607.
- [9] Cingolani L.A., Gymnopoulos M., Vaccaccio A., et al. Developmental regulation of small-conductance Ca^{2+} -activated K^{+} channels and function in rat Purkinje neurons // J. Neurosci. 2002. Vol. 22. No. 11. Pp. 4456–4467.
- [10] Alvina K., Khodakhah K. KCa channels as therapeutic targets in episodic ataxia type-2 // J. Neurosci. 2010. Vol. 30. No. 21. Pp. 7249–7257.
- [11] Alvina K., Khodakhah K. The therapeutic mode of action of 4-aminopyridine in cerebellar ataxia // J. Neurosci. 2010. Vol. 30. No. 21. Pp. 7258–7268.
- [12] Kasumu A.W., Hougaard C., Rode F., et al. Selective positive modulator of calcium-activated potassium channels exerts beneficial effects in a mouse model of spinocerebellar ataxia type 2 // Chem. Biol. 2012. Vol. 19. No. 10. Pp. 1340–1353.
- [13] Egorova P.A., Karelina T.V., Vlasova O.L., et al. The effect of SK channel modulators on the simple spike firing frequency in discharge of cerebellar Purkinje cells in laboratory mice // Journal of Evolutionary Biochemistry and Physiology. 2014. Vol. 50. No. 2. Pp. 114–120.
- [14] Hougaard C., Eriksen B.L., Jorgensen S., et al. Selective positive modulation of the SK3 and SK2 subtypes of small conductance Ca^{2+} -activated K^{+} channels // Br. J. Pharmacol. 2007. Vol. 151. No. 5. Pp. 655–665.
- [15] Raman I.M., Bean B.P. Ionic currents underlying spontaneous action potentials in isolated cerebellar Purkinje neurons // J. Neurosci. 1999. Vol. 19. No. 5. Pp. 1663–1674.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЕГОРОВА Полина Анатольевна — ассистент кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

ВЛАСОВА Ольга Леонардовна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры медицинской физики, директор НОЦ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
olvlasova@yandex.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

Egorova P.A., Vlasova O.L., Bezprozvanny I.B. THE LIMITATION OF THE PURKINJE CELL'S IMPULSE ACTIVITY IN THE LABORATORY MICE'S VERMIS BY IN VIVO ACTIVATION OF SK CHANNELS.

This study has tested the effect of intravenous injections of CyPPA [the activator of small conductance calcium-activated potassium channels of types 2 and 3 (SK2/SK3)] on the firing frequency of cerebellar Purkinje cells of laboratory male mice at the age of 6 months via the method of extracellular in vivo recordings from Purkinje cells. This method revealed that 1 mM CyPPA tail vein injections lead to progressive reduction of Purkinje cells firing frequency. Thus, simple spike's firing frequency decreases by 16% in one hour after injection, by 49% in two hours after injection, and by 61% in three hours. The obtained results confirmed the hypothesis about the important role of SK channels in the maintenance of Purkinje cells spontaneous activity in vivo. Since deterioration of biophysical and physiological functions is observed in many cerebellar ataxias, SK channels can serve as a potential target for the treatment of such disorders.

ATAXIA, CEREBELLUM, PURKINJE CELLS, SK CHANNELS, CYPPA

REFERENCES

- [1] **C.J. Smeets, D.S. Verbeek**, Climbing fibers in spinocerebellar ataxia: A mechanism for the loss of motor control, *Neurobiol Dis.* (88) (2016) 96–106.
- [2] **M. Ito**, Historical review of the significance of the cerebellum and the role of Purkinje cells in motor learning, *Ann. NY Acad. Sci.* (978) (2002) 273–288.
- [3] **V.G. Shakkottai, B.L. Fogel**, Clinical neurogenetics: autosomal dominant spinocerebellar ataxia, *Neurol. Clin.* 31(4) (2013) 987–1007.
- [4] **D.H. Geschwind, S. Perlman, C.P. Figueroa, et al.**, The prevalence and wide clinical spectrum of the spinocerebellar ataxia type 2 trinucleotide repeat in patients with autosomal dominant cerebellar ataxia, *Am. J. Hum. Genet.* 60(4) (1997) 842–850.
- [5] **J.T. Walter, K. Alvina, M.D. Womack, et al.**, Decreases in the precision of Purkinje cell pacemaking cause cerebellar dysfunction and ataxia, *Nat. Neurosci.* 9(3) (2006) 389–397.
- [6] **V.G. Shakkottai, M. do Carmo Costa, J.M. Dell'Orco, et al.**, Early changes in cerebellar physiology accompany motor dysfunction in the polyglutamine disease spinocerebellar ataxia type 3, *J. Neurosci.* 31(36) (2011) 13002–13014.
- [7] **A.W. Kasumu, X. Liang, P. Egorova, et al.**, Chronic suppression of inositol 1,4,5-triphosphate receptor-mediated calcium signaling in cerebellar purkinje cells alleviates pathological phenotype in spinocerebellar ataxia 2 mice, *J. Neurosci.* 32(37) (2012) 12786–12796.
- [8] **M.D. Womack, K. Khodakhah**, Somatic and dendritic small-conductance calcium-activated potassium channels regulate the output of cerebellar Purkinje neurons, *J. Neurosci.* 23(7) (2003) 2600–2607.
- [9] **L.A. Cingolani, M. Gymnopoulos, A. Baccaccio, et al.**, Developmental regulation of small-conductance Ca²⁺-activated K⁺ channel expression and function in rat Purkinje neurons, *J. Neurosci.* 22(11) (2002) 4456–4467.
- [10] **K. Alvina, K. Khodakhah**, KCa channels as therapeutic targets in episodic ataxia type-2, *J. Neurosci.* 30(21) (2010) 7249–7257.
- [11] **K. Alvina, K. Khodakhah**, The therapeutic mode of action of 4-aminopyridine in cerebellar ataxia, *J. Neurosci.* 30(21) (2010) 7258–7268.
- [12] **A.W. Kasumu, C. Hougaard, F. Rode, et al.**, Selective positive modulator of calcium-activated potassium channels exerts beneficial effects in a mouse model of spinocerebellar ataxia type 2, *Chem. Biol.* 19(10) (2012) 1340–1353.
- [13] **P.A. Egorova, T.V. Karelina, O.L. Vlasova, et al.**, The effect of SK channel modulators on the simple spike firing frequency in discharge of cerebellar Purkinje cells in laboratory mice, *Journal of Evolutionary Biochemistry and Physiology.* 50(2) (2014) 114–120.
- [14] **C. Hougaard, B.L. Eriksen, S. Jorgensen, et al.**, Selective positive modulation of the SK3 and SK2 subtypes of small conductance Ca²⁺-activated K⁺ channels, *Br. J. Pharmacol.* 151(5) (2007) 655–665.
- [15] **I.M. Raman, B.P. Bean**, Ionic currents underlying spontaneous action potentials in isolated cerebellar Purkinje neurons, *J. Neurosci.* 19(5) (1999) 1663–1674.

THE AUTHORS

EGOROVA Polina A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

bio_polya@mail.ru



VLASOVA Olga L.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

olvlasova@yandex.ru

BEZPROZVANNY Ilya B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

mnlabspb@gmail.com

НОВЫЙ ВЗГЛЯД НА ПАРНИКОВЫЙ ЭФФЕКТ

В статье проанализировано соответствие между реально происходящими физико-химическими процессами и понятием парникового эффекта. Рассматривается поглощение солнечного излучения газами, имеющимися в атмосфере Земли. Показано, что, несмотря на поглощение излучения с поверхности Земли в средней и длинноволновой ИК-областях, существует сильное поглощение обертонов и составных частот паров воды в полосе излучения Солнца (видимая и ближняя ИК спектральные области), т. е. полосы пропускания «стекла парника». Таким образом, атмосфера Земли в реальности не осуществляет функции парника, а значит термины «парниковый эффект» и «парниковые газы» теряют свой первоначальный смысл и остаются символическими.

СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ, ПАРНИКОВЫЙ ЭФФЕКТ, ПАРНИКОВЫЙ ГАЗ, ОБЕРТОН ПАРОВ ВОДЫ.

В последнее время довольно часто говорят о парниковом эффекте, хотя он уже давно известен (см., например, работу [1]). Кратко суть явления такова. Если исходить из формулы Планка для теплового излучения и считать температуру Солнца равной 6000 К, то спектральная полоса солнечного излучения, проходящего через атмосферу Земли и ее нагревающего, лежит в видимой и ближней инфракрасной (ИК) областях. Волновые числа этой полосы находятся в интервале примерно $3000 - 25000 \text{ см}^{-1}$ (атмосфера — это прозрачное стекло парника). Излучение же нагретой земной поверхности при комнатной температуре (290 К), лежащее в средней и длинноволновой ИК областях (примерно $200 - 2000 \text{ см}^{-1}$), атмосферой не пропускается, тепло задерживается. Это приводит к повышению температуры в «парнике» по сравнению с открытым грунтом.

Рассмотрим это явление более подробно. Как известно, основными компонентами земной атмосферы являются азот N_2 и кислород O_2 (соответственно 78 и 21 % по

объему) [2]. По классификации точечных групп симметрии эти двухатомные молекулы относятся к группе симметрии $D_{\infty h}$, т. е. имеют центр симметрии. При операции отражения в этом центре (называется инверсией) симметрия равновесной конфигурации молекулы сохраняется, и поэтому они не имеют дипольного момента. Последний не возникает при колебаниях и вращении этих молекул, а, следовательно, для них характерно отсутствие инфракрасного поглощения и испускания.

Таким образом, основными поглощающими веществами в земной атмосфере являются пары воды и углекислый газ (соответственно по степени значимости). По данным работы [3], изменение относительной влажности в атмосфере Земли лежит в пределах 6 – 85 %. Например, для Санкт-Петербурга среднегодовая относительная влажность достигает 80 % [4] при 67 % летом. Что касается углекислого газа, то его процентное содержание (по объему) составляет лишь 0,03 % [2]. В течение года его изменение незначительно. Например,

Таблица 1

**Тип симметрии и активные колебания молекул
в ИК поглощении и испускании**

Молекула	Тип симметрии	Колебание	
		Основной тон	Частота, см ⁻¹
H ₂ O	A_1	ν_1, ν_2	3657, 1595
	B_2	ν_3	3756
CO ₂	A_u	ν_3	2350
	E_u	ν_2	667

за весь 2013 год это изменение составило лишь 0,0004 % (данные Национального управления океанических и атмосферных исследований США). Однако, несмотря на такое низкое содержание в атмосфере, необходимо учитывать ее значительную оптическую толщину (слой тропосферы составляет около 10 км), и, следовательно, углекислый газ нельзя исключать из рассмотрения.

Молекулы воды и углекислого газа относятся к точечным группам симметрии C_{2v} и $D_{\infty h}$ соответственно. В табл. 1 этим молекулам приведены в соответствие частоты (в волновых числах) активных колебаний и их тип симметрии в ИК поглощении и испускании. В отличие от молекулы воды молекула углекислого газа имеет центр симметрии. При симметричных колебаниях (ν_1) относительно него, дипольный момент не меняется, и поэтому ИК спектры поглощения и испускания отсутствуют. При асимметричных (ν_3) и дважды вырожденных деформационных (ν_2) колебаниях, имеющих соответственно симметрию A_u и E_u , дипольный момент возникает и обуславливает эти спектры. Напомним, что буквы A и E означают соответственно невырожденное и дважды вырожденное колебания, а буква u — изменение знака у смещения атомов из положения равновесия (в рассматриваемом колебании) при инверсии.

Для молекулы воды буквы A и B , а также цифры 1 и 2 означают соответственно симметрию (сохранение знака: A и 1) и асимметрию (изменение знака: B и 2) у смещения атомов из положения равно-

весия (в рассматриваемом колебании) относительно оси симметрии 2-го порядка (т. е. при повороте на 180°) и при отражении в плоскости, перпендикулярной плоскости молекулы и проходящей через эту ось симметрии. Для молекулы воды ИК спектр поглощения хорошо изучен [5]. Наряду с основными частотами (тонами) ν_1 , ν_2 и ν_3 (см. табл. 1) наблюдается ряд обертонов и составных частот не только в ИК, но и в видимой области (табл. 2). Из табл. 2 видно, например, что переходу от полосы первого обертона симметричного деформационного колебания (0, 2, 0) к полосе составной частоты (2, 0, 3) соответствует изменение частоты от 3152 до 17495 см⁻¹. При этом указанным полосам соответствуют сотни колебательно-вращательных линий. Например, в результате перекрывания полос валентных колебаний 3657 и 3756 см⁻¹ образуется одна полоса поглощения 3500 — 4000 см⁻¹. Вследствие наличия этих колебаний, пары воды поглощают значительную долю ИК излучения Солнца (в том числе) [6]. Таким образом, рассматриваемая область, которая, казалось бы, должна быть прозрачна для солнечного излучения, т. е. служить «стеклом парника», сильно перекрывается с непрозрачной областью. Поэтому атмосфера Земли таким «стеклом» не является, а термины «парниковый эффект» и «парниковые газы» теряют свой первоначальный смысл и могут лишь традиционно обозначать проблему.

Если рассмотреть поглощение солнечного излучения без «стекла парника» в диапазоне частот излучения поверхности

Таблица 2

**Частоты колебаний молекулы воды при поглощении
(и испускании) излучения в ИК и видимой областях**

ν_1, ν_2, ν_3	Частота, см^{-1}	ν_1, ν_2, ν_3	Частота, см^{-1}
0, 0, 0	0	1, 2, 1	10329
0, 1, 0	1595	0, 2, 2	10523
0, 2, 0	3152	3, 0, 0	10600
1, 0, 0	3657	2, 0, 1	10613
0, 0, 1	3756	1, 0, 2	10868
0, 3, 0	4667	0, 0, 3	11032
1, 1, 0	5235	0, 5, 1	11248
0, 1, 1	5331	1, 3, 1	11813
0, 4, 0	6136	0, 3, 2	12012
1, 2, 0	6775	2, 1, 1	12152
0, 2, 1	6872	1, 1, 2	12408
2, 0, 0	7201	0, 1, 3	12565
1, 0, 1	7250	2, 2, 1	13653
0, 0, 2	7445	3, 0, 1	13831
1, 3, 0	8274	1, 0, 3	14319
0, 3, 1	8374	3, 1, 1	15348
2, 1, 0	8762	1, 1, 3	15832
1, 1, 1	8808	3, 2, 1	15822
0, 1, 2	9000	4, 0, 1	16899
0, 4, 1	9834	2, 0, 3	17495

Земли, а также в частотной полосе излучения Солнца, к ней примыкающей, вплоть до 3000 см^{-1} (до нашего рассмотрения проблемы это была граница, выше которой «стекло парника» пропускало излучение), то основные субстраты здесь те же: молекулы воды и углекислого газа. Именно из-за них атмосфера непрозрачна до 900 см^{-1} и в диапазоне от 1200 до 2400 см^{-1} [1]. Из других газов наибольшее влияние на прозрачность атмосферы оказывает колебательно-вращательная полоса озона O_3 на частоте 1042 см^{-1} . Меньше влияют на прозрачность молекулы метана CH_4 (1300 см^{-1}), оксонитрида N_2O ($589, 1285$ и 2224 см^{-1}) и монооксида углерода CO (2143 см^{-1}). Еще меньшее влияние (ввиду низкого содержания в атмосфере) оказывают двуокись азота, азотная кислота, аммиак, сернистый газ и фреоны.

При анализе факторов, влияющих на тепловое поглощение атмосферы, можно также учесть некоторое различие в спек-

трах у различных изотопных конфигураций углекислого газа по сравнению с основной модификацией, а также индуцированные столкновениями [7] спектры поглощения азота (около 2350 см^{-1}) и кислорода (вблизи 1600 см^{-1}). Кроме того, не стоит игнорировать естественное и доплеровское уширения спектральных линий. Однако эти эффекты на общие выводы не влияют.

Таким образом, из проведенного нами анализа факторов, влияющих на поглощение и пропускание атмосферой солнечного и земного излучений, а также приведенных доводов можно сделать следующие заключения.

1. Атмосфера Земли в видимой и ближней ИК спектральных областях, ввиду присутствия обертонов и составных частот молекул воды, которые предоставляют ей лишь небольшие окна прозрачности для излучения Солнца, не соответствует общепринятому понятию «стекло парника», и



поэтому она не выполняет такой функции.

2. Ввиду п. 1 термины «парниковый эффект» и «парниковые газы» теряют свой первоначальный смысл.

Итак, вместо «парникового эффекта» на Земле, на наш взгляд, наряду с другими идут процессы поглощения солнечного

излучения в основном водяными парами. Одновременно задерживается встречное тепловое излучение, идущее от поверхности в межпланетное пространство. И этот процесс является одним из естественных природных путей проникновения на Землю падающего излучения Солнца и его переизлучения Землей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Тонков М.В.** Спектроскопия парникового эффекта // Соросовский образовательный журнал. 2001. Т. 7. № 10. С. 52–58.

[2] **Рабинович В.Я., Хазов З.Я.** Краткий химический справочник. Л.: Химия, 1978. 356 с.

[3] Геоглобус.ру. Геолого-географическое и техно-экологическое обозрение. Вода в атмосфере [www.geoglobus.ru/earth/geo2]. Дата обращения – 31.03. 2015.

[4] Климат Ленинграда. Л.: Гидрометеоз-

дат, 1982. 254 с.

[5] **Ельяшевич М.А.** Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: Эдиториал УРСС, 2001. 896 с.

[6] **Ельяшевич М.А.** Вращательно-колебательная энергия молекул // Труды ГОИ. 1938. Т. 12. Вып. 106. С. 3–134.

[7] **Frommhold L.** Collision-induced absorption in gases. Cambridge: University Press, 1993. 410 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ОКТЯБРЬСКИЙ Валерий Павлович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vokt@yandex.ru

Oktyabrskiy V.P. A NEW OPINION OF THE GREENHOUSE EFFECT.

The article analyzes the correspondence between actually occurring physical and chemical processes and the concept of the greenhouse effect. The absorption of the solar radiation by the gases existing in the Earth atmosphere has been examined. It was demonstrated that, despite the absorption of radiation from the Earth's surface in the middle and long-wave infrared (IR) regions, there is a strong absorption of the overtones and combined frequencies of water vapor in the solar radiation (visible and near IR regions), i.e. the transmittance bandwidth of 'the glass greenhouse'. Thus, the Earth atmosphere does not really function as a greenhouse, and the terms 'greenhouse effect' and 'greenhouse gases' lost their original meaning and have remained symbolical.

ABSORPTION SPECTRUM, GREENHOUSE EFFECT, GREENHOUSE GAS, WATER VAPOR OVERTONE.

REFERENCES

[1] **M.V. Tonkov**, Spektroskopiya parnikovogo effekta [Greenhouse effect spectroscopy], Soros Educational Journal. 7 (10) (2001) 52–58.

[2] **V.Ya. Rabinovich, Z.Ya. Khazov**, Kratkiy khimicheskiy spravochnik [Chemical pocket book], Khimiya, 1978.

[3] Geologo-geograficheskoye i tekhnologicheskoye obozreniye, Water in the atmosphere [www.geoglobus.ru/earth/geo2], URL 31.03.2015.

[4] Kлимат Ленинграда [Leningrad's climate], Leningrad, Gidrometeoizdat, 1982.

[5] **M.A. Elyashevich**, Atomnaya i molekulyarnaya spektroskopiya [Atomic and molecular spectroscopy], Moscow, Editorial URSS, 2001.

[6] **M.A. Elyashevich**, Rotational-vibrational energy of the molecules, Trudy GOI. 12 (106) (1938) 3–134.

[7] **L. Frommhold**, Collision-induced absorption in gases, Cambridge, University Press, 1993.

THE AUTHORS

OKTYABRSKIY Valery P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

vokt@yandex.ru

ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ДИЗЬЮНКТИВНЫХ СЕЧЕНИЙ

Статья посвящена решению дизъюнктивной задачи. В работе представлены различные способы, с помощью которых можно получить дизъюнктивные сечения из логических ограничений на линейные неравенства. Изложен основной принцип дизъюнктивных сечений, а также принцип, позволяющий усиливать такие сечения. Благодаря этим принципам, упрощается решение задач оптимизации с большим числом линейных ограничений. Формулируются и доказываются две теоремы. Четыре примера иллюстрируют различные теоретические положения.

Предложенные принципы и процедуры на их основе являются теоретической базой для построения алгоритмов, предназначенных для программной реализации при решении практических задач.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ЛОГИКА, ДИЗЬЮНКТИВНАЯ ЗАДАЧА, ВЫПУКЛАЯ ОБОЛОЧКА, ЗАМЫКАНИЕ МНОЖЕСТВА, УСИЛЕНИЕ СЕЧЕНИЯ.

Введение

Дизъюнктивные методы позволяют получать дизъюнктивные сечения (DC — Disjunctive Cut) из логических ограничений на линейные неравенства. В настоящем исследовании рассмотрен принцип DC, который позволяет обобщить имеющиеся способы получения сечений. Однако указанный принцип связан с другими принципами и подходами, относящимися к нахождению сечений, поэтому его часто называют основным. Для усиления DC используется так называемый метапринцип MCS (Metaprinciple Cut Strengthening).

Представленные в данной статье DC расширяют возможности их получения при построении новых алгоритмов. Программы, реализующие эти алгоритмы, предназначены для численного решения теоретических и практических задач оптимизации с логическими ограничениями на линейные неравенства. Полученные результаты уже используются при анализе экономических

моделей, в описании которых используются логические ограничения. Возможны и другие применения этих результатов, например при численном решении задач оптимизации. Теоретические положения различной степени сложности проиллюстрированы в настоящей статье четырьмя примерами.

Основные определения

Рассмотрим дизъюнктивную задачу минимизации, которая формулируется как

$$\min \left\{ cx \mid \bigvee_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j \geq b_i, x \geq 0 \right) = \text{true} \right\},$$

где $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$.

В дальнейшем будем ее называть DP (Disjunctive Program). Выражение в круглых скобках формулы есть логическая переменная, принимающая значение true — истина (либо false — ложь), если точка x удовлетворяет (не удовлетворяет) системе из $n+1$ неравенств.

Объектом исследования является допу-

стимое множество рассматриваемой дизъюнктивной задачи минимизации

$$S_4 = \left\{ x \mid \bigvee_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j \geq b_i, x \geq 0 \right) = \text{true} \right\}.$$

Множество S_4 называется дизъюнктивным, и его можно представить двумя способами. В первом случае его представление есть дизъюнктивная нормальная форма логического выражения, содержащего линейные неравенства (любое такое выражение может быть приведено к дизъюнктивной форме). Второй способ представления дизъюнктивного множества имеет вид

$$S_4 = \bigcup_{i=1}^m \left\{ x \mid \sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j \geq b_i, x \geq 0 \right\}.$$

На самом деле эти два представления эквивалентны. Следует отметить, что множество S_4 может быть невыпуклым.

Дизъюнктивные сечения

Для формулировки изложенных далее принципов целесообразно рассмотреть конкретный пример.

Пример 1. Пусть для неотрицательных переменных x_1, x_2, x_3 предложено два неравенства:

$$2x_1 + (-3)x_2 + (-7)x_3 \geq 15 \quad (1)$$

и

$$1x_1 + 2x_2 + (-5)x_3 \geq 28. \quad (2)$$

Известно, что одно из них справедливо, однако неизвестно, какое именно. Возникает вопрос, существует ли хотя бы одно неравенство, которое с необходимостью справедливо.

Утверждаем, что такое неравенство существует и в данном случае им будет третье неравенство, например, вида

$$2x_1 + 2x_2 + (-5)x_3 \geq 15, \quad (3)$$

которое представляет собой ослабление обоих неравенств (1) и (2), так как

$$2 = \max\{2, 1\}, 2 = \max\{-3, 2\}, \\ -5 = \max\{-7, -5\} \text{ и } 15 = \min\{15, 28\}.$$

Таким образом, неравенство (3) справедливо в том случае, когда хотя бы одно

из неравенств (1) и (2) является истинным.

Метапринцип DC, который обобщает идею получения последнего неравенства (3) из двух неравенств (1) и (2), формулируется следующим образом.

Метапринцип DC. Предположим, что имеет место по крайней мере одно из неравенств

$$\sum_{j=1}^r b_{i,j} x_j \geq b_{i,0}, i = 1, 2, \dots, p, p \geq 2 \quad (4)$$

и что переменные $x_1, x_2, \dots, x_r$ — неотрицательные.

Тогда неравенство

$$\sum_{j=1}^r \left(\max_{i=1}^p b_{i,j} \right) x_j \geq \min_{i=1}^p b_{i,0} \quad (5)$$

и все его ослабления являются справедливыми сечениями для множества

$$S_4 = \left\{ x \mid \bigvee_{i=1}^p \left(\sum_{j=1}^r b_{i,j} x_j \geq b_{i,0}, x \geq 0 \right) = \text{true} \right\}.$$

Поскольку принцип DC, который является ключевым для нашего исследования, следует из принципа LP и метапринципа DC [3, 5], сформулируем в первую очередь принцип LP.

Принцип LP. Если λ — произвольный неотрицательный m -вектор, то неравенство

$$(\lambda A)x \geq \lambda b$$

и все его ослабления являются справедливыми неравенствами для непустого множества

$$S_1 = \{x \mid Ax \geq b, x \geq 0, x \in \mathbf{R}^r\}.$$

Итак, сформулируем принцип дизъюнктивных сечений (DC).

Принцип DC [2, 3, 5]. Предположим, что имеет место по крайней мере одна из систем линейных неравенств

$$(A^h x \geq b^h, x \geq 0), h \in H, H \neq \emptyset \quad (6)$$

(A^h — $m_h \times r$ -матрица, b^h — m_h -вектор-столбец).

Тогда для любых m_h -вектор-строк λ^h неотрицательных множителей неравенство

$$\left(\sup_{h \in H} \lambda^h A^h \right) x \geq \inf_{h \in H} \lambda^h b^h \quad (7)$$

и все его ослабления являются справедливыми



сечениями для дизъюнктивного множества

$$S_4 = \{x \mid \bigvee_{h \in H} (A^h x \geq b^h, x \geq 0) = \text{true}\}.$$

Здесь и далее нами используется понятие супремума множества векторов. В неравенстве (7) через $\sup_{h \in H} \lambda^h A^h$ обозначен вектор v , j -я компонента которого есть

$$v_j = \sup_{h \in H} v_j^h \quad (j = 1, 2, \dots, r), \quad v^h = \lambda^h A^h,$$

где λ^h — вектор-строка из m_h компонент, h — индекс.

В неравенстве (7) предполагается существование конечного инфимума и конечных супремумов. Множество H может быть конечным или бесконечным.

Доказательство. Ввиду того, что по крайней мере одна система (6) имеет место для некоторого x , по крайней мере одно неравенство

$$(\lambda^h A^h)x \geq \lambda^h b^h$$

имеет место для этого x . Однако h может зависеть от x . Взятие инфимума и супремумов в неравенстве (7) устраняет эту зависимость и оставляет неравенство все еще справедливым, поскольку $x \geq 0$.

Отметим, что принцип LP может быть переформулирован как метапринцип, полученный из логического условия, согласно которому справедливы все неравенства $Ax \geq b$. Кроме того, частными случаями принципа DC являются принцип LP и метапринцип DC:

$$(|H| = 1 \text{ и } m_h = 1 \quad \forall h \in H, |H| = p, p \geq 2).$$

Обычно сечение (7) обладает свойствами, характерными для всех систем в случае, если они известны лишь для одной из них среди системы линейных неравенств (6), которая справедлива (см. теоремы 1 и 2, представленные ниже).

Но иногда возможны исключения, когда сечение (7) оказывается неэффективным в представлении такой информации (см. следующий пример).

Пример 2. Предположим, что x_1 — неотрицательная переменная и что имеет место неравенство

$$(-1) \cdot x_1 \geq (-1) \quad (8)$$

или

$$0 \cdot x_1 \geq 1.$$

Система (6) при значениях $h = 1$ и 2 состоит из одного неравенства, причем в первом случае ($h = 1$) она совместна, а во втором — нет. Тогда, используя принцип DC, получаем следующие неравенства:

$$\max\{-1 \cdot \lambda_1, 0 \cdot \lambda_2\}x \geq \min\{-1 \cdot \lambda_1, 1 \cdot \lambda_2\} \quad (9)$$

и

$$0 \cdot x_1 \geq -\lambda_1. \quad (9a)$$

Неравенство (9a) есть ослабление тривиального сечения $0 \cdot x_1 \geq 0$, которое выполняется для всех x_1 . Итак, из анализа неравенств (8) следует (6), что должны выполняться неравенства

$$0 \leq x_1 \leq 1$$

(ввиду того, что $0 \cdot x_1 \geq 1$ не выполняется, должно иметь место неравенство $(-1) \cdot x_1 \geq (-1)$).

Важна геометрическая интерпретация дизъюнктивных сечений:

Справедливые сечения для дизъюнктивного множества S_4 в точности являются таковыми для замкнутой выпуклой оболочки $\text{clconv} S_4$ множества S_4 .

Обратные утверждения к принципу DC

В нижеследующих теоремах формулируются условия, выполнение которых гарантирует, что принцип DC дает все справедливые сечения. Представленные теоремы 1 и 2 являются обратными утверждениями к принципу DC. Еще одно обратное утверждение представлено в работах [2, 5].

