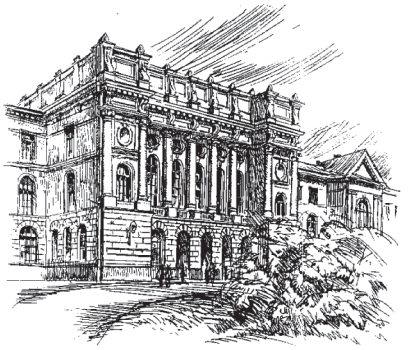
4(134)/2011



# Научно-технические ведомости СПбГПУ

## ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Санкт-Петербург. Издательство Политехнического университета

Министерство образования и науки РФ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ

### РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

*Алферов Ж.И.*, академик РАН; *Васильев Ю.С.*, академик РАН (председатель);
*Костюк В.В.*, академик РАН; *Лопота В.А.*, чл.-кор. РАН;
*Окрепилов В.В.*, чл.-кор. РАН; *Патон Б.Е.*, академик РАН и НАН Украины;
*Рудской А.И.*, чл.-кор. РАН; *Федоров М.П.*, чл.-кор. РАН;
*Фортов В.Е.*, академик РАН.

### РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

*Васильев Ю.С.*, академик РАН (главный редактор); *Арсеньев Д.Г.*, д-р техн. наук, профессор; *Бабкин А.В.*, д-р экон. наук, профессор (зам. гл. редактора);
*Боронин В.Н.*, д-р техн. наук, профессор; *Глухов В.В.*, д-р экон. наук, профессор;
*Дегтярева Р.В.*, д-р истор. наук, профессор; *Иванов А.В.*, д-р техн. наук, профессор;
*Иванов В.К.*, д-р физ.-мат. наук, профессор; *Козловский В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор; *Рудской А.И.*, чл.-кор. РАН (зам. гл. редактора); *Юсупов Р.М.*, чл.-кор. РАН.

## СЕРИЯ «ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ»

### РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ СЕРИИ

*Алферов Ж.И.*, академик РАН — председатель;
*Варшалович Д.А.*, академик РАН;
*Глухих В.А.*, академик РАН;
*Жуков А.Е.*, чл.-кор. РАН — зам. председателя;
*Рудской А.И.*, чл.-кор. РАН — зам. председателя;
*Рыбин В.В.*, чл.-кор. РАН;
*Сурис Р.А.*, академик РАН;
*Финкельштейн А.М.*, чл.-кор. РАН.

### РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ

*Иванов В.К.*, д-р физ.-мат. наук, профессор — председатель;
*Антонов В.И.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Блинов А.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Капралова В.М.*, канд. физ.-мат. наук, доцент — отв. секретарь;
*Кожевников Н.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Козловский В.В.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Остряков В.М.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Самойлов В.О.*, чл.-кор. РАМН;
*Топтыгин И.Н.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Фирсов Д.А.*, д-р физ.-мат. наук, профессор;
*Фотиади А.Э.*, д-р физ.-мат. наук, профессор — зам. председателя.



*Журнал выходит под научно-методическим руководством Российской академии наук с 1995 г.*

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

Журнал издается в пяти сериях:

*Наука и образование;*
*Физико-математические науки;*
*Экономические науки;*
*Информатика, телекоммуникации, управление;*
*Гуманитарные и общественные науки.*

Журнал зарегистрирован в Госкомпечати РФ. Свидетельство № 013165 от 23.12.94.

Подписной индекс **18390** в каталоге «Газеты. Журналы» агентства «Роспечать».

Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Национальной электронной библиотеки на сайте http://www.elibraru.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 серии (812) 294-22-85.



© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2011

# Содержание

## Физика конденсированного состояния

**Баграев Н.Т., Брилинская Е.С., Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Романов В.В.** *Эффекты Шубникова – де Гааза и де Гааза – Ван Альфена в объемных кристаллах и низкоразмерных структурах* .... 7

**Радомский В.С., Астапова Е.С., Филимонов А.В.** *Формирование физико-химических свойств системы цеолит – наночастицы при механической активации* ..... 16

**Бронвальд Ю.А., Бурковский Р.Г., Филимонов А.В., Вахрушев С.Б., Фотиади А.Э., Е Цзо-Гуан.** *Наномасштабная гетерофазность и диффузное рассеяние синхротронного излучения в монокристаллах цирконата-титаната свинца в области морфотропной фазовой границы* ..... 24

**Ковалевский Д.В.** *Электронные свойства модели Кронига – Пенни с полубесконечной решеткой случайных потенциальных барьеров* ..... 36

**Пастор А.А., Сердобинцев П.Ю., Тимофеев Н.А., Ходорковский М.А., Накозина А.А.** *Определение электрокинетических свойств полупроводниковых материалов для создания нанокомпозитных катодов* ..... 39

## Математическое моделирование физических процессов

**Иванов В.И., Кузин А.А., Ливашвили А.И., Хе В.К.** *Динамика светоиндуцированной тепловой линзы в жидкофазной двухкомпонентной среде* ..... 44

**Жгутов В.М.** *Геометрически нелинейные математические модели термоупругости оболочек переменной толщины* ..... 46

**Осипова Н.Г., Семёнов А.С.** *Моделирование нелинейного поведения пьезокерамики тетрагональной структуры методами конечно-элементной гомогенизации* ..... 56

**Корсун М.М., Рояк М.Э.** *Учет шихтованности материалов при моделировании электромагнитных процессов* ..... 64

**Мороз А.П., Серебряков А.С., Бердников Я.А.** *Численный подход к решению задач количественного рентген-флуоресцентного анализа образцов сложной геометрии* ..... 71

**Васильев Г.И., Холупенко Е.Е., Байко Д.А., Быков А.М., Красильщиков А.М., Павлов Г.Г.** *Особенности пространственного распределения черенковских фотонов в стволе широкого атмосферного ливня, вызванного гамма-квантом с энергией 5 ГэВ* ..... 79

## Математическая физика

**Шацкий А.В., Шацкая Л.А.** *Электрический импеданс пьезопластины, нагруженной на среду через контактный слой жидкости* ..... 87

**Златин А.Н.** *Новые ключевые парные сумматорные уравнения, связанные с задачей осесимметричного кручения пространства со сферической трещиной* ..... 90

## Приборы и техника физического эксперимента

**Миронов В.О.** *Разработка методик контроля качества для многолепесткового коллиматора в дистанционной лучевой терапии* ..... 94

**Аксенов Е.Т., Кафидова Г.А., Мокрова Д.В., Петров В.М.** *Контроль концентрации глюкозы в биотканях методом когерентной оптической поляриметрии* ..... 102

## Физическая электроника

**Павлов В.В.** *Принцип конформного преобразования электростатических полей* ..... 110

## Физическая оптика

**Мокрушин Ю.М.** *Влияние нелинейности акустооптического взаимодействия в модуляторе из парателлурита на формирование изображения гармонических сигналов* ..... 118

## Физическое материаловедение

**Прохорова Т.В., Степанова Т.Р.** *Моделирование процессов ползучести и разрушения жаропрочной хромистой стали Р91* ..... 130

**Бочарова Т.В.., Тагильцева Н.О., Сысоев Д.С., Васильева А.Г.** *Влияние ионообменной обработки и гамма-облучения на спектроскопические свойства фосфатных стекол, активированных европием* ..... 137

**Закревский В.А., Сударь Н.Т.** *Работоспособность органических светодиодов* ..... 142

## Биофизика и медицинская физика

**Руденко Е.Д., Сабанцев А. В., Швецов А. В., Илатовский А. В., Червякова Д.Б., Григорьев М.Ю., Петухов М.Г.** *Анализ молекулярных механизмов растяжения коротких фрагментов двухнитевых ДНК* .... 147

**Шухаев С.В., Федорович Е.Д., Карякин Ю.Е., Кораблев В.В.** *Вязкоупругие биополимеры: физико-механические свойства и применение в офтальмологии* ..... 154

## Физика молекул

**Степанова Т.П., Глаздовская М.М., Капралова В.М.** *Влияние внешнего постоянного электрического поля на дипольный момент мезогенсодержащего полимера* ..... 162

## Ядерная физика

**Спирин Д.О., Бердников А.Я., Марков С.И., Сафонов А.С.** *Оптимизация параметра дискриминации в методе дуальных энергий* ..... 171

**Павлов Ф.Ф.** *Поведение инвариантных амплитуд нуклон-нуклонного рассеяния* ..... 176

**Бердников Я.А., Иванов А.Е., Ким В.Т., Мурзин В.А.** *Образование адронов в лептон-ядерных взаимодействиях при высоких энергиях* ..... 185

## Математика

**Шемякина Т.А.** *Примеры решения задачи Коши для некоторых вариантов системы Франкля эллиптического типа* ..... 191

## Механика

**Булович С.В., Григорьев В.В., Исаков С.Н., Петров Р.Л.** *Экспериментальное исследование пульсирующего истечения газа из ресивера* ..... 198

## Хроника

**Зильберглейт А.С., Галактионов Е.В., Златин А.Н., Тропп Э.А.** *Николай Николаевич Лебедев (к столетию со дня рождения)* ..... 202

*Сведения об авторах, контактные данные* ..... 204

*Аннотации, ключевые слова* ..... 210

# Contents

## Condensed matter physics

**Bagraev N.T., Brilinskaya E.S., Klyachkin L.E., Malyarenko A.M., Romanov V.V.** *The Shubnikov – de Haas and the de Haas – van Alphen effects in bulk crystals and low-dimension structures* ..... 7

**Radomskiy V.S., Astapova E.S., Filimonov A.V.** *The formation of physical-chemical properties of zeolite-nanoparticles system by mechanical activation*..... 16

**Bronwald Yu.A., Burkovski R.G., Filimonov A.V., Vakhrushev S.B., Fotiadi A.E., Ye Z.-G.** *Nanoscale heterophasity and synchrotron radiation diffuse scattering in lead zirconate titanate single crystals near the morphotropic phase boundary*..... 24

**Kovalevsky D.V.** *Electronic properties of the Kronig – Penney model with semi-infinite lattice of random potential barriers* ..... 36

**Pastor A.A., Serdobintsev P.Yu., Timofeev N.A., Khodorkovskii M.A., Nakozina A.A.** *Determinations of electrokinetic properties of semiconducting materials for making nanocathods* ..... 39

## Simulation of physical processes

**Ivanov V.I., Kuzin A.A., Livashvili A.I., Khe V.K.** *The light induced thermal lens dynamics in a binary fluid medium* ..... 44

**Zhgoutov V.M.** *Geometrically nonlinear thermoelasticity mathematic models of shells with the variable thickness* ..... 46

**Osipova N.G., Semyonov A.S.** *The simulation of nonlinear behavior for ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing*..... 56

**Korsun M.M., Royak M.E.** *Taking account the lamination factor in electromagnetic processes simulation* ..... 64

**Moroz A.P., Serebryakov A.S., Berdnikov Ya.A.** *The computational approach to the problem of quantitative XRF analysis for complex geometry samples* ..... 71

**Vasilyev G.I., Kholupenko E.E., Baiko D.A., Bykov A.M., Krassilchtchikov A.M., Pavlov G.G.** *The spatial distribution features of Cherenkov photon flux in the core of an electron-photon extensive atmospheric shower induced by a 5 GeV primary gamma-quantum* ..... 79

## Mathematical physics

**Shatsky A.V., Shatskaya L.A.** *Electrical impedance of flat piezotransducer loaded on environment through the contact layer fluid*..... 87

**Zlatin A.N.** *New key dual series equations connected with axisymmetric torsioin problem for an elastic space containing spherical crack* ..... 90