Теорема 1. Если каждая система (6), где $h \in H$, является совместной, то для любого справедливого неравенства $\pi x \geq \pi_0$, $x \in S_4$, существуют неотрицательные векторы $\lambda^h, h \in H$, такие, что

$$(\sup_{h \in H} \lambda^h A^h)_j \leq \pi_j, \quad j = 1, 2, \dots, r, \quad \inf_{h \in H} \lambda^h b^h \geq \pi_0.$$

Доказательство. Согласно выдвинутому нами предположению, все системы (6) совместны. Поскольку справедливое неравенство $\pi x \geq \pi_0$ следует из любой из них, то согласно теореме, обратной утверждению к принципу LP, для каждого $h \in H$ существует вектор $\lambda^h \geq 0$, удовлетворяющий условию

$$(\lambda^h A^h)_j, j = 1, 2, \dots, r, \lambda^h b^h \geq \pi_0,$$

где $(\lambda^h A^h)_j$ — j -я компонента вектора $\lambda^h A^h$.

Беря супремумы и инфимум, получаем требуемое.

Теорема 1 доказана.

Прежде чем будет сформулирована и доказана следующая теорема, введем новые понятия. Для каждого $h, h \in H$, рассмотрим конус

$$C_h = \{x \mid A^h x \geq 0, x \geq 0\}. \quad (10)$$

Далее в формуле (11) будет записана сумма множеств (конусов), определяемая как

$$A + B = \{a + b \mid a \in A, b \in B\}.$$

В принципе ДС не все системы (6) обязаны быть совместными, чтобы давать все справедливые сечения.

Теорема 2. *Принцип ДС дает все справедливые сечения для логического условия, по которому по крайней мере одна из систем (6) имеет место, если для каждого $h \in H$ такового, что указанная система несовместна, выполняется*

$$C_h \subseteq \sum_p \{C_p \mid (A^p x \geq b^p, x \geq 0) \text{ совместна}, p \in H\} \quad (11)$$

(сумма интерпретируется как $\{0\}$, если все системы (6), $h \in H$, являются несовместными).

Доказательство. Идея доказательства теоремы 2 заключается в нахождении таких $\lambda^h (\lambda^h \geq 0)$ для несовместных систем (6), что выполняется неравенство

$$\lambda^h A^h \leq \pi \quad (\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_r)) \text{ и } \lambda^h b^h \geq \pi_0$$

для любого сечения $\pi x \geq \pi_0$, справедливого для всех совместных систем $(A^p x \geq b^p, x \geq 0)$. Тогда взятие супремумов и инфимума, как в доказательстве теоремы 1, завершит рассуждения.

Для начала подробного доказательства теоремы 2 заметим, что если система

$$(A^p x \geq b^p, x \geq 0)$$

совместна и неравенство $\pi x \geq \pi_0$ является справедливым, то имеем неравенство $\pi x \geq 0$ для $x \in C_p$. Это следует из систе-

мы неравенств $\lambda^p A^p \leq \pi$ для некоторого $\lambda^p, \lambda^p \geq 0$ и из того, что $x \geq 0$.

Но если система (6) несовместна и $x \in C_h$, то, согласно системе (11), когда

$$x = \sum_p \{x^p \mid (A^p x \geq b^p, x \geq 0)$$

$$\text{совместна } x^p \in C_p, p \in H\}$$

для определенных x^p из C_p , получаем, что

$$\pi x = \sum_p \pi x^p \geq 0. \quad (11a)$$

Система (11a) также выполняется, если все системы (6), $h \in H$, несовместны. Поэтому из неравенств

$$A^h x \geq 0, x \geq 0$$

следует неравенство $\pi x \geq 0$, и, в соответствии с принципом ЛР, получаем множители θ^h , для которых

$$\theta^h \geq 0, \theta^h A^h \leq \pi.$$

Наконец, согласно лемме Минковского — Фаркаша, из несовместности системы (6) следует, что существует вектор p^h , для которого (см. работу [5], стр. 39) справедливы неравенства

$$p^h \geq 0, p^h A^h \leq 0 \text{ и } p^h b^h > 0.$$

Но тогда для достаточно большого значения переменной $r, r \geq 0$, полагая

$$\lambda^h = \theta^h + r p^h,$$

имеем

$$\lambda^h A^h \leq \pi + 0 = \pi, \lambda^h b^h \geq \pi_0,$$

что и требовалось доказать.

Теорема 2 доказана.

В качестве следствия теоремы 2 отметим, что конус C_h , представленный формулой (10), имеет интересную интерпретацию. Этот конус часто называют рецессивным или конусом направлений в бесконечность [1]. Для определенности предположим, что d^h выбирается так, что система

$$A^h x \geq d^h, x \geq 0 \quad (12)$$

совместна.

Пусть x^0 удовлетворяет системе (12), и пусть $\bar{x} \in C_h$. Тогда для любого $\lambda, \lambda \geq 0$ выполняется соотношение



$$A^h(x^0 + \lambda \bar{x}) = A^h x^0 + \lambda A^h \bar{x} \geq d^h + 0 = d^h, \quad (13)$$

и, следовательно, $x^0 + \lambda \bar{x}$ также удовлетворяет системе (12).

Усиление дизъюнктивного сечения

В данном разделе представлен метапринцип MCS, который по своему действию значительно отличается от метапринципа DC. Метапринцип MCS предназначен для усиления сечений (напомним, что MCS — это Metaprinciple Cut Strengthening).

Метапринцип MCS. Пусть T — непустое множество, а M — моноид, т. е. $T \subseteq \mathbf{R}^m$, $M \subseteq \mathbf{R}^m$ (m — число строк матрицы A). Предположим, что из ограничений

$$Ax \in T + M, x \in Z_+^r \quad (14)$$

всегда следует неравенство

$$\sum_{j=1}^r F_j(a^j)x_j \geq \pi_0 \quad (15)$$

для некоторых матриц A , где $F_1(v), F_2(v), \dots, F_r(v)$ — заданные (не обязательно субаддитивные) функции, a^j — j -й столбец матрицы A .

Тогда неравенство

$$\sum_{j=1}^r (\inf_{m \in M} F_j(a^j + m))x_j \geq \pi_0 \quad (16)$$

также является справедливым для ограничений (14).

Доказательство. Пусть произвольно выбраны элементы

$$m^j, m^j \in M, j = 1, 2, \dots, r.$$

Поскольку M — моноид, имеем

$$\sum_{j=1}^r m^j x_j \in M$$

для любого вектора $x \in Z_+^r$. Следовательно, из ограничения (14) следует, что

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^r (a^j + m^j)x_j = \\ & = \sum_{j=1}^r a^j x_j + \sum_{j=1}^r m^j x_j \in T + M + M = T + M \end{aligned} \quad (17)$$

(последнее равенство имеет место, так как M — моноид). Это, в свою очередь, влечет за собой следующее неравенство (оно вытекает из принятого предположения):

$$\sum_{j=1}^r F_j(a^j + m^j)x_j \geq \pi_0. \quad (18)$$

Формула (14) влечет за собой неравенство (18) для любого произвольного выбора m^j . Отсюда и следует неравенство (16).

Метапринцип MCS может быть использован вместе с принципом DC для усиления сечений, полученных по принципу DC, когда $x \in Z_+^r$.

Проиллюстрируем процедуру усиления сечения на конкретном примере.

Пример 3. Предположим, что неотрицательные целочисленные переменные x, t_1, t_2, t_3 удовлетворяют уравнению

$$x = 1, 7 + 2, 3(-t_1) + (-0, 3)(-t_2) + 2(-t_3).$$

Релаксируем (ослабляем) это ограничение, записывая его как

$$2, 3(-t_1) - 0, 3(-t_2) + 2(-t_3) \in T + M,$$

а в общем случае как

$$a_1(-t_1) + a_2(-t_2) + a_3(-t_3) \in T + M, \quad (19)$$

где $T = \{-1, 7\}$, M — моноид всех целых чисел по сложению.

Поскольку для каждого элемента из множества $T + M$ выполняются ограничения $\geq 0, 3$ или $\leq -0, 7$, нетрудно видеть, что имеют место неравенства

$$(-a_1)t_1 + (-a_2)t_2 + (-a_3)t_3 \geq 0, 3$$

или

$$a_1 t_1 + a_2 t_2 + a_3 t_3 \geq 0, 7.$$

Используя множители $\lambda^1 = 1 / 0, 3$ и $\lambda^2 = 1 / 0, 7$, в соответствии с принципом DC, немедленно получаем справедливое неравенство

$$\sum_{j=1}^3 (\max\{-a_j / 0, 3, a_j / 0, 7\})t_j \geq 1, \quad (20)$$

которое представляет собой одно из сечений, предложенных Гомори для задач с непрерывными неотрицательными переменными t_j [5]. В контексте формул с конкретными числовыми данными неравенство (20) преобразуется в неравенство вида

$$3, 29t_1 + t_2 + 2, 86t_3 \geq 1. \quad (21)$$

Если умножим обе части неравенства (21) на 0,7, то увидим, что оно есть осла-

бление дробного сечения Гомори:

$$0,3t_1 + 0,7t_2 + 0t_3 \geq 0,7.$$

Однако неравенство (21) справедливо для непрерывных переменных t_j , в то время как в дробном сечении Гомори требуется целочисленность этих переменных.

Для усиления неравенств (20) и (21), когда все переменные t_j неотрицательные и целочисленные, обратимся к метапринципу MCS, чтобы получить сечение

$$\sum_{j=1}^3 (\inf_{m \in M} \max\{-(a_j + m) / 0,3, (a_j + m) / 0,7\}) t_j \geq 1. \quad (20a)$$

Сначала упрощаем сечение (20a) следующим образом. Записываем коэффициент a_j в виде суммы его целой и дробной частей

$$a_j = \lfloor a_j \rfloor + f_j, \quad 0 \leq f_j < 1. \quad (22)$$

Для $m \geq -\lfloor a_j \rfloor$ имеем

$$\begin{aligned} \max\{-(a_j + m) / 0,3, (a_j + m) / 0,7\} = \\ = (a_j + m) / 0,7 \geq f_j / 0,7, \end{aligned} \quad (23)$$

а для $m \leq -\lfloor a_j \rfloor - 1$ —

$$\begin{aligned} \max\{-(a_j + m) / 0,3, (a_j + m) / 0,7\} = \\ = -(a_j + m) / 0,3 \geq (1 - f_j) / 0,3. \end{aligned} \quad (24)$$

Поэтому (20a) эквивалентно неравенству

$$\sum_{j=1}^3 (\min\{f_j / 0,7, (1 - f_j) / 0,3\}) t_j \geq 1, \quad (25)$$

которое для конкретных числовых данных становится неравенством вида

$$0,43t_1 + t_2 + 0t_3 \geq 1. \quad (26)$$

Умножая неравенство (26) на 0,7, видим, что оно согласуется с дробным сечением Гомори с точностью до двух десятичных разрядов (сечения фактически тождественны).

Из этого примера ясно, что «простой способ» использования принципа DC и метапринципа MCS есть вопрос искусства, а не прямая процедура. Было бы очень полезно в дополнение к метапринципу MCS иметь другие процедуры усиления сечений, чтобы использовать их в связи с принци-

пом DC. Фактически о процедурах усиления сечений известно очень мало [4].

Следующий пример представлен более подробно и демонстрирует комбинирование принципа DC и метапринципа MCS.

Пример 4 [3]. Предположим, что по крайней мере одна система (6) совместна и что у всех систем имеются нижние границы, т. е. все системы

$$A^h x \geq d^h, \quad x \geq 0 \quad (27)$$

совместны ($d^h, d^h \leq b^h$ — вектор, выбранный надлежащим образом). Наконец, предположим, что x — это целочисленное решение системы.

Положим

$$\begin{aligned} T = \{(v^1, v^2, \dots, v^t) \mid v^h \geq d^h \quad \forall h \in H, \\ v^h \geq b^h \quad \exists h \in H\}, \end{aligned} \quad (28a)$$

$$M = \{(n_1(b^1 - d^1), n_2(b^2 - d^2), \dots, n_t(b^t - d^t))\},$$

$$\sum_{h=1}^t n_h \geq 0, n_h \in \mathbb{Z}^1 \quad \forall h \in H, \quad (28b)$$

где $t = |H|$.

Положим также

$$A = (A^1, A^2, \dots, A^t)^T \quad (29)$$

(столбец записан в строку).

Тогда имеющаяся информация может быть представлена как

$$Ax \in T. \quad (30)$$

Ослабляем сечение (30) как

$$Ax \in T + M. \quad (31)$$

Теперь заметим, что из формулы (31) следует совместность по крайней мере одной системы (6). Если $n_h = 0 \quad \forall h \in H$ в (28b), то $Ax \in T$ и по крайней мере одна система (6) имеет место. Если же

$$n_h \neq 0 \quad \exists n_h \in H,$$

то $n_h^* \geq 1$ для по крайней мере одного h^* , и тогда имеет место система

$$(A^{h^*} x \geq b^{h^*}, x \geq 0).$$

Поэтому сечение (31) гарантирует справедливость сечений (7).

Пусть $a^{j,h}$ обозначает j -й столбец матрицы A^h ($j = 1, 2, \dots, r; h = 1, 2, \dots, t$).

Тогда записываем сечение (7) в виде

$$\sum_{j=1}^r (\max_{h \in H} \lambda^h a^{j,h}) x_j \geq \min_{h \in H} \lambda^h b^h. \quad (32)$$

Таким образом, усиленное сечение (16) для сечения (32), рассматриваемого как неравенство (15), есть

$$\sum_{j=1}^r \left(\min \left\{ \max_{h \in H} \lambda^h (a^{j,h} + n_h (b^h - d^h)) \mid \sum_{h=1}^t n_h \geq 0, \right. \right. \\ \left. \left. n_h \in \mathbb{Z}^1 \forall h \in H \right\} \right) x_j \geq \min_{h \in H} \lambda^h b^h. \quad (33)$$

Итак, приведенные примеры показывают, что комбинирование принципа DC и метапринципа MCS — задача нетривиальная и требующая определенного навыка.

Пример алгоритма. В качестве реализации изложенных принципов приведем возможный алгоритм решения задач с логическими ограничениями на линейные неравенства.

Шаг 1. Применяя принцип DC или метапринцип MCS, переходим к упрощенной задаче (или набору упрощенных задач).

Шаг 2. Решаем упрощенную задачу (набор задач).

Шаг 3. Выясняем, что найденное решение дает для исходной задачи.

Шаг 4. Если удовлетворительное решение исходной задачи найдено, процесс вычислений останавливаем, если нет — возвращаемся к шагу 1.

Заключение

В работе представлены различные способы, с помощью которых можно получить дизъюнктивные сечения из логических ограничений на линейные неравенства. Изложен основной принцип дизъюнктивных сечений, а также принцип, позволяющий усилить такие сечения. Благодаря этим принципам, упрощается решение задач оптимизации с большим числом линейных ограничений.

Предложенные принципы и процедуры на их основе являются теоретической базой для построения алгоритмов, предназначенных для программной реализации при решении практических задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Rockafellar R.T.** Convex Analysis. USA, New Jersey: Princeton University Press, 1970.
- [2] **Jeroslow R.G.** Cutting-plane theory: Disjunctive methods // Annals of Discrete Mathematics. 1977. Vol. 1. Pp. 293–330.
- [3] **Jeroslow R.G.** An introduction to the theory of cutting-planes // Annals of Discrete Mathematics. 1979. Vol. 5. Pp. 71–95.
- [4] **Balas E.** Disjunctive programming // Annals of Discrete Mathematics. 1979. Vol. 5. Pp. 3–51.
- [5] **Хохлюк В.И.** Методы дискретной оптимизации. Учеб. пос. Новосибирск: Изд-во Новосибирского гос. ун-та, 2013. Ч. 1.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ХОХЛЮК Виталий Иванович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН.
630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4
vit@academ.org

Khokhlyuk V.I. PRINCIPLES FOR CONSTRUCTING THE DISJUNCTIVE CUTS.

This article focuses on solving the disjunctive problem. Various methods of constructing the disjunctive cuts (DC) from the logical limitations on the linear inequalities have been presented. A general principle of DC and a principle making possible to strengthen these cuts were stated. By virtue of the stated principles, solving the problems of optimization with a great number of limitations can be simplified. Two theorems were formulated and proved. Four examples illustrated various theoretical statements.

The suggested principles and procedures on their basis provide the theoretical background to the elaboration of algorithms intended for the software implementation in solving the practical problems.

MATHEMATICAL LOGIC, DISJUNCTIVE PROBLEM, CONVEX HULL, CLOSURE OF SET, STRENGTHENING OF CUT.

REFERENCES

- [1] **R.T. Rockafellar**, Convex Analysis, Princeton University Press, Princeton, N.J., 1970.
- [2] **R.G. Jeroslow**, Cutting-plane theory: Disjunctive methods, Annals of Discrete Mathematics. 1 (1977) 293–330.
- [3] **R.G. Jeroslow**, An introduction to the theory of cutting-planes, Annals of Discrete Mathematics. 5 (1979) 71–95.
- [4] **E. Balas**, Disjunctive programming, Annals of Discrete Mathematics. 5 (1979) 3–51.
- [5] **V.I. Khokhlyuk**, Metody diskretnoy optimizatsii [Methods of discrete optimization], ucheb. posobiye. Novosibirsk, Izd-vo Novosibirskogo Gosudarstvennogo Universiteta, 2013. Ch. 1.

THE AUTHOR

KHOKHLYUK Vitaly I.

Sobolev Institute of Mathematics

4 Acad. Koptug Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

vit@academ.org

А.А. Пастухов, А.А. Прокофьев

Национальный исследовательский университет

«Московский институт электронной техники»

ПРИМЕНЕНИЕ САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ КАРТ КОХОНЕНА ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ПРЕДСТАВИТЕЛЬСКОЙ ВЫБОРКИ ПРИ ОБУЧЕНИИ МНОГОСЛОЙНОГО ПЕРСЕПТРОНА

Рассмотрен вопрос эффективного формирования представительской выборки для обучения нейронной сети типа многослойный персептрон. Обозначены основные проблемы, возникающие в процессе разбиения факторного пространства на тестовое, проверочное и обучающее множества. Предложен подход, основанный на применении кластеризации, позволяющий увеличить энтропию обучающего множества. Рассмотрены самоорганизующиеся карты Кохонена как эффективный метод кластеризации. На базе таких карт проведена кластеризация факторных пространств различной размерности и сформирована представительская выборка. Синтезирована и обучена нейронная сеть типа многослойный персептрон на множестве, сформированном с использованием и без использования кластеризации. Сделан вывод о том, что рассматриваемый подход способствует повышению энтропии обучающего множества и, как следствие, приводит к улучшению качества обучения многослойного персептрона при небольшой размерности факторного пространства.

ИСКУССТВЕННАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ, САМООРГАНИЗУЮЩАЯСЯ КАРТА КОХОНЕНА, КЛАСТЕРИЗАЦИЯ, ПРЕДСТАВИТЕЛЬСКАЯ ВЫБОРКА.

Введение

Обучение нейронной сети — это важный этап ее функционирования. Для обучения многослойного персептрона (MLP — **multilayer perceptron**) наиболее часто используют алгоритм обратного распространения ошибки.

Перед процедурой обучения MLP особое внимание уделяется предобработке данных. В большинстве работ по применению нейронных сетей методика предобработки сводится к нормализации, масштабированию, а также начальной инициализации весов.

Данные действия, несомненно, необходимы, но их нельзя считать достаточными. При небольшой размерности факторного пространства следует учитывать специфику распределения исходных данных для эффективного обучения нейронной сети. При большом же количестве факторов это слишком сложно сделать. В последнем случае целесообразно применять кластериза-

цию для формирования обучающего множества из примеров признаков, наиболее уникальных по совокупности.

Один из эффективных методов кластеризации — использование самоорганизующихся карт Кохонена. Они нашли широкое применение в различных областях. Так, например, в работах [1, 2] описано применение указанных карт для распознавания образов. Кроме того, они эффективны при создании систем тестирования [3], анализа состава растворов [4]; на их основе разрабатываются новые модели для кластеризации данных [5]. Описание архитектуры, процедуры обучения и примеры использования самоорганизующихся карт Кохонена представлено, например, в работах [6, 7].

Как отмечено выше, проведение кластеризации факторного пространства позволяет формировать представительскую выборку, содержащую наиболее уникальные по совокупности признаков обучающие примеры, для обучения многослойного персеп-

трона. Аналогичный подход, включающий использование самоорганизующихся карт Кохонена для кластеризации, встречается, например, в работе [8].

В нашей работе исследовано применение кластеризации на основе самоорганизующихся карт Кохонена, но с точки зрения увеличения энтропии обучающего множества; проанализированы также эффективность такого подхода для факторных пространств различных размерностей и влияние размерности на изменение энтропии обучающего множества при использовании кластеризации.

При обучении нейронной сети типа MLP по алгоритму обратного распространения ошибки ответственным является этап формирования факторного пространства, на которое налагаются следующие требования:

- 1) необходима непротиворечивость данных, участвующих в обучении;
- 2) должны присутствовать максимально уникальные по совокупности признаки примеров, составляющие обучающее множество;
- 3) необходимо достаточное количество обучающих данных для сети выбранной архитектуры.

Чтобы отвечать первому требованию, обучающее множество должно быть проанализировано на наличие противоречий, необходимо выяснить причины возникновения ошибок (ошибка появилась при внесении данных или, что более серьезно, в результате использования недостаточного количества признаков факторного пространства) и по возможности их устранить.

Удовлетворять второму требованию необходимо для того, чтобы максимально эффективно использовать обучающую выборку. Количество данных, используемых для обучения нейронной сети, часто бывает невелико, поэтому крайне важно правильно сформировать обучающее множество, содержащее данные, наиболее уникальные по совокупности признаков.

Третье требование предъявляется для того, чтобы достичь заданной точности обучения нейронной сети за конечное количество шагов. В работе [9] приведена

зависимость ошибки обучения от количества свободных параметров W (архитектуры нейронной сети) и количества обучающих примеров N :

$$N = O(W / \varepsilon), \quad (1)$$

где ε — допустимая точность ошибки обучения; $O(\dots)$ — порядок величины, заключенной в скобки.

Нами были исследованы способы формирования обучающего множества, содержащего наиболее уникальные по совокупности признаков примеры, за счет увеличения энтропии. В данной статье под термином энтропия подразумевается неопределенность выбора примера из обучающего множества.

Для повышения вероятности адекватного обучения многослойного персептрона факторное пространство разбивается на три множества: обучающее, тестовое и проверочное [10]. Первое используется для настройки свободных параметров нейронной сети, второе — для независимого тестирования уже обученной нейронной сети, третье — для исключения эффекта переобучения, который заключается в запоминании, а не обобщении обучающего множества.

NNtool Box пакета MatLab использует для обучения 80 % случайно выбранных векторов из факторного пространства. Такое разбиение нельзя считать оптимальным, поскольку крайне мала вероятность выбора векторов, уникальных по совокупности признаков, т. е. такого разбиения, при котором энтропия обучающего множества максимальна и равна $\log_2 N_i$ (N_i — размер обучающего множества).

Таким образом, следует считать актуальной разработку метода, который бы позволял достигать максимума энтропии обучающего множества (если это позволяет характер данных, составляющих факторное пространство) либо гарантированно достигать определенного значения энтропии указанного множества (большего, чем при случайном разбиении факторного пространства на представительскую выборку).

С целью повышения энтропии обучающего множества предлагается провести кластерный анализ [11] факторного про-



пространства с тем, чтобы разбить последний на обучающее, тестовое и проверочное подмножества для формирования представительской выборки.

Чтобы эффективно применять алгоритмы кластерного анализа, очень важно правильно определить число прототипов. Одним из надежных способов кластеризации следует считать метод, основанный на применении самоорганизующихся карт Кохонена [6]. Чтобы провести кластеризацию с использованием таких карт, требуется также указать число прототипов, однако благодаря самоорганизации и обучению без учителя, сеть способна самостоятельно определять центры кластеров. Кроме того, следует отметить простоту реализации самоорганизующихся карт Кохонена, а также гарантированное получение ответа после прохождения данных по слоям карты.

Таким образом, представляется целесообразным использовать самоорганизующиеся карты Кохонена для кластеризации факторного пространства, а затем анализировать результаты обучения многослойного персептрона на представительской выборке, полученные с применением и без применения предлагаемого подхода.

Для проведения эксперимента были сгенерированы исходные данные, которые формируют факторное пространство. Последнее определяется пятью параметрами: из них четыре входных (x_1, x_2, x_3, x_4) и один выходной (y). Связь между этими параметрами задана функцией

$$y = e^{x_1} + e^{x_2} + 2e^{x_3} + 3e^{x_4}. \quad (2)$$

Кроме того, во входной вектор добавлен шум, который описан случайной величиной, распределенной по нормальному закону с дисперсией 0,01. Эксперимент был проведен на десяти факторных пространствах, включающих от 100 до 1000 векторов.

Постановка задачи

Пусть

$$X = \{X^1, \dots, X^M, Y^1, \dots, Y^M\}$$

— факторное пространство,
где $X^i = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$, $Y^i = \{y(X^i)\}$, M —

количество векторов в факторном пространстве.

Требуется найти с применением самоорганизующихся карт Кохонена такое разбиение факторного пространства на три множества (T — обучающее, V — проверочное и E — тестовое), для которого выполняется условие

$$H_0(T) < H(T) \leq H_{\max}(T), \quad (3)$$

где $H(T)$, $H_0(T)$ — величины энтропии обучающего множества с использованием кластеризации и для случайного разбиения факторного пространства на представительскую выборку, соответственно; $H_{\max}(T) = \log_2 N_t$ — максимальная энтропия этого множества (N_t — размер обучающего множества, составляющего 80 % от факторного пространства).

Описание нейронной сети Кохонена

Указанная нейронная сеть, или самоорганизующаяся карта признаков, имеет набор входных элементов, число которых совпадает с размерностью векторов, составляющих факторное пространство, и имеет набор выходных элементов, соответствующих кластерам (кластерные элементы — КЭ).

Входные элементы предназначены для распределения входного вектора между выходными элементами сети. Весовые значения КЭ можно интерпретировать как значения координат, описывающих позицию кластера в пространстве входных данных.

В работе [9] отмечается, что КЭ целесообразно располагать в форме двумерной решетки, так как такая топология гарантирует, что каждый нейрон будет иметь множество соседей. От этого расположения зависит, какие элементы будут корректироваться в радиусе кластерного элемента-победителя. Множество корректируемых КЭ определяется нормой, выбранной в пространстве весов; этой норме соответствует геометрия окрестности выбранного радиуса. В простейшем случае КЭ равен единице (корректируются веса только элемента-победителя).

На рис. 1 распределительный слой (DL) соответствует входному, а слой Кохонена

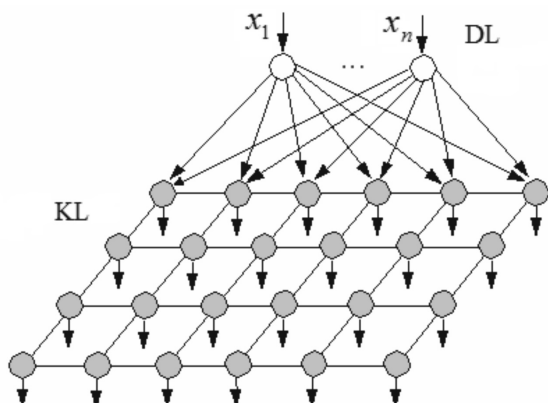


Рис. 1. Нейронная сеть Кохонена:
 $x_1, \dots, x_n$ – входные параметры факторного пространства; DL, KL – распределительный слой и слой Кохонена соответственно; кластерные элементы изображены шариками

(KL) содержит КЭ, образующие прямоугольник.

Обучение сети Кохонена проходит в два этапа [9]. На первом вычисляются расстояния от обучающих образов до каждого КЭ (нейрона) по формуле [12]:

$$d_j = \sum_i (\omega_{ij} - x_i)^2,$$

где ω_{ij} – весовой коэффициент, связывающий входной вектор x_i с кластерным элементом j .

Значения d_j передаются в конкурирующую функцию активации передачи, которая возвращает нулевое значение для всех выходных нейронов кроме нейрона-победителя k . Нейроном-победителем считается нейрон, для которого выполняется условие

$$d = \min(d_j),$$

где $1 \leq j \leq n$ (n – количество КЭ).

Весовой вектор нейрона-победителя расположен ближе всех к входному вектору и поэтому его выход устанавливается равным единице.

На втором этапе производится корректировка весовых коэффициентов нейрона-победителя k и всех нейронов из заданного радиуса r , т. е. уточняются позиции КЭ в пространстве входных данных. Для корректировки весовых коэффициентов мы при-

меняли формулу

$$\omega_{ij}(n+1) = \omega_{ij}(n) + \eta(n)[x_i - \omega_{ij}(n)],$$

где $\omega_{ij}(n)$ – весовой коэффициент, связывающий входной вектор x_i с кластерным элементом j на итерации n ; $\eta(n) \in [0; 1]$ – коэффициент скорости обучения, позволяющий управлять величиной коррекции весовых коэффициентов на каждой итерации.

Можно применять и другие способы корректировки весовых коэффициентов, например, с использованием функции окрестности [9], но данный вопрос выходит за рамки нашего исследования.

Коэффициент скорости обучения обычно инициализируется достаточно большой величиной (близка к единице), которая по мере обучения уменьшается.

Радиус r также изначально инициализируется достаточно большим значением и уменьшается на каждой итерации вплоть до одного элемента-победителя. Закон изменения радиуса подбирается экспериментально. В простейшем случае радиус на каждом шаге уменьшается по линейному закону.

Критерием окончания процесса обучения служит значение величины изменения весовых коэффициентов на очередной итерации: если она меньше заданного значения, то процесс завершен.