## Experimental technique and devices

**Mironov V.O.** *Testing procedure development for multileaf collimator in remote radiation therapy* ..... 94

**Aksenov E.T., Kafidova G.A., Mokrova D.V., Petrov V.M.** *Glucose concentration testing in the biological tissue by coherent optical polarimetry* ..... 102

## Physical electronics

**Pavlov V.V.** *A principle of the conformal transformation of elecrostatic fields* ..... 110

## Physical optics

**Mokrushin Yu.M.** *The nonlinearity influence of acousto-optic interaction in the paratellurite modulator on the formation of harmonious signals imaging* ..... 118

## Physical materials technology

**Prokhorova T.V., Stepanova T.R.** *Modelling of a creep and a damage processes for high-temperature chromium P-91 steel* ..... 130

**Bocharova T.V., Tagil'tseva N.O., Sysoev D.S., Vasil'eva A.G.** *The effect of the ion-exchange treatment and gamma-irradiation on the spectra of phosphate glasses doped with europium* ..... 137

**Zakrevskii V.A., Sudar N.T.** *Durability of polymer light emitting diodes* ..... 142

## Biophysics and medical physics

**Rudenko E.D., Sabantsev A.V., Shvetsov A.V., Ilatovskiy A.V., Chervyakova D,B., Grigoriev M.Yu., Petukhov M.G.** *An analysis of molecular mechanisms of stretching of short fragments of DNA double stranded* ..... 147

**Shukchaev S.V., Fedorovich E.D., Karyakin Yu.E., Korablev V.V.** *Viscous-elastic biopolymers: physical-mechanical properties and application in ophthalmology* ..... 154

## Physics of molecules

**Stepanova T.P., Glazdovskaya M.M., Kapralova V.M.** *The effect of the external constant electric field on dipole moment of LC main-chain polymer* ..... 162

## Nuclear physics

**Spirin D.O., Berdnikov A.Ya., Markov S.I., Safonov A.S.** *Optimization of discrimination effect of the dual-energy method in radioscopy* ..... 171

**Pavlov F.F.** *The behavior of invariant amplitudes of nucleon-nucleon scattering* ..... 176

**Berdnikov Ya.A., Ivanov A.E., Kim V.T., Murzin V.A.** *Hadron production in lepton-nucleus interactions at high energies* ..... 185

## Mathematics

**Shemyakina T.A.** *Solution examples of the Cauchy problem for some variants of the Frankl system of elliptic type* ..... 191

## Mechanics

**Bulovich S.V., Grigoriev V.V., Isakov S.N., Petrov R.L.** *An experimental investigation of the pulsing gas efflux from the receiver* ..... 198

## Chronicle

**Zilbergleit A.S., Galaktionov E.V., Zlatin A.N., Tropp E.A.** *Nikolay Nicolaevich Lebedev (on occasion of his 100th birthday)* ..... 202

*About the authors, contact information* ..... 204

*Abstracts, key words* ..... 215

УДК 538.935

*Н.Т. Баграев, Е.С. Брилинская, Л.Е. Клячкин,*
*А.М. Маляренко, В.В. Романов*

# ЭФФЕКТЫ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА И ДЕ ГААЗА – ВАН АЛЬФЕНА В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

Значение каждой научной публикации определяется в конечном итоге тем, какую роль она сыграла для развития той или иной области науки. С этой точки зрения работы Л.В. Шубникова и В. де Гааза, а также В. де Гааза и П. Ван Альфена, опубликованные в 1930 году, в которых были обнаружены осцилляции сопротивления и статической магнитной восприимчивости висмута в зависимости от величины поперечного магнитного поля, в полной мере можно оценить лишь в настоящее время. Эффекты Шубникова – де Гааза (ШдГ) и де Гааза – Ван Альфена (дГВА) стали первой экспериментальной идентификацией существования размерного квантования энергии и момента в твердом теле. В настоящее время методы на основе эффектов ШдГ и дГВА являются мощным инструментом изучения процессов квантовой интерференции, особенно в связи с развитием физики наноструктур, размеры которых сравнимы с фермиевской длиной волны, что позволяет исследовать взаимосвязанность квантования характеристик поперечного и продольного транспорта носителей. В данной работе эффекты ШдГ и дГВА в полупроводниковых наноструктурах анализируются с целью создания методики для определения значения эффективной массы носителей в условиях осцилляций их плотности при изменении температуры и магнитного поля.

### Квантование характеристик продольного транспорта носителей тока (квантование Ландау)

В 1930 году Л.Д. Ландау опубликовал работу, в которой рассмотрел диамагнитные свойства свободных электронов [1]. Применив формализм квантовой механики к орбитальному движению свободных электронов в металле, находящемся в магнитном поле $H$, он предсказал слабую постоянную диамагнитную восприимчивость $\chi$:

$$\chi = -\frac{4m\mu_Б^2}{h^2}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} N^{1/3}, \qquad (1)$$

которая составляет одну треть величины спиновой парамагнитной восприимчивости, вычисленной Паули, и поэтому не может непосредственно наблюдаться, поскольку перекрывается более сильным паулиевским парамагнетизмом. В формуле (1) $\mu_Б$ – магнетон Бора, $m$ – масса электрона, $h$ – постоянная Планка, $N$ – число электронов проводимости в единице объема.

Кроме того, в этой работе Ландау сделал замечание, что выражение (1) справедливо только при выполнении неравенства $\mu_Б H \ll kT$ ($k$ – постоянная Больцмана, $T$ – температура). Это означает, что полученные результаты теряют силу при достаточно больших полях и низких температурах. Л.Д. Ландау писал, что «в этом случае могла бы возникнуть сложная нелинейная зависимость магнитного момента

от поля, которая к тому же имела бы сильную периодичность по полю» [1].

Иными словами, сплошной энергетический спектр свободных носителей становится квантованным в условиях внешнего магнитного поля, перпендикулярного их движению (рис. 1). Фактически это было предсказанием того, что при низких температурах намагниченность и сопротивление кристаллов должны осциллировать при изменении магнитного поля.

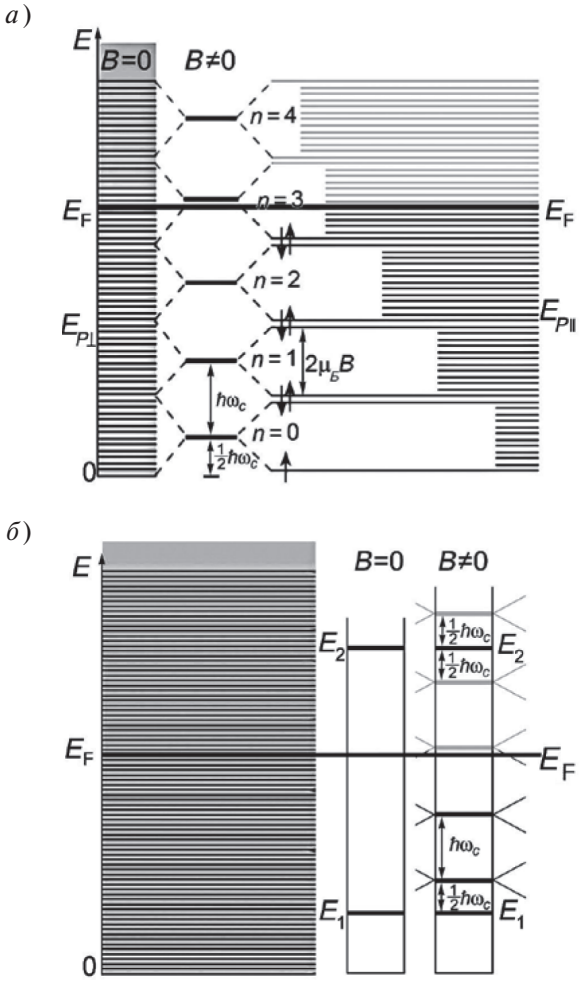



Рис. 1. Схема, иллюстрирующая переход от квазинепрерывного энергетического спектра электронов в нулевом магнитном поле ($B = 0$) к квантованному спектру при $B \neq 0$ в объемном материале (*а*) и в низкоразмерных системах (*б*).
$E_F$ – уровень Ферми; $E_{P\perp}$, $E_{P\|}$ – энергии, соответствующие движению электрона соответственно перпендикулярно и параллельно магнитному полю; $\mu_Б$ – магнетон Бора; $\hbar\omega_c$ – энергия кванта; $n$ – квантовое число осциллятора; $E_1$, $E_2$ – позиции уровней размерного квантования

Заметим, что сам Ландау счел невозможным экспериментальное наблюдение подобных эффектов, «поскольку из-за неоднородности реальных полей всегда будет происходить усреднение» [1].

Однако уже в 1930 году в Лейденской лаборатории Л.В. Шубников, измеряя магнетосопротивление кристаллов висмута при низких температурах, обнаружил его характерные осцилляции, что стало первым экспериментально наблюдаемым проявлением диамагнитного квантования энергии электронов в твердом теле (рис. 2,*а*) [2]. Следующим шагом было обнаружение осцилляций магнитной восприимчивости

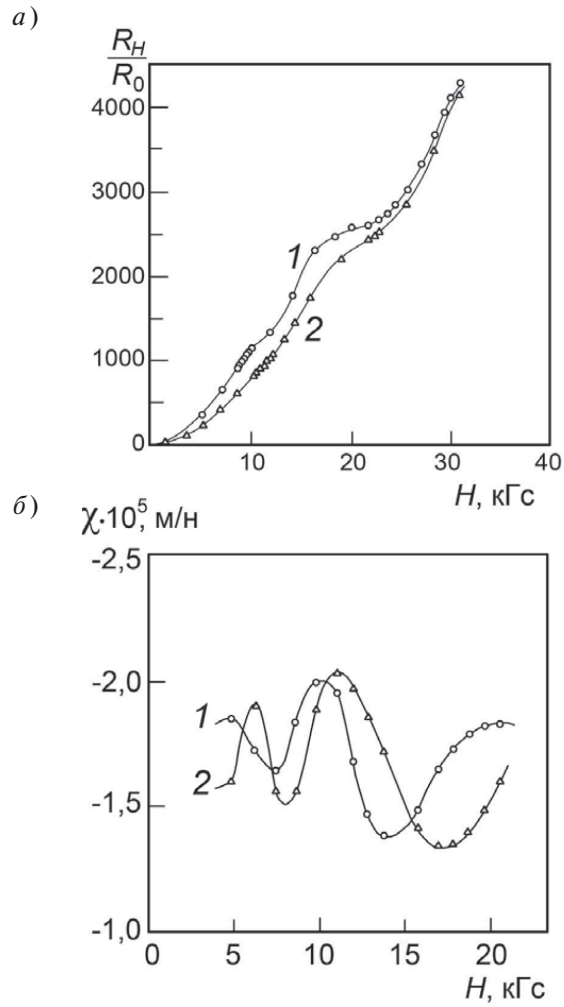



Рис. 2. Осцилляции магнетосопротивления (*а*) (эффект Шубникова – де Гааза) и магнитной восприимчивости (*б*) (эффект де Гааза – Ван Альфена) в висмуте;
*а* – $T = 14{,}15$ К (*1*) и 20,43 К (*2*); *б* – $T = 14{,}15$ К, магнитное поле направлено перпендикулярно (*1*) и параллельно (*2*) бинарной оси, соответственно

кристаллов висмута как функции магнитного поля, которое осуществили в той же лаборатории профессор В.Й. де Гааз и его аспирант П.М. Ван Альфен (рис. 2,*б*) [3]. Важно, что при одной и той же ориентации магнитного поля наблюдалась одна и та же периодичность особенностей, как в эффекте Шубникова – де Гааза (ШдГ), так и в эффекте де Гааза – Ван Альфена (дГВА).

Позднее были обнаружены аналогичные осцилляции термоэдс, холловской эдс, теплоемкости, теплопроводности, квазиклассического коэффициента поглощения длинноволнового звука и других термодинамических и кинетических характеристик металла в зависимости от величины поперечного магнитного поля. В настоящее время такие осцилляции объединены общим названием квантовых осцилляционных эффектов.

### Критерий «сильного поля» для наблюдения осцилляций Шубникова – де Гааза и де Гааза–Ван Альфена

Все квантовые осцилляционные эффекты наблюдаются при выполнении следующих условий:

$$\omega_c\tau \gg 1;\ \hbar\omega_c > kT;\ E_{\mathrm{F}} > \hbar\omega_c, \qquad (2)$$

где $\omega_c$ – циклотронная частота; $\tau$ – время релаксации момента носителей; $E_{\mathrm{F}}$ – энергия Ферми.

Эти условия наблюдения осцилляций ШдГ и дГВА являются достаточно жесткими и сводятся к так называемому критерию «сильного поля» $\mu B >> 1$ ($\mu$ – подвижность носителей), который определяет область существования квантовой интерференции в продольном транспорте. Поэтому в течение долгих лет эффекты ШдГ и дГВА наблюдались в объемных системах только в сильных магнитных полях при низких температурах.

После обнаружения эффекта ШдГ в монокристаллах висмута осцилляции его магнетосопротивления подробно исследовались в работах [4–11]. Позднее эффект ШдГ был обнаружен при исследовании цинка, магния, бериллия и ниобия [12–15] и интерметаллических соединений, сплавов и вырожденных полупроводников. Особенно подходящими объектами для наблюдения осцилляций ШдГ оказались полупроводники группы $A_3B_5$ и полупроводники с узкой запрещенной зоной $A_4B_6$.

В последние годы эффект ШдГ интенсивно исследуется в антимониде индия [16–19], арсениде индия [20–25], селениде ртути [26–28], сплавах висмут-сурьма [29–32], сплавах халькогенидов свинца и олова [33–38], а также в полуметаллах (Bi, Sb, As, графит) [39–42].

Таким образом, эффекты Шубникова – де Гааза (ШдГ) и де Гааза – Ван Альфена (дГВА) являются универсальным и мощным инструментом для исследования энергетического спектра вырожденных электронных систем в металлах, полуметаллах, сплавах и легированных полупроводниках.

Как отмечено выше, эффекты ШдГ и дГВА могут быть качественно и количественно объяснены, если отказаться от ограничения, накладываемого неравенством $\mu_{\text{Б}} H \ll kT$, т. е. рассмотреть случай сильных магнитных полей и низких температур.

Отправным пунктом статистических вычислений магнитной восприимчивости электронного газа служит выражение для термодинамического потенциала газа фермионов с учетом всех квантовых состояний в форме [31, 32]:

$$\Phi = -2kT\sum_j \ln\left[1+\exp\left(\frac{\tilde{\mu}-E_j}{kT}\right)\right], \qquad (3)$$

где коэффициент два учитывает спиновое вырождение, а магнитное поле входит в неявном виде через энергии $E_j$ и химический потенциал $\tilde{\mu}$.

Энергия частицы, находящейся в состоянии $j$, в магнитном поле напряженностью $H$ равна [32, 33]:

$$E_j(H) = \frac{p_z^2}{2m} + \mu_{\text{Б}} H(2n+1) \pm \mu_{\text{Б}} H. \qquad (4)$$

Знаки перед последним слагаемым соответствуют двум возможным проекциям спина во внешнем магнитном поле $H$; $n$ – квантовое число осциллятора ($n$ = 1, 2, 3, ...).

Подстановка формулы (4) в выражение (3) в принципе позволяет вычислить магнитную восприимчивость электронного газа с достаточно полным учетом всех особенностей влияния статистики Ферми – Дирака на магнитные свойства газа фермионов, если отказаться от

ограничения, накладываемого неравенством $\mu_Б H \ll kT$, которое лежит в основе всех предыдущих вычислений [1].

Первая качественная теория эффектов ШдГ и дГВА в металлах в области сильных полей и низких температур $kT \le \mu_Б H$ была предложена Пайерлсом в рамках зонной теории, в которой рассматривался изотропный газ электронов, а эффективная масса электрона и энергия Ферми играли роль параметров [34, 35]. Данная теория осцилляций ШдГ и дГВА основывается на введенном Л.Д. Ландау представлении о расщеплении квазинепрерывного в отсутствие магнитного поля ($H = 0$) энергетического спектра электронов проводимости во внешнем магнитном поле $(H \ne 0)$, приводящем к появлению системы дискретных эквидистантных уровней, получивших название уровней Ландау [1]. В рамках этого представления круговое прецессионное движение свободных электронов во внешнем магнитном поле $\mathbf{H}\cdot(\mathbf{H}\|z)$ можно представить в виде суммы взаимно перпендикулярных периодических движений вдоль осей $x$ и $y$. В этом случае возникает линейный гармонический осциллятор с дискретным спектром энергий

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H = 2\mu_Б H\left(n+\frac{1}{2}\right). \qquad (5)$$

При этом движение электрона вдоль оси $z$ остается свободным и не квантуется в магнитном поле, вследствие чего полная энергия электрона определяется выражением

$$E(n, p_z) = \frac{p_z^2}{2m} + \mu_Б H\left(n+\frac{1}{2}\right), \qquad (6)$$

где $p_z$—$z$-компонента импульса электрона.

Таким образом, в отсутствие магнитного поля энергетический спектр электрона, отвечающий его движению в плоскости ($x$, $y$), является квазинепрерывным и графически может быть изображен сплошной полосой (см. рис. 1, *а*).

При включении магнитного поля весь энергетический спектр свободных носителей разбивается на отдельные узкие полоски шириной

$$\Delta E = 2\mu_Б H\left[\left(n+1+\frac{1}{2}\right)-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right] = 2\mu_Б H. \quad (7)$$

Каждая из полосок, «сжимаясь», превращается в дискретный уровень Ландау (см. рис. 1,*а*), поэтому степень вырождения каждого уровня равна $2\mu_Б H$.

Для объяснения наличия осцилляций ШдГ и дГВА обратимся к рис. 2 и учтем, что степень вырождения $g_n$ уровней Ландау (статистический вес) с учетом спина электрона определяется величиной напряженности магнитного поля:

$$g_n = \frac{2eVH}{h^2 c} dp_z, \qquad (8)$$

где $V$ – объем металла, $c$ – скорость света, $e$ – заряд электрона.

Если число, определяемое выражением (8), больше, чем полное число электронов $N$ в металле, то все они «уместятся» на одном уровне с номером $n = 0$. По мере уменьшения напряженности магнитного поля число «мест» на уровне будет уменьшаться и может стать меньше $N$, тогда электроны начнут «переселяться» на следующий уровень с номером $n = 1$ и так далее. Следовательно, магнитные и другие свойства электронов будут периодически изменяться с изменением напряженности магнитного поля.

Таким образом, осцилляции ШдГ и дГВА имеют место, когда уровни Ландау, возникающие в результате квантования движения электронов в сильном магнитном поле, «проходят» уровень Ферми и оказываются незаселенными, демонстрируя тем самым размерное квантование в магнитном поле, которое обусловлено формированием уровней Ландау. Далее, следуя [32 – 35], можно провести оценку периода осцилляций как функцию обратной величины приложенного магнитного поля. Выберем два значения поля $H_1$ и $H_2$, причем $H_1 > H_2$, для которых число уровней Ландау с энергиями, меньшими или равными $E_F$, равно соответственно $i$ и $i+1$, и обозначим этот период как

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \left(\frac{1}{H_2}\right) - \left(\frac{1}{H_1}\right). \qquad (9)$$

Тогда

$$i = \frac{E_F}{2\mu_Б H_1};\ i+1 = \frac{E_F}{2\mu_Б H_2}. \qquad (10)$$

Вычитая из второго равенства первое, для периода осцилляций получаем формулу

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{2\mu_Б}{E_F}. \qquad (11)$$

Как отмечено выше (см. условия (2)), осцилляции ШдГ и дГВА могут быть экспериментально обнаружены, если выполняется условие «сильного поля», которое выражает отсутствие рассеяния носителей при выполнении более, чем одного оборота в магнитном поле, а также отсутствие размытия расстояния между соседними уровнями Ландау за счет появления «хвоста» максвелловского распределения при $T > 0$ K.

Подбирая значения энергии Ферми и эффективной массы носителя, Р.Э. Пайерлс получил теоретические кривые, по форме очень близкие к экспериментальным [34, 35], но вычисленные значения намагниченности оказались в 70 раз меньше, чем наблюдавшиеся на опыте, из-за недооценки очень сильной анизотропии параметров [36]. Учет анизотропии значительно улучшил согласие между теорией и экспериментом, но попытки получить из эксперимента наилучшие значения параметров не принесли успеха из-за больших сложностей выполнения численного расчета, в рамках которого не была учтена симметрия кристалла [36]. Таким образом, модель Ландау [1], точно описывающая постоянство периодов осцилляций в обратном поле и форму зависимости амплитуды от температуры, которая хорошо служила для висмута, не подходила для объяснения многообразия периодов и зависимости от ориентации образцов других металлов, поскольку квадратичный закон дисперсии для электрона в металле справедлив лишь у дна соответствующей энергетической зоны и может быть использован для металлов с малым числом электронов проводимости.

Интерес к эффекту дГВА возродился в 50-е годы, в значительной степени благодаря теоретическим работам И.М. Лифшица и А.М. Косевича, построивших наиболее строгую теорию осцилляционных эффектов в металлах [43], и экспериментам Д. Шенберга [37, 38, 40], когда стало ясно, что эффект дГВА является уникальным инструментом исследования поверхности Ферми.

Прежде чем приступить к изложению основных положений теории Косевича – Лифшица [43], определим еще раз условия наблюдения эффекта дГВА. Отдельные требования предъявляются к чистоте монокристаллического образца, поскольку взаимодействие электронов проводимости с примесями, а также их рассеяние на фононах приводит к уменьшению амплитуды осцилляций. В то же время конечность длины свободного пробега не приводит к изменению периода осцилляций. Требуемая чистота определяется соотношением между длиной свободного пробега $\lambda$ и радиусом орбиты электрона $r_H$ во внешнем магнитном поле:

$$\lambda >> r_H.$$

Кроме того, внешнее магнитное поле должно удовлетворять условиям:

$$kT \le \mu_Б H << E_F. \qquad (12)$$

Сформулированные условия определяют область наиболее четкого проявления эффекта дГВА, поскольку вне этой области амплитуда осцилляций экспоненциально мала. Кроме того, вычисления термодинамического потенциала в форме (3) проводились в приближении ферми-газа, поскольку для ферми-жидкости картина явления не будет меняться [43]. Статистический вес (число состояний в интервале изменения проекции импульса электрона $p_z$, параллельной внешнему магнитному полю, от $p_z$ до $p_z + dp_z$) определяется выражением (8).