Кластерный анализ факторного пространства с применением нейронной сети Кохонена

Как упоминалось выше, было сформировано факторное пространство с пятью параметрами для обучения многослойного персептрона (MLP) моделированию целевой функции (2). NNToolbox пакета Matlab разбивает это пространство на три множества случайным образом в пропорции 8 : 1 : 1 [13].

Далее в нашей статье приведены расчеты для факторного пространства размера $N = 100$. Расчеты для пространств большего размера ($N \in [200, \dots, 1000]$) проводились аналогичным образом, поэтому опущены. В конце раздела приведена лишь сводная таблица результатов расчетов для $N \in [100, \dots, 1000]$.

Случай $N = 100$. Представительская выборка формируется NNToolbox пакета Matlab следующим образом: 80 : 10 : 10 векторов, где значения отвечают соответственно обучающему, проверочному и тестовому множествам.

Восемьдесят векторов, формирующих тестовое множество, в данном случае не учитывают специфику входных признаков, и поэтому такой выбор обучающих примеров нельзя считать оптимальным в отношении максимизации энтропии.

Ввиду вышеизложенного, предлагается выбирать для обучающего множества на основе кластеризации, проведенной сетью Кохонена, примеры из кластеров с минимальным количеством элементов (в идеальном случае из кластеров, представленных одним элементом). Суть предложения заключается в том, что в идеальном эксперименте обучающее множество должно содержать по одному элементу из каждого кластера. В случае если нейронная сеть Кохонена определила малое количество кластеров, в обучающее множество добавляются еще по одному элементу из каждого кластера. Однако необходимо стремиться к тому, чтобы количество представителей из неединичных кластеров было обратно пропорционально размеру кластера.

С учетом этого была выбрана прямоугольная топология сети Кохонена размерностью 8×10 . Конфигурации прямоугольника подбирается экспериментально (возможны варианты 10×8 или 4×20). В данном случае при конфигурации 8×10 количество единичных кластеров оказалось максимальным, а в каждом неединичном кластере количество примеров оказалось минимальным.

Инициализация карты Кохонена, т. е. присвоение начальных значений весам нейронов, может быть проведена разными способами. В данной работе карта инициализирована малыми случайными значениями, но существуют и более продвинутые алгоритмы начальной инициализации [14].

В нашем случае сеть Кохонена разбила факторное пространство на 73 кластера (рис. 2), представляющее собой прямоугольную таблицу размером 8×10 . Видно,

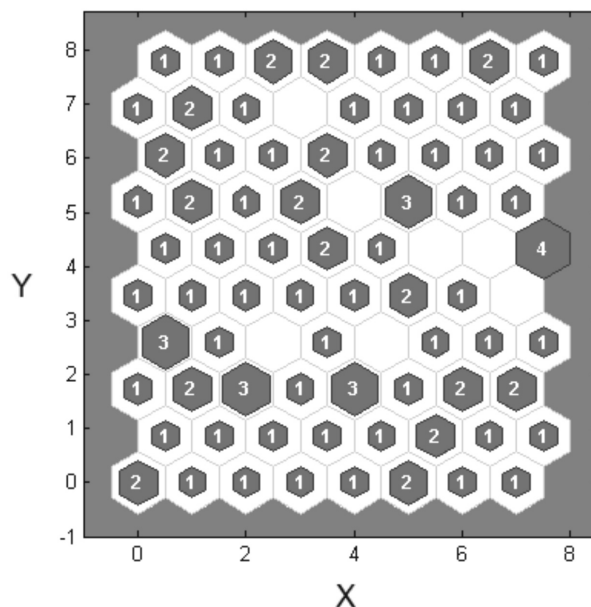


Рис. 2. Распределение факторного пространства по 80 кластерам, построенное сетью Кохонена (прямоугольная таблица размером 8×10).

Числа в ячейках отвечают количеству элементов в кластерах. Пара (X,Y) однозначно определяет положение кластера в пространстве карты Кохонена

что семь кластеров не содержат ни одного элемента, что, тем не менее, не оказывается критичным. В этой связи для повышения энтропии обучающего множества факторное пространство было разбито на представительскую выборку следующим образом: 73 : 10 : 17 наборов (обучающее/проверочное/тестовое множества), причем для обучающего множества было взято по одному представителю из кластера.

С учетом этого разбиения факторного пространства вычислялась энтропия обучающего множества для его случайного разбиения на представительскую выборку (в этом случае наборы для обучения выбираются случайно из всего факторного пространства) и для разбиения с учетом кластеризации (наборы для обучения выбираются из имеющихся 73-х, определенных с помощью кластеризации).

Для случая $N = 100$ существуют кластеры, содержащие в себе соответственно 1, 2, 3 и 4 элемента (см. рис. 2). Обозначим их $K = \{K_1, K_2, K_3, K_4\}$.

Таблица 1 Шенона [15]:

Классификация кластеров
по количеству элементов

$K_i \in K$	K_1	K_2	K_3	K_4
$\sum K_i$	52	16	4	1

В табл. 1 приведено соотношение количеств кластеров, относящихся к соответствующему подмножеству множества K .

Для текущего разбиения на кластеры вычислим энтропию для факторного пространства так, если бы формирование представительской выборки осуществлялось случайным образом.

Рассмотрим факторное пространство в качестве системы из 73 элементов (на столько кластеров разбила факторное пространство сеть Кохонена). Если формировать обучающее множество случайным образом, то вероятность p_i выбора элемента из кластера K_i будет равна $i / 100$ (i – количество элементов в кластере).

Энтропия для дискретных случайных событий вычисляется по формуле

$$H(x) = -\sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i. \quad (4)$$

Используя эту формулу, получим искомое значение:

$$H(x) = -\left(\sum_{i=1}^{52} \frac{1}{100} \log_2 \frac{1}{100} + \sum_{i=1}^{16} \frac{2}{100} \log_2 \frac{2}{100} + \sum_{i=1}^4 \frac{3}{100} \log_2 \frac{3}{100} + \frac{4}{100} \log_2 \frac{4}{100} \right) \approx 6,05 \text{ бит.}$$

В случае формирования обучающего множества из представителей каждого кластера (по одному), получим равновероятные события выбора, т. е. вероятность такого события равна $1/73$. С помощью формулы (4) получим энтропию, равную $\log_2 n = 6,19$, где $n = 73$. Таким образом, прирост энтропии тестового множества составляет 0,14 бит.

Максимально возможная энтропия, равная 6,32 ($\log_2 80 = 6,32$) для случая $N = 100$, гипотетически достигается в случае, если все 80 примеров являются абсолютно уникальными по совокупности признаков.

Таблица 2

Результаты расчета энтропии для факторных пространств различной размерности

N	Энтропия, бит			Затраченное время, с	
	$H_{\max}(T)$	$H(T)$	$H_0(T)$	T_1	T_2
100	6,32	6,19	6,05	3	1
200	7,32	7,15	7,02	5	2
300	7,91	7,79	7,67	7	4
400	8,32	8,17	8,07	10	3
500	8,64	8,50	8,38	15	3
600	8,91	8,77	8,66	21	4
700	9,13	8,97	8,86	29	9
800	9,32	9,17	9,05	36	7
900	9,49	9,31	9,16	42	8
1000	9,64	9,45	9,29	53	11

Обозначения: N – количество элементов факторного пространства; $H_{\max}(T)$ – максимальная энтропия обучающего множества; $H(T)$, $H_0(T)$ – величины энтропии этого множества с использованием кластеризации и для случайного разбиения факторного пространства на представительскую выборку, соответственно; T_1 , T_2 – промежутки времени, затраченные соответственно на обучение самоорганизующейся карты Кохонена (размер $0,8N$) и многослойного персептрона на данных соответствующей размерности (архитектура многослойного персептрона выбиралась в соответствии с формулой (4) из расчета $\epsilon = 0,2$).



Результаты аналогичных расчетов для факторных пространств с количеством векторов от 100 до 1000 приведены в табл. 2.

Анализ данных табл. 2 приводит к выводу, что для любого N выполняется условие (3). Значение энтропии для случая с использованием кластеризации лежит примерно посередине между значениями $H_0(T)$ и $H_{\max}(T)$ для всех N . Временные затраты на обучение карты Кохонена растут практически линейно.

Следует отметить, что время обучения многослойного персептрона (T_2) растет медленнее, чем время обучения самоорганизующейся карты Кохонена (T_1). Возможно, анализ времени обучения на данных более сложных количественной и качественной структур был бы показательнее. Этот вопрос требует дальнейшего исследования.

Можно констатировать, что для факторного пространства очень большой размерности временные затраты могут быть неприемлемы, но для небольших факторных пространств использование кластеризации гарантирует сокращение размера обучающего множества и в то же время прирост его энтропии.

На следующем этапе исследования ставился эксперимент, состоящий в обучении многослойного персептрона с использованием как представительской выборки, сформированной случайным образом, так и сформированной на основе кластеризации.

Обучение многослойного персептрона с использованием кластеризации и без нее

Нами проведены две процедуры обучения нейронной сети типа MLP на тестовых данных по методу обратного распространения ошибки [16]. В первом случае использовали формирование представительской выборки, предложенное NNToolBox пакета MATLAB, во втором применяли подход на основе кластерного анализа. В эксперименте использовалось факторное пространство, включающее 100 элементов.

Для контрольного сравнения с результатами исследования была также проведена процедура обучения по алгоритму, отличному от стандартного обратного рас-

пространения ошибки, в частности, по квазиньютоновскому методу обратного распространения (BFGS).

Нейронная сеть типа MLP в обоих случаях имеет одинаковую архитектуру: 4-4-1. Результаты обучения сети для обоих случаев представлены на рис. 3 – 7.

Графики регрессии (рис. 3 и 4) для обоих случаев аналогичны по своему виду. Табл. 3, 4 содержат результаты анализа данных, приведенных на рис. 3 и 4, соответственно. Можно констатировать, что отклонение от тренда составило в обоих случаях намного меньше 1 %.

Анализ результатов, представленных на рис. 5, позволяет сделать следующие выводы:

1. Наилучшая производительность нейронной сети (минимальная величина среднеквадратичной ошибки (MSE)) для проверочного множества при формировании представительской выборки без кластеризации составляет 0,31462, а в случае использования кластеризации – 0,11601.

2. Разница в среднеквадратичной ошибке между обучающим и тренировочным/проверочным множествами оказывается существенно выше в случае, когда кластеризация не используется.

3. Наилучшая производительность (минимальная величина среднеквадратичной ошибки) без использования кластеризации была достигнута на 165-й эпохе обучения против 254-й с использованием кластеризации, однако, как отмечалось выше, для первого случая наилучшая производительность (на рис. 5 минимальное значение на графике Validation) составила 0,31462, а с использованием кластеризации – 0,11601.

Сопоставление результатов, представленных на рис. 6 и 7, позволяет заключить, что значение градиента поверхности отклика ошибки на рис. 6 по окончании процедуры обучения оказывается на порядок ниже, чем на рис. 7, где представлено разбиение на представительскую выборку случайным образом. Поверхность отклика ошибки обучения есть пространство размерности n , где n – количество входных параметров факторного пространства (было взято $n = 4$). Вектор градиента поверхности

ошибок указывает направление кратчайшего спуска по этой поверхности из данной точки к минимуму (но не обязательно глобальному) ошибки обучения. Значение градиента для функции поверхности отклика

$u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ определяется через частные производные:

$$g = \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial x_1}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial u}{\partial x_n}\right)^2}.$$

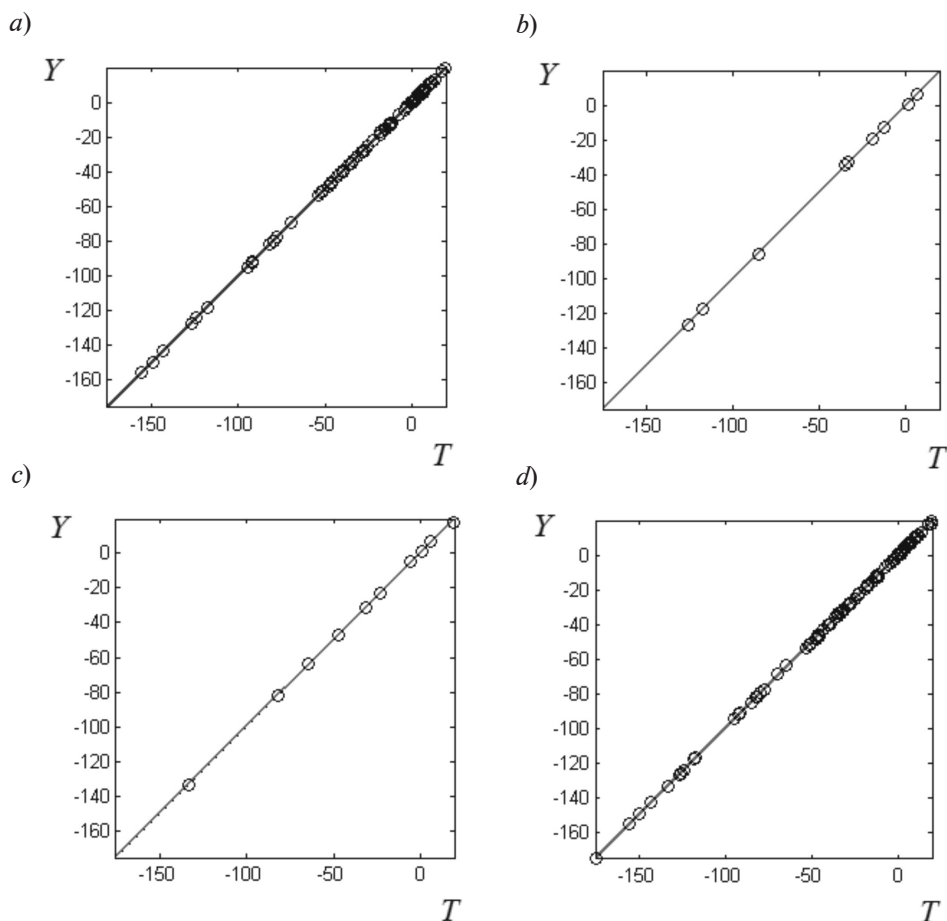


Рис. 3. Графики регрессии обучения нейронной сети со случайным формированием обучающего множества: Результаты обучения (a), проверки на переобучение (b) и проверки на тестовом множестве (c), а также общий результат (d). Прямая на графике проходит через центр облака данных

Таблица 3

Результаты обучения нейронной сети со случайным формированием обучающего множества

График на рис. 3	R	$Y(T)$
a	0,99998	$T + 0,00150$
b	0,99993	$T + 0,00046$
c	0,99994	$T + 0,01900$
d	0,99997	$T + 0,00240$

Обозначения: R — показатель отношения «значение выхода нейронной сети / целевое значение», $Y(T)$ — приближенная линейная зависимость фактических величин значения функции от целевых величин T .

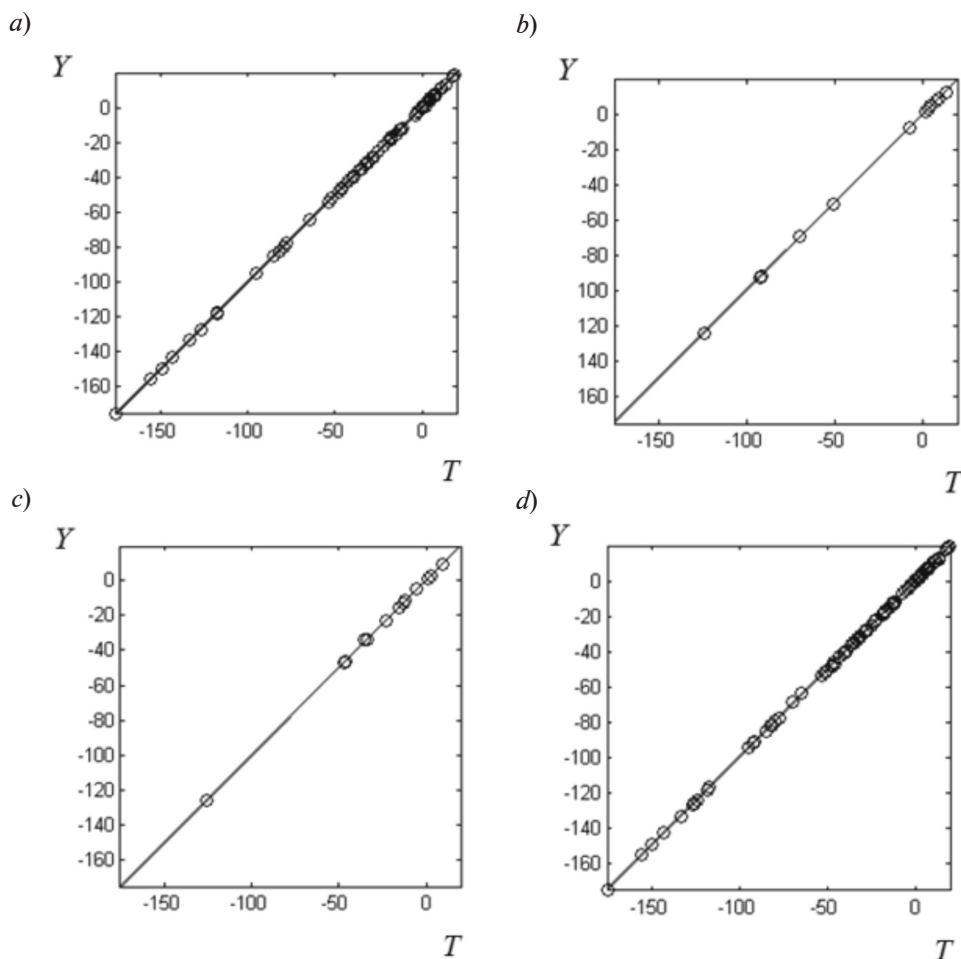


Рис. 4. Графики регрессии обучения нейронной сети с формированием обучающего множества (использована кластеризация)
(обозначение величин см. в подписи к рис. 3)

Таблица 4

Результаты обучения нейронной сети с формированием обучающего множества
(использована кластеризация)

График на рис. 4	R	$Y(T)$
a	0,99998	$T + 0,0016$
b	0,99998	$T + 0,0600$
c	0,99994	$T + 0,1700$
d	0,99997	$T + 0,0280$

Обозначение величин дано в подписи к табл. 3.

Следует отдельно отметить, что малое значение величины градиента не служит показателем повышения качества обучения в том случае, если процесс такого обучения сошелся к локальному минимуму, который отличается от глобального.

Использование квазиньютоновского метода обратного распространения (BFGS) для пространств с количеством элементов, близким к 1000, дало лучшие результаты, чем применение стандартного алгоритма обратного распространения, однако для

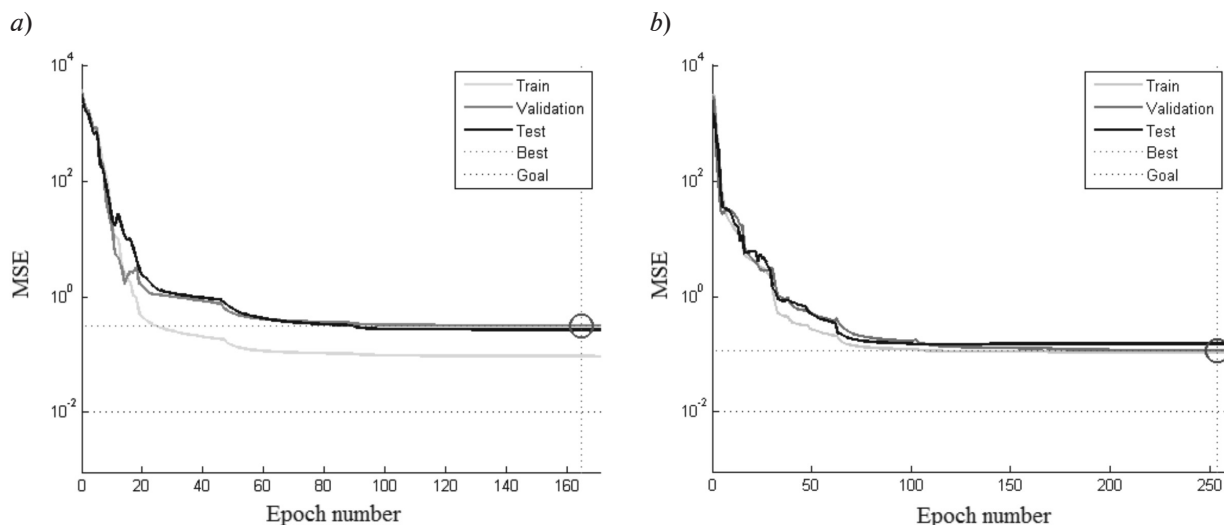


Рис. 5. Графики производительности нейронной сети в процессе обучения со случайным формированием обучающего множества (a) и с применением кластеризации (b): MSE – среднеквадратичная ошибка обучения; Epoch number – его текущая эпоха; представлено поведение ошибки для обучающего (Train), проверочного (Validation) и тестового (Test) множеств; Goal, Best – целевое и наилучшее значения ошибки, последнее достигнуто для проверочного множества μ

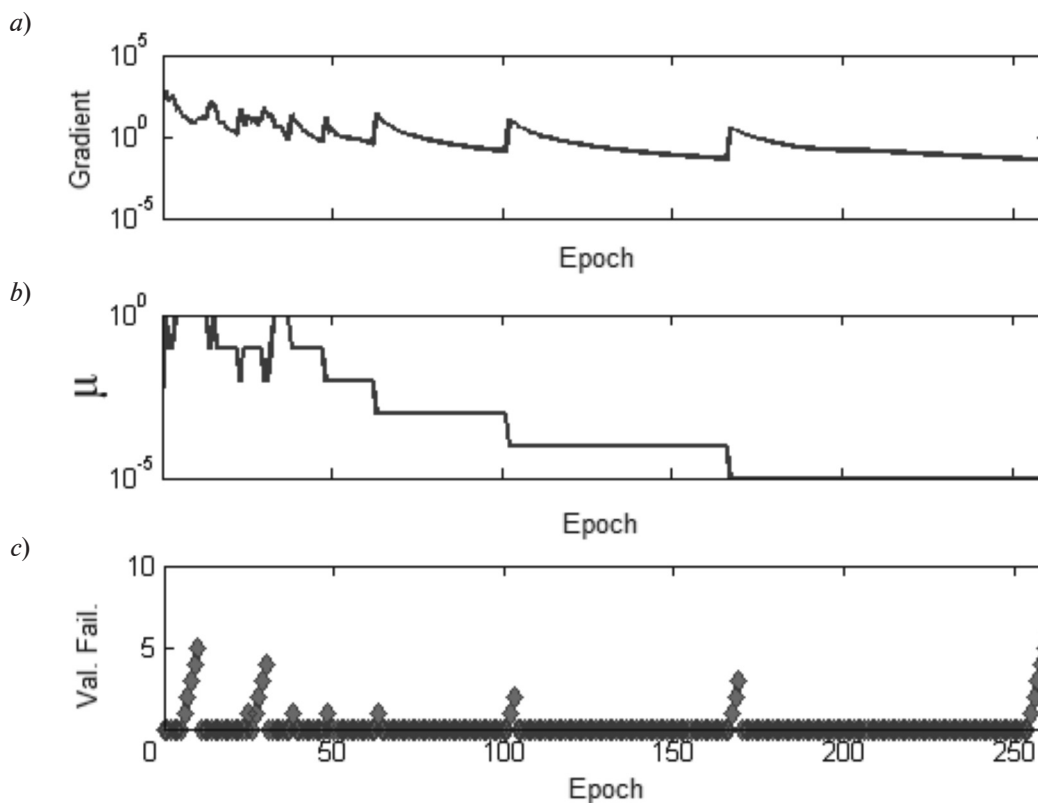


Рис. 6. Графики состояния обучения со случайным формированием тестового множества. Представлены зависимости градиента (Gradient) (a), адаптации μ (b) и количества проверок на переобучение (Validation Fail.) (c) на соответствующих значениях эпохи (Epoch). Значение градиента по окончании процедуры обучения оказалось равным 0,033976, адаптации – 10^{-5} ; количество проверок на переобучение – 6

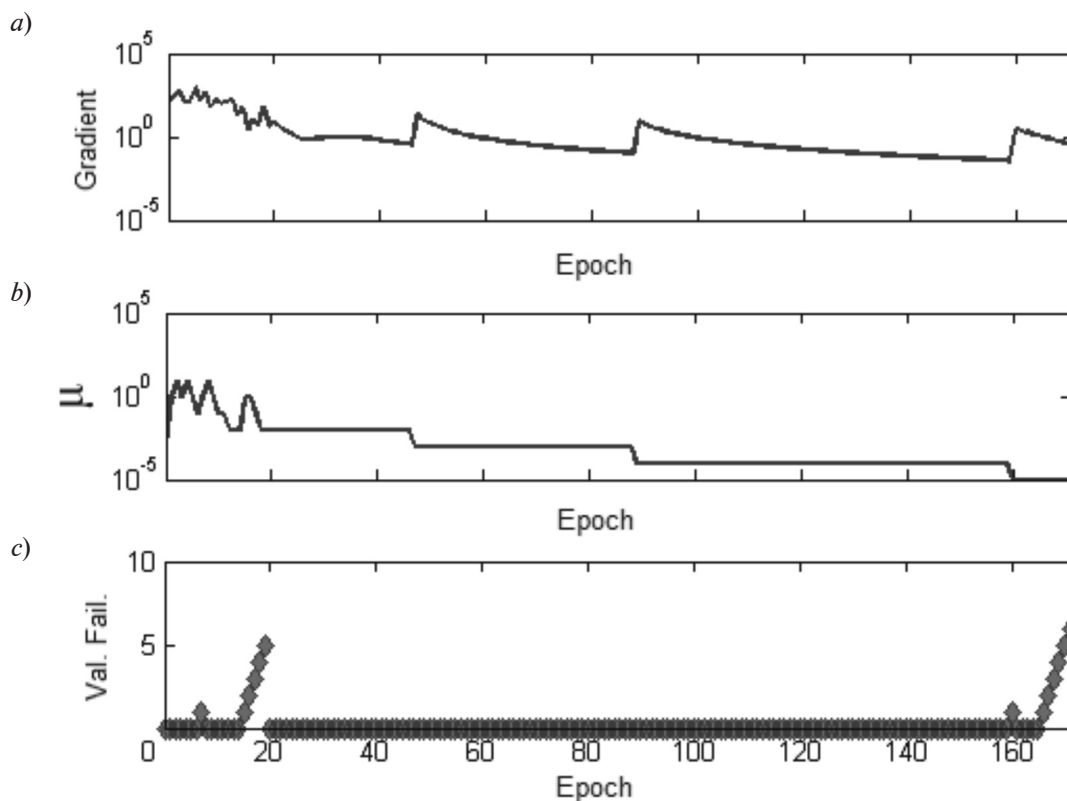


Рис. 7. Графики состояния обучения с применением кластеризации (обозначения величин см. в подписи к рис. 6).

В данном случае значение градиента по окончании процедуры обучения оказалось равным 0,35385, адаптации — 10^{-5} ; количество проверок на переобучение — 6

пространств малой размерности (например, для $N = 100$) применение стандартного алгоритма обратного распространения ошибки на основе наискорейшего спуска оказалось эффективней в отношении конечного значения среднеквадратичной ошибки обучения.

Заключение

Подведение итогов для полученных результатов позволяет заключить, что предложенный нами подход позволяет успешно решить поставленную задачу. Энтропия обучающего множества при использовании кластеризации для формирования обучающего множества увеличилась и приблизи-

лась к максимально возможному значению.

Несмотря на то, что при использовании кластеризации обучающее множество включает меньшее количество примеров, чем при случайном разбиении его на представительскую выборку, разница между ошибками для обучающего и тестового/проверочного множеств очевидно меньше, когда применяется кластеризация. Полученный результат наглядно показывает повышение качества обучения. Кроме того, величина среднеквадратичной ошибки оказывается значительно меньше в случае разбиения на представительскую выборку с применением кластеризации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Тант Зин Пьо, Тин Чжо, Пья Сон Ко Ко, Пайе Тэйн Наинга. Методика системы распознавания образов с помощью самоорганизующихся карт Кохонена нейронных сетей на основе

Matlab. Интернет-журнал «Науковедение». 2013. № 5 [http://naukovedenie.ru/PDF/27tvn513.pdf].

[2] Kumar D., Rai C.S., Kumar S. Face recognition using self-organizing map and princi-

pal component analysis // Proc. on Neural Networks and Brain (ICNNB 2005). Oct. 2005. Vol. 3. Pp. 1469–1473.

[3] **Панфилова А.С.** Система тестирования интеллекта на базе факторных моделей и самоорганизующихся карт Кохонена // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2012. № 9. С. 6–12.

[4] **Гущин К.А., Доленко С.А., Буриков С.А., Доленко Т.А.** Применение алгоритмов кластеризации и понижения размерности данных в задачах анализа состава многокомпонентных растворов // XIII Всерос. научн. конф. «Нейрокомпьютеры и их применение». Тез. докл. М.: МГППУ, 2015. С. 72–73.

[5] **Новиков А.В.** Нейросетевые методы решения задач кластерного анализа. // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2014. № 2. С. 48–53.

[6] **Кохонен Т.** Самоорганизующиеся карты. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008. 655 с.

[7] **Горбаченко В.И.** Нейроинформатика. Конспект лекций. Пенза: Пензенский государственный педагогический университет, 2011. 81 с.