Тогда выражение для термодинамического потенциала приобретает вид:

$$\Phi = -\frac{VeHkT}{h^2}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\sigma}\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \times \\ \times \ln\left[1+\frac{\exp\left(\tilde{\mu}-E_n\left(p_z, H-\sigma\mu_Б H\right)\right)}{kT}\right]. \qquad (13)$$

Заметим, что интегрирование по координатам сводится к умножению на объем металла $V$. Обозначив выражение, стоящее под знаком суммы, через $\varphi(n)$ и воспользовавшись известной из теории рядов Фурье формулой Пуассона, можно представить (13) в виде

$$\Phi = -\frac{VeHkT}{h^2}\times \\ \times\sum_{\sigma}\left\{\int_{\frac{1}{2}}^{\infty}\varphi(n)dn + 2\,\mathrm{Re}\sum_{l=1}^{\infty}\int_{\frac{1}{2}}^{\infty}\varphi(n)\exp(2inl)\right\}. \qquad (14)$$

Диамагнетизм электронного газа и осциллирующие компоненты описываются вторым слагаемым, стоящим в выражении (14) в фигурных скобках.

Для нахождения осциллирующей компоненты статической магнитной восприимчивости вдоль направления магнитного поля нужно дважды продифференцировать выражение для осциллирующей части термодинамического потенциала по напряженности магнитного поля [43]:

$$\chi = -\frac{V}{\pi\hbar^3}\left(\frac{e\hbar}{c}\right)^{1/2}\frac{m^*\mu_Б kT}{H^{3/2}}\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^{l+1}l^{-1/2}\times$$
$$\times\frac{\cos\left(\pi l\frac{m^*}{m}\right)\sin\left(\frac{\pi}{4}-\pi l\frac{\mu_Б}{\mu_{эфф}H}\right)}{\mathrm{sh}\left(\frac{\pi^2 lkT}{\mu_{эфф}H}\right)}, \qquad (15)$$

где $\mu_{эфф} = \frac{e\hbar}{2m^*c}$ – эффективный магнетон Бора; $m^*$ – эффективная масса квазичастицы.

Анализ полученного выражения (15) показывает, что осцилляции становятся заметными, если величина принимает значение, по крайней мере, не меньше единицы; отсюда следует связь между внешним магнитным полем и температурой, при которых будет наблюдаться рассматриваемый эффект [32]:

$$H \approx 10^5 T\frac{m^*}{m}. \qquad (16)$$

Простые оценки показывают, что при $m \approx m^*$ эффект дГВА может наблюдаться только в полях порядка 10–100 Т и то лишь при температуре около 1 К. Однако экспериментальные исследования показывают, что в металлах эффект дГВА наблюдается только при гелиевых температурах и в значительно более слабых магнитных полях, порядка 0,1 Т. Отсюда следует важный вывод: значения эффективной массы квазичастиц, при которых наблюдаются эффекты ШдГ и дГВА, лежат в пределах (0,01 – 0,10)$m$.

При $l = 1$ из выражения (15) для периода осцилляций следует формула

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{\mu_{эфф}}{\pi\mu_Б}. \qquad (17)$$

Используя для проведения оценок известные выражения для энергии Ферми

$$E_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}$$

и магнетона Бора $\mu_Б = \frac{e\hbar}{2mc}$, получаем хорошее согласие с экспериментом для висмута [2, 37, 38, 40].

Во многих случаях полученные в экспериментах зависимости $\chi = \chi(H)$ для монокристаллических металлических образцов не ограничиваются одной гармоникой, а представляют собой наложение многих гармоник с резко различающимися периодами. Кроме того, сама зависимость (гармоника) может иметь еще тонкую структуру, представляющую собой быстро осциллирующую кривую [42]. Это указывает на весьма сложную форму поверхности Ферми у большинства металлов, что в свою очередь существенно затрудняет расшифровку экспериментальных кривых. Восстановить форму поверхности Ферми для ряда металлов позволяет использование широких интервалов полей при измерениях и тщательное изучение зависимости периодов осцилляций от ориентации кристалла во внешнем магнитном поле [43].

### Эффекты Шубникова – де Гааза и де Гааза–Ван Альфена в низкоразмерных структурах

В 1950–60-е гг. исследование эффекта дГВА в объемных образцах велось весьма интенсивно. Он наблюдался практически во всех чистых металлах, в графите, некоторых разбавленных растворах, сплавах и твердых растворах [32].

Весьма заметное усиление интереса к эффекту де Гааза – Ван Альфена в последние годы обусловлено интенсивными исследованиями низкоразмерных структур, прежде всего полупроводниковых наноструктур, в которых спектр уровней Ландау определяется, в первую очередь, позициями уровней размерного квантования.

Впервые на возможность регистрации двумерного эффекта де Гааза – Ван Альфена обратил внимание Р.Э. Пайерлс [34, 35]. Он показал, что в пределе нулевой температуры намагниченность идеального двумерного электронного газа имеет резкие пилообразные осцилляции с

постоянной амплитудой. Далее Ф. Зейтц обосновал положение, что двумерная модель электронного газа позволяет достаточно просто проиллюстрировать возникновение осцилляций магнитного момента при изменении внешнего магнитного поля [32].

Хотя качественно характер магнитных осцилляций в плоской двумерной системе такой же, как и для трехмерного электронного газа (в обоих случаях магнитный момент периодичен по обратному полю), существует принципиальная разница между этими случаями. При рассмотрении эффекта дГВА в трехмерной версии А.М. Косевич и И.М. Лифшиц предполагали, что химический потенциал постоянен и не зависит от приложенного магнитного поля. Это предположение является хорошим приближением в трехмерном случае, что подтверждается экспериментальными данными, но оно может не выполняться в случае двумерного электронного газа. Действительно, в изотропном случае электронный спектр непрерывен и поверхность Ферми пересекается большим числом уровней Ландау. При этом химический потенциал приблизительно равен энергии Ферми $E_F$ , а его осцилляции при изменении магнитного поля пренебрежимо малы (см. рис. 1,*а*).

Напротив, энергетический спектр двумерного электронного газа дискретен, и его химический потенциал при низких температурах должен быть «прикреплен» к верхнему занятому электронами уровню Ландау; при изменении магнитного поля и номера верхнего занятого уровня Ландау указанный потенциал должен испытывать скачки в зависимости от магнитного поля (см. рис. 1,*б*). В частности, при рассмотрении поведения анизотропного электронного газа в магнитном поле, приложенном вдоль оси *z*, в направлении которой движение носителей ограничено, было показано, что такое поведение химического потенциала приводит к термодинамически неустойчивой ситуации. Система становится термодинамически равновесной при $\hbar\omega_c \gg kT$ в том случае, когда ее химический потенциал локализован в середине промежутка между верхним заселенным и нижним «пустым» уровнями Ландау [44, 45].

В этом случае рассмотрение осциллирующей компоненты намагниченности также нуждается в некоторой модификации [46]:

$$M = \frac{\pi}{1+Z_0}\frac{ekT}{\hbar cd}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{\mathrm{sh}(2\pi^2 jkT/\hbar\omega_c)}\sin\left(2\pi j\frac{B_0}{B}\right), \quad (18)$$

где $d$ – размер наноструктуры в направлении размерного квантования (порядка фермиевской длины волны), $B_0 = \Phi_0 n_e \equiv hcn_e / e$ ($\Phi_0$ – квант магнитного потока, $n_e$ – двумерная плотность носителей), $\omega_c = eB/m^*c$; отношение $E_F / \hbar\omega_c$ выражено через $B_0/B$, ( $E_F / \hbar\omega_c = B_0 / B$ ).

Величина $Z_0$ пропорциональна константе обменного взаимодействия между электронами; она отрицательна и может быть близка к –1 [12], поэтому целесообразно рассматривать случай $Z_0 + 1 << 1$.

Важно отметить, что эффекты ШдГ и дГВА в низкоразмерных структурах могут наблюдаться в слабых магнитных полях при достаточно высоких температурах благодаря малой эффективной массе носителей тока и относительно большому времени релаксации момента носителей (эти величины определяют реализацию вышеприведенного условия «сильного поля»). В полной мере это проявилось при регистрации осцилляций ШдГ и дГВА в наносэндвичах на основе фторида кадмия (рис. 3). При этом температурные зависимости амплитуды статической магнитной восприимчивости не только позволяют определить значения малой эффективной массы носителей ($m^* \approx 10^{-4}\, m_e$), но и проявляют квантование магнитного момента в зависимости от плотности двумерных носителей, которая осциллирует при изменении температуры и магнитного поля.

В настоящее время эффекты Шубникова – де Гааза (ШдГ) и де Гааза – Ван Альфена (дГВА) являются универсальным и мощным инструментом для исследования энергетического спектра вырожденных трехмерных и двумерных электронных систем в металлах, полуметаллах, сплавах и легированных полупроводниках. Кроме того, они являются одними из немногих методов, позволяющих с высокой точностью определить абсолютные значения тензора эффективной массы носителей вплоть до очень малых величин ($m^* \approx 10^{-4}\, m_e$), что в данной работе было продемонстрировано на примере исследований наносэндвичей на основе фторида кадмия. Кроме того, исследование этих наносэндвичей показало, что методы на основе регистрации осцилляций ШдГ и дГВА

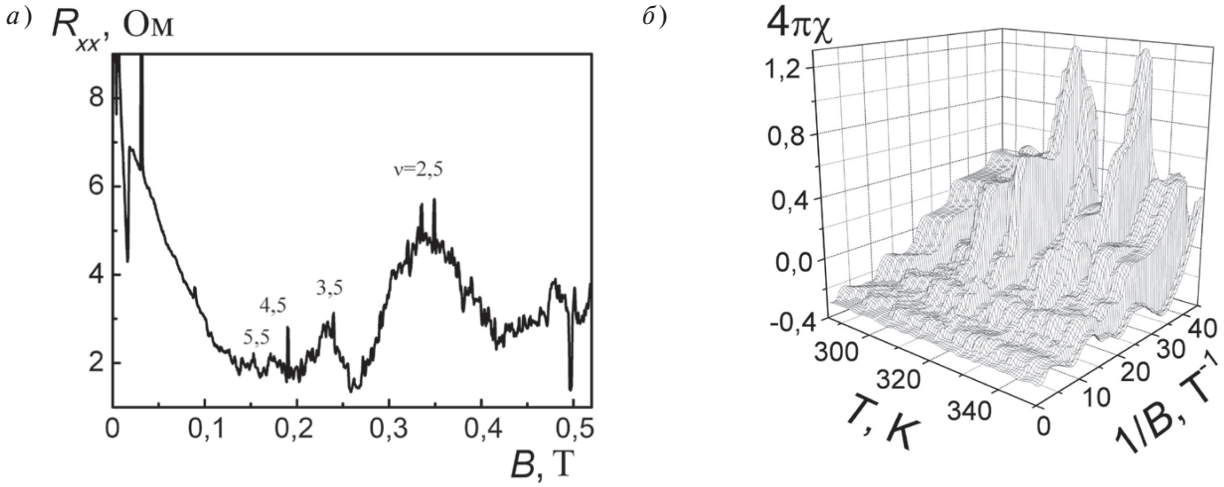



Рис. 3. Осцилляции Шубникова – де Гааза в полевой зависимости продольного магнетосопротивления при $T = 300$ K (*а*) и осцилляции де Гааза – Ван Альфена в полевых зависимостях статической магнитной восприимчивости, измеренные при различных температурах (*б*)

Представлена сэндвич-наноструктура $CdB_xF_{2-x}$/ *p*-$CdF_2$-QW/$CdB_xF_{2-x}$ на поверхности кристалла *n*-$CdF_2$; *а* – целочисленные значения ν соответствуют номерам уровней Ландау

открывают широкие возможности для исследования квантования магнитного момента в полупроводниковых наноструктурах внутри сверхпроводящих оболочек.