[8] **Ковалев И.В.** Интеллектуальная система прогнозирования загрязнения атмосферы // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2010. № 7. С. 62–66.

[9] **Хайкин С.** Нейронные сети: полный курс. 2-е изд. Пер. с англ. М.: ИД «Вильямс», 2008. 1104 с.

[10] **Бэстенс Д.Э., Ван Ден Берг В.М., Вуд Д.** Нейронные сети и финансовые рынки: принятие решений в торговых операциях. М.: ТВП, 1997. 236 с.

[11] **Паклин Н.Б., Орешков В.И.** Бизнес-аналитика: от данных к знаниям. СПб.: Питер, 2013. 704 с.

[12] **Калан Р.** Основные концепции нейронных сетей. М.: Вильямс, 2001. 288 с.

[13] **Beale M.H., Hagan M.T., Demuth H.B.** Neural Network Toolbox User's Guide [http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/nnet/nnet_ug.pdf] MathWorks, Inc. 2014. 410 p.

[14] **Горбачев В.И.** Сети и карты Кохонена. URL: http://gorbachenko.self-organization.ru/articles/Self-organizing_map.pdf (дата обращения: 11.01. 2016).

[15] **Дмитриев В.И.** Прикладная теория информации. Учеб. пос. для студ. вузов. М.: Высшая школа, 1989.

[16] **Пастухов А.А.** Применение нейронных сетей для прогнозирования параметров энергетических установок с лазерным зажиганием // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 2 (218) С. 19–29.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАСТУХОВ Алексей Андреевич — аспирант кафедры высшей математики № 1 Национального исследовательского университета «МИЭТ».

124498, Российская Федерация, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д. 5
pastuhov1992@gmail.com

ПРОКОФЬЕВ Александр Александрович — доктор педагогических наук, заведующий кафедрой высшей математики № 1 Национального исследовательского университета «МИЭТ».

124498, Российская Федерация, Москва, Зеленоград, проезд 4806, д. 5
aaprokof@yandex.ru

Pastukhov A.A., Prokofiev A.A. KOHONEN SELF-ORGANIZING MAP APPLICATION TO REPRESENTATIVE SAMPLE FORMATION IN THE TRAINING OF THE MULTILAYER PERCEPTRON.

In this paper, we have considered an item of effective formation of a representative sample for training the neural network of the multilayer perceptron (MLP) type. The main problems arising in the process of the factor space division into the test, verification and training sets were formulated. An approach based on the use of clustering, that allowed one to increase the entropy of the training set was put forward. Kohonen self-organizing maps (SOM) were examined as an effective procedure of a clustering. Based on such maps, the clustering of factor spaces of different dimensions was carried out, and a representative sample was formed. To verify our approach we synthesized the MLP neural network and trained it. The training technique was performed with the sets formed both using the clustering and no doing it. The approach under consideration was concluded to have an influence on the increase in the entropy of the training set and (as a result) to lead to the quality improvement of training of MLP with the small dimensionality of the factor space.

ARTIFICIAL NEURAL NETWORK, KOHONEN SELF-ORGANIZING MAP, CLUSTERING, SAMPLE FORMATION.



REFERENCES

- [1] **Tant Zin Po, Tin Chzho, Pya Son Ko Ko, Paye Teyn Nainga**, Metodika sistemy raspoznavaniya obrazov s pomoshchyu samoorganizuyushchikhsya kart Kokhonena neyronnykh setey na osnove Matlab [The procedure of pattern recognition system using self-organizing maps of neural networks based on Mathlab], Internet-Journal 'Naukovedenie' No. 5 (2013) [<http://naukovedenie.ru/PDF/27tvn513.pdf>].
- [2] **D. Kumar, C.S. Rai, S. Kumar**, Face recognition using self-organizing map and principal component analysis, In: Proc. on Neural Networks and Brain, ICNNB 2005. 3 (2005) 1469–1473.
- [3] **A.S. Panfilova** Sistema testirovaniya intellekta na baze faktornykh modeley i samoorganizuyushchikhsya kart Kokhonena [The system of intellect testing based on factor models and self-organizing maps], Neyrokomp'yutery, razrabotka, primeneniye, No. 9 (2012) 6–12.
- [4] **K.A. Gushchin, S.A. Dolenko, S.A. Burikov, T.A. Dolenko**, Primeneniye algoritmov klasterizatsii i ponizheniya razmernosti dannykh v zadachakh analiza sostava mnogokomponentnykh rastvorov [An application of clustering algorithms and data dimensionality reduction to the problems on composition of multicomponent solutions], 13th Vserossiyskaya nauchnaya konferentsiya «Neyrokomp'yutery i ikh primeneniye». Tezisy dokladov [Abstracts], MGPPU, Moscow, 2015.
- [5] **A.V. Novikov**, Neyrosetevyye metody resheniya zadach klaster'nogo analiza [Neural-network methods of solving the problems on cluster analysis] «Neyrokomp'yutery: razrabotka, primeneniye». No. 2 (2014) 48–53.
- [6] **T. Kokhonen**, Samoorganizuyushchiyesya karty [Self-organizing maps], Moscow, Binom, Laboratoriya znaniy, 2008.
- [7] **V.I. Gorbachenko**, Neyroinformatika. Konspekt lektsiy [Neural informatics, Lecture notes], Penza: Penzenskiy gosudarstvennyy pedagogicheskiy universitet, 2011.
- [8] **I.V. Kovalev**, Intellektualnaya sistema prognozirovaniya zagryazneniya atmosfery [The intelligence system to forecast air pollution], Neyrokomp'yutery: razrabotka, primeneniye. No. 7 (2010) 62–66.
- [9] **S. Khaykin**, Neyronnyye seti: polnyy kurs [Neural networks: a full course of study], 2-nd ed. Per. s angl. Moscow, ID "Wiliams", 2008.
- [10] **D.E. Bestens, V.M. Van Den Berg, D. Vud**, Neyronnyye seti i finansovyye rynki: prinyatiye resheniy v torgovykh operatsiyakh [Neural networks and financial markets: decision of making in the trading], Moscow, TVP, 1997.
- [11] **N.B. Paklin, V.I. Oreshkov**, Biznes-analitika: ot dannykh k znaniyam [Business intelligence: from the data to the knowledge], SPb., Piter, 2013.
- [12] **R. Kalan**, Osnovnyye kontseptsii neyronnykh setey [Fundamental concepts of neural networks], Moscow, Wiliams, 2001.
- [13] **Beale M.H., Hagan M.T., Demuth H.B.** Neural Network Toolbox User's Guide [http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/nnet/nnet_ug.pdf] // MathWorks, Inc. 2014.
- [14] **V.I. Gorbachev**, Seti i karty Kokhonena [Networks and self-organizing maps]. URL: http://gorbachenko.self-organization.ru/articles/Self-organizing_map.pdf (data obrashcheniya: 11.01.2016).
- [15] **V.I. Dmitriyev**, Prikladnaya teoriya informatsii [Applied information theory]: Uchebnoye posobiye dlya studentov vuzov, Moscow, Vysshaya shkola, 1989.
- [16] **A.A. Pastukhov**, Predicting the parameters of energy installations with laser ignition: neural network models, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. No. 2 (218) (2015) 19–29.

THE AUTHORS

PASTUKHOV Aleksey A.

National Research University of Electronic Technology

5 Pass. 4806, Zelenograd, Moscow, 124498, Russian Federation

pastuhov1992@gmail.com

PROKOFIEV Alexander A.

National Research University of Electronic Technology

5 Pass. 4806, Zelenograd, Moscow, 124498, Russian Federation

aaprokof@yandex.ru

DOI: 10.5862/JPM.242.12
УДК: 519.213.2:519.217.4

С.В. Березин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ОБ АНАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ПРОЦЕССА, ЗАДАННОГО СИСТЕМОЙ СТОХАСТИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

В работе исследуются вопрос аналитичности характеристической функции решения системы стохастических дифференциальных уравнений. Рассматривается важный для приложений случай, когда матрица диффузии не зависит от фазовых координат системы, однако может зависеть от времени. Доказывается, что при некоторых естественных ограничениях на коэффициенты стохастического дифференциального уравнения характеристическая функция его решения является целой по совокупности всех своих аргументов.

СТОХАСТИЧЕСКОЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ, АНАЛИТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ КОМПЛЕКСНОГО ПЕРЕМЕННОГО, ЦЕЛАЯ ФУНКЦИЯ.

Введение

В настоящее время аппарат характеристической функции является одним из основных инструментов исследования случайных процессов, определяемых стохастическими дифференциальными уравнениями. Разработаны как точные [1], так и приближенные [2] методы такого исследования, многие из которых опираются на возможность разложения характеристической функции в степенной ряд. Хорошо известно, что в одномерном случае степенные ряды представляют собой функции, аналитические в кругах на комплексной плоскости [3]. Более того, в специфическом случае характеристических функций эти ряды могут быть продолжены в область, которая получается из круга всевозможными сдвигами вдоль вещественной оси (полосу) [4 – 6]. Аналогичная ситуация имеет место и в многомерном случае, где естественным множеством аналитичности характеристической функции является трубчатая область [7].

В настоящей статье исследуется аналитичность характеристической функции процесса, заданного системой стохастических дифференциальных уравнений. Оказывается, что такая характеристическая функция является аналитической не только в некоторой трубчатой области, но и во

всем комплексном пространстве. В частности, отсюда следует конечность смешанных моментов любых порядков для соответствующего процесса.

В работе мы ограничиваемся рассмотрением случая систем стохастических дифференциальных уравнений с матрицей диффузии, которая не зависит от фазовых координат системы, но может зависеть от времени, и произвольным вектором сноса, удовлетворяющим условию не более чем линейного роста. С одной стороны, эта ситуация является более простой для анализа по сравнению с самой общей, но, с другой стороны, достаточно важной для приложений [8, 9].

Некоторый частный случай решаемой в настоящей статье задачи рассмотрен в работе [10]. А именно, в ней доказывается, что характеристическая функция решения системы кусочно-линейных стохастических дифференциальных уравнений является целой. Рассматривается такая система уравнений, вектор сноса которой допускает декомпозицию в виде суммы линейного относительно фазовых координат слагаемого и нелинейной части, имеющей вид релейной нелинейности ($\text{sign } x$) по какой-то одной выбранной координате, причем матрица диффузии считается постоянной. При отбрасывании релейной нелинейно-



сти решением соответствующей линейной системы является гауссовский процесс, характеристическая функция которого — целая для каждого фиксированного момента времени. Поскольку релейная нелинейность ограничена во всем пространстве, то решение исходной нелинейной задачи удастся оценить через решений линейной, что немедленно приводит к искомой аналитичности с применением результатов из [6].

К сожалению, в общем случае указанная выше декомпозиция невозможна и требуется новый метод оценки решения общей системы стохастических дифференциальных уравнений через решение некоторой более простой, частной системы. В настоящей статье для этих целей используется неравенство Гронуолла (см., например, монографию [11]), которое позволяет прийти к желаемому результату.

Одномерный случай

Сначала мы докажем заявленные утверждения для одномерного случая. Для этого нам понадобятся некоторые вспомогательные леммы.

Лемма 1. *Характеристическая функция $E(z) = \mathbb{E}[e^{iz\xi}]$ случайной величины ξ является целой в том и только в том случае, когда для любого $k \in \mathbb{N}$ существует $\mathbb{E}[|\xi|^k] < \infty$ и выполняется предельное равенство*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\frac{\mathbb{E}[|\xi|^k]}{k!}} = 0.$$

Отметим, что в лемме утверждается не только существование аналитического продолжения $E(z)$ на всю комплексную плоскость $\mathbb{C}$, но и тот факт, что это продолжение задается прежней формулой $E(z) = \mathbb{E}[e^{iz\xi}]$.

Доказательство этого несложного утверждения приведено в монографии [6, с. 234].

Далее нам потребуется следующее очевидное свойство гауссовской случайной величины.

Лемма 2. *Пусть задана случайная величина $\xi \sim N(0, \sigma^2)$. Тогда для любого $k \in \mathbb{N}$ выполняется соотношение*

$$\mathbb{E}[|\xi|^k] = \frac{(\sqrt{2}\sigma)^k}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right), \quad (1)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера.

Приведем также ряд важных для дальнейшего лемм.

Лемма 3 (неравенство Гронуолла). *Пусть интегрируемая функция $\alpha(t) \geq 0$, где $t \in [t_0, T]$, удовлетворяет неравенству*

$$\alpha(t) \leq h \int_{t_0}^t \alpha(s) ds + \beta(t), \quad t \in [t_0, T], \quad (2)$$

где $h \geq 0$ — некоторая постоянная, а $\beta(t)$ — еще одна интегрируемая на $[t_0, T]$ функция. Тогда выполняется неравенство

$$\alpha(t) \leq h \int_{t_0}^t e^{h(t-s)} \beta(s) ds + \beta(t), \quad t \in [t_0, T]. \quad (3)$$

Доказательство этой леммы можно найти в монографии [11, с. 471].

Лемма 4 (об оценке моментов). *Пусть непрерывный случайный процесс $X(t)$ задан при $t \in [t_0, T]$, а $H(t)$ — некоторая неслучайная функция, интегрируемая с квадратом на $[t_0, T]$, причем при некоторых постоянных $h \geq 0$ и $C \geq 0$ выполняется неравенство*

$$|X(t)| \leq C + h \int_{t_0}^t |X(s)| ds + \left| \int_{t_0}^t H(s) dW(s) \right|, \quad (4)$$

где $W(t)$ — стандартный винеровский процесс, стартовый из нуля. Тогда для любого $k \in \mathbb{N}$ существует $\mathbb{E}[|X(t)|^k] < \infty$, а характеристическая функция $E(z; t) = \mathbb{E}[e^{izX(t)}]$ является целой при каждом фиксированном $t \in [t_0, T]$.

Доказательство. Воспользовавшись неравенством Гронуолла (3), из неравенства (4) получим:

$$\begin{aligned} |X(t)| &\leq C + \left| \int_{t_0}^t H(s) dW(s) \right| + \\ &+ h \int_{t_0}^t e^{h(t-s)} \left[C + \left| \int_{t_0}^s H(q) dW(q) \right| \right] ds. \end{aligned} \quad (5)$$

Введем для удобства обозначения

$$C_1 = Ce^{h(T-t_0)} \geq 0, \quad G(t) = \int_{t_0}^t H(s) dW(s),$$

$$\tilde{h} = h e^{h(T-t_0)} \geq 0,$$

и тогда будем иметь

$$|X(t)| \leq C_1 + |G(t)| + \tilde{h} \int_{t_0}^t |G(s)| ds. \quad (6)$$

Хорошо известно, что процесс $G(t)$ является (непрерывным) гауссовским, поэтому из леммы 2 следует, что

$$\mathbb{E}[|G(t)|^k] \leq \frac{(\sqrt{2}\sigma)^k}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right), \quad (7)$$

где $\sigma^2 = \int_{t_0}^T H^2(s) ds$.

Далее, из неравенства Гёльдера следует оценка

$$\left(\int_{t_0}^t |G(s)| ds \right)^k \leq (T-t_0)^{k-1} \int_{t_0}^t |G(s)|^k ds, \quad (8)$$

из которой, ввиду соотношения (6) следует существование конечных абсолютных моментов $\mathbb{E}[|X(t)|^k]$, где $k \in \mathbb{N}$.

Возведем левую и правую части неравенства (6) в степень k и перейдем к математическим ожиданиям; после этого, извлекая корень степени k , получим оценку

$$\begin{aligned} (\mathbb{E}[|X(t)|^k])^{\frac{1}{k}} &\leq \\ &\leq \left(\mathbb{E} \left[\left(C_1 + |G(t)| + \tilde{h} \int_{t_0}^t |G(s)| ds \right)^k \right] \right)^{\frac{1}{k}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Далее используем неравенство Минковского для правой части (9) и с помощью формулы (8) придем к очередной оценке

$$\begin{aligned} (\mathbb{E}[|X(t)|^k])^{\frac{1}{k}} &\leq C_1 + (\mathbb{E}[|G(t)|^k])^{\frac{1}{k}} + \\ &+ \tilde{h}(T-t_0)^{\frac{1}{k}} \left(\int_{t_0}^t \mathbb{E}[|G(s)|^k] ds \right)^{\frac{1}{k}}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\tilde{h} = (T-t_0)\tilde{h} \geq 0$.

Применим неравенство (7) еще раз и введем новое обозначение $h_1 = 1 + \tilde{h} \geq 0$; тогда получим окончательное выражение

$$(\mathbb{E}[|X(t)|^k])^{\frac{1}{k}} \leq C_1 + h_1 \sqrt[k]{\frac{(\sqrt{2}\sigma)^k}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}, \quad (11)$$

из которого с помощью формулы Стирлинга легко получается соотношение

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{\frac{\mathbb{E}[X^k(t)]}{k!}} = 0. \quad (12)$$

Таким образом, с учетом леммы 1 доказательство закончено. $\square$

Замечание. Фактически было установлено более сильное утверждение, а именно: из неравенства (11) следует, что

$$\sup_{s \in [t_0, T]} \mathbb{E}[|X(s)|^k] < \infty,$$

а также, что сходимость соответствующего ряда Тейлора для целой функции $E(z; t)$ будет равномерной по t на отрезке $[t_0, T]$.

Отметим также, что в книге [12, с. 48] приведена другая оценка для моментов решения стохастического дифференциального уравнения при несколько иных предположениях, однако она недостаточно точна для доказательства аналитичности соответствующей характеристической функции. Напротив, из леммы 4 следует более сильная оценка, которая уже позволяет прийти к желаемому результату.

Перейдем теперь к основному утверждению данного раздела — аналитичности характеристической функции решения стохастического дифференциального уравнения.

Мы будем рассматривать непрерывный случайный процесс $X(t)$, определенный при $t \in [t_0, T]$, который является (вообще говоря, слабым) решением стохастического дифференциального уравнения с коэффициентом диффузии, зависящим только от времени:

$$dX(t) = a(t, X(t)) dt + H(t) dW(t), \quad (13)$$

и с начальным условием $X(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}$. Здесь, как обычно, $W(t)$ — стандартный винеровский процесс, стартующий из нуля; причем мы считаем, что коэффициенты уравнения (13) удовлетворяют условиям

$$\int_{t_0}^T H^2(s) ds < \infty, \quad |a(t, x)| \leq C(1 + |x|), \quad (14)$$

где $x \in \mathbb{R}$, а $C \geq 0$.

В таких предположениях имеет место следующее утверждение.



Теорема 1. Пусть случайный процесс $X(t)$, определенный при $t \in [t_0, T]$, является решением стохастического дифференциального уравнения (13) с начальным условием $X(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}$. Тогда характеристическая функция $E(z; t) = \mathbb{E}[e^{izX(t)}]$ — это целая функция аргумента $z \in \mathbb{C}$.

Доказательство. Запишем уравнение (13) в эквивалентной интегральной форме:

$$X(t) = x_0 + \int_{t_0}^t a(s, X(s)) ds + \int_{t_0}^t H(s) dW(s). \quad (15)$$

Оценим правую часть этого равенства по модулю и используем второе из условий (14); получим следующее неравенство:

$$|X(t)| \leq \tilde{C} + h \int_{t_0}^t |X(s)| ds + \left| \int_{t_0}^t H(s) dW(s) \right|,$$

где $\tilde{C} = |x_0| + C(T - t_0) \geq 0$.

Последнее в силу леммы 4 и завершает доказательство теоремы. $\square$

Многомерный случай

В случае систем стохастических дифференциальных уравнений наибольший интерес представляет исследование аналитичности характеристической функции по всей совокупности ее аргументов. Начнем с получения удобного достаточного условия такой аналитичности, а затем используем его для установления основного для данной секции результата — аналитичности характеристической функции решения системы стохастических дифференциальных уравнения во всем комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$.

Прежде всего введем удобные обозначения: определим мультииндекс равенством $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n)$, где $k_j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ для $j = 1, \dots, n$, а сумму элементов этого мультииндекса будем обозначать через $|\mathbf{k}| = k_1 + \dots + k_n$. Для сокращения записи будем также применять краткую нотацию

$$\mathbf{k}! = k_1! \cdot \dots \cdot k_n!, \quad \xi^{\mathbf{k}} = \xi_1^{k_1} \cdot \dots \cdot \xi_n^{k_n},$$

$$|\xi|^{\mathbf{k}} = |\xi_1|^{k_1} \cdot \dots \cdot |\xi_n|^{k_n},$$

а для евклидовой нормы вектора $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)^T \in \mathbb{R}^n$ будет использоваться обозначение $\|\xi\| = \sqrt{\xi_1^2 + \dots + \xi_n^2}$.

Далее, имеет место следующее простое достаточное условие аналитичности характеристической функции $E(z)$ во всем комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$.

Лемма 5. Пусть ξ — случайный вектор в $\mathbb{R}^n$ такой, что для любого $l \in \mathbb{N}$ существует $\mathbb{E}[\|\xi\|^l] < \infty$, причем

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \sqrt[l]{\frac{\mathbb{E}[\|\xi\|^l]}{l!}} = 0. \quad (16)$$

Тогда характеристическая функция

$$E(z) = \mathbb{E}[e^{iz^T \xi}],$$

где $z = (z_1, \dots, z_n)^T$, является целой функцией в комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$.

Отметим, что в лемме утверждается не только существование аналитического продолжения $E(z)$ во все комплексное пространство $\mathbb{C}^n$, но и то, что это продолжение задается прежней формулой $E(z) = \mathbb{E}[e^{iz^T \xi}]$.

Доказательство. Из очевидного неравенства $|\xi|^{\mathbf{k}} \leq \|\xi\|^{|\mathbf{k}|}$ следует существование конечных смешанных моментов $\mathbb{E}[|\xi|^{\mathbf{k}}]$ любого порядка. Поэтому можно записать цепочку неравенств

$$\begin{aligned} \sum_{|\mathbf{k}|=l} \mathbb{E}[|\xi|^{\mathbf{k}}] \frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} &\leq \sum_{|\mathbf{k}|=l} \mathbb{E}[\|\xi\|^{|\mathbf{k}|}] \frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} = \\ &= \frac{\mathbb{E}[\|\xi\|^l]}{l!} (|y_1| + \dots + |y_n|)^l \leq \frac{\mathbb{E}[\|\xi\|^l]}{l!} (n\|y\|)^l \end{aligned} \quad (17)$$

при любых $l = 0, 1, \dots$, где символ $\sum_{|\mathbf{k}|=l}$ обозначает суммирование по всем мультииндексам $\mathbf{k}$ таким, что $|\mathbf{k}| = l$.

Условие (16) гарантирует, что радиус сходимости ряда

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{\mathbb{E}[\|\xi\|^l]}{l!} (n\|y\|)^l \quad (18)$$

является бесконечным (согласно формуле Адамара [3]). Другими словами, для любого $\rho > 0$ ряд (18) сходится равномерно на замкнутом шаре $\bar{B}_\rho = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \|y\| \leq \rho\}$, а значит имеет место равномерная сходимость и для ряда

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathbb{E}[|\xi|^{\mathbf{k}}] \frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{|\mathbf{k}|=l} \mathbb{E}[|\xi|^{\mathbf{k}}] \frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!}, \quad (19)$$

где символ $\sum_{\mathbf{k}}$ обозначает суммирование

теперь уже по всевозможным мультииндексам $\mathbf{k}$.

Далее рассмотрим еще одну цепочку неравенств:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \mathbb{E} \left[\frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} \right] &\geq \sum_{\mathbf{k}} \int_{-A}^A \dots \int_{-A}^A |x|^{\mathbf{k}} dF_{\xi}(x) \frac{|y|^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} = \\ &= \int_{-A}^A \dots \int_{-A}^A e^{|x_1 y_1| + \dots + |x_n y_n|} dF_{\xi}(x_1, \dots, x_n) \geq \\ &\geq \int_{-A}^A \dots \int_{-A}^A e^{iz^T x} dF_{\xi}(x), \end{aligned} \quad (20)$$

где совместная функция распределения системы компонент случайного вектора ξ обозначена через

$$F_{\xi}(x) = F_{\xi}(x_1, \dots, x_n),$$

а $z = u + iy \in \mathbb{C}^n$ обозначает некоторый комплексный вектор, причем здесь $u \in \mathbb{R}^n$.

При выводе неравенства (20) была произведена перестановка суммирования и интегрирования, законность которой следует из известной теоремы о монотонной сходимости, принадлежащей Б. Леви [13]. Для всех z , принадлежащих замыканию $\bar{G}_{\rho}$ трубчатой области $G_{\rho} = \{z \in \mathbb{C}^n \mid \|\operatorname{Im} z\| < \rho\}$, из полученных неравенств сразу же следует существование и конечность интеграла в правой части равенства

$$E(z) = \mathbb{E}[e^{iz^T \xi}] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{iz^T x} dF_{\xi}(x). \quad (21)$$

Если теперь обратить внимание на то, что сходимость этого интеграла является равномерной на $\bar{G}_{\rho}$, то по хорошо известной теореме Вейерштрасса [3] получим аналитичность предельной функции $E(z)$ в G_{ρ} . А в силу произвольности ρ , аналитичность будет иметь место и во всем комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$.

Итак, установлено, что $E(z)$ является целой функцией в $\mathbb{C}^n$, что и завершает доказательство. $\square$

Пусть теперь задан нормальный центрированный случайный вектор ξ с корреляционной матрицей $K = \{K_{j,l}\}_{j,l=1}^n$, норму Фробениуса которой будем обозначать через

$$\|K\|_F = \sqrt{\sum_{j,l=1}^n K_{j,l}^2}.$$

В такой ситуации имеет место следующее утверждение.

Лемма 6. Пусть задан случайный вектор $\xi \sim N(0, K)$, тогда для любого $l \in \mathbb{N}$ имеет место неравенство

$$\mathbb{E} \left[\|\xi\|^l \right] \leq C \frac{(\sqrt{2}\sigma)^l}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{l+n}{2}\right), \quad (22)$$

где $\sigma = \sqrt{\|K\|_F} \geq 0$, а $C \geq 0$ — некоторая константа, не зависящая от l .

Доказательство. Подберем такую ортогональную матрицу A , чтобы новый случайный гауссовский центрированный вектор $\tilde{\xi} = A\xi$ имел некоррелированные компоненты. Тогда получим, что корреляционная матрица случайного вектора $\tilde{\xi}$ будет иметь диагональный вид

$$\begin{aligned} K_{\tilde{\xi}} &= \mathbb{E}[\tilde{\xi}\tilde{\xi}^T] = AKAT^T = \\ &= \operatorname{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_n, 0, \dots, 0\}. \end{aligned}$$

Без ограничения общности можно считать, что именно первые $\nu \leq n$ диагональных элементов этой матрицы отличны от нуля. Легко понять, что

$$\|K\|_F = \|K_{\tilde{\xi}}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{\nu} \lambda_i^2},$$

а также, что $\|\tilde{\xi}\| = \|\xi\|$.

Производя явное вычисление $\mathbb{E} \left[\|\tilde{\xi}\|^l \right]$, получим равенство

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\|\tilde{\xi}\|^l \right] &= \frac{1}{(2\pi)^{\nu/2}} \int_{\mathbb{R}^{\nu}} (\lambda_1 x_1^2 + \dots + \lambda_{\nu} x_{\nu}^2)^{\frac{l}{2}} \times \\ &\times e^{-\frac{x_1^2}{2} - \dots - \frac{x_{\nu}^2}{2}} dx_1 \dots dx_{\nu}, \end{aligned} \quad (23)$$

причем очевидно, что последний интеграл конечен. Из этого равенства без труда выводим, что

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\|\tilde{\xi}\|^l \right] &\leq \frac{\sigma^l}{(2\pi)^{\nu/2}} \int_{\mathbb{R}^{\nu}} (x_1^2 + \dots + x_{\nu}^2)^{\frac{l}{2}} \times \\ &\times e^{-\frac{1}{2}(x_1^2 + \dots + x_{\nu}^2)} dx_1 \dots dx_{\nu}, \end{aligned} \quad (24)$$

где $\sigma = \sqrt{\|K\|_F}$.

Вычислим последний интеграл путем перехода к многомерным сферическим координатам, в результате чего получим неравенство



$$\mathbb{E}[\|\xi\|^l] \leq C \frac{(\sqrt{2}\sigma)^l}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{l+n}{2}\right), \quad (25)$$

где $C \geq 0$ — некоторая константа, не зависящая от l , что и завершает доказательство леммы. $\square$

Леммы, доказанные выше, позволяют без напряжения установить аналитичность характеристической функции и в многомерном случае. Действительно, рассмотрим непрерывный векторный случайный процесс $X(t)$, определенный при $t \in [t_0, T]$, который является (вообще говоря, слабым) решением системы стохастических дифференциальных уравнений (векторного стохастического дифференциального уравнения)

$$dX(t) = a(t, X(t)) dt + H(t) dW(t), \quad (26)$$

с детерминированным начальным условием $X(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$, где $W(t)$ — теперь уже вектор, составленный из n независимых стандартных винеровских процессов, стартовых из нуля.

Предполагается, что коэффициенты уравнения (26) удовлетворяют следующим условиям:

$$\int_{t_0}^T \|H(s)\|_F^2 ds < \infty, \quad \|a(t, x)\| \leq C(1 + \|x\|), \quad (27)$$

где $x \in \mathbb{R}^n$, а $C > 0$.

Сформулируем окончательно основное утверждение настоящего раздела.