Данная работа поддержана в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Квантовая физика конденсированных сред» (проект 9.12), Федеральной целевой программы исследований и развития по приоритетным направлениям российской науки и технологического комплекса на 2007–2012 гг. (проект 02.514.11.4074), программы швейцарского национального научного фонда (SNSF) (grant IZ73Z0-127945/1), 7-й Европейской рамочной программы (Marie Curie Actions PIRSES-GA-2009-246784 project SPINMET).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ландау, Л.Д.** Диамагнетизм металлов [Текст] / Л.Д. Ландау // Zs. Phs. – 1930. – Т. 64. – С. 629 – 652.

2. **Schubnikow, L.** Magnetische Widerstandsvergrosserung in Einkristallen von Wismut bei tiefen Temperaturen [Text] / L. Schubnikow, W.J. de Haas // Leiden Commun. – 1930. – No. 207a. – P. 3 – 6.

3. **de Haas, W.J.** The dependence of the susceptibility of bismuth single-crystals upon the field [Text] / W.J. de Haas, P.M. van Alphen // Leiden Commun. – 1932. – No. 220d. – P. 454 – 458.

4. **Shoenberg, D.** The de Haas–van Alphen effect [Text] / D. Shoenberg // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. – 1952. – Vol. 245 (891). – P. 1 – 57.

5. **Alers, P.B.** The magnetoresistance of bismuth crystals at low temperatures [Text] / P.B. Alers, R.T. Webber // Phys. Rev. – 1953. –Vol. 91. – No. 5. – P. 1060–1065.

6. **Berlincourt, T.G.** Relation between the de Haas – van Alphen effect and the magnetoresistance in bismuth [Text] / T.G. Berlincourt // Phys. Rev. – 1953. – Vol. 91. – No. 5. – P. 1277 – 1278.

7. **Connell, R.A.** Low-temperature galvanomagnetic effects in bismuth monocrystals [Text] / R.A. Connell, J.A. Marcus // Phys. Rev. – 1957. – Vol. 107. – No. 4. – P. 940–946.

8. **Alers, P.B.** Thermal magnetoresistance of zinc at low temperatures [Text] / P. B. Alers // Phys. Rev. – 1956. – Vol. 101. – No. 1. – P. 41–48.

9. **Steele, M.C.** Oscillatory galvanomagnetic properties of antimony single crystals at liquid helium temperatures [Text] / M.C. Steele // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 99. – No. 6. – P. 1751–1759.

10. **Frederikse, H.P.R.** Galvanomagnetic effects in *n*-type indium antimonide [Text] / H.P.R. Frederikse, W.R. Hosler // Phys. Rev. – 1957. – Vol. 108. – No. 5. – P. 1136–1145.

11. **Broom, R.** Magnetoresistance of *n*-type InSb at 4.2 K [Text] / R. Broom // Proc. Phys. Soc. – 1958. – Vol. 71. – No. 3 – P. 470–475.

12. **Бреслер, М.С.** К вопросу о влиянии спина электронов на осцилляции Шубникова – де Гааза

в *n*-InSb [Текст] / М.С. Бреслер, Р.В. Парфеньев, С.С. Шалыт // ФТТ. – 1965. – Т. 7. – Вып. 4 – С. 1266–1271.

13. **Амирханов, Х.Н.** Влияние спина на квантовые осцилляции гальваномагнитных эффектов в *n*-InSb [Текст] / Х.Н. Амирханов, Р.Н. Баширов // ФТТ. – 1966. – Т. 8. – Вып. 7. – С. 2189–2196.

14. **Frederikse, H.P.R.** Oscillatory galvanomagnetic effects in *n*-type indium arsenide [Text] / H.P.R. Frederikse, W.R. Hosler // Phys. Rev. – 1958. – Vol. 110. – No. 4. – P. 880–883.

15. **Sladek, R.J.** Magnetoresistance oscillations in single-crystal and polycrystalline indium arsenide [Text] / R.J. Sladek // Phys. Rev. – 1958. – Vol. 110. – No. 4. – P. 817–826.

16. **Bresler, M.C.** Quantum oscillations of transport coefficients in *n*-type InSb [Text] / M.C. Bresler, N.A. Redko, S.S. Shalyt // Phys. Stat. Sol. – 1966. – Vol. 15. – No. 2. – P. 745–749.

17. **Закиев, Ю.Э.** К вопросу об осцилляции продольного магнитосопротивления в сильно легированном арсениде индия электронного типа [Текст] / Ю.Э. Закиев // ФТТ. – 1966. – Т. 8. – Вып. 6. – С. 1975–1975.

18. **Амирханов, Х.И.** Гальваномагнитные явления в *n*-InSb в сильных магнитных полях [Текст] / Х.И. Амирханов, Р.Н. Баширов // ФТП. – 1967. – Т. 1. – Вып. 5 – С. 667–672.

19. **Whitsett, C.R.** Oscillatory magnetoresistance in mercuric selenide [Text] / C.R. Whitsett //Phys. Rev. – 1965. – Vol. 138. – No. 3A. – P. A829 – A839.

20. **Баширов, Р.Н.** Влияние спина на квантовые осцилляции поперечного магнитосопротивления в селениде ртути [Текст] / Р.Н. Баширов, Р.М. Гаджиев // ФТП. – 1967. – Т. 1. – Вып. 3 – С. 443–444.

21. **Smith, G.E.** Hybrid resonance and tilted-orbit cyclotron resonance in bismuth [Text] / G.E. Smith, L.C. Hebel, S.J. Buchsbaum // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 129. – No. 1. – P. 154–168.

22. **Kao, Y.-H.** Shubnikov – de Haas effect and cyclotron resonance in a dilute Bi-Sb alloy [Text] / Y.-H. Kao, R.D. Brown, I,R.L. Hartman // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 136. – No. 3A. – P. A858–A862.

23. **Брандт, Н.Б.** Осцилляционные эффекты в полуметаллических сплавах BiSb под давлением [Текст] / Н.Б. Брандт, С.М. Чудинов // ЖЭТФ. – 1970. – Т. 59. – Вып. 5. – С. 1494 – 1508.

24. **Акимов, Б.А.** Эффект Шубникова – де Гааза в узкощелевом твердом растворе $Pb_{1-x}Sn_xTe$ *n*-типа [Текст] /Б.А. Акимов, А.И. Дмитриев, Г.В. Лашкарев [и др.] // ФТТ. – 1977. – Т. 9. – Вып. 2. – С. 402 – 408.

25. **Дмитриев, А.И.** Поверхность Ферми дырок в узкощелевых твердых растворах $Pb_{1-x}Sn_xTe$ [Текст] / А.И. Дмитриев, Г.В. Лашкарев, С. М. Чудинов // Физика низких температур. – 1977. – Т. 3. – Вып. 4. – С. 444–453.

26. **Акимов, Б.А.** Переход в бесщелевое состояние под действием давления в сплаве $Pb_{1-x}Sn_xTe$ [Текст] / Б.А. Акимов, Р.С. Вадхва, С.М. Чудинов // ФТП. – 1978. – Т. 12. – Вып. 10. – С. 1927 – 1931.

27. **Акимов, Б.А.** Перестройка энергетического спектра в сплавах $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с примесью In при изменении их состава и под давлением [Текст] / Б.А. Акимов, Л.И. Рябова, С.М. Чудинов [и др.] // ФТП. – 1979. – Т. 13. – Вып. 4. – С. 752 – 759.

28. **Брандт, Н.Б.** Изменение связности электронной изоэнергетической поверхности у Bi под давлением [Текст] / Н.Б. Брандт, В. В. Мощалков, С.М. Чудинов // ЖЭТФ. — 1978. – Т. 74. – Вып. 5. – С. 1829–1844.

29. **Windmiller, L.R.** The Fermi surface of antimony [Text] / L.R. Windmiller, M.G. Priestle // Solid State Communications. – 1965. – Vol. 3. – No. 8. – P. 199 – 203.

30. **de Haas, W.J.** Note on the dependence of the susceptibility of diamagnetic metals on the field [Text] / W.J. de Haas, P.M. van Alphen // Leiden Communic. – 1931. – Vol. 208d. – P. 31 – 33.

31. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика [Текст]: Учеб. для вузов в 10 т. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Отв. ред. Л.П. Питаевский. – 5-е изд., стер. – М.: Физматлит, 2001. – 613 с.

32. **Вонсовский, С.В.** Магнетизм [Текст] / С.В. Вонсовский – М.: Наука, 1971. – 1032 с.

33. **Блохинцев, Д.И.** Основы квантовой механики [Текст]: 3-е изд. / Д.И. Блохинцев. – М.: Высш. школа, 1961. – 664 с.

34. **Peierls**, **R.** Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen [Text] / R. Peierls // Zeitschrift fűr Physik. A. Hadrons and Nuclei. – 1933. – B. 80. – Nu. 11–12. – S. 763–791.

35. **Peierls, R.** Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen. II Starke Magnetfelder [Text] / R.Peierls// Zeitschrift fűr Physik. A. Hadrons and Nuclei. – 1933. – B. 81. –Nu. 3-4 – S. 186–194.

36. **Blackman, M.** On the diamagnetic susceptibility of bismuth [Text] / M. Blackman // Proc. R. Soc. Lond. A . – 1938. – Vol. 166. – P. 1–15.

37. **Shoenberg, D.** The magnetic properties of bismuth. I. Dependence of susceptibility on temperature and addition of other elements [Text] / D. Shoenberg, M. Zaki Uddin // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1936. – Vol. 156. – P. 687–701.

38. **Shoenberg, D.** The magnetic properties of bismuth. II. The de Haas-van Alphen effect [Text] /D. Shoenberg, M. Zaki Uddin // Proc. R. Soc. Lond. A. –1936. – Vol. 156. – P. 701–720.

39. **Ландау, Л.Д** Теория ферми-жидкости [Текст] / Л.Д. Ландау // ЖЭТФ. – 1956. – Т. 30. – Вып. 6. – С. 1058–1064.

40. **Шенберг, Д.-М.** Магнитные осцилляции в металлах [Текст]: пер. с англ. / Д. – М. Шенберг.–М.: Мир, 1986. – 679 с.

41. **Marcus, J.A.** The de Haas – van Alphen effect in a single crystal of zinc phys [Text] / J.A. Marcus // Phys. Rev. – 1947. – Vol. 71. – No. 8. – P. 559 – 559.

42. **Веркин, Б.И.** Магнитные свойства металлов при низких температурах. I. Периодическое изменение магнитной восприимчивости монокристаллов кадмия, бериллия, магния, олова и индия в зависимости от напряжения магнитного поля [Текст] / Б.И. Веркин, Б.Г. Лазарев, Н.С. Руденко // ЖЭТФ. – 1950. – Т. 20. – Вып. 11. – С. 995–1010.

43. **Лифшиц, И.М.** К теории магнитной восприимчивости металлов при низких температурах [Текст] / И.М. Лифшиц, А.М. Косевич // ЖЭТФ. – 1955. – Т. 29. – Вып. 6. – С. 730 – 742.

44. **Vagner, I.D.** Ideally conducting phases in quasi-two-dimensional conductors [Text] / I.D. Vagner, Tsofar Maniv, E. Ehrenfreund // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 51. – No. 18. – P. 1700 – 1703.

45. **Vagner, I.D.** Spikes in the orbital magnetic susceptibility of a two-dimensional electron gas [Text] / I.D. Vagner, Tsofar Maniv // Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 32. – No. 12. – P. 8398–8400.

46. **Зегря, Г.Г.** Квантование магнитной индукции в 2D-системе в условиях квантового эффекта Холла [Текст] / Г.Г. Зегря // ФТП. – 1999. – Т. 33. – Вып. 9. – С. 1144 – 1147.