Теорема 2. Пусть случайный векторный процесс $X(t)$, определенный при $t \in [t_0, T]$, есть решение векторного стохастического дифференциального уравнения (26) с детерминированным начальным условием $X(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$. Тогда характеристическая функция

$$E(z; t) = \mathbb{E}[e^{iz^T X(t)}]$$

является целой функцией векторного аргумента $z \in \mathbb{C}^n$.

Доказательство. Заметим вначале, что

$$G(t) = \int_{t_0}^t H(s) dW(s)$$

есть центрированный многомерный гауссовский процесс с корреляционной матрицей

$$K(t) = \int_{t_0}^t H(s) H^T(s) ds.$$

С помощью обобщенного неравенства Минковского легко получить оценку для ее нормы Фробениуса:

$$\|K(t)\|_F \leq \int_{t_0}^t \|H(s) H^T(s)\|_F ds \leq \int_{t_0}^t \|H(s)\|_F^2 ds.$$

Далее повторяем все выкладки из доказательств теоремы 1 и леммы 4 с учетом замены модуля на норму вектора и пользуемся леммами 6 и 5. Таким образом мы приходим к необходимому утверждению. $\square$

Замечание. Обратим внимание, что в условии теоремы 2 матрица диффузии может вырождаться, что довольно часто возникает в приложениях.

Заключение

Доказанное в работе свойство аналитичности характеристической функции процесса, заданного системой стохастических дифференциальных уравнений, часто используется на практике (см. статью [1] и другие работы того же автора), однако строгое обоснование того, что оно имеет место, до сих пор было известно только для довольно частных случаев систем.

Приведенный в настоящей статье метод доказательства аналитичности характеристической функции также допускает обобщение и на более широкий класс уравнений. В частности, при внимательном анализе видно, что по существу в доказательствах использовалась аналитичность в комплексном пространстве $\mathbb{C}^n$ характеристической функции процесса — решения системы уравнений (26) при $a(x; t) = 0$.

В нашем рассмотрении такой процесс был гауссовским, но аналогичные результаты можно получить и для более общих стохастических дифференциальных уравнений где, например, роль процесса с независимыми приращениями выполняет центрированный компенсированный пуассоновский процесс, характеристическая функция которого — также целая.

Благодарности

Автор считает своим долгом поблагодарить кандидата физико-математических наук, доцента кафедры прикладной математики СПбПУ О.И. Зайца, а также доктора

физико-математических наук, профессора кафедры теории вероятностей и математической статистики СПбГУ М.А. Лифшица за внимательное изучение текста статьи и ряд ценных замечаний, которые способствовали ее улучшению.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Зяц О.И.** Применение уравнения Пугачева — Свешникова к исследованию кусочно-линейных стохастических систем, линейных в полупространствах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 4-1 (182). С. 128–142.
- [2] **Пугачёв В.С., Синицын И.Н.** Стохастические дифференциальные системы. Анализ и фильтрация. М.: Наука, 1990. 632 с.
- [3] **Шабат Б.В.** Введение в комплексный анализ. М.: Наука, 1969. 576 с.
- [4] **Kawata T.** Fourier analysis in probability theory. Academic Press, 1972. 668 p.
- [5] **Рамачандран Б.** Теория характеристических функций. М.: Наука, 1975. 224 с.
- [6] **Лукач Е.** Характеристические функции. М.: Наука, 1979. 264 с.
- [7] **Линник Ю.В., Островский И.В.** Разложение случайных величин и векторов. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Наука, 1972. 480 с.
- [8] **Manohar C.** Methods of nonlinear random vibration analysis // Sadhana. 1995. Vol. 20. No. 2. Pp. 345–371.
- [9] **Ibrahim R.** Recent results in random vibrations of nonlinear mechanical systems // ASME. J. Mech. Des. 1995. Vol. 117(B). No. 2. Pp. 222–233.
- [10] **Зяц О.И.** Об аналитических свойствах решения уравнения В.С. Пугачёва в форме А.А. Свешникова. Деп. в ВИНТИ 30.06.1987, №7461-В87. С. 1–16. 1987.
- [11] **Гихман И.И., Скороход А.В.** Введение в теорию случайных процессов. 2-е изд. М.: Наука, 1977. 568 с.
- [12] **Гихман И.И., Скороход А.В.** Стохастические дифференциальные уравнения. Киев: Наукова Думка, 1968. 356 с.
- [13] **Колмогоров А.Н., Фомин С.В.** Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972. 496 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

БЕРЕЗИН Сергей Васильевич — старший научный сотрудник лаборатории виртуально-имитационного моделирования института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

Berezin S.V. ON ANALYTIC CHARACTERISTIC FUNCTIONS AND PROCESSES GOVERNED BY SDEs.

We study analyticity of the characteristic function of a process defined by means of SDEs. Namely, starting with the simple case of a scalar Ito SDE we show that the corresponding characteristic function is entire. The proof is based on the Gröenwall's inequality technique and the classic analyticity criterion in terms of moments. Further, we extend this criterion and derive a handy sufficient condition of analyticity in the multidimensional case. This condition is used to prove the corresponding general result of analyticity. We assume that the drift vector obeys the linear growth condition, and the diffusion matrix is time-only-dependent, but possibly degenerate. The approach used in the article can be extended to more general types of SDEs.

STOCHASTIC DIFFERENTIAL EQUATION, COMPLEX ANALYTIC FUNCTION, HOLOMORPHIC FUNCTION, MULTIVARIATE HOLOMORPHIC FUNCTION.

REFERENCES

- [1] **O.I. Zayats**, Analysis of piecewise linear stochastic systems in half-spaces by means of the Pugachev–Sveshnikov equation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 4(182)-1 (2013) 129–142.
- [2] **V.S. Pugachev, I.N. Sinitsyn**, Stochastic



differential systems. Analysis and filtering, Chechester, 1987.

[3] **B.V. Shabat**, Vvedeniye v kompleksnyy analiz [Introduction to complex analysis] (in Russian). M.: Nauka, 1969.

[4] **T. Kawata**, Fourier analysis in probability theory. Academic Press, 1972.

[5] **B. Ramachandran**, Teoriya kharakteristicheskikh funktsiy [The characteristic functions theory] (in Russian). M.: Nauka, 1975.

[6] **E. Lukach**, Kharakteristicheskiye funktsii [Characteristic functions] (in Russian). M.: Nauka, 1979.

[7] **Yu.V. Linnik, I.V. Ostrovskiy**, Razlozheniya sluchaynykh velichin i vektorov [Decomposition of random variables and vectors] (in Russian). Teoriya veroyatnostey i matematicheskaya statistika. M.: Nauka, 1972.

[8] **C. Manohar**, Methods of nonlinear random vibration analysis, Sadhana. 20(2) (1995) 345–371.

[9] **R. Ibrahim**, Recent results in random vibrations of nonlinear mechanical systems. ASME, J. Mech. Des. 117(B) (2) (1995) 222–233.

[10] **O.I. Zayats**, Ob analiticheskikh svoystvakh resheniya uravneniya V.S. Pugacheva v forme A.A. Sveshnikova [On analytic properties of the Pugachev–Sveshnikov equation solution] (in Russian). Dep. v VINITI 30.06.1987, №7461-B87. Pp. 1–16. 1987.

[11] **I.I. Gikhman, A.V. Skorokhod**, Vvedeniye v teoriyu sluchaynykh protsessov [Introduction to stochastic processes] (in Russian). 2th izd. M.: Nauka, 1977.

[12] **I.I. Gikhman, A.V. Skorokhod**, Stokhasticheskiye differentsialnyye uravneniya [Stochastic differential equations] (in Russian). Kiyev: Naukova Dumka, 1968.

[13] **A.N. Kolmogorov, S.V. Fomin**, Elementy teorii funktsiy i funktsionalnogo analiza [Elements of the functions theory and of the functional analysis] (in Russian). M.: Nauka, 1972.

THE AUTHOR

BEREZIN Sergey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

servberezin@yandex.ru

DOI: 10.5862/JPM.242.13

УДК 532.5.013.4.536.25+519.6

А.Н. Шарифулин¹, А.Н. Полудницин²

¹ Пермский национальный исследовательский политехнический университет

² Пермский государственный национальный исследовательский университет

ЧИСЛЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ СУЩЕСТВОВАНИЯ АНОМАЛЬНОГО КОНВЕКТИВНОГО ТЕЧЕНИЯ В НАКЛОНЯЕМОМ ПРЯМОУГОЛЬНОМ ЦИЛИНДРЕ

Статья посвящена изучению бифуркаций стационарных режимов конвекции в замкнутом, подогреваемом снизу и наклоняемом цилиндре квадратного сечения, заполненном воздухом для случаев теплоизолированных и идеально теплопроводящих боковых стенок. Методом сеток получены поля температуры и скорости для отклонения от горизонтального положения до тридцати градусов в интервале чисел Рэлея до 20-кратного превышения его критического значения. Установлено, что предельный угол существования аномального течения в полости с теплоизолированными стенками примерно в три раза превышает таковой для случая теплопроводящих стенок. В случае теплопроводящих стенок максимальный угол существования аномального течения достигает 7,7° при превышении критического значения числа Рэлея в 3,3 раза.

ТЕПЛОВАЯ КОНВЕКЦИЯ, НАКЛОН ПОЛОСТИ, АНОМАЛЬНОЕ ТЕЧЕНИЕ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Введение

Тепловая конвекция воздуха в замкнутых наклоняемых прямоугольных полостях представляют интерес в связи с тем, что подобные емкости являются элементами большого количества технических устройств. Их ориентация может плавно или ступенчато меняться, при этом в газе, заполняющем объем, конвективные течения могут претерпевать скачкообразные изменения [1].

Для моделирования влияния наклона на режимы конвекции в замкнутой прямоугольной полости часто используется куб. Конвективные течения воздуха в кубе при малых и умеренных числах Рэлея (Ra) имеют форму одноваловых течений, т. е. вихрей с горизонтальной осью. Частицы жидкости в них движутся по круговым траекториям, в плоскостях, перпендикулярных оси вихря. Такое течение вблизи

центрального вертикального сечения куба можно считать квазидвумерным [2]. Это обстоятельство позволяет надеяться, что численное исследование плоских течений воздуха, т. е. бесконечно вытянутых горизонтальных вихрей, в абстрактных бесконечных цилиндрах поможет в понимании наблюдаемых закономерностей бифуркаций стационарных режимов конвекции в лабораторных экспериментах с кубической полостью. Первое численное исследование влияния наклона (поворота вокруг оси бесконечного цилиндра квадратного сечения) на перенос тепла между противоположными изотермическими гранями (две других грани полагались теплоизолированными), проведено В.И. Полежаевым [3]. Показано, что максимум теплового потока достигается в промежуточной области угла наклона — между подогревом снизу и сбоку.



Первые сведения о бифуркации конвективного течения воздуха в кубической полости, подогреваемой снизу, вызванной наклоном, были опубликованы в экспериментальной работе [4], где рассматривались лишь малые углы наклона, от положения, соответствующего подогреву только строго снизу.

Поясним, что наклон при малых значениях числа Ra приводит к формированию вихря, с направлением циркуляции, совпадающим с направлением угла наклона полости (если рассматривать угол наклона как поворот полости от нулевого значения угла). Это вихрь с нормальной циркуляцией, и если полость привести в горизонтальное положение, он прекратит свое вращение. Однако при числах Рэлея, превышающих их критическое значение (Ra_c), возможно, наряду с таким нормальным вихрем, и существование вихря с обратным направлением циркуляции. Такие течения было предложено называть аномальными [5]. В таком аномальном вихре направления циркуляции воздуха и угла наклона полости противоположны, следовательно, теплый воздух движется вдоль наклонной поверхности вниз. Аномальные вихри существуют в некотором диапазоне углов наклона, величина которого зависит от интенсивности конвективного течения. Экспериментально границы существования аномального конвективного течения в кубе были определены в работе [6].

Цель настоящей работы — построить бифуркационную кривую, отражающую зависимость величины критического угла наклона для существования аномального вихря от интенсивности конвективного течения.

В качестве основы построения необходимо использовать численное решение полных уравнений тепловой конвекции воздуха (в приближении Буссинеска) для различных углов наклона квадратной полости и различных значений надкритичности.

Постановка задачи

Пусть жидкость заполняет полость, имеющую форму бесконечного горизонтально-

го цилиндра квадратного сечения (рис. 1). Введем декартову систему координат (x, y, z) , ось y которой совпадает с ребром цилиндра и направлена от нас. Единичный вектор $\mathbf{n}$ расположен в плоскости xz , указывает направление вверх и связан с ускорением свободного падения соотношением $\mathbf{g} = -g\mathbf{n}$. Угол наклона квадратного цилиндра α , отсчитывается по часовой стрелке от оси z до $\mathbf{n}$. Диапазон изменения угла α в расчетах составляет $-30^\circ \leq \alpha \leq 30^\circ$, причем при $\alpha = 0^\circ$ сторона цилиндра, совпадающая с осью x , горизонтальна и реализуется условие подогрева строго снизу. На рис. 1 в сечении квадрата, среднем по высоте, отмечены точки A и B , между которыми рассчитывается перепад температуры для сопоставления расчетов с измерениями термопарой в лабораторном эксперименте [6].

Стенки полости предполагаются твердыми. Верхняя и нижняя плоскости $z = 0, d$ — изотермические и поддерживаются при постоянном перепаде температуры Θ , причем плоскость $z = 0$ более нагрета. В расчетах используются две модели полости, в которых боковые стенки $x = 0, d$ предполагаются либо теплопроводящими (и на них задается линейное распределение температуры $T = \Theta(1 - z/d)$), либо теплоизолированными (тогда равенство $\partial T/\partial x = 0$

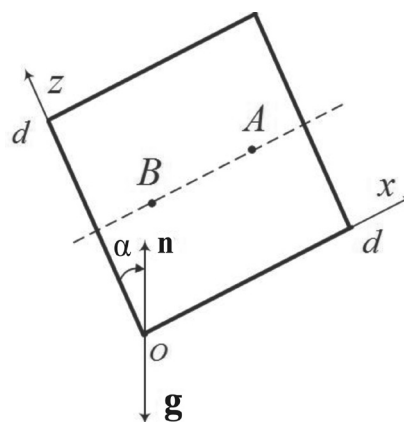


Рис. 1. Геометрия задачи о свободной тепловой конвекции в горизонтальном цилиндре квадратного сечения.

В среднем сечении, отмеченном пунктиром, расположены точки A и B , между которыми рассчитывается перепад температуры dT . Эти точки находятся на расстоянии $d/4$ от стенок (см. пояснения в тексте)

отмечает отсутствие потока тепла через поверхность). Коэффициент линейного расширения жидкости β , кинематическая вязкость ν и температуропроводность χ постоянны.

Предполагается, что жидкость несжимаемая и справедливо приближение Буссинеска. Скорость $\mathbf{v}$, давление p и температура T определяются уравнениями непрерывности, Навье – Стокса и баланса тепла. Обозначим величины расстояния, температуры, функции тока и времени соответственно d , Θ , φ , t , коэффициент кинематической вязкости ν и d^2/ν . Будем искать плоские решения задачи. В этом случае векторные поля завихренности и функции тока будут иметь отличными от нуля только y -компоненты:

$$\varphi = (0, \varphi, 0), \psi = (0, \psi, 0). \quad (1)$$

Тогда уравнения тепловой конвекции в безразмерной форме запишутся в следующем виде [7, 8]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \text{Gr} \left(\frac{\partial T}{\partial z} \sin \alpha - \frac{\partial T}{\partial x} \cos \alpha \right); \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \varphi = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right). \quad (4)$$

Безразмерные критерии подобия, а именно число Грасгофа Gr , число Прандтля Pr , число Релея Ra имеют вид:

$$\text{Gr} = \frac{g\beta\Theta d^3}{\nu^2}, \text{Pr} = \frac{\nu}{\chi}, \text{Ra} = \text{Gr} \cdot \text{Pr}. \quad (5)$$

Скорость течения связана с полем функции тока $\psi(x, z)$:

$$\mathbf{v} = \left(-\frac{\partial \psi}{\partial z}, 0, \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (6)$$

Граничные условия для температуры на нижней и верхней изотермических стенках запишутся в следующем виде:

$$\text{при } z = 0, 1 \quad T = 1, 0. \quad (7)$$

Граничные условия для температуры в случае проводящих боковых стенок с ли-

нейным распределением температуры имели вид:

$$\text{при } x = 0, 1 \quad T = 1 - z. \quad (8)$$

В случае теплоизолированных боковых стенок задавалось условие отсутствия теплового потока:

$$\text{при } x = 0, 1 \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (9)$$

Граничные условия для функции тока были одинаковыми в обоих случаях. Стенки полости полагались непроницаемыми и твердыми. Из условия непротекания через них и прилипания получаем граничные условия для функций тока:

$$\text{при } z = 0, 1 \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0; \quad (10)$$

$$\text{при } x = 0, 1 \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0. \quad (11)$$

Методика решения задачи и расчетов

Решение задачи, заданной уравнениями и условиями (2) – (11), мы находили конечно-разностным методом. Число Прандтля полагалось равным $\text{Pr} = 0,7$. Расчеты проводились на равномерной квадратной сетке:

$$x_i = i \cdot h, \quad z_k = k \cdot h,$$

$$i = 0, 1, \dots, N; \quad k = 0, 1, \dots, N;$$

где $h = 1/N$ – шаг сетки. Все вычисления проведены для $N = 40$.

Использовалась явная схема с центральными разностями для пространственных производных [7]. Для аппроксимации завихренности на границах использовалась формула Тома. Величина шага по времени Δt контролировалась и выбиралась достаточно малой, для того чтобы выполнялось условие Куранта.

Опишем процедуру получения решения для заданных значений числа Грасгофа Gr и угла наклона α .

Шаг 1. Задаем начальные условия для температуры, функции тока и завихренности во всех узлах сетки на первом временном слое, т. е. для момента времени $t = 0$:

$$T_{i,k}^0 = 1 - z_k,$$



$$\begin{aligned}\psi_{i,k}^0 &= 0, \\ \varphi_{i,k}^0 &= 0.\end{aligned}$$

Задаем значение номера временного слоя $n = 0$.

Шаг 2. Считая T^n и φ^n известными, из конечно-разностных аналогов уравнений (2) и (4) находим значения этих функций на временном слое $n + 1$ во внутренних узлах сетки. Для случая теплоизолированных стенок граничное значение температуры заменяем значением температуры в прилегающем внутреннем узле.

Шаг 3. Решая уравнение Пуассона (3) по вычисленным значениям φ^{n+1} , получаем итерационным методом ψ^{n+1} во внутренних узлах сетки.

Шаг 4. Используя новые значения функции тока в приграничных узлах, определяем по формулам Тома граничные значения завихренности на новом шаге по времени.

Шаги 2 – 4 повторяются до получения установившихся значений T и ψ . Значения указанных сеточных функций вместе с физическими и численными параметрами для заданного значения числа Грасгофа Gr и угла наклона α сохраняются во внешней памяти. При переходе к следующему значению угла наклона α шаг 1 опускался, и в качестве начального состояния использовалось ранее полученное состояние.

Целью расчетов было получение бифуркационных кривых $dT(\alpha)$ и $\psi_c(\alpha)$. Здесь ψ_c – максимальное значение функции тока, dT – перепад температуры между точками A и B (см. рис. 1). В расчетах угол наклона последовательно с переменным шагом $\Delta\alpha = 1 - 10^\circ$ изменялся от начального значения $\alpha = -30^\circ$ до конечного $\alpha = +30^\circ$ и обратно.

Результаты расчетов и их обсуждение

До выполнения основных расчетов, в соответствии с приведенной выше методикой, проводилась проверка используемой модели и разностного метода. Для этого рассчитывали критические числа Грасгофа при подогреве строго снизу ($\alpha = 0^\circ$) и затем сравнивали их с общепринятыми значениями, полученными методами линейной теории устойчивости. Основу способа полу-

чения критического числа Грасгофа составляла экстраполяция линейной зависимости квадрата функции тока от чисел Грасгофа в сторону меньших значений. Так были получены критические числа Грасгофа для теплопроводящих стенок ($Gr_c = 7156$) и теплоизолированных ($Gr_c = 3643$).

Известно, что для случая теплопроводящих боковых стенок критическое число Релея составляет $Ra_c = 5012$ [9], а соответствующее ему критическое число Грасгофа при $Pr = 0,7$ равно 7160. Для полости с теплоизолированными стенками критическое число Грасгофа равно 3693 [10, 11]. Таким образом, в результате проверочных вычислений выяснилось, что полученные в расчетах критические числа Грасгофа отличаются от определенных методами линейной теории устойчивости менее чем на 1,5 %, что свидетельствует об удовлетворительной точности использованного численного метода.

Поскольку разным граничным условиям соответствуют различные критические числа Грасгофа, использовали понятие надкритичности; оно выражалось отношением $r = Gr / Gr_c$.

Представляло несомненный интерес изучить поведение валового конвективного течения в нормальном и аномальном режимах, которые определяются углом наклона полости. Течение, сохраняющее свою циркуляцию при переходе угла наклона полости через нулевое значение, принято называть аномальным [5]. Интенсивность и направление циркуляции плоского валового течения в стационарном режиме однозначно описывается экстремальным значением функции тока $\psi_c(Gr, \alpha)$ в центре полости, т. е. фазовое пространство системы одномерно. Возникновение тепловой конвекции при нулевом угле $\alpha = 0$ происходит мягким образом в результате вилочной бифуркации на плоскости $\psi_c(Gr)$ при критическом числе Грасгофа Gr_c . Однако даже незначительный наклон (порядка 0,01 градуса [12]) приводит к появлению конвекции при любых, сколь угодно малых значениях числа Грасгофа.

Расчеты показали, что валовое конвективное течение, возникшее при угле на-

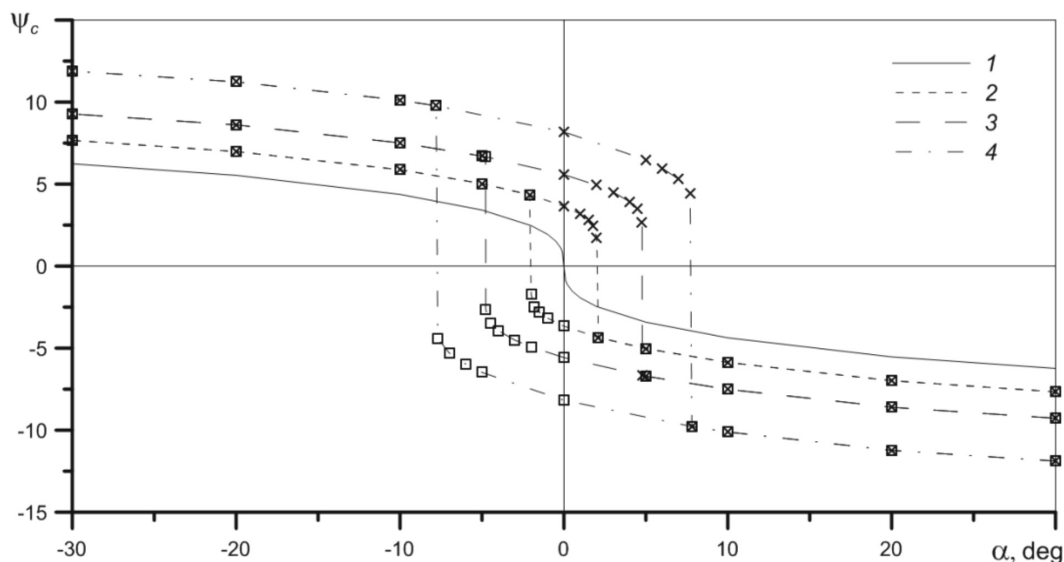


Рис. 2. Зависимости функции тока ψ_c в центре полости от угла ее наклона α для случая теплопроводящих стенок при различных значениях надкритичности r : 1,0 (кривая 1), 1,3 (2), 1,7 (3), 2,5 (4). Крестиками (квадратиками) отмечены диаграммы, полученные при изменении угла α от -30° до $+30^\circ$ (от $+30^\circ$ до -30°) (см. пояснения в тексте)

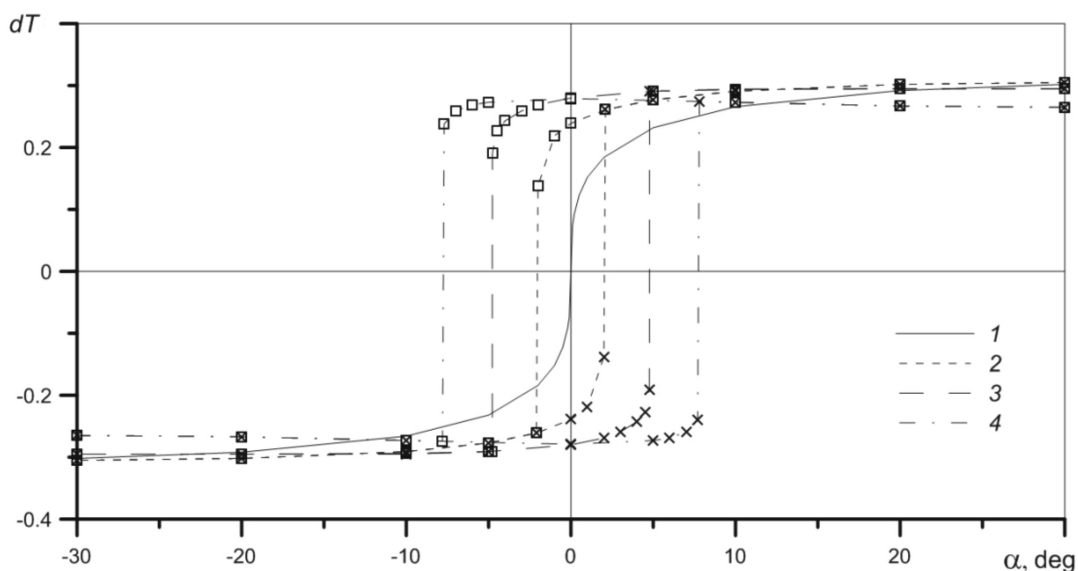


Рис. 3. Зависимости перепада температуры dT между точками A и B от угла наклона полости α для случая теплопроводящих стенок при различных значениях надкритичности r (символы и номера кривых те же, что на рис. 2)

клона полости, отличным от нуля, и фиксированном числе Грасгофа, меньшем или равном критическому ($r \leq 1$), плавно меняет свое направление на обратное при переходе угла наклона полости α через нулевое значение (сплошная линия на рис. 2). Если же число Грасгофа превышает критическое

значение ($r > 1$), валовое конвективное течение сохраняет направление движения при переходе величины угла наклона полости через нулевое значение, становясь при этом аномальным. Это течение сохраняется до некоторого критического угла α_c , после достижения которого оно резко меняет свое

направление на обратное и превращается в нормальное течение. Описанное поведение иллюстрируют бифуркационные диаграммы $\psi_c(\alpha)$, полученные расчетами для четырех значений r (см. рис. 2).

Кривые 1 – 4 на рис. 2 соответствует различным значениям надкритичности. Символы в виде крестиков соответствуют последовательному изменению наклона полости от отрицательных углов к положительным, а в виде квадратиков – от положительных к отрицательным. Бифуркационные диаграммы указывают на существование аномального течения, которое,

однако, переходит в нормальное при достижении углом наклона критического значения α_c . С увеличением значения надкритичности область существования аномального течения увеличивается. Как видно из рис. 2, для каждого α из интервала $-\alpha_c < \alpha < \alpha_c$ существует два устойчивых состояния, которые различаются направлением циркуляции, т. е. знаком ψ_c .

Экспериментальные исследования конвекции в полостях с теплопроводящими стенками включают, как правило, измерения с помощью термопар [1, 4, 6]. Данные от дифференциальных термопар,

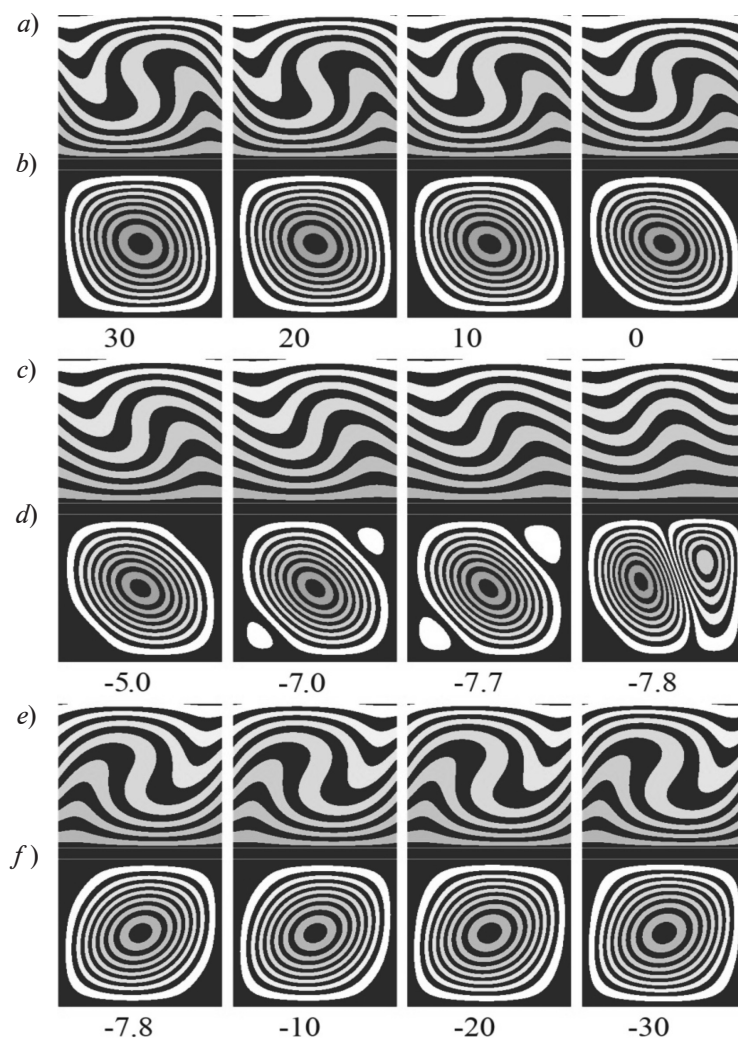


Рис. 4. Эволюция поля температуры (a, c, e) и структуры течения (b, d, f) для случая теплопроводящих стенок при изменении угла наклона α от $+30^\circ$ до -30° ; $r = 2,5$. Цифры означают углы наклона α . Границы полос семи изотерм на рис. (a, c, e) соответствуют четырнадцати значениям температуры: $T_j = (2j - 1)/28$, а границы линий тока (b, d, f) соответствуют $|\psi_j| = \psi_c \cdot (2j - 1)/28$, где $j = 1, 2, \dots, 14$

установленных в определенных местах полости, позволяют судить о структуре конвективного течения. В упомянутых работах спайи термопар располагались в точках *A* и *B* (см. рис. 1). Значения безразмерной разности температур dT с такой виртуальной термопары представлены на рис. 3 в виде зависимостей от угла наклона полости для четырех значений надкритичности r . Видно, что скачкообразные изменения dT и ψ_c для одинаковых значений надкритичности r происходят при одних и тех же углах наклона (см. рис. 2).

Эволюция полей температуры и линий тока при изменении угла наклона полости α от $+30^\circ$ до -30° для $r = 2,5$ представлена на рис. 4. В диапазоне изменений угла α от $+30^\circ$ до 0° , когда течение является нормальным, происходит плавное уменьшение интенсивности течения (см. кривую 4 на рис. 2). После перехода через нулевое значение угла α продолжается уменьшение интенсивности течения с сохранением его структуры. При приближении угла к критическому значению $\alpha_c = -7,8^\circ$ ускоряется падение интенсивности центрального вихря ψ_c и увеличиваются угловые вихри с закруткой, противоположной основному вихрю.

Процесс перехода осуществляется следующим образом. Один из угловых вихрей обгоняет в росте второй угловой вихрь, который затем исчезает. Далее растущий угловой вихрь, который имеет нормальное направление вращения при установленном угле наклона, вытесняет аномальный вихрь. Изображения функции тока и изотерм для критического угла наклона $-7,8^\circ$ представлены для двух моментов времени. Первый соответствует моменту смены структуры течения, а второй — завершению процесса перехода. Следующие изображения относятся к эволюции нормального вихря до угла наклона полости $\alpha_c = -30^\circ$. Изменение угла наклона в обратном направлении приводит к получению критического угла в диапазоне положительных углов со значением, равным $\alpha_c = +7,8^\circ$.

Результаты расчетов, проведенных с двумя случаями граничных условий для температуры, представлены в виде бифур-

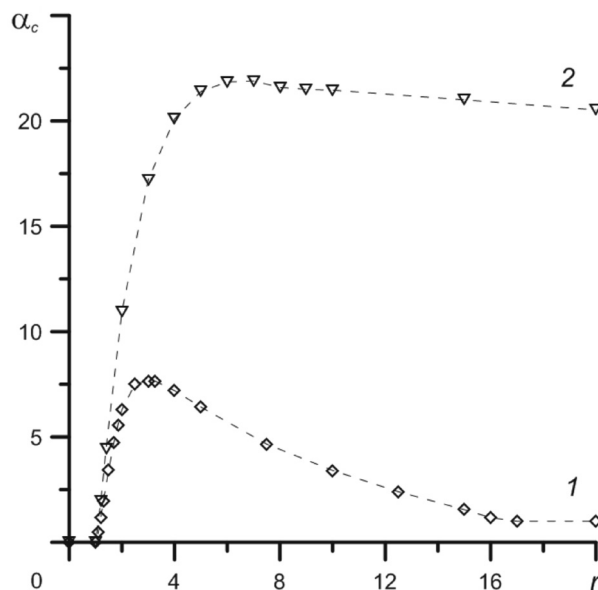


Рис. 5. Зависимости критического угла от значений надкритичности для случая теплопроводящих стенок (кривая 1) и теплоизолированных (кривая 2)

кационных кривых (рис. 5). Данная кривая для случая теплопроводящих стенок (кривая 1) имеет ярко выраженный максимум $\alpha_c = 7,7^\circ$ при $r = 3,3$. Эти значения близки к полученным при расчетах бифуркационной кривой в цилиндре кругового сечения с теплопроводящими стенками [13, 14], но все же отличаются от них. Бифуркационная кривая для теплоизолированных стенок соответствует результатам работ [15, 16]. Расчет в работе [15] проводился методом Петрова — Галёркина, в котором использовалось до семидесяти базисных функций. В качестве таких функций применялись полиномы Чебышева. Отдельные точки бифуркационных кривых для трех чисел Прандтля получены в статье [16] и для случая воздуха согласуются с результатами работы [15]. Наши расчеты на сравнительно грубой сетке позволили получить хорошее согласие с результатами, представленными в работе [15], что позволяет судить о достоверности полученных результатов.

Заключение

В настоящей работе проведено численное исследование аномального течения в



цилиндре квадратного сечения, и в результате получены бифуркационные кривые для случаев теплоизолированных и теплопроводящих стенок.

Установлено, что предельный угол существования аномального течения в случае теплоизолированных стенок примерно в три раза превышает таковой для теплопроводящих стенок. Таким образом, в случае теплопроводящих стенок переход от аномального течения к нормальному происходит при меньшем угле наклона полости и меньшем значении надкритичности.

Бифуркационные диаграммы функции тока и перепада температуры от угла наклона полости показывают одинаковые значения критического угла наклона, при котором происходит смена направления

конвективного валового течения для одного и того же значения надкритичности. Это дает основания для использования результатов измерений термопарами в экспериментах по изучению аномального конвективного валового течения при определении критического угла наклона полости (угол, при котором происходит смена направления течения).

Из расчетов следует, что изменение направления вращения происходит в результате интенсивного роста одного из диагональных нормальных вихрей, который подавляет и вытесняет аномальный конвективный вал.

Работа выполнена при финансовой поддержке внутриуниверситетского гранта Пермского национального исследовательского политехнического университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Шарифулин А.Н., Полудницин А.Н., Кравчук А.С. Лабораторное моделирование нелокального возникновения тропического циклона // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. № 6. С. 1269–1273.
- [2] Mizushima J., Matsuda O. Onset of 3D thermal convection in a cubic cavity // Journal of the Physical Society of Japan. 1997. Vol. 66. No. 8. Pp. 2337–2341.
- [3] Полежаев В.И. Течение и теплообмен при естественной конвекции газа в замкнутой области после потери устойчивости гидростатического равновесия // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1968. № 5. С. 124–129.
- [4] Зимин В.Д., Кетов А.И. Надкритические конвективные движения в кубической полости // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1974. № 5. С. 110–114.
- [5] Cliffe K.A., Winters K.H. A numerical study of the cusp catastrophe for Benard convection in tilted cavities // Journal of Computational Physics. 1984. Vol. 54. No. 3. Pp. 531–534.
- [6] Шарифулин А.Н., Полудницин А.Н. Экспериментальное определение пределов существования аномального конвективного течения в наклоняемом кубе // Прикладная механика и техническая физика. 2014. Т. 55. № 3 (325). С. 103–112.
- [7] Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. Иркутск: Изд-во Иркутского ун-та, 1990. 223 с.
- [8] Сагитов Р.В., Шарифулин А.Н. Устойчивость стационарной тепловой конвекции в наклоняемой прямоугольной полости в мало-
- модовом приближении // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15. № 2. С. 247–256.
- [9] Mizushima J., Hara Y. Routes to unicellular convection in a tilted rectangular cavity // J. Physical Society of Japan. 2000. Vol. 69. No. 8. Pp. 2371–2374.
- [10] Lappa M. Thermal convection: patterns, evolution and stability. Chichester: Wiley, 2010. 670 p.
- [11] Mizushima J. Onset of the thermal convection in a finite two-dimensional box // J. Physical Society of Japan. 1995. Vol. 64. No. 7. Pp. 2420–2432.
- [12] Adachi T. Stability of natural convection in an inclined square duct with perfectly conducting side walls // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2006. Vol. 49. No. 13. Pp. 2372–2380.
- [13] Никитин А.И., Шарифулин А.Н. О бифуркациях стационарных режимов тепловой конвекции в замкнутой полости, порождаемых особенностью типа сборки Уитни // Процессы тепло- и массопереноса вязкой жидкости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1986. С. 32–39.
- [14] Фоминский Д.А., Шарифулин А.Н. Численное определение границ существования аномального конвективного течения в наклоняемом цилиндре // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2 (170). С. 191–196.
- [15] Шарифулин А.Н., Суслов С.А. Конвективные бифуркации несжимаемой жидкости в наклоняемой полости квадратного сечения // Матер. 10-й Междунар. конф. «Высокопро-

изводительные параллельные вычисления на кластерных системах» (НРС-2010). Пермь, 1–3 нояб. 2010 г. Пермь: Перм. гос. техн. ун-т, 2010. Т. 2. С. 315–319.

[16] Polezhaev V.I., Myakshina M.N., Nikitin

S.A. Heat transfer due to buoyancy-driven convective interaction in enclosures: Fundamentals and applications // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2012. Vol. 55. No. 1. Pp. 156–165.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ШАРИФУЛИН Альберт Нургалиевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной физики Пермского национального исследовательского политехнического университета. 614990, Российская Федерация, г. Пермь, Комсомольский пр., 29
sharifulin@bk.ru

ПОЛУДНИЦИН Анатолий Николаевич — старший преподаватель кафедры общей физики Пермского государственного национального исследовательского университета. 614990, Российская Федерация, г. Пермь, ул. Букирева, 15
panam.48@mail.ru

Sharifulin A.N., Poludnitsin A.N. THE BORDERS OF EXISTENCE OF ANOMALOUS CONVECTION FLOW IN THE INCLINED SQUARE CYLINDER: NUMERICAL DETERMINATION.

The article is devoted to the study of bifurcations of stationary convection regimes in a closed, heated from below and tilted square cylinder filled with air for cases of heat-insulated and perfectly heat-conducting sidewalls. The temperature and velocity fields were obtained using grid method for inclinations from a horizontal position up to 30 degrees in the range of Rayleigh numbers up to 20-fold excess of its critical value. The limit angle of anomalous-flow existence in the cylinder with the heat-insulated walls was established to be about 3 times greater than that in the cylinder with the heat-conducting ones. In the case of the heat-conducting walls the maximum angle of the anomalous-flow existence reached 7.7 degrees at a 3.3-fold excess of the critical value of Rayleigh number.

THERMAL CONVECTION, INCLINATION OF THE CAVITY, ANOMALOUS FLOW, NUMERICAL SIMULATION.

REFERENCES

- [1] A.N. Sharifulin, A.N. Poludnitsin, A.S. Kravchuk, Laboratornoye modelirovaniye nelokalnogo vozniknoveniya tropicheskogo tsyklona [Laboratory-scale simulation of nonlocal generation of a tropical cyclone], ZhETF. 134 (6) (2008) 1269–1273.
- [2] J. Mizushima, O. Matsuda, Onset of 3D thermal convection in a cubic cavity, J. Phys. Soc. Japan. 66 (8) (1997) 2337–2341.
- [3] V.I. Polezhaev, Tcheniye i teploobmen pri yestestvennoy konveksii gaza v zamknutoy oblasti posle poteri ustoychivosti gidrostaticheskogo ravnovesiya [Flow and heat transfer with natural convection of a gas in a closed region after loss of hydrostatic equilibrium stability], Izv. AS USSR. No. 5 (1968) 124–129.
- [4] V.D. Zimin, A.I. Ketov, Nadkriticheskiye konvektivnyye dvizheniya v kubicheskoy polosti [Supercritical convective motions in a cubic cavity], Izv. AS USSR, Mechanics of Fluid and Gases. No. 5 (1974) 110–114.
- [5] K.A. Cliffe, K.H. Winters, A numerical study of the cusp catastrophe for Benard convection in tilted cavities, J. Comp. Phys. 54 (3) (1984) 531–534.
- [6] A.N. Sharifulin, A.N. Poludnitsin, Eksperimentalnoye opredeleniye predelov sushchestvovaniya anomalnogo konvektivnogo tcheniya v naklonyayemom kube [Experimental determination of limits of existence of anomalous convective currents in tilted cube], J. Appl. Mech. and Techn. Phys. 55 (3(325)) (2014) 103–112.
- [7] E.L. Tarunin, Vychislitelnyy eksperiment v zadachakh svobodnoy konveksii [Numerical experiment in free convection problems], Irkutsk, Izd-vo Irkutskogo un-ta, 1990.
- [8] R.V. Sagitov, A.N. Sharifulin, Ustoychivost statsionarnoy teplovoy konveksii v naklonyayemoy pryamougolnoy polosti v malomodovom priblizhenii [Stability of steady state thermal convection in a titled rectangular cavity in low-mode approach], Teplofizika i aeromekhanika. 15(2) (2008) 247–256.
- [9] J. Mizushima, Y. Hara, Routes to unicellular convection in a tilted rectangular cavity, J. Phys. Soc. Japan. 69 (8) (2000) 2371–2374.



- [10] **M. Lappa**, Thermal convection: patterns, evolution and stability, Chichester, Wiley, 2010.
- [11] **J. Mizushima**, Onset of the thermal convection in a finite two-dimensional box, *J. Phys. Soc. Japan*. 64 (7) (1995) 2420–2432.
- [12] **T. Adachi**, Stability of natural convection in an inclined square duct with perfectly conducting side walls, *Intern. J. of Heat and Mass Transfer*. 49(13) (2006) 2372–2380.
- [13] **A.I. Nikitin, A.N. Sharifulin**, O bifurkatsiyakh statsionarnykh rezhimov teplovoy konveksii v zamknutoy polosti, porozhdayemykh osobennostyu tipa sborki Uitni [Concerning the bifurcations of steady-state thermal convection regimes in a closed cavity due to the Whitney folding-type singularity], In: *Protsessy teplo i massoperenosa vyazkoy zhidkosti*, Sverdlovsk, UNTs AS USSR, 1986, Pp. 32–39.
- [14] **D.A. Fominskiy, A.N. Sharifulin**, Numerical determination of the borders for existence of anomalous convective flow in a cylinder tilted, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. No. 2(170) (2013) 191–196.
- [15] **A.N. Sharifulin, S.A. Suslov**, Konvektivnyye bifurkatsii neszhimayemoy zhidkosti v naklonyayemoy polosti kvadratnogo secheniya [Convective bifurcation of an incompressible fluid in a tilted square cavity], *Mater. 10th Intern. conf. “Vysokoproizvoditelnyye parallelnyye vychisleniya na klasternykh sistemakh” (NRS-2010)*, Perm, Nov. 1–3, 2010. Perm: Perm. Gos. Tekhn. Un-t. 2 (2010) 315–319.
- [16] **V.I. Polezhaev, M.N. Myakshina, S.A. Nikitin**, Heat transfer due to buoyancy-driven convective interaction in enclosures: Fundamentals and applications, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 55(1) (2012) 156–165.

THE AUTHORS

SHARIFULIN Albert N.

Perm National Research Polytechnic University

29 Komsomolsky Ave., Perm, 614990, Russian Federation

sharifulin@bk.ru

POLUDNITSIN Anatoliy N.

Perm State University

15 Bukireva St., Perm, 614113, Russian Federation

panam.48@mail.ru

DOI: 10.5862/JPM.242.14

УДК: 539.3

В.В. Тихомиров

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ПОЛУБЕСКОНЕЧНАЯ ТРЕЩИНА МОДЫ III В БИМАТЕРИАЛЬНОМ КЛИНЕ

Получено точное решение антиплоской задачи для полубесконечной интерфейсной трещины в кусочно-однородном клине при самоуравновешенной нагрузке на ее берегах. Рассмотрены три типа граничных условий на сторонах клина: обе стороны свободны от напряжений, обе стороны защемлены и одна сторона свободна, а вторая защемлена. В результате применения метода Винера–Хопфа решение представлено в квадратурах. Для коэффициентов интенсивности напряжений получены функции Грина, а в случае клина геометрически симметричной структуры для них найдены простые формулы. Изучена сингулярность напряжений в вершине клина. В отличие от однородной структуры, асимптотика напряжений вблизи вершины при некоторых значениях параметров композита может иметь два сингулярных члена.

ИНТЕРФЕЙСНАЯ ТРЕЩИНА МОДЫ III, БИМАТЕРИАЛЬНЫЙ КЛИН, КОЭФФИЦИЕНТ ИНТЕНСИВНОСТИ НАПРЯЖЕНИЙ.

Введение

Исследованию полей напряжений при антиплоской деформации клиновидных областей, содержащих дефекты типа трещин, посвящен ряд публикаций. Помимо самостоятельного значения, интерес к изучению этой проблемы связан, например, с возникновением и распространением трещин в зоне высокой концентрации напряжений вблизи вершины острого выреза. Как правило, в литературе рассматривались трещины конечной длины, которые ориентированы вдоль интерфейса разнородных материалов композита, причем как изотропных, так и анизотропных.

Одной из первых работ в этом направлении явилась статья Ф. Эрдогана и Г. Гупты [1], в которой рассмотрена интерфейсная трещина в композитном клине, получено сингулярное интегральное уравнение и использован численный метод его решения. В работе [2] для случая нескольких коллинеарных трещин, расположенных на оси симметрии изотропного клина, построено точное решение. Анализ трещины, исходящей из вершины анизотропного клина, был проведен А. Шахани [3]. На основе метода

дислокаций в работе [4] для нескольких произвольно ориентированных трещин в изотропном клине получена система сингулярных интегральных уравнений, для решения которой была предложена численная процедура. К. Ву, Ю. Дзенис и В. Зоу [5] исследовали методом комплексных потенциалов равновесие клина, состоящего из двух трансверсально-изотропных пьезоэлектрических материалов, с интерфейсной трещиной конечной длины.

В работе [6] было установлено, что решение антиплоской задачи для композитного анизотропного клина может быть получено из решения соответствующей задачи, в которой материалы являются изотропными, с помощью преобразования полярных координат. По этой причине решения, полученные для изотропных компонент композита, приобретают особую важность.

Эффективный способ построения точных решений задач рассматриваемого направления продемонстрирован в работах Х. Беома и Х. Янга [7, 8] для интерфейсной трещины и трещины, лежащей вне зоны интерфейса. Для случая нагружения граней клина сосредоточенными силами авторы свели задачу к скалярному уравнению Ви-

нера — Хопфа. Однако при решении этого уравнения для факторизации функций использовался метод бесконечных произведений, что несколько снижает эффективность подхода.

В настоящей работе исследовано равновесие кусочно-однородного клина с полубесконечной интерфейсной трещиной моды III, на берегах которой приложена самоуравновешенная нагрузка. Рассмотрены три варианта граничных условий на сторонах клина:

- 1) обе стороны свободны от напряжений;
- 2) обе стороны защемлены;
- 3) одна сторона свободна, а вторая защемлена.

В каждом из вариантов с помощью интегрального преобразования Меллина задача сведена к задаче Римана [9]. На основе техники, развитой в работе [10], построено ее точное решение в квадратурах. При этом факторизация функций выполнена с использованием интегралов типа Коши. В случае геометрически симметричной структуры композита получены простые формулы для коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины. Исследованы предельные ситуации, когда относительная жесткость композита стремится к нулю или к бесконечности. Изучена сингулярность напряжений в вершине клина.

Оказывается, что в отличие от случая однородного материала, при некоторых значениях параметров композиции асимптотика напряжений вблизи этой особой точки будет содержать два сингулярных члена. Данный факт не был отмечен в предыдущих работах рассматриваемой тематики [11, 12].

Постановка задачи и ее сведение к задаче Римана

Рассмотрим полубесконечную интерфейсную трещину моды III между двумя разнородными клиньями с углами α_1 и α_2 (рис. 1). Материалы клиньев в областях Ω_1 и Ω_2 будем считать изотропными, однородными и имеющими модули сдвига μ_1 и μ_2 . Контакт материалов вне трещины предпо-

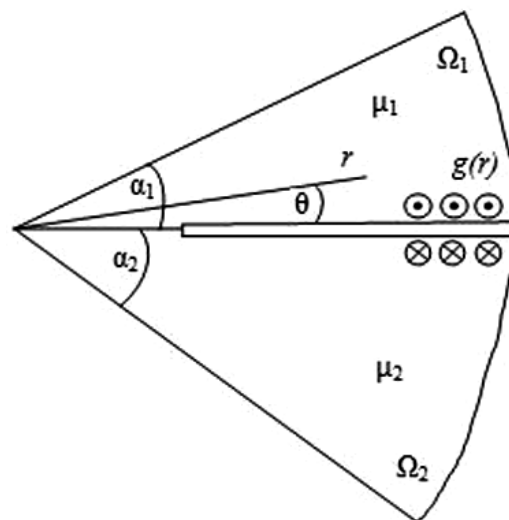


Рис. 1. Биматериальный клин с интерфейсной полубесконечной трещиной:

Ω_1, Ω_2 — области материала с модулями сдвига μ_1 и μ_2 ; $\alpha_1, \alpha_2, \theta, r$ — геометрические параметры; $g(r)$ — самоуравновешенная нагрузка, приложенная к берегам трещины

лагается идеальным. Без ущерба общности будем считать, что вершина трещины находится на расстоянии единичной длины от вершины композитного клина. К берегам трещины приложена самоуравновешенная нагрузка $g(r)$ (r — полярный радиус).

Как известно, перемещения w_j в областях Ω_1 и Ω_2 в рассматриваемом случае являются гармоническими функциями:

$$\frac{\partial^2 w_j}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w_j}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial w_j}{\partial r} = 0 \quad (j = 1, 2), \quad (1)$$

а напряжения в полярных координатах r и θ определяются формулами

$$\tau_{\theta z j} = \frac{\mu_j}{r} \frac{\partial w_j}{\partial \theta}, \quad \tau_{r z j} = \mu_j \frac{\partial w_j}{\partial r}. \quad (2)$$

На линии $\theta = 0$ напряжения и перемещения удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} \tau_{\theta z 1}(r, +0) &= \tau_{\theta z 2}(r, -0), \\ w_1(r, +0) &= w_2(r, -0) \quad (0 \leq r \leq 1) \end{aligned} \quad (3)$$

$$\tau_{\theta z 1}(r, +0) = \tau_{\theta z 2}(r, -0) = g(r) \quad (1 \leq r < \infty).$$

Рассмотрим три варианта граничных условий на сторонах клина:

$$\tau_{\theta z 1}(r, \alpha_1) = \tau_{\theta z 1}(r, -\alpha_2) = 0 \quad (\text{задача 1}); \quad (4)$$

$$w_1(r, \alpha_1) = w_2(r, -\alpha_2) = 0 \quad (\text{задача 2}); \quad (5)$$

$$\tau_{\theta z1}(r, \alpha_1) = 0, \quad w_2(r, -\alpha_2) = 0 \quad (\text{задача 3}). \quad (6)$$

Решение каждой задачи ищем в виде интегралов Меллина (n – номер задачи):

$$w_{jn}(r, \theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L W_{jn}(p, \theta) r^{-p} dp \quad (7)$$

$$(j = 1, 2; n = 1, 2, 3),$$

$$\tau_{\theta zjn}(r, \theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L T_{\theta zjn}(p, \theta) r^{-p-1} dp,$$

$$\tau_{rzjn}(r, \theta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L T_{rzjn}(p, \theta) r^{-p-1} dp,$$

где трансформанты перемещений и напряжений в соответствии с равенствами (1) и (2) определяются следующими формулами:

$$W_{jn}(p, \theta) = A_{jn}(p) \sin p\theta + B_{jn}(p) \cos p\theta; \quad (8)$$

$$T_{\theta zjn}(p, \theta) = \mu_j p [A_{jn}(p) \cos p\theta - B_{jn}(p) \sin p\theta];$$

$$T_{rzjn}(p, \theta) = -\mu_j p [A_{jn}(p) \sin p\theta + B_{jn}(p) \cos p\theta].$$

Согласно условиям регулярности, контур интегрирования L расположен параллельно мнимой оси в полосе

$$-\varepsilon < \operatorname{Re} p < \delta \quad (\varepsilon, \delta > 0).$$

Величины $A_{jn}(p)$ и $B_{jn}(p)$ находятся из равенств (3) и соответствующих рассматриваемой задаче условий (4) – (6).

Из условий (3), с учетом представлений (7) и (8) имеем:

$$\mu_1 p A_{1n}(p) = \mu_2 p A_{2n}(p) = T_{n+}(p) + G_-(p),$$

$$-p[B_{1n}(p) - B_{2n}(p)] = U_{n-}(p),$$

где

$$T_{n+}(p) = \int_0^1 \tau_{\theta z1n}(r, +0) r^p dr,$$

$$G_-(p) = \int_1^\infty g(r) r^p dr,$$

$$U_{n-}(p) = \int_1^\infty \frac{\partial}{\partial r} [w_{1n}(r, +0) - w_{2n}(r, -0)] r^p dr.$$

Функции $G_-(p)$ и $U_{n-}(p)$ регулярны и не имеют нулей в левой от контура L полуплоскости Ω_- , а $T_{n+}(p)$ – в правой полуплоскости Ω_+ [13].

Используя граничные условия на сторо-

нах клина (4) – (6), приходим к неоднородным скалярным задачам Римана [9]:

$$F_n(p)[T_{n+}(p) + G_-(p)] - q\mu_2 U_{n-}(p) = 0 \quad (9)$$

$$(p \in L; n = 1, 2, 3).$$

Здесь $q = (-1)^n$, в качестве контура L может быть взята мнимая ось, а функции $F_n(p)$ имеют вид

$$F_1(p) = \mu \operatorname{ctg} p\alpha_1 + \operatorname{ctg} p\alpha_2;$$

$$F_2(p) = \mu \operatorname{tg} p\alpha_1 + \operatorname{tg} p\alpha_2; \quad (10)$$

$$F_3(p) = \mu \operatorname{ctg} p\alpha_1 - \operatorname{tg} p\alpha_2.$$

Входящая в эти формулы постоянная $\mu = \mu_2/\mu_1$ является относительной жесткостью композита, которая может изменяться в пределах от нуля до бесконечности.

Решение задач Римана

Ключевым моментом при решении задач (9) является факторизация функций. Представим их коэффициенты (10) в виде

$$F_n(p) = (1 + \mu)p^q M_n(p), \quad (11)$$

$$M_n(p) = X^{-q}(p)\Phi_n(p), \quad X(p) = p \operatorname{ctg} p\alpha_1,$$

где

$$\Phi_1(p) = (1 + \mu)^{-1}(\mu + \operatorname{tg} p\alpha_1 \operatorname{ctg} p\alpha_2);$$

$$\Phi_2(p) = (1 + \mu)^{-1}(\mu + \operatorname{ctg} p\alpha_1 \operatorname{tg} p\alpha_2); \quad (12)$$

$$\Phi_3(p) = (1 + \mu)^{-1}(\mu - \operatorname{tg} p\alpha_1 \operatorname{tg} p\alpha_2).$$

Факторизация функции $X(p)$ осуществляется элементарно [13]:

$$X(p) = \frac{X_+(p)}{X_-(p)}, \quad (13)$$

$$X_\pm(p) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha_1}} \frac{\Gamma(1 \pm p\alpha_1/\pi)}{\Gamma(1/2 \pm p\alpha_1/\pi)},$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

На мнимой оси при $p = it$ функции (12) непрерывны, не имеют нулей и полюсов, их индекс равен нулю, и при $t \rightarrow \infty$ экспоненциально стремятся к единице. Поэтому справедливы следующие равенства [10, 13]:

$$\Phi_n(p) = \frac{\Phi_{n+}(p)}{\Phi_{n-}(p)}, \quad (14)$$

$$\Phi_{n\pm}(p) = \exp \left[-\frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\ln \Phi_n(t)}{t - p} dt \right] \quad (p \notin L).$$



С учетом четности функций (12) аналитические функции в областях Ω_+ и Ω_- могут быть представлены в форме

$$\Phi_{n\pm}(p) = \exp \left[\frac{p}{\pi} \int_0^\infty \frac{\ln \Phi_n(i\xi)}{\xi^2 + p^2} d\xi \right].$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} M_n(p) &= M_{n+}(p)M_{n-}^{-1}(p), \\ M_{n\pm}(p) &= X_\pm^q(p)\Phi_{n\pm}(p). \end{aligned} \quad (15)$$

В результате использования формул (11), (13) – (15), перегруппировки слагаемых в уравнениях (9) и применения теоремы Лиувилля [13], получаем:

$$\begin{aligned} M_{n+}(p)T_+(p) + Q_{n+}(p) &= q\mu_2(1+\mu)^{-1}p^{-q} \times \\ &\times M_{n-}(p)U_-(p) - Q_{n-}(p) = J_n(p), \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{n\pm}(p) &= \mp \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{Q_n(t)}{t-p} dt, \\ Q_n(t) &= \frac{M_{n-}(t)}{(1+\mu)t^q} F_n(t)G_-(t). \end{aligned} \quad (17)$$

Из оценок членов в равенстве (16) при $p \rightarrow \infty$ вытекает, что единые аналитические функции $J_n(p) = \text{const} = C_n$, причем $C_2 = 0$.