УДК 538.9

*В.С. Радомский, Е.С. Астапова, А.В. Филимонов*

# ФОРМИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ЦЕОЛИТ – НАНОЧАСТИЦЫ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ

Цеолиты представляют собой нанопористые кристаллические твердые тела и имеют каркасную структуру с алюмокремнекислородным основным мотивом. Наряду с природными цеолитами, насчитывающими несколько десятков минеральных видов, в настоящее время получают синтетические, которые используются в различных отраслях экономики, в том числе в качестве катализаторов в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности [1]. В последние два десятилетия в нашей стране и за рубежом повышенное внимание уделяется высококремнеземным цеолитам (ВКЦ). Они относятся к цеолитам нового структурного типа, не имеющим природных аналогов, и характеризуются значениями отношения содержания оксидов $SiO_2/Al_2O_3$ от 10 до 100 и выше. Основу кристаллической структуры ВКЦ составляют элементы из пятичленных колец, в результате чего они получили название пентасилы. Пятичленные кольца образованы в основном кремнекислородными тетраэдрами, при соединении которых в трехмерный каркас в кристаллах образуется система сквозных каналов, диаметр которых близок к 6 Å. Незначительное количество катионов $Si^{4+}$ замещается катионами $Al^{3+}$. В структуре цеолитов ZSM-5 имеется система пересекающихся между собой каналов двух типов: прямых и зигзагообразных. Наличие макро-, мезо- и микропор на поверхности цеолитов влияет на тепло- и массопередачу, абсорбционные, диффузионные, механические и другие свойства этих систем, зависящие от пористости. Согласно классификации IUPAC, к макропорам относятся поры со средним диаметром более 50 нм [2]; удельная поверхность макропор, определенная по методу БЭТ (Брунауэра–Эммета–Теллера), не превышает 1–2 м$^2$/г и не вносит существенных изменений в сорбционный процесс. Главная роль макропор, имеющая практическое значение, – транспортные каналы, облегчающие диффузию к внутренним слоям и обратно. К микропорам относятся поры с диаметром менее 2 нм, они объемно заполняются в первом сорбционном акте. И мезопоры – поры промежуточного размера, 2–50 нм; их линейные размеры больше размеров адсорбирующихся молекул. Мезопоры заполняются послойно [3].

Цеолитная матрица перспективна в качестве стабильного инертного «хозяина» для различных нанообъектов, в частности для наноразмерных частиц металлов и их оксидов, которые могут быть более активны в каталитических реакциях, по сравнению с катализаторами, используемыми в настоящее время.

Цель данной работы – установить характер влияния модифицирующих наноразмерных порошков железа и его оксида на структурные характеристики высококремнеземных синтетических цеолитов.

### Методика и материалы

Синтез ВКЦ осуществляли гидротермальной кристаллизацией щелочных алюмокремнегелей с использованием в качестве структурообразующих добавок гексаметилендиамина (ГМДА) и карбамида [4–6].

Элементный состав полученных образцов определяли атомно-абсорбционным методом на спектрофотометре Hitachi 180-50. Химический состав исследуемых образцов цеолитов приведен в табл. 1.

Таблица 1

**Химический состав исследованных цеолитов**

| Структурообразующая добавка при синтезе | Содержание, масс. % | | | $SiO_2/Al_2O_3$, % вес./% вес. |
|---|---|---|---|---|
| | $SiO_2$ | $Al_2O_3$ | $Na_2O$ | |
| Карбамид | 87,6 | 2,86 | 0,31 | 52 |
| Гексаметилендиамин | 89,7 | 2,42 | 0,69 | 63 |

Синтезированные цеолиты были модифицированы наноразмерным порошком железа методом механического смешения в шаровой вибрационной мельнице КМ-1 в течение 2 ч на воздухе. Нанопорошок железа был получен методом электрического взрыва проволоки в инертной аргоновой среде; содержание этого нанопорошка в образцах цеолитов, синтезированных с использованием карбамида, составляло (%): 0,5; 1; 5; 10, а в цеолитах, синтезированных с помощью ГМДА, составило (%): 1,0; 1,4; 2; 5; 10.

Приготовленные таким образом образцы железосодержащих цеолитов делились на две группы, и одну прокаливали на воздухе при температуре 550 °С в течение 2 ч для перевода наноразмерных металлов в оксидную форму, а другую оставляли без такой обработки.

Фазовый состав образцов определен методом рентгеновской дифрактометрии, съемка выполнялась на дифрактометре ДРОН-6 на $CuK_\alpha$-излучении с никелевым фильтром. Для расчетов применялся программный комплекс PDWin.

ИК-спектроскопические исследования проводились на ИК Фурье-спектрометре «SpectrumOne» в диапазоне частот 400–4000 см$^{-1}$. Образцы готовили прессованием таблеток с бромидом калия в воздушной среде в соотношении 1–2 мг цеолита на 300 мг KBr.

Определение объема микропор производили методом сравнения со стандартом на приборе «Sorbtometer M» производства «Катакон» Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН. Стандарт сравнения – это изотерма адсорбции, измеренная на непористом материале с регулярной поверхностью. Была использована изотерма адсорбции, предложенная С. Грегом и К. Сингом и уточненная в лабораториях В.Б. Фенелонова и М. Яроника – для неуглеродных материалов ($0{,}05 < P/P_0 < 0{,}30$, где $P$, $P_0$ – значения давления измеряемого и насыщенного паров газа-адсорбата, соответственно).

Сравнение со стандартом сравнения проводится построением графика, на котором каждому измеренному в текущем эксперименте значению адсорбции ставится в соответствие значение для стандарта сравнения при том же значении $P/P_0$. В диапазоне заполнения монослоя ($0{,}05 < P/P_0 < 0{,}3$) соответствующий график носит линейный характер. Тангенс угла наклона линии графика на данном участке пропорционален удельной поверхности вне микропор, а величина отрезка, отсекаемого прямой по оси ординат, соответствует объему микропор, заполненных задолго до формирования монослоя на поверхности мезопор.

Удельные поверхности и удельный объем полученных ВКЦ определяли по тепловой десорбции азота многоточечным методом БЭТ. И хотя этот метод не учитывает специфику заполнения микропор, но полученные данные могут иметь ценность как средство сравнительного анализа, вследствие однотипности изучаемых образцов высококремнеземных цеолитов.

Электронно-микроскопические исследования морфологии кристаллов цеолитов и наночастиц железа проведены на сканирующем электронном микроскопе JEOL JSM-6490LV (Япония). Препараты закреплялись на аналитических алюминиевых столиках с помощью токопроводящего углеродного скотча и были напылены платиной. Изображение было получено в режиме вторичных электронов (*SE*-детектор). Диапазон рабочего увеличения варьировался от 200 до 13000 крат. Ускоряющее напряжение составляло 20 кВ.

## Результаты и обсуждения

**Структура цеолитов.** В табл. 2 представлены результаты рентгенографических исследований цеолитных образцов, синтезированных с различными структурообразующими добавками. На основании полученных данных можно заключить, что структура синтезированных образцов соответствует структуре цеолита типа ZSM-5. Слабый пик с межплоскостным расстоянием $d$ = 3,35 Å, вероятно, соответствует незначительной примеси α-кварца в продуктах кристаллизации.

Таблица 2

**Межплоскостные расстояния $d$ и относительные интенсивности $I_{отн}$ рефлексов синтезированных высококремнеземных цеолитов (ВКЦ)**

| ВКЦ (карбамид) | | ВКЦ (гексаметилендиамин) | | ZSM-5 [7] | |
|---|---|---|---|---|---|
| $d$, Å | $I_{отн}$, о.е. | $d$, Å | $I_{отн}$, о.е. | $d$, Å | $I_{отн}$, о.е. |
| 11,149 | 82 | 11,138 | 79 | 11,126 | 68,4 |
| – | – | – | – | 11,105 | 50,3 |
| 10,041 | 40 | 10,023 | 36,2 | 10,011 | 31,3 |
| – | – | – | – | 9,950 | 36,8 |
| 9,756 | 10 | 9,742 | 6,3 | 9,711 | 25,4 |
| 6,751 | 4,7 | 6,700 | 5,5 | 6,692 | 6,8 |
| 6,390 | 11,5 | 6,369 | 12,0 | 6,346 | 17,4 |
| 6,011 | 13,5 | 6,007 | 17,6 | 6,046 | 8,6 |
| – | – | – | – | 5,973 | 10,9 |
| 5,742 | 7,1 | 5,707 | 6,6 | 5,720 | 0,8 |
| 5,594 | 12,3 | 5,570 | 10,5 | 5,563 | 6,2 |
| 5,383 | 3,4 | 5,380 | 2,3 | 5,358 | 1,8 |
| 5,000 | 6,0 | 5,019 | 6,0 | 5,005 | 2,6 |
| 4,637 | 6,9 | 4,622 | 5,0 | 4,598 | 8,4 |
| 4,386 | 9,6 | 4,367 | 10,0 | 4,353 | 7,1 |
| 4,280 | 15,3 | 4,267 | 11,9 | 4,262 | 3,2 |
| 4,114 | 6,4 | 4,095 | 9,3 | 4,075 | 3,0 |
| 4,024 | 6,6 | – | – | 3,995 | 5,6 |
| 3,863 | 98,3 | 3,852 | 100 | 3,836 | 100,0 |
| 3,828 | 100 | – | – | 3,815 | 78,7 |

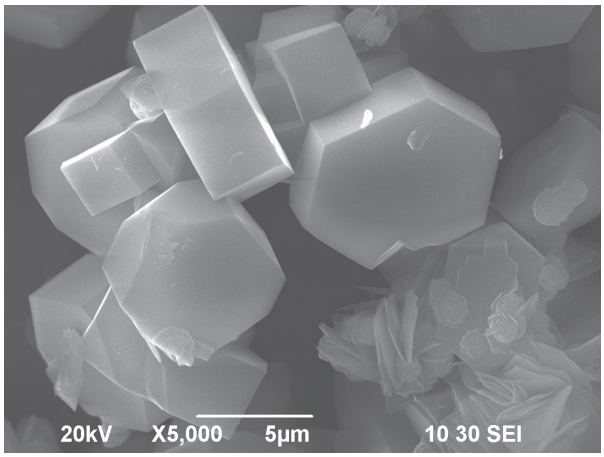
*Окончание таблицы 2*

| ВКЦ (карбамид) | | ВКЦ (гексаметилендиамин) | | ZSM-5 [7] | |
|---|---|---|---|---|---|
| *d*, Å | $I_{отн}$, о.е. | *d*, Å | $I_{отн}$, о.е. | *d*, Å | $I_{отн}$, о.е. |
| 3,770 | 54,3 | – | – | 3,747 | 31,0 |
| 3,737 | 42,6 | 3,725 | 46,1 | – | – |
| – | – | – | – | 3,709 | 47,7 |
| 3,663 | 39,6 | 3,651 | 37,1 | 3,640 | 39,7 |
| 3,497 | 6,0 | – | – | 3,475 | 3,0 |
| 3,453 | 11,4 | – | – | 3,430 | 13,6 |
| 3,405 | 9,8 | – | – | 3,386 | 1,3 |
| 3,358 | 14,2 | 3,345 | 14,5 | Примесь α-кварца | |
| 3,322 | 10,5 | – | – | 3,330 | 5,9 |
| 3,253 | 4,0 | 3,248 | 3,9 | 3,256 | 0,7 |
| 3,174 | 2,4 | – | – | 3,178 | 0,9 |
| 3,14 | 3,1 | 3,136 | 2,9 | 3,132 | 2,4 |
| 3,057 | 15,9 | 3,052 | 9,3 | 3,044 | 11,9 |
| 2,984 | 11,5 | 2,984 | 13,0 | 2,980 | 7,4 |

Примечания. 1. В скобках указаны структурообразующие добавки, использованные при синтезе ВКЦ.
2. Химическая формула цеолита ZSM-5: $Na_x(Al_xSi_{96-x}O_{192})\cdot 16H_2O$; $x \approx 3$

Природа структурообразующей органической добавки оказывает влияние на морфологию кристаллов цеолитов. На рис. 1 представлены кристаллы цеолитов, синтезированных с ГМДА и карбамидом. Частицы цеолита, полученные с использованием ГМДА, довольно однородны по своему составу и имеют вид поликристаллических сфероидов, состоящих из сросшихся монокристаллов, в виде тетрагональной призмы с углом между гранями 90° и размером ~0,8 мкм. Размеры сфероидов в основном колеблются от 3 до 8 мкм.

*а*)




*б*)

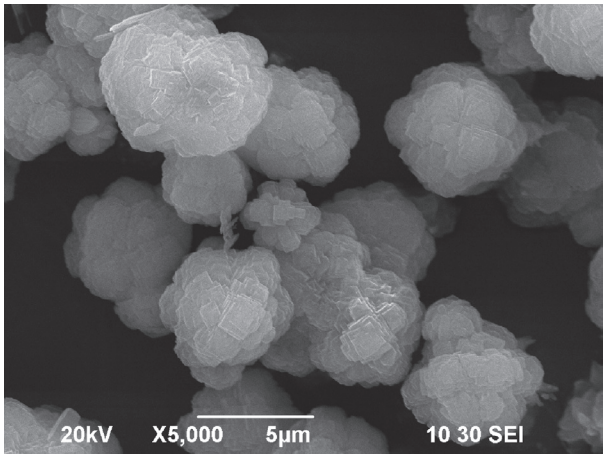



Рис. 1. Электронно-микроскопические снимки цеолитов, синтезированных с использованием структурообразующих добавок: *а* – карбамида, *б* – гексаметилендиамина

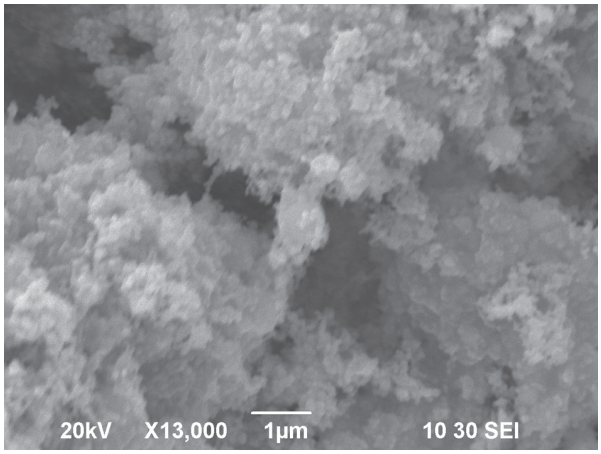



Рис. 2. Микрофотография частиц нанопорошка железа

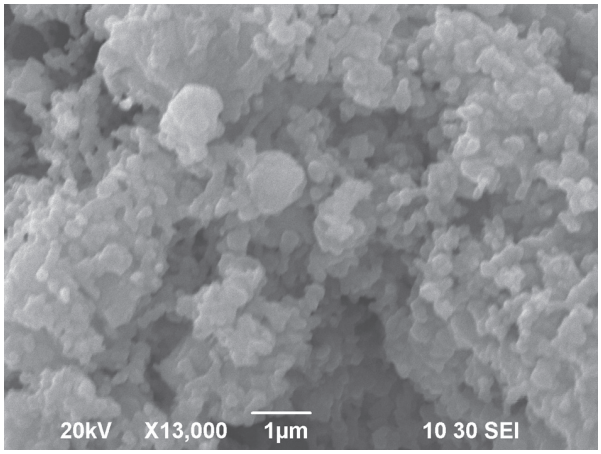



Рис. 3. Микрофотография частиц оксида железа

Применение карбамида способствует образованию изолированных хорошо ограненных кристаллов цеолита в форме гексагональной призмы с ребрами 3 х 5 х 5 мкм. Также присутствует небольшое количество пластинчатых кристаллов в виде гексагональных призм с высотой 0,1–0,2 мкм.

**Структура исходных наночастиц.** Анализ снимков исходного нанопорошка (НП) железа, полученного с помощью сканирующего электронного микроскопа, показал, что частицы этого нанопорошка имеют форму, близкую к сферической. Частицы размерностью 100–200 нм, соединяясь, образуют агломераты размером 10–20 мкм (рис. 2).

После отжига наночастиц железа произошло окисление частиц с образованием оксидов, оплавление и частичное спекание частиц (рис. 3). Основным продуктом окисления наночастиц железа является гематит ($Fe_2O_3$).

Согласно данным рентгенофазового анализа, в исследуемом нанопорошке железа присутствует только фаза железа, по структуре соответствующая металлу в массивном состоянии (табл. 3). Исследуемые образцы НП железа принадлежат кубической сингонии, период решетки НП железа $a$=0,28678 нм, что оказалось больше периода решетки компактного железа ($a$ = 0,28663 нм).

Однако по данным ИК-спектроскопии в образце НП железа присутствует также и оксидная фаза. На рис. 4 приведены ИК-спектры наночастиц железа, а также продукта его отжига при температуре 550 °С. В первом спектре отчетливо проявляется плохо разрешенная полоса поглощения в области 400–650 см$^{-1}$, которая хорошо соотносится с полосой поглощения продукта отжига на втором спектре. Она отнесена нами к колебаниям связи Fe-O. Таким образом, в ИК-спектрах наночастиц железа присутствуют полосы поглощения связей Me-O, что свидетельствует о покрытии поверхности нанопорошка оксидным слоем.

Таблица 3

**Фазовый состав наночастиц железа и оксида железа**

| Образец нанопорошка | Индексы грани ($hkl$) | Межплоскостное расстояние, Å | | $I_{отн}$, о.е. | Фаза |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Стандарт* | Эксперимент | | |
| Fe | 110 | 2,05 | 2,028 | 100 | Fe |
| | 200 | 1,43 | 1,434 | 11,4 | |
| | 211 | 1,16 | 1,170 | 19,5 | |
| | 220 | 1,01 | 1,014 | 4,4 | |
| $Fe_2O_3$ | 110 | 3,66 | 3,687 | 22,9 | $Fe_2O_3$ |
| | 121 | 2,69 | 2,701 | 100 | |
| | –110 | 2,51 | 2,520 | 73,7 | |
| | 120 | 2,201 | 2,209 | 28,7 | |
| | 220 | 1,838 | 1,839 | 28 | |
| | 231 | 1,69 | 1,696 | 48,5 | |
| | 130 | 1,484 | 1,486 | 31,7 | |
| | –211 | 1,452 | 1,454 | 24,5 | |

*База данных международного комитета JCPDS

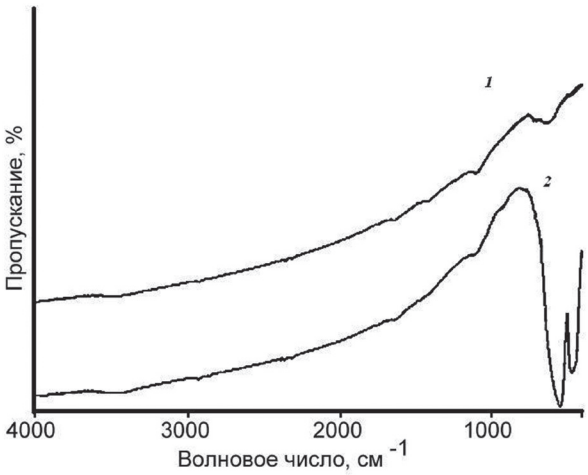



Рис. 4. Инфракрасные спектры нанопорошка железа (*1*) и продукта их отжига при температуре 550 °С (*2*)

Отсутствие по данным рентгенофазового анализа кристаллической фазы оксида железа свидетельствует о возможной аморфизации оксидного слоя на поверхности наночастиц железа.

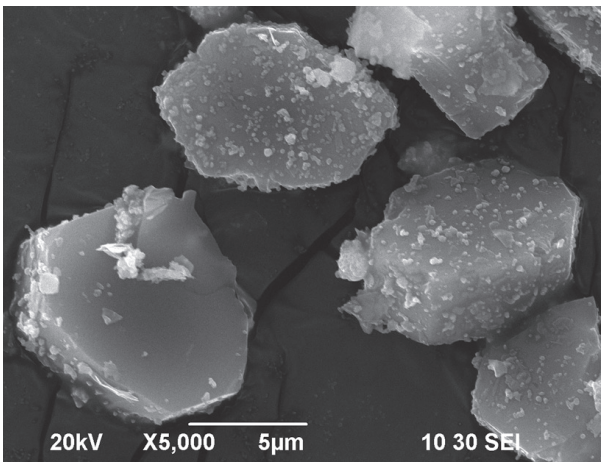
При модифицировании цеолитов наночастицами железа методом механического смешения в шаровой вибрационной мельнице происходило частичное разрушение и измельчение больших агломератов железа. В результате механической активации на поверхности кристаллов цеолита образовался слой наночастиц железа, изолированных друг от друга, причем их размер составляет в основном 100–200 нм, но присутствуют частицы и большего диаметра. Согласно литературным данным [8], в процессе синтеза наночастицы на ее поверхности образуется двойной электрический слой. Электрическая разность потенциалов возникает вследствие того, что на внешней поверхности имеются отрицательные заряды, а в приповерхностном слое – положительные. Наночастицы, имеющие заряженную поверхность, притягиваются к поверхности цеолита и удерживаются силами диполь-дипольного взаимодействия (силы Ван-дер-Ваальса) (рис. 5).

В табл. 4 представлены данные структурных характеристик цеолитов, синтезированных с различными структурообразующими добавками до и после модификации наночастицами железа и оксида железа методом механического смешения в шаровой вибрационной мельнице КМ-1 в течение 2 ч на воздухе.

Поскольку пористая структура цеолита может зависеть от темплата, представляло интерес сопоставить структурные характеристики исходных немодифицированных цеолитов.