Константы C_1 и C_3 определим из уравнения (16) при значении $p = 0$. Учитывая формулы (17), находим:

$$\begin{aligned} C_n &= M_{n+}(0)G_-(0) - \frac{1}{2\pi i(1+\mu)} \times \\ &\times \int_L M_{n-}(t)F_n(t)G_-(t)dt \quad (n = 1, 3). \end{aligned} \quad (18)$$

Запишем функции (10) в задачах 1 и 3 в виде

$$F_n(t) = (1+\mu)\Delta_n(t)/f_n(t); \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \Delta_1(t) &= \sin(\alpha_1 + \alpha_2)t + m \sin(\alpha_1 - \alpha_2)t; \\ \Delta_3(t) &= \cos(\alpha_1 + \alpha_2)t - m \cos(\alpha_1 - \alpha_2)t; \end{aligned} \quad (20)$$

$$f_1(t) = 2 \sin t \alpha_1 \sin t \alpha_2;$$

$$f_2(t) = 2 \sin t \alpha_1 \cos t \alpha_2.$$

В формулы (20) входит биупругая постоянная $m = (1-\mu)/(1+\mu)$. Для всех сочетаний модулей сдвига материалов эта величина удовлетворяет неравенству $|m| \leq 1$,

причем значение $m = 0$ отвечает однородной среде.

Из представлений (19) вытекает, что подынтегральные функции в формулах (18) имеют в полуплоскости Ω_- полюсы в точках $t_{k1} = -\pi k/\alpha_1$ и $t_{k2} = -\pi k/\alpha_2$ ($k = 1, 2, \dots$) в задаче 1, а в задаче 3 – в точках t_{k1} и $s_{k2} = -\pi(2k-1)/(2\alpha_2)$. Тогда, используя теорему о вычетах, находим:

$$\begin{aligned} C_1 &= -\sqrt{\frac{\alpha_1 + \mu\alpha_2}{\alpha_1\alpha_2(1+\mu)}}G_-(0) - \frac{1}{1+\mu} \times \\ &\times \left[\frac{\mu}{\alpha_1} \sum_{k=1}^\infty M_{1-}(t_{k1})G_-(t_{k1}) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{\alpha_2} \sum_{k=1}^\infty M_{1-}(t_{k2})G_-(t_{k2}) \right], \\ C_3 &= -\sqrt{\frac{\mu}{\alpha_1(1+\mu)}}G_-(0) - \frac{1}{1+\mu} \times \\ &\times \left[\frac{\mu}{\alpha_1} \sum_{k=1}^\infty M_{3-}(t_{k1})G_-(t_{k1}) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{\alpha_2} \sum_{k=1}^\infty M_{3-}(s_{k2})G_-(s_{k2}) \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Из уравнения (16) для $n = 1, 3$ получаем:

$$T_{n+}(p) = [C_n - Q_{n+}(p)]X_+^{-1}(p)\Phi_{n+}^{-1}(p). \quad (22)$$

При $p \rightarrow \infty$, согласно формулам (13), (14) и (17), имеют место оценки

$$X_+(p) = O(p^{1/2}), \quad \Phi_{n\pm}(p) = O(1),$$

$$Q_{n+}(p) = O(p^{-1}).$$

Следовательно, представление (22) приводит к асимптотике

$$T_{n+}(p) \sim C_n p^{-1/2} \quad (p \rightarrow \infty).$$

Отсюда по теореме абелева типа [13] заключаем, что асимптотика напряжений при $r \rightarrow 1-0$ имеет вид

$$\tau_{\theta z n}(r, 0) \sim \frac{C_n}{\sqrt{\pi(1-r)}} \quad (n = 1, 3). \quad (23)$$

В задаче 2 из уравнения (16) находим

$$T_{2+}(p) = -X_+(p)\Phi_{2+}^{-1}(p)Q_{2+}(p).$$

Отсюда получаем, что $T_{2+}(p) \sim -Bp^{-1/2}$ при $p \rightarrow \infty$, где

$$B = \frac{1}{2\pi i(1+\mu)} \int_L \frac{F_2(t)}{t} \frac{\Phi_{2-}(t)}{X_-(t)} G_-(t) dt,$$

$$F_2(t) = (1+\mu)\Delta_2(t)/f_2(t), \quad (24)$$

$$\Delta_2(t) = \sin(\alpha_1 + \alpha_2)t - m \sin(\alpha_1 - \alpha_2)t, \quad (25)$$

$$f_2(t) = 2 \cos t\alpha_1 \cos t\alpha_2.$$

Тогда, аналогично предыдущим случаям, в задаче 2 будем иметь:

$$\tau_{0z21}(r, 0) \sim -\frac{B}{\sqrt{\pi(1-r)}} \quad (r \rightarrow 1-0). \quad (26)$$

В результате применения теоремы о вычетах константу B можно представить в виде

$$B = \frac{2}{\pi(1+\mu)} \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\beta_j \Phi_{2-}(s_{kj}) G_-(s_{kj})}{(2k-1)X_-(s_{kj})}, \quad (27)$$

$$\beta_1 = \mu, \quad \beta_2 = 1, \quad s_{kj} = -\pi(2k-1)/(2\alpha_j) \quad (k = 1, 2, \dots).$$

Коэффициенты интенсивности напряжений

Определим коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины в каждой задаче формулой

$$K_{III}^{(n)} = \lim_{r \rightarrow 1-0} \sqrt{2\pi r} \tau_{0z1n}(r, 0).$$

Тогда, используя асимптотики (23) и (26), получаем:

$$K_{III}^{(n)}(\alpha_1, \alpha_2, \mu) = \sqrt{2}C_n \quad (n = 1, 3), \quad (28)$$

$$K_{III}^{(2)}(\alpha_1, \alpha_2, \mu) = -\sqrt{2}B.$$

В случае геометрически симметричного клина формулы для КИН в задачах 1 и 2 существенно упрощаются. При $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ из формул (12) вытекает, что $\Phi_1(p) = \Phi_2(p) = 1$ и, следовательно, согласно (14), $\Phi_{n\pm}(p) = 1$ ($n = 1, 2$). Учитывая равенства (13), (15), (21) и (27), в итоге из (28) будем иметь:

$$K_{III}^{(1)}(\alpha, \alpha, \mu) = K_{III*}^{(1)}(\alpha) =$$

$$= -\sqrt{\frac{2}{\alpha}} \left[G_-(0) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} G_-\left(-\frac{\pi k}{\alpha}\right) \right], \quad (29)$$

$$K_{III}^{(2)}(\alpha, \alpha, \mu) = K_{III*}^{(2)}(\alpha) =$$

$$= -\sqrt{\frac{2}{\alpha}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} G_-\left(-\frac{\pi}{2\alpha}(2k+1)\right).$$

Отсюда вытекает, что в случае клина

геометрически симметричного строения с одинаковыми граничными условиями на его гранях КИН в вершине трещины не зависит от относительной жесткости материалов и совпадает с КИН для однородного клина.

Если к берегам трещины приложены сосредоточенные силы T_0 на расстоянии $r_0 > 1$ от вершины клина, т. е. $g(r) = -T_0 \delta(r - r_0)$ ($\delta(r - r_0)$ — дельта-функция), то $G_-(p) = -T_0 r_0^p$. Тогда ряды в (29) суммируются, и для КИН получаем простые представления

$$K_{III*}^{(1)} = T_0 \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{r_0^{\pi/(2\alpha)}}{\sqrt{r_0^{\pi/\alpha} - 1}},$$

$$K_{III*}^{(2)} = T_0 \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{1}{\sqrt{r_0^{\pi/\alpha} - 1}}. \quad (30)$$

Поскольку $K_{III*}^{(1)}/K_{III*}^{(2)} = r_0^{\pi/(2\alpha)} > 1$ при $r_0 > 1$ и $0 < \alpha \leq \pi$, то КИН в вершине трещины для клина со свободными гранями всегда превышает его значение для случая, когда грани клина защемлены.

В частности, при $n = 1$ и $\alpha = \pi$ получаем задачу о взаимодействии двух коллинеарных интерфейсных трещин, к одной из которых приложена точечная нагрузка. В этом случае

$$K_{III}^{(1)} = T_0 \sqrt{2r_0/[\pi(r_0 - 1)]}.$$

В задаче 2 при $\alpha = \pi$ имеем случай взаимодействия полубесконечной интерфейсной трещины с полубесконечным жестким включением. Для КИН в вершине трещины согласно (30) получаем

$$K_{III}^{(2)} = T_0 \sqrt{2/[\pi(r_0 - 1)]}.$$

Возвращаясь к общему случаю $\alpha_1 \neq \alpha_2$, найдем асимптотики КИН для предельных значений относительной жесткости композита. Устремляя μ к бесконечности, используя формулы (21), (27) и (28), а также обозначения (29), получаем:

$$K_{III}^{(1)} \rightarrow K_{III*}^{(1)}(\alpha_1), \quad K_{III}^{(2)} \rightarrow K_{III*}^{(2)}(\alpha_1),$$

$$K_{III}^{(3)} \rightarrow K_{III*}^{(1)}(\alpha_1) \quad (\mu \rightarrow \infty). \quad (31)$$

Таким образом, в каждой из задач асимптотики КИН определяются соответствующими выражениями для случая геометри-

чески симметричного однородного клина с углом раствора, равным $2\alpha_1$. При этом для больших значений относительной жесткости предельные значения КИН в задачах 1 и 3 совпадают.

Когда параметр μ близок к нулю, будем иметь:

$$\begin{aligned} K_{III}^{(1)} &\rightarrow K_{III*}^{(1)}(\alpha_2), \quad K_{III}^{(2)} \rightarrow K_{III*}^{(2)}(\alpha_2), \\ K_{III}^{(3)} &\rightarrow K_{III*}^{(2)}(\alpha_2) \quad (\mu \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (32)$$

Отсюда вытекает, что и в случае малой относительной жесткости композита предельные значения КИН выражаются формулами (29) для однородного клина при $\alpha = \alpha_2$. Заметим, что асимптотики (31) и (32) также могут быть получены путем решения предельных для (9) задач, возникающих при $\mu \rightarrow \infty$ и $\mu \rightarrow 0$.

Введем в рассмотрение нормализованные КИН:

$$N^{(n)} = K_{III}^{(n)}(\alpha_1, \alpha_2, \mu) / K_{III}^{(n)}(\alpha_1, \alpha_2, 1),$$

отражающие влияние на КИН неоднородности композиционной структуры.

На рис. 2 представлены зависимости нормализованных КИН в вершине трещины, нагруженной сосредоточенными силами, для $\alpha_1 = \pi/2$, $\alpha_2 = 3\pi/2$ и $r_0 = 4$ от параметра относительной жесткости клина. При таком выборе углов задача 1 соответствует случаю взаимодействия двух ортогональных трещин, задача 2 – трещины и жесткого включения, а задача 3 – трещины и отслоившегося жесткого включения. Приведенные данные показывают, что неоднородность композита может вызывать как эффект увеличения КИН по сравнению со случаем однородной среды, так и эффект его уменьшения. Наиболее сильно эти эффекты проявляются при малых и больших значениях относительной жесткости в задаче 3.

Поля напряжений вблизи вершины клина

Исследуем поля напряжений в вершине клина при $r \rightarrow 0$. На линии $\theta = 0$ касательные напряжения на основании формул (7) и условий (3) имеют вид

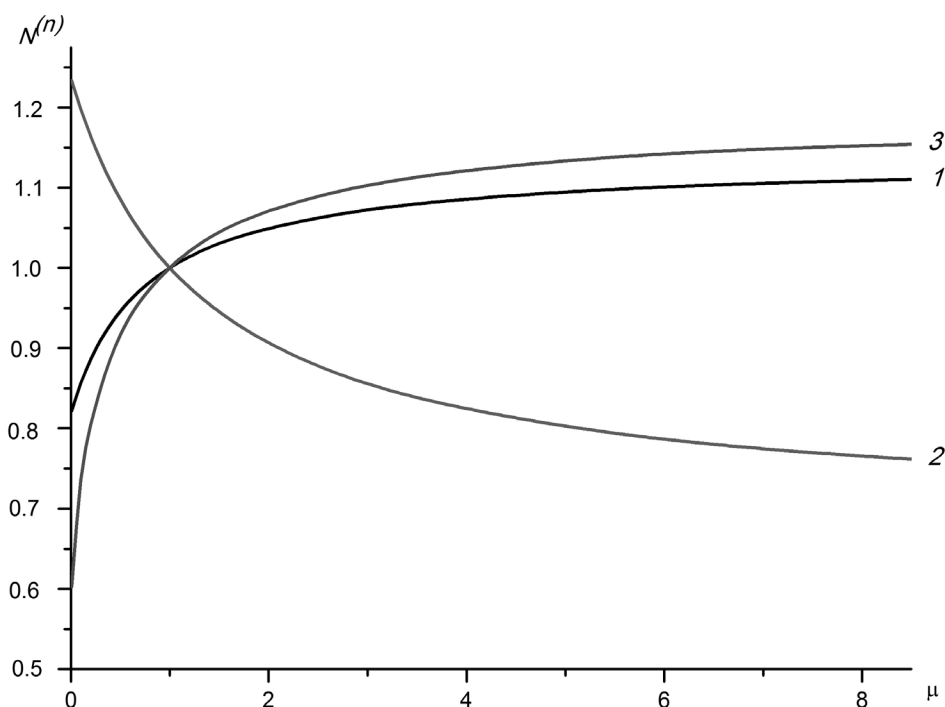


Рис. 2. Зависимости нормализованных КИН от модуля сдвига μ в вершине трещины, расположенной в композитной плоскости при $\alpha_1 = \pi/2$, $\alpha_2 = 3\pi/2$ и $r_0 = 4$; номера кривых соответствуют номерам задач

$$\tau_{\theta j n}(r, 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_L [T_{n+}(p) + G_-(p)] r^{-p-1} dp. \quad (33)$$

С помощью равенств (15) и (16) выражение для подынтегральной функции можно записать следующим образом:

$$T_{n+}(p) + G_-(p) = (1 + \mu) p^q \frac{C_n + Q_{n-}(p)}{M_{n-}(p) F_n(p)} \\ (n = 1, 2, 3).$$

Тогда с учетом представлений (19) и (24) формула (33) приобретает вид

$$\tau_{\theta j n}(r, 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_L Y_n(p) \frac{f_n(p)}{\Delta_n(p)} r^{-p-1} dp,$$

где $Y_n(p) = [C_n + Q_{n-}(p)] p^q M_{n-}^{-1}(p)$.

В результате применения теоремы о вычетах в полюсах, определяемых отрицательными корнями $-p_k^{(n)}$ уравнений (см. (20) и (25))

$$\Delta_n(p, \alpha_1, \alpha_2, m) = 0, \quad (34)$$

получаем:

$$\tau_{\theta j n}(r, 0) = \sum_{k=0}^{\infty} D_{nk}(\alpha_1, \alpha_2, \mu) r^{-\lambda_k^{(n)}} \\ (\lambda_k^{(n)} = 1 - p_k^{(n)}). \quad (35)$$

Коэффициенты этого ряда находятся по формулам

$$D_{nk}(\alpha_1, \alpha_2, \mu) = Y_n(-p_k^{(n)}) f_n(p_k^{(n)}) / \Delta'_n(p_k^{(n)}),$$

где $\Delta'_n(p) = d\Delta_n(p)/dp$.

Из (35) вытекает, что сингулярные поля напряжений в окрестности вершины клина порождаются корнями уравнений (34), расположенными в полосе $0 < \text{Re } p_k^{(n)} < 1$. По аналогии с выкладками, представленными в работе [10], можно показать, что все числа $p_k^{(n)}$ в этой полосе являются вещественными и однократными. Функции (20) и (25) обладают следующими свойствами:

$$\Delta_1(p, \alpha_1, \alpha_2, m) = \Delta_1(p, \alpha_2, \alpha_1, -m); \quad (36)$$

$$\Delta_2(p, \alpha_1, \alpha_2, m) = \Delta_1(p, \alpha_1, \alpha_2, -m); \quad (37)$$

$$\Delta_3(p, \alpha_1, \alpha_2, m) = \Delta_3(p, \alpha_2, \alpha_1, m). \quad (38)$$

Из равенств (36) и (38) следует, что в задачах 1 и 3 достаточно рассмотреть, например, корни уравнений (34) при $\alpha_1 < \alpha_2$ для $-1 < m < 1$. В силу свойства (37) корни в задаче 2 совпадают с корнями в задаче 1

при замене параметра m на $-m$.

Не касаясь в данной статье проведенного детального анализа корней уравнений (34), отметим только некоторые свойства корней, расположенных в интервале $(0, 1)$. В зависимости от параметров композиционной структуры уравнения (34) могут не иметь корней, иметь один корень или два корня в данном интервале. В вершине клина эти корни могут порождать как слабые ($0 < \lambda_k^{(n)} < 0,5$), так и сильные ($0,5 < \lambda_1^{(n)} < 1$) сингулярности. При наличии двух корней в отмеченном интервале могут быть только две ситуации: $0,5 < p_1^{(n)} < p_2^{(n)} < 1$ или $0 < p_1^{(n)} < 0,5 < p_2^{(n)} < 1$. Иными словами, такие распределения корней внутри интервала определяют либо две слабые сингулярности поля напряжений при $r \rightarrow 0$, либо одну сильную и одну слабую сингулярности. Существование двух сильных сингулярностей в асимптотике напряжений невозможно.

В задачах 1 и 2 отсутствие сингулярных членов в представлениях напряжений (35) имеет место, например, при любом $m \in (-1, 1)$ для углов раствора клина, не превышающих $\pi/2$. В задаче 3 подобная ситуация для углов того же диапазона возникает при $m \leq 0$.

Для геометрически симметричных композитных клиньев ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$) в задачах 1 и 2 уравнения (34) имеют в интервале $(0, 1)$ только один корень, если $\alpha > \pi/2$. Этот корень не зависит от биупругой постоянной и совпадает с корнем для однородного клина $p_1^{(n)} = \pi/(2\alpha)$. В задаче 3 в этом случае возможны три варианта. Во-первых, при углах $\alpha \leq \alpha_* = 0,5 \arccos m$ корни, меньшие единицы, отсутствуют. Во-вторых, для углов, удовлетворяющих неравенству $\alpha_* < \alpha \leq \pi - \alpha_*$, в интересующем нас интервале существует один корень. Наконец, для углов $\pi - \alpha_* < \alpha \leq \pi$ напряжения в угловой точке клина будут содержать два сингулярных слагаемых, порождаемых корнями

$$p_1^{(3)} = \arccos m / (2\alpha),$$

$$p_2^{(3)} = \pi / \alpha - \arccos m / (2\alpha).$$

На рис. 3, а приведены зависимости первых двух корней уравнения (34) в задаче 1 от угла α_1 при различных значениях относи-

тельной жесткости, когда композитная среда занимает всю плоскость ($\alpha_1 + \alpha_2 = 2\pi$) и содержит две интерфейсные трещины. При

$0 < \mu < 1$ (биупругая постоянная $m > 0$) уравнение (34) имеет в интервале $(0, 1)$ два корня: $0 < p_1^{(1)} < 0,5 < p_2^{(1)} < 1$, если

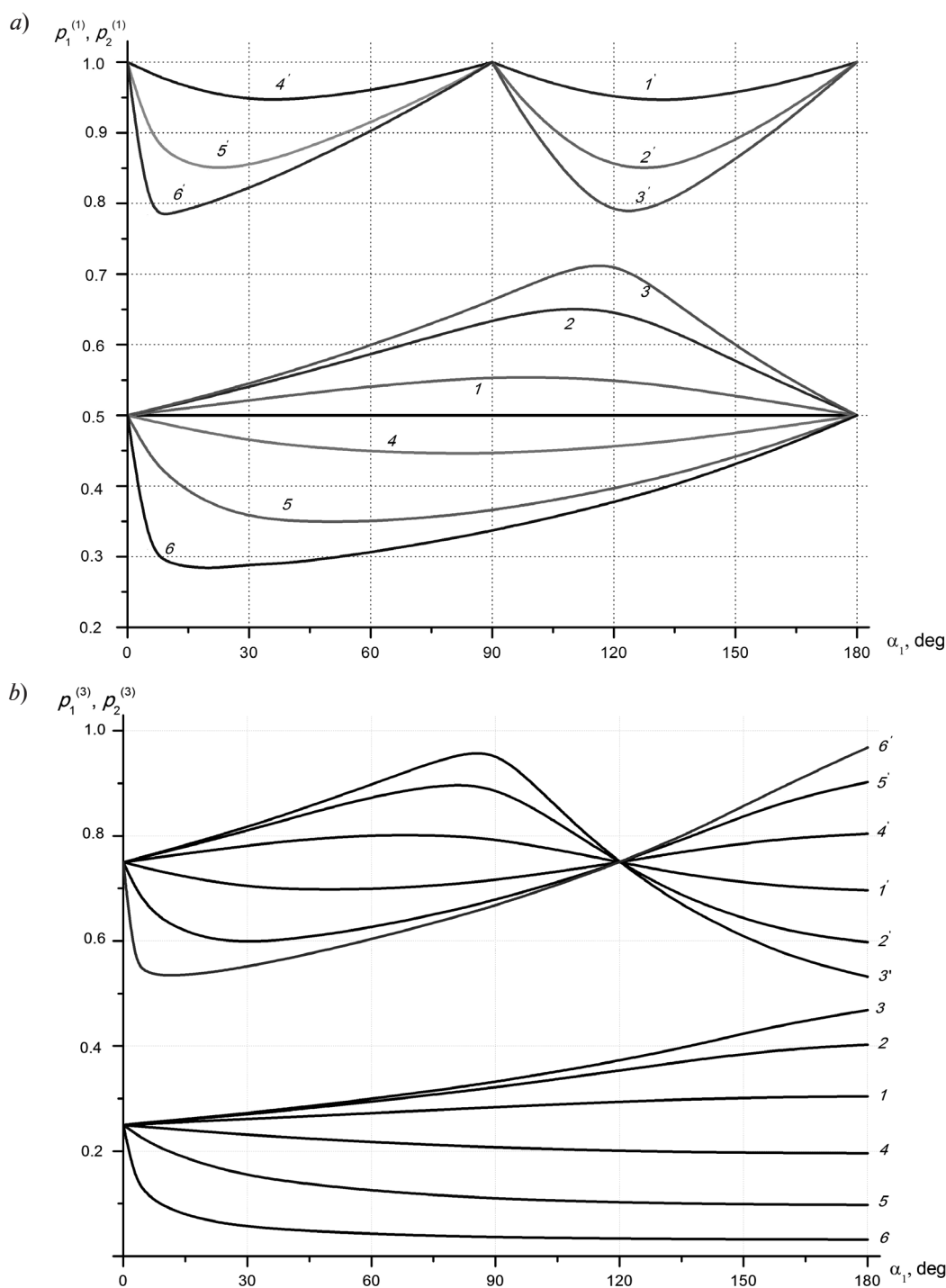


Рис. 3. Зависимости первых двух корней уравнений (34) от угла α_1 при $\alpha_1 + \alpha_2 = 2\pi$ в задаче 1 (a) и задаче 3 (b) для различных значений относительной жесткости μ : 2 (номера кривых 1 и 1'), 10 (2 и 2'), 100 (3 и 3'), 0,5 (4 и 4'), 0,1 (5 и 5'), 0,01 (6 и 6') (кривые, соответствующих второму корню, отмечены штрихом)

$0 < \alpha_1 < \pi/2$, а при $\pi/2 < \alpha_1 \leq \pi$ — один корень $0 < p_1^{(1)} \leq 0,5$. В случае $\mu > 1$ ($m < 0$) во всем диапазоне изменения угла α_1 корни превосходят 0,5. Это значит, что асимптотика напряжений в вершине трещины, совпадающей с угловой точкой линии раздела материалов, может содержать один или два сингулярных члена. При этом показатель сингулярности отличен от классического значения, равного 0,5. Для двух коллинеарных трещин ($\alpha = \pi$) классический результат $\lambda_1^{(1)} = 0,5$ сохраняется.

Задача 3 при $\alpha_1 + \alpha_2 = 2\pi$ представляет задачу для составной упругой плоскости, содержащей полубесконечную трещину и отслоившееся полубесконечное жесткое включение. В этом случае при любых значениях относительной жесткости композита $\mu \in (0, \infty)$ во всем диапазоне изменения угла α_1 уравнение (34) имеет два корня (см. рис. 3, б), порождающие сильную и слабую особенности у напряжений в вершине клина.

Заключение

В данной работе с помощью метода Винера — Хопфа получено точное решение задачи о равновесии биматериального клина, ослабленного полубесконечной межфазной трещиной продольного сдвига, при трех типах граничных условий на его сторонах. В случае композита геометрически симметричной структуры и приложения к берегам трещины сосредоточенных сил, найдены простые алгебраические представления функций Грина для коэффициентов интенсивности напряжений. Исследована сингулярность напряжений в вершине клина. В отличие от однородного клина, асимптотика напряжений в вершине клина при некоторых значениях параметров неоднородной структуры может содержать два сингулярных члена.

Данный подход позволяет получить точные решения как для случая приложения нагрузки на сторонах клина, так и случая клина с надрезом, исходящим из его вершины.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Erdogan F., Gupta G.D. Bonded wedges with an interface crack under anti-plane shear loading // Int. J. Fract. 1975. Vol. 11, No. 4. Pp. 583–593.
- [2] Mkhitarian S.M., Melkounian N., Lin B.B. Stress-strain state of a cracked elastic wedge under anti-plane deformation with mixed boundary conditions on its faces // Int. J. Fract. 2001. Vol. 108. No. 4. Pp. 291–315.
- [3] Shahani A.R. Mode III stress intensity factors for edge-cracked circular shafts, bonded wedges, bonded half planes and DCB's // Int. J. Solids Struct. 2003. Vol. 40. No. 24. Pp. 6567–6576.
- [4] Faal R.T., Fotuhi A.R., Fariborz S.J., Daghyani H.R. Antiplane stress analysis of an isotropic wedge with multiple cracks // Int. J. Solids Struct. 2004. Vol. 41. No. 16–17. Pp. 4535–4550.
- [5] Wu X., Dzenis Y., Zou W. Screw dislocation interacting with an interfacial edge crack between two bonded piezoelectric wedges // Int. J. Fract. 2002. Vol. 117. No. 3. Pp. 9–14.
- [6] Beom H.G., Lee J.W., Cui C.B. Analysis of a kinked crack in an anisotropic material under antiplane deformation // J. Mech. Sci. Technol. 2012. Vol. 26. No. 2. Pp. 411–416.
- [7] Beom H.G., Jang H.S. Interfacial wedge cracks in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear // Int. J. Eng. Sci. 2012. Vol. 56. No. 1. Pp. 49–62.
- [8] Beom H.G., Jang H.S. A crack emanating from a wedge in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear // Int. J. Fract. 2012. Vol. 177. No. 2. Pp. 191–198.
- [9] Gakhov F.D. Boundary Value Problems. London: Pergamon Press, 1966.
- [10] Nuller B., Ryvkin M., Chudnovsky A.A. Closed form solution for a crack approaching an interface // J. Mech. Mat. Struct. 2006. Vol. 1. No. 8. Pp. 1405–1423.
- [11] Ma C.C., Hour B.L. Analysis of dissimilar anisotropic wedges subjected to antiplane shear deformation // Int. J. Solids Struct. 1989. Vol. 25. No. 11. Pp. 1295–1309.
- [12] Shahani A.R. Mode III stress intensity factors in an interfacial crack in dissimilar bounded materials // Arch. Appl. Mech. 2006. Vol. 75. No. 6–7. Pp. 405–411.
- [13] Noble B. Method based on the Wiener-Hopf technique for solution of partial differential equations. Oxford: Pergamon Press, 1958.



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич — кандидат физико-математических наук, заместитель директора по образовательной деятельности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

Tikhomirov V.V. A SEMI-INFINITE CRACK OF MODE III IN THE BIMATERIAL WEDGE.

An exact solution of the antiplane problem for a semi-infinite interface crack in a piecewise-homogeneous wedge under a self-balanced load on its sides has been obtained. Three types of boundary conditions on the wedge sides were examined: the both sides being stress-free; both sides being clamped, and one side being stress-free with the second one clamped. As a result of using the Wiener-Hopf method, the solution was represented in quadratures. The Green's functions were obtained for stress intensity factors; in the case of a geometrically symmetrical wedge structure simple formulae were found for these functions. The stress singularity in the apex of the wedge was studied. In contrast to the homogeneous wedge structure the asymptotic of the stresses near the apex was established to have sometimes two singular terms for some values of the composite parameters.

INTERFACIAL MODE III CRACK, BIMATERIAL WEDGE, STRESS INTENSITY FACTOR, STRESS SINGULARITY.

REFERENCES

- [1] **F. Erdogan, G.D. Gupta**, Bonded wedges with an interface crack under anti-plane shear loading, *Int. J. Fract.* 11 (4) (1975) 583–593.
- [2] **S.M. Mkhitarian, N. Melkounian, B.B. Lin**, Stress-strain state of a cracked elastic wedge under anti-plane deformation with mixed boundary conditions on its faces, *Int. J. Fract.* 108 (4) (2001) 291–315.
- [3] **A.R. Shahani**, Mode III stress intensity factors for edge-cracked circular shafts, bonded wedges, bonded half planes and DCB's, *Int. J. Solids Struct.* 40 (24) (2003) 6567–6576.
- [4] **R.T. Faal, A.R. Fotuhi, S.J. Fariborz, H.R. Daghyani**, Antiplane stress analysis of an isotropic wedge with multiple cracks, *Int. J. Solids Struct.* 41(16-17) (2004) 4535–4550.
- [5] **X. Wu, Y. Dzenis, W. Zou**, Screw dislocation interacting with an interfacial edge crack between two bonded piezoelectric wedges, *Int. J. Fract.* 117(3) (2002) 9–14.
- [6] **H.G. Beom, J.W. Lee, C.B. Cui**, Analysis of a kinked crack in an anisotropic material under antiplane deformation, *J. Mech. Sci. Technol.* 26(2) (2012) 411–416.
- [7] **H.G. Beom, H.S. Jang**, Interfacial wedge cracks in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear, *Int. J. Eng. Sci.* 56 (1) (2012) 49–62.
- [8] **H.G. Beom, H.S. Jang**, A crack emanating from a wedge in dissimilar anisotropic materials under antiplane shear, *Int. J. Fract.* 177 (2) (2012) 191–198.
- [9] **F.D. Gakhov**, *Boundary Value Problems*, London, Pergamon Press, 1966.
- [10] **B. Nuller, M. Ryvkin, A.A. Chudnovsky**, Closed form solution for a crack approaching an interface, *J. Mech. Mat. Struct.* 1(8) (2006) 1405–1423.
- [11] **C.C. Ma, B.L. Hour**, Analysis of dissimilar anisotropic wedges subjected to antiplane shear deformation, *Int. J. Solids Struct.* 25(11) (1989) 1295–1309.
- [12] **A.R. Shahani**, Mode III stress intensity factors in an interfacial crack in dissimilar bounded materials, *Arch. Appl. Mech.* 75 (6-7) (2006) 405–411.
- [13] **B. Noble**, *Method based on the Wiener-Hopf technique for solution of partial differential equations*, Oxford, Pergamon Press, 1958.

THE AUTHOR

TIKHOMIROV Victor V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
victikh@mail.ru

ТОЧНОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О СРЕДНЕМ ЧИСЛЕ ВЫБРОСОВ УЗКОПОЛОСНОГО ГАУССОВСКОГО СЛУЧАЙНОГО ПРОЦЕССА

В представленной работе рассмотрена задача о количестве выбросов (пересечений уровня) стационарного узкополосного гауссовского процесса, заданного экспоненциально-косинусоидальной автокорреляционной функцией. Задача была решена ранее С. Райсом в терминах совместной плотности вероятностей процесса и его производной по времени, но в данной работе получено решение с использованием функционала плотности вероятностей, полученного И.Н. Амиантовым, а также канонического разложения случайного процесса. Также в данной работе для решения задачи рассмотрено оптимальное каноническое разложение узкополосного случайного процесса на основе работы А.П. Филимонова и А.В. Денисова. Использование вышеперечисленных средств позволило получить точное аналитическое решение задачи о выбросах стационарного гауссовского узкополосного случайного процесса. Полученные формулы применимы, например, при решении задач об остаточном ресурсе некоторых радиотехнических изделий, об обрушающихся морских волнах и в других случаях.

ВЫБРОС СЛУЧАЙНОГО ПРОЦЕССА, ФУНКЦИОНАЛ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ,
КАНОНИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ.

Задача о среднем числе выбросов (переходов через уровень) стационарным случайным процессом $\xi(t)$ впервые была решена С. Райсом [1] в терминах совместной плотности вероятностей $W(\xi(t), \dot{\xi}(t))$ процесса $\xi(t)$ и его производной по времени $\dot{\xi}(t)$. Это решение вошло во многие учебники и обзорные статьи по статистической радиотехнике и радиофизике, например, в работы [2 – 4].

Эта задача не потеряла актуальности и в настоящее время. Формулу для нахождения числа переходов через уровень можно использовать при решении следующих прикладных задач [5 – 7]:

об остаточном ресурсе некоторых радиотехнических изделий (например, дорогих

массивных трансформаторов);

об обрушении морских (океанических) гравитационных волн (если решение таких задач основано на спектральной методологии).

Однако в работе [3, с. 456] при выводе формулы для числа переходов через уровень на достаточно малом промежутке Δt , осуществляется переход от приращения производной случайного процесса $\Delta \dot{\xi}$ к дифференциалу $d\dot{\xi}$, но при этом не выполняется операция предельного перехода $\Delta t \rightarrow 0$. Невыполнение указанной операции нам представляется не вполне корректным, вследствие чего формула С. Райса приобретает приближенный характер.

При решении подобных задач исследо-



ватель обычно располагает графиком спектральной плотности мощности и (или) графиком автокорреляционной функции.

В связи с этим представляет интерес получение точного аналитического решения данной задачи с использованием функционала плотности вероятностей [8] и канонического разложения случайного процесса [9, 10].

Нахождение функционала плотности вероятностей $F(x(t))$, который показывает относительную вероятность появления траектории, для произвольной автокорреляционной функции представляет собой достаточно сложную математическую задачу, связанную с решением интегрального уравнения Фредгольма. Однако в работе [8] получено точное выражение для функционала плотности вероятностей. Это выражение будет использовано как базовое в настоящей работе и представлено далее.

Рассмотрим на промежутке $[-T/2, T/2]$ траектории стационарного узкополосного гауссовского случайного процесса $x(t)$, заданного спектральной плотностью мощности (1) и соответствующей ей автокорреляционной функцией (2):

$$\Phi(f) = \frac{2a\sigma^2}{(2\pi)^4(f - f_0)^2 + (2\pi)^2 f^2}, \quad (1)$$

$$K(\tau) = \sigma^2 \exp(-a|\tau|) \times \left(\cos(\omega_1 \tau) + \frac{a}{\omega_1} \sin(\omega_1 |\tau|) \right), \quad (2)$$

где $\omega_0 = 2\pi f_0$, $\omega_0^2 = \omega_1^2 + a^2$.

Введем обозначение

$$H_0 = \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2 a^2 \omega_0^2} (a\omega_0^2 x_1^2 + ax_1^2) + [a\omega_0^2 x_2^2 + ax_2^2] \right],$$

где x_1, x_2 — соответственно начальное и конечное значения траектории случайного процесса $x(t)$ на некотором промежутке $[-T/2, T/2]$.

С учетом введенного обозначения (указанного промежутка) функционал плотности вероятностей процесса (1), (2) имеет следующий вид [8]:

$$F(x(t)) = hH_0 \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2 a^2 \omega_0^2} \left(\int_{-T/2}^{T/2} x''^2(t) dt + a^2 \int_{-T/2}^{T/2} x'^2(t) dt + \omega_0^4 \int_{-T/2}^{T/2} x^2(t) dt + 2\omega_0^2 \int_{-T/2}^{T/2} x'(t) dt \right) \right], \quad (3)$$

где $x'(t), x''(t)$ — первая и вторая производные $x(t)$; промежуток $[-T/2, T/2]$ произвольный; h — параметр, который зависит от ранга дробления n -мерной функции распределения рассматриваемого случайного процесса при $n \rightarrow \infty$ и является одинаковым для различных реализаций $x(t)$ [8].

Всюду в дальнейшем значение T будем полагать равным периоду первой гармоники T_0 канонического разложения случайного процесса по тригонометрическому базису.

Запишем общий вид канонического разложения узкополосного процесса $x(t)$ с нулевым математическим ожиданием по такому базису:

$$x(t) = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos \left(\frac{2\pi k}{T_0} t + \varphi_k \right); \quad (4)$$

в этом базисе коэффициенты A_0, A_k — некоррелированные между собой гауссовские случайные величины с нулевым математическим ожиданием и дисперсиями σ_k^2 ; φ_k — случайные величины с равномерным распределением в интервале $[0; 2\pi]$.

Дисперсии σ_k^2 находятся по известной автокорреляционной функции [9]:

$$\sigma_0^2 = 2 \int_0^{T/2} \sigma^2 \exp(-a|\tau|) \left(\cos(\omega_1 \tau) + \frac{a}{\omega_1} \sin(\omega_1 |\tau|) \right) d\tau, \quad (5)$$

$$\sigma_k^2 = 2 \int_0^{T/2} \sigma^2 \exp(-a|\tau|) \left(\cos(\omega_1 \tau) + \frac{a}{\omega_1} \sin(\omega_1 |\tau|) \right) \cos \left(\frac{2\pi k}{T} \tau \right) d\tau. \quad (6)$$

Исключив из разложения (4) те члены ряда, для которых $\sigma_k^2 \ll 1$, разложение $x(t)$ можно приближенно представить в виде

конечной суммы:

$$x(t) = \sum_{k=M}^N A_k \cos\left(\frac{2\pi k}{T_0} t + \varphi_k\right), \quad (7)$$

причем

$$\sum_{k=M}^N \sigma_k^2 \approx \sigma^2.$$

Оптимальный выбор периода T_0 канонического разложения, как известно из статьи [9], связан со следующими требованиями:

1) количество членов разложения должно быть минимальным,

2) сумма дисперсий σ_k^2 в разложении (7) должна быть близка к суммарной дисперсии σ^2 .

Эти условия можно удовлетворить только в том случае, когда период канонического разложения T_0 обратно пропорционален эффективной ширине графика спектральной плотности мощности [9].

Для узкополосного случайного процесса (1), (2) эффективная ширина Δf графика спектральной плотности мощности определяется характерным масштабом изменения «огibaющей» автокорреляционной функции, т. е. параметром a , так что в случае узкополосного и достаточно высокочастотного процесса, когда постоянная составляющая отсутствует, выполняется неравенство

$$T_0 \geq \frac{1}{ak},$$

где k — номер наименьшей гармоники канонического разложения.

Если представить оптимальное каноническое разложение (7), то k можно положить равным M . Обратно пропорциональная связь между T_0 и a согласуется с теоремой отсчетов Котельникова [11].

Заметим, что если использовать неоптимальное каноническое разложение и взять другое (большее) значение T , то дальнейшее решение останется неизменным.

С учетом выведенных выше формул получим выражение для среднего числа выбросов за время T_0 .

Введем следующее обозначение:

$$x(t) = \sum_{k=M}^N x_k(t), \quad x_k(t) = A_k \cos\left(\frac{2\pi k}{T_0} t + \varphi_k\right). \quad (8)$$

Нетрудно получить, что

$$F(x_k(t)) = hH_0 \exp\left[-\frac{2\pi A_k^2 k^2}{T_0} \times \right. \\ \left. \times \frac{4k^2 + a^2}{4a^2 \omega^2 \sigma^2 T_0^2} - \frac{\omega^2 T_0}{16a^2 \sigma^2} \right]. \quad (9)$$

Заметим, что количество осцилляций k -ой гармоники за время T_0 равно $2k$.

Используя выражение для функционала плотности вероятностей (9), определим вероятность появления k -ой гармоники с амплитудой, превосходящей уровень $|C|$ (берется модуль величины, так как C может быть как больше, так и меньше нуля). Учитывая, что A_k подчиняется гауссовской статистике, получим следующее:

$$P(x_k(t), C) = \frac{1}{\Phi_{norm}} \int_{|C|}^{+\infty} \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{A_k^2}{2\sigma_k^2} - \right. \\ \left. - \frac{2\pi A_k^2 k^2}{T_0} \cdot \frac{4k^2 + a^2}{4a^2 \omega^2 \sigma^2 T_0^2} - \frac{\omega^2 T_0}{16a^2 \sigma^2} \right] dA_k, \quad (10)$$

где

$$\Phi_{norm} = \sum_{k=M}^N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{A_k^2}{2\sigma_k^2} - \frac{2\pi A_k^2 k^2}{T_0} \times \right. \\ \left. \times \frac{4k^2 + a^2}{4a^2 \omega^2 \sigma^2 T_0^2} - \frac{\omega^2 T_0}{16a^2 \sigma^2} \right] dA_k.$$

С учетом вероятности (10) формула для вычисления среднего числа переходов через уровень C за время T имеет вид:

$$\bar{N} = \frac{2}{\Phi_{norm}} \sum_{k=M}^N k \int_{|C|}^{+\infty} \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{A_k^2}{2\sigma_k^2} - \right. \\ \left. - \frac{2\pi A_k^2 k^2}{T_0} \cdot \frac{4k^2 + a^2}{4a^2 \omega^2 \sigma^2 T_0^2} - \frac{\omega^2 T_0}{16a^2 \sigma^2} \right] dA_k. \quad (11)$$

Докажем, что для определения среднего числа переходов случайным процессом через уровень C достаточно рассмотреть лишь траектории, состоящие из одной гармоники. Для этого будем рассматривать кортежи реализаций случайного процесса. Назовем основным набором кортеж реализаций на промежутке $[-T_0/2, T_0/2]$, где T_0 — период первой гармоники канонического разложе-



ния случайного процесса. Расширенным набором будем называть кортеж реализаций случайного процесса на промежутке $[-NT_0/2, NT_0/2]$, где N – целое число. Поскольку процесс является периодическим в среднем квадратическом, то количество переходов через уровень траекторией из расширенного набора будет равно kN , где k – количество переходов через уровень траекторией за время T на основном промежутке.

Если подставлять в выражение (3) траектории из расширенного набора, то можно прийти к следующему заключению: существует такой номер N , начиная с которого вероятность реализации любой линейной комбинации становится много меньше, чем таковая для любой отдельно взятой гармоники канонического разложения. Таким образом, среднее число пересечений через уровень на промежутке $[-NT_0/2, NT_0/2]$ будет зависеть от вероятности реализации отдельно взятых гармоник и количества пе-

ресечений ими уровня. Принимая во внимание, что среднее число переходов уровня на промежутке времени $[-NT_0/2, NT_0/2]$ равно KN , где K – среднее число пересечений уровня за время T , получаем, что среднее пересечение уровня за время T будет также зависеть только от вероятности реализации отдельно взятых гармоник и количества пересечений ими уровня. Из этого следует справедливость формулы (11).

Формулу (11) можно применять для определения количества переходов стационарного гауссовского узкополосного случайного процесса через произвольный уровень C .

Формула (11) является точным аналитическим решением задачи о среднем числе выбросов (переходов через уровень) стационарным случайным процессом для рассмотренной модели автокорреляционной функции и может быть распространена на другие близкие модели узкополосных процессов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Райс С. Теория флуктуационных шумов. Пер. с англ. под ред. Н.А. Железнова // Теория передачи электрических сигналов при наличии помех. М.: Изд-во ИЛ, 1953. С. 88–238.
- [2] Бунимович В.И. Флуктуационные процессы в радиоприемных устройствах. М.: Советское радио, 1951. 360 с.
- [3] Тихонов В.И. Выбросы случайных процессов // Успехи физических наук. 1962. Т. 77. Вып. 3. С. 449–480.
- [4] Тихонов В. И. Выбросы случайных процессов. М.: Наука, 1970. 392 с.
- [5] Шарков Е.А. Обрушающиеся морские волны: структура, геометрия, электродинамика. М.: Научный мир, 2009. 304 с.
- [6] Young I.R., Babanin A.V. Spectral distribution of energy dissipation of wind-generated waves due to dominant wave breaking // J. Physical Oceanography. 2006. Vol. 36. No. 3. Pp. 376–394.
- [7] Чайковский В.С. Методика определения размаха шумов по спектральной плотности мощности // Тр. Междунар. симп. «Надежность и качество». 2011. Т. 2. С. 286–288.
- [8] Амиантов И.Н. Избранные вопросы статистической теории связи М.: Советское радио, 1971. 416 с.
- [9] Филимонов А.П., Денисов А.В. Выбор параметров канонического разложения узкополосного случайного процесса // Известия вузов. Приборостроение. 2007. № 8. С. 48–53.
- [10] Синицын И.Н. Канонические представления случайных функций и их применение в задачах компьютерной поддержки научных исследований. М.: Торус Пресс, 2009. 768 с.
- [11] Свинын С.Ф. Базисные сплайны в теории отсчетов сигналов СПб.: Наука, 2003. 118 с.

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. THE EXACT ANALYTICAL SOLUTION OF THE PROBLEM ON THE AVERAGE NUMBER OF SPIKES OF THE NARROWBAND GAUSSIAN STOCHASTIC PROCESS.

In this article, the problem of the number of spikes (level crossings) of the stationary narrowband Gaussian process has been considered. The process was specified by the exponentially-cosine autocorrelation function. The problem had been solved earlier by S. Rice in terms of the joint probabilities' density of the process and its derivative with respect to time, but in our article we obtained the solution using the functional of probabilities' density (the functional was obtained by I.N. Amiantov), as well as an expansion of the canonical stochastic process. In this article, the optimal canonical expansion of narrowband stochastic process based on the work of A.P. Filimonov and A.V. Denisov was also considered to solve the problem. The application of all these resources allowed obtaining an exact analytical solution of the problem on spikes of stationary narrowband Gaussian process. The obtained formulae one could use to solve, for example, some problems about the residual resource of some radiotechnical products, about the breaking sea waves and others.

EMISSION OF STOCHASTIC PROCESS, DENSITY FUNCTIONAL OF PROBABILITY, CANONICAL EXPANSION.

REFERENCES

- [1] **S. Rays**, Teoriya fluktuatsionnykh shumov [The theory of fluctuation noise], Teoriya peredachi elektricheskikh signalov pri nalichii pomekh [In: The theory of electric signaling with noise], Moscow, Izdatelstvo IL, 1953, Pp. 88–238.
- [2] **V.I. Bunimovich**, Fluktuatsionnyye protsessy v radiopriyemnykh ustroystvakh [Fluctuation processes in the radio receivers], Moscow, Sovetskoye radio, 1951.
- [3] **V.I. Tikhonov**, Vybrosoy sluchaynykh protsessov [Overshoots of random processes], Uspekhi fizicheskikh nauk. 77 (3) (1962) 449–480.
- [4] **V.I. Tikhonov**, Vybrosoy sluchaynykh protsessov [Overshoots of random processes], Moscow, Nauka, 1970.
- [5] **E.A. Sharkov**, Obrushayushchiyesya morskiye volny: struktura, geometriya, elektrodinamika [Hitting sea waves: the structure, geometry, electrodynamics], Moscow, Nauchniy mir, 2009.
- [6] **I.R. Young, A.V. Babanin**, Spectral distribution of energy dissipation of wind-generated waves due to dominant wave breaking, J. Physical Oceanography. 36 (3) (2006) 376–394.
- [7] **V.S. Tchaykovskiy**, Metodika opredeleniya razmakha shumov po spektralnoy plotnosti moshchnosti [The procedure for finding the peak-to-peak noise amplitude from the power spectral density], Trudy Mezhdunarodnogo simpoziuma «Nadezhnost i kachestvo». 2 (2011) 286–288.
- [8] **I.N. Amiantov**, Izbrannyye voprosy statisticheskoy teorii svyazi [Selected points of statistical communication theory], Moscow, Sovetskoye radio, 1971.
- [9] **A.P. Filimonov, A.V. Denisov**, Vybory parametrov kanonicheskogo razlozheniya uzkopolosnogo sluchaynogo protsessa [Parametrization of canonical expansion for narrowband random process], Izvestiya vuzov. Priborostroyeniye. No. 8 (2007) 48–53.
- [10] **I.N. Sinitsyn**, Kanonicheskiye predstavleniya sluchaynykh funktsiy i ikh primeneniye v zadachakh kompyuternoy podderzhki nauchnykh issledovaniy [Canonical representation of random functions and their application to the computational support of scientific research], Moscow, Toruss Press, 2009.
- [11] **S.F. Svin'in**, Bazisniye splayny v teorii otschetov signalov [Basic splines in the theory of signal count], St. Petersburg, Nauka, 2003.

THE AUTHORS

LOBANOV Ivan D.

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

DENISOV Alexander V.

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

ВАДИМ КОНСТАНТИНОВИЧ ИВАНОВ **(к семидесятилетию со дня рождения)**

5 апреля 2016 года исполнилось 70 лет со дня рождения заслуженного деятеля науки Российской Федерации, доктора физико-математических наук, заведующего кафедрой экспериментальной физики, профессора, потомственного политехника Вадима Константиновича Иванова.

Вадим Константинович являет собой яркий пример неистощимого оптимизма, доброты и открытости, жизнерадостного отношения к жизни.

Наш юбиляр родился в поселке Будогощь Киришского района Ленинградской области. Его отец Константин Евгеньевич Иванов (1912 — 1994) — доктор технических наук, профессор. И отец, и дед Вадима Константиновича были преподавателями гидротехнического факультета ЛПИ им. М.И. Калинина. Детство Вадима Константиновича прошло в Ленинграде. До 8-го класса он учился в 199-й школе на площади Искусств. В школу ходил пешком мимо Русского музея, был свидетелем появления в центре площади в 1957 году гениального творения скульптора М.К. Анискина — памятника А.С. Пушкину.

В 1959 году Константина Евгеньевича Иванова с семьей командировали от Правительства СССР в Китайскую Народную Республику, где он занял пост советника при Министерстве водного хозяйства Китая и принял деятельное участие в решении гидротехнических проблем республики. Вадим Константинович один год учился в русской школе для детей советских специалистов в Пекине. Там юноша увлекался спортом: плаванием, баскетболом, футболом, настольным теннисом. Тогда же он заинтересовался физикой, посещал занятия

физического кружка, осваивал и английский язык.

В 1963 году, окончив школу с золотой медалью, он поступил на физический факультет Ленинградского государственного университета, участвуя в общем конкурсе (более 5 человек на место), поскольку именно в 1963 году льготы для поступающих с золотой медалью были отменены. В университете у него были великолепные учителя. Лекции по физике читали профессора Н.А. Толстой, Н.П. Пенкин, Г.С. Кватер, Н.И. Калитеевский, по математике — профессора М.Ф. Широхов, Мария Ивановна и Михаил Иванович Петрашень, М.Ш. Бирман. Несколько показательных лекций прочитал академик В.А. Фок.



В 1967 году Вадим Константинович, еще будучи студентом, приходит в теоретический отдел ФТИ им. А.Ф. Иоффе, в сектор ядерной физики (руководитель — Лев Абрамович Слив), к старшему научному сотруднику Миرونу Янкевичу Амусья. В то время там собиралась достаточно сильная группа молодых исследователей, которые занимались теоретической ядерной физикой и физикой многоэлектронных атомов. В 1969 году, окончив с отличием ЛГУ (кафедра ядерных реакций), он начал работать стажером-исследователем в теоретическом отделе в секторе Л.А. Слива ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Первые научные работы им были выполнены и опубликованы в соавторстве с М.Я. Амусья, Н.А. Черепковым и Л.В. Чернышевой. В 1974 году в диссертационном совете ФТИ Вадим Константинович защитил кандидатскую диссертацию на тему «Межоболочечные и межподоболочечные корреляции при фотоионизации атомов».

В 1978 году он переходит на работу в Ленинградский политехнический институт, на кафедру экспериментальной физики, где в эти годы формируется сильный коллектив молодых физиков. Именно им предстояло тогда модернизировать систему преподавания общей физики в Политехническом институте, чтобы не только сохранить «систему физтеха» (основана на единстве учебного процесса и научных исследований), но и вывести ее на качественно новый уровень, соответствующий современным достижениям в физике твердого тела, оптике, радиоспектроскопии, лазерной физике и других областях. В 1979 году он создал и возглавил на кафедре группу, занимающуюся теорией многоэлектронных атомов и атомных процессов. За время существования этой группы ею проделан огромный объем работы, описание которой потребовало бы много страниц текста, что выходит за рамки настоящего очерка.

Успешно совмещая научную работу с преподаванием физики, В.К. Иванов в 1988 году защищает докторскую диссертацию,

посвященную проблемам квантовой теории атомных процессов. Полученные им результаты, опубликованные в многочисленных статьях и представленные на конференциях, тесные связи с коллегами из Австралии, США, Германии, Англии, Шотландии и других стран делают имя В.К. Иванова известным далеко за пределами СССР.

Начало 1990-х. Рухнули барьеры, разделявшие российскую и мировую науку, появилась возможность участвовать в совместных исследованиях, проектах. В эти годы В.К. Иванов проводит много времени в зарубежных университетах, изучая процессы фотопоглощения положительными и отрицательными ионами, кластерами, исследуя резонансные явления в наноразмерных структурах, налаживая международные контакты кафедры экспериментальной физики Политехнического университета.

Научный авторитет ученого растет. В качестве приглашенного профессора он проводит совместную с зарубежными коллегами научную работу, участвует в семинарах университетов многих стран. Благодаря заслуженному авторитету, он становится членом Научного совета по физике электронных и атомных столкновений РАН, членом Совета отделения по атомной и молекулярной физике Европейского физического общества, членом редколлегии общеевропейского журнала по физике «Journal of Physics (B)». В 2000 году он становится действительным членом Института физики в Лондоне, с 2012 года он президент Российского отделения Европейской ассоциации продвижения науки и технологии.

В 2008 году в журнале «Научно-технические ведомости СПбГПУ» создается серия «Физико-математические науки», где В.К. Иванов становится председателем редколлегии. По мере развития издательской деятельности журнала создается отдельное издание — «Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки», в котором В.К. Иванов становится



ся главным редактором (2014). И на этом поприще он проявляет свою способность собрать вокруг себя сильный коллектив единомышленников и создать в нем непринужденную, творческую атмосферу. Вадима Константиновича отличают требовательное отношение к качеству публикуемых материалов, коллегиальность в решении многочисленных проблем журнала, и при этом бережное и доброе отношение к своим сотрудникам. Авторитет журнала неизменно поддерживается публикациями как самого ученого, так и его теоретической группы, хотя такие статьи охотно могут принять самые престижные зарубежные и отечественные журналы.

Преподавательская деятельность В.К. Иванова началась с середины 1970-х годов. С 1978 года он читает курс общей физики для студентов физических направлений подготовки и проводит практические занятия по решению задач. Его лекционный курс по физике, представленный на сайте кафедры, пользуется большой популярностью среди студентов различных специальностей, отличается четкой последовательностью, строгой логикой и, в то же время, доступностью изложения материала. Лекции сопровождаются показом реальных и компьютерных демонстраций. Помимо лекций по общей физике, В.К. Иванов разработал спецкурс «Квантовая теория многоэлектронных систем» для студентов старших курсов и читал его в течение 20 лет. В 2013 году в Издательстве Политехнического университета вышло его пособие по этому курсу «Квантовая теория многих тел». Для студентов кафедры первого года обучения В.К. Иванов также читает курс «Введение в специальность». По практическим занятиям им в соавторстве написано несколько учебно-методических пособий по методике решения задач по физике.

Следует отметить, что после окончания магистратуры выпускники Вадима Константиновича поступают в аспирантуру и посвящают себя научной работе.

Этой работой вполне можно было бы успешно заниматься до сегодняшнего дня,

однако в конце 1990-х все заметнее становятся негативные тенденции в российской науке и образовании, которые не обошли и кафедру экспериментальной физики. Ситуация усугубилась тем, что в 1998 – 1999 гг. один за другим ушли из жизни профессора Ю.И. Уханов и В.Ф. Мастеров, долгие годы бравшие на себя решение административных и научно-методических проблем. В этот момент В.К.Иванов проявил большое мужество и смелость, взяв на себя сначала кафедральные заботы, а затем с 2001 до 2011 года – и руководство физико-механического факультетом. А когда в 2001 году был создан Научно-методический совет по физике Министерства образования и науки России под руководством академика Ж.И. Алферова, В.К. Иванов стал первым заместителем председателя этого Совета.

Многогранная научная, педагогическая и административная деятельность Вадима Константиновича не осталась незамеченной. В 2010 году ему было присвоено почетное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации», в 2013 г. присуждена премия Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся достижения в области высшего и среднего профессионального образования. Этой премией была отмечена конкурсная работа «Организационно-методические разработки, способствующие повышению качества преподавания физики в высшей школе».

Под давлением такого груза забот и ответственности многие люди становятся раздражительными, резкими, замкнутыми. Однако это совершенно не относится к нашему юбиляру, который, как и раньше, интеллигентен, приветлив и внимателен к людям (особенно к студентам), энергичен, находится в хорошей научной и спортивной форме. В его обществе всегда приятно находиться, он доступен и прост, в его разговоре никогда не бывает менторских интонаций. Он может по-прежнему взять в руки гитару и спеть что-нибудь для своих друзей. 70-летний возраст для настоящего умного ученого – это расцвет его творческой деятельности.

Многочисленные друзья и коллеги Вадима Константиновича, Редакционный совет и Редколлегия нашего журнала с радостью поздравляют дорогого Вадима Константиновича с 70-летием и желают ему,

прежде всего, здоровья, новых свершений, исполнения самых дерзких желаний, больших успехов в его многогранной деятельности, сохранения энергии и оптимизма на долгие годы.



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Безпрозванный И.Б.	72	Неласов И.В.	37
Березин С.В.	108	Октябрьский В.П.	82
Власова О.Л.	72	Павлов В.В.	55
Дат Д.В.	44	Панькин Д.В.	27
Денисов А.В.	136	Пастухов А.А.	95
Дубов В.В.	65	Поликарпов Ю.И.	19
Егорова П.А.	72	Полудницин А.Н.	116
Захарова И.Б.	9	Прокофьев А.А.	95
Каров Д.Д.	19	Романов Н.М.	9
Картамышев А.И.	44	Слуцкер А.И.	19
Кораблев В.В.	65	Смирнов М.Б.	27
Краснова Н.К.	55	Тихомиров В.В.	126
Липницкий А.Г.	37, 44	Хохлюк В.И.	87
Лобанов И.Д.	136	Шарифулин А.Н.	116

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 2 (242) 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. Ящуржинская* — 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 15.06.2016. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 17,9. Уч.-изд. л. 17,9. 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 двойными международными стандартными сериальными номерами **ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782**. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международную систему по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. 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