Оказалось, что исходный цеолит, приготовленный с использованием ГМДА, характеризуется наибольшим значением удельного объема пор (0,109 см$^3$/г). Оно в 1,4 раза больше соответ-

*а*)




*б*)

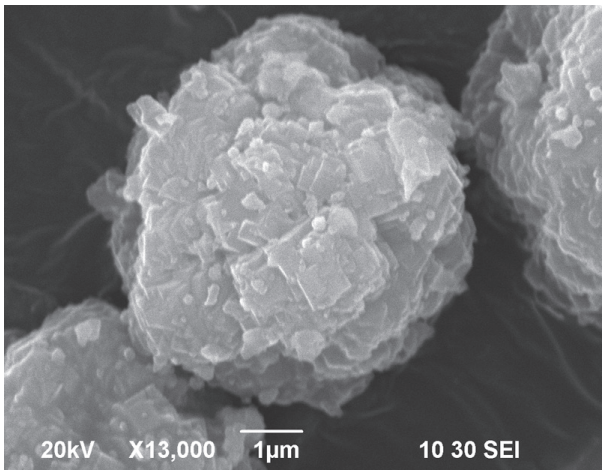



Рис. 5. Электронно-микроскопические изображения поверхности механически активированных образцов цеолитов, синтезированных с использованием карбамида (*а*) и гексаметилендиамина (*б*)
Активация нанопорошками железа (10,0 %) (*а*) и оксида железа (14,2 %) (*б*)

Таблица 4

**Структурные характеристики цеолитов, синтезированных с использованием добавок двух типов и модифицированных наночастицами**

| Нанопорошок-модификатор | Концентрация нанопорошка, % | $S_{уд}$, м$^2$/г | | $V_{уд}$, см$^3$/г | | $V_{уд\ пор} - V_{уд\ микро}$, см$^3$/г |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | Поры | Мезопоры | Поры | Микропоры | |
| Добавка карбамида | | | | | | |
| Fe | 0 | 229 | 0 | 0,079 | 0,077 | 0,002 |
| | 0,5 | 274 | 0 | 0,096 | 0,096 | 0 |
| | 1 | 239 | 1,46 | 0,086 | 0,087 | 0 |
| | 5 | 254 | 0 | 0,084 | 0,084 | 0 |
| | 10 | 255 | 0 | 0,092 | 0,092 | 0 |
| $Fe_2O_3$ | 1,43 | 235 | 0 | 0,096 | 0,096 | 0 |
| | 2,86 | 220 | 18,6 | 0,096 | 0,084 | 0,012 |
| | 14,23 | 244 | 27,0 | 0,101 | 0,087 | 0,014 |
| | 28,57 | 230 | 0 | 0,082 | 0,083 | 0 |
| Добавка гексаметилендиамина | | | | | | |
| Fe | 0 | 237 | 124 | 0,109 | 0,041 | 0,068 |
| | 1,0 | 298 | 59 | 0,127 | 0,097 | 0,030 |
| | 1,4 | 296 | 73 | 0,127 | 0,093 | 0,034 |
| | 2,0 | 295 | 76 | 0,136 | 0,096 | 0,040 |
| | 5 | 295 | 59 | 0,130 | 0,096 | 0,034 |
| | 10 | 279 | 68 | 0,123 | 0,089 | 0,034 |
| $Fe_2O_3$ | 2,86 | 306 | 78 | 0,133 | 0,094 | 0,039 |
| | 4,00 | 296 | 41 | 0,129 | 0,108 | 0,021 |
| | 5,71 | 286 | 99 | 0,128 | 0,077 | 0,051 |
| | 14,23 | 295 | 25 | 0,130 | 0,117 | 0,013 |
| | 28,57 | 258 | 86 | 0,115 | 0,072 | 0,043 |

Обозначения: $S_{уд}$, $V_{уд}$ – удельные поверхность, объем

ствующего значения для цеолита, полученного с применением карбамида (0,079 см$^3$/г). Наибольший вклад в эту величину вносят микропоры $V_{уд}$ = 0,077 см$^3$/г. Это подтверждается и данными по удельной поверхности мезопор, согласно которым их вклад в общую удельную поверхность цеолитов на карбамидной основе для большинства образцов был нулевой, а для остальных не превышал 10 % (см. табл. 4).

Объем пор исходного цеолита, синтезированного с добавкой ГМДА, равен 0,109 см$^3$/г, из них на долю микропор приходится 38 %, т. е. такой цеолит имеет два уровня пористой структуры: один образован межкристаллическими

промежутками, второй определяется структурой цеолита и включает внутренние нанопоры. Другая картина наблюдается для цеолита, синтезированного с использованием карбамида: он имеет пористость, обусловленную только нанопорами. Эти результаты хорошо соотносятся с морфологией кристаллов (см. рис. 1). Изолированные кристаллы цеолита, синтезированного с помощью карбамида, имеют один тип пор – внутрикристаллические нанопоры. Тогда как поликристаллические сфероиды, состоящие из сросшихся монокристаллов, у цеолита на основе ГМДА способствуют образованию также мезопор.

Введение модифицирующей добавки и одновременно механохимическая активация могут приводить к существенным изменениям пористой структуры цеолитов. В связи с этим определялись их структурные характеристики до и после модификации.

Следует отметить, что наночастицы металлов и их оксиды не должны вносить весомый вклад в удельную поверхность модифицированных цеолитов, так как их собственная удельная поверхность не превышает 10 $м^2/г$.

Оценка пористой структуры цеолитов показала, что модифицирование образцов цеолита, синтезированного с использованием карбамида, приводит к увеличению удельной поверхности (на 4–20 %), а также удельного объема пор в основном за счет увеличения микропористости (объем микропор увеличился на 5–20 %).

Механохимическая активация и одновременное модифицирование наночастицами железа и его оксида отразились в большей степени на параметрах пористой структуры цеолита, синтезированного с использованием ГМДА. Данная обработка привела к увеличению сорбционной емкости, а также удельной поверхности (на 9–30 %), измеренной по методу БЭТ. Удельный объем пор у модифицированных цеолитов увеличился в 1,06–1,25 раз. Например, введение механохимической активацией 1 % наночастиц железа в исходный цеолит привело к возрастанию удельного объема пор с 0,109 до 0,127 $см^3/г$ (см. табл. 4). Для модифицированных цеолитов, по сравнению с исходным, наблюдается увеличение удельного объема микропор в 1,8–2,9 раза. В то же время механохимическая активация цеолита с одновременным модифицированием наночастицами железа и его оксида привела к уменьшению объема мезопор; это в свою очередь обусловило падение удельной поверхности вне микропор.

Таким образом, введение в цеолит нанопорошков металлов и их оксидов методом механической активации приводит к увеличению общего объема пор. При этом возрастает количество мелких пор и уменьшается количество мезопор по сравнению с исходным цеолитом. Это свидетельствует о том, что как механическая активация, так и модифицирование оказывают существенное влияние на структуру цеолита. Перераспределение пор по размерам можно объяснить тем, что частицы вводимого порошка металла размером 3–5 нм входят в крупные поры цеолита и распределяются по их поверхности, в результате чего происходит уменьшение диаметра пор.

Кроме того, процессы, происходящие при интенсивном размоле, нельзя считать чисто механическими, так как они сопровождаются перераспределением зарядов, атомарным перемешиванием и химическими реакциями как внутри отдельных частиц, так и между ними, а в ряде случаев – сильнейшей физико-химической модификацией свойств их поверхности – механоактивацией [9].

Итак, частицы нанопорошка железа, полученного методом электрического взрыва проволоки в инертной аргоновой среде, имеют форму, близкую к сферической. Оксидный слой нанопорошка железа, возможно, аморфизован.

Установлено, что цеолит, синтезированный с ГМДА, имеет два уровня пористой структуры: один образован межкристаллическими промежутками, второй определяется структурой цеолита и включает внутренние нанопоры; в то время как цеолит, синтезированный с использованием карбамида, имеет пористость, обусловленную в основном нанопорами.

Введение модифицирующих добавок механохимической активацией приводит к изменениям пористой структуры цеолитов, происходит увеличение удельной поверхности и удельного объема пор за счет увеличения микропористости.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Степанов, В.Г.** Производство моторных топлив на заводах малой и средней мощности с применением нового каталитического процесса «Цеоформинг» [Текст] / В.Г. Степанов, К.Г. Ионе // Катализ в промышленности. – 2003. – № 2. – С. 49–53.

2. **Крейсберг, В.А.** Диффузная диагностика микро- и мезопористой структуры адсорбентов [Текст] / В.А. Крейсберг, В.П. Ракчеев // Вестн. Моск. ун-та. Сер. Химия. – 2000. – Т. 41. – С. 289–292.

3. **Грег, С.** Адсорбция, удельная поверхность, пористость [Текст] / С. Грег, К. Синг. – М.: Мир, 1984. – 306 с.

4. **Коробицына, Л.Л.** Синтез и каталитические свойства высококремнеземного цеолита типа ZSM-5 [Текст] / Л.Л. Коробицына, В.И. Ерофеев, Н.В. Антонова, Ю.В. Рябов // Сб. научных трудов «Структура растворов и дисперсий». – Новосибирск: Наука, 1988. – С. 30–36.

5. **Коробицына, Л.Л.** Физико-химические свойства высококремнеземных цеолитов и их каталитическая активность в реакции синтеза углеводородов [Текст] / Л.Л. Коробицына, Я.Е. Барбашин // Сб. научных трудов «Синтез на основе продуктов нефтехимии». – Новосибирск: Наука, 1990. – С. 314–318.

6. **Астапова, Е.С.** Интерпретация структуры цеолитов, модифицированных наночастицами, с помощью ИК-спектроскопии [Текст] / Е.С. Астапова, В.С. Радомский, Л.Л. Коробицына, А.В. Филимонов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. – № 3. – С. 53–58.

7. **Treacy, M.M.J.** Collection of simulated XRD powder patterns for zeolites [Text] / M.M.J. Treacy, J.B. Higgins. – Elsevier, 2001. – 650 p.

8. **Ильин, А.П.** Процессы окисления на воздухе нанопорошка меди при нагревании и пропускании электрического тока [Текст] / А.П. Ильин, А.В. Мостовщиков, Л.О. Толбанова // Перспективные материалы. – 2010. – № 6. – С. 59–62.

9. **Суздалев, И.П.** Нанотехнологии: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст] / И.П. Суздалев.– М.: КомКнига, 2006. – 592 с.


УДК 538.975:620 – 022.53

*Ю.А. Бронвальд, Р.Г. Бурковский,*
*А.В. Филимонов, С.Б. Вахрушев,*
*А.Э. Фотиади, Цзо-Гуан Е*

# НАНОМАСШТАБНАЯ ГЕТЕРОФАЗНОСТЬ И ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА В ОБЛАСТИ МОРФОТРОПНОЙ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ

Сегнетоэлектрики стали активно изучаться в 1940-х годах в связи с открытием особых диэлектрических свойств титаната бария. С тех пор сегнетоэлектрики стали основой нескольких многомиллиардных отраслей промышленности, включающих области от производства конденсаторов с высокой диэлектрической проницаемостью до появившихся позднее пьезоэлектрических датчиков, устройств с положительным температурным коэффициентом сопротивления, пироэлектрических сенсоров и элементов сегнетоэлектрической памяти [1, 2]. Среди материалов для интегрированных сегнетоэлектриков одно из основных мест занимают системы твердых растворов цирконата-титаната свинца (ЦТС), обладающие наилучшими характеристиками в отношении практических приложений. Пьезо- и пироэлектрические свойства этих материалов представляют огромный интерес для создания эффективных и конкурентоспособных устройств, работающих в различных условиях. Для целенаправленного улучшения свойств материалов на основе ЦТС и родственных разупорядоченных сегнетоэлектриков, а

также для создания новых материалов на их основе необходима детальная микроскопическая модель их структуры на атомном уровне. С развитой в последние годы технологией выращивания объемных монокристаллов ЦТС появилась возможность проведения ряда принципиально новых исследований, в частности – выполненного в данной работе изучения характера локальных структурных искажений цирконата-титаната свинца методами монокристальной дифракции и диффузного рассеяния.

ЦТС – это система твердых растворов цирконата свинца $PbZrO_3$ и титаната свинца $PbTiO_3$. В зависимости от относительной концентрации первой и второй компонент в ЦТС реализуются различные кристаллические структуры, что отражено на фазовой диаграмме (рис. 1). При температурах выше температуры Кюри материал имеет кубическую структуру перовскита. При температурах ниже указанной точки происходит переход в тетрагональную фазу, если велико содержание титана, или в тригональную, если велико содержание циркония.

На рис. 2 показана форма базовой кубической решетки ЦТС: катионы свинца расположены в углах примитивной ячейки, цирконий или титан занимают ее центр, а кислород находится в вершинах октаэдра (восьмигранника) и окружает центральный катион.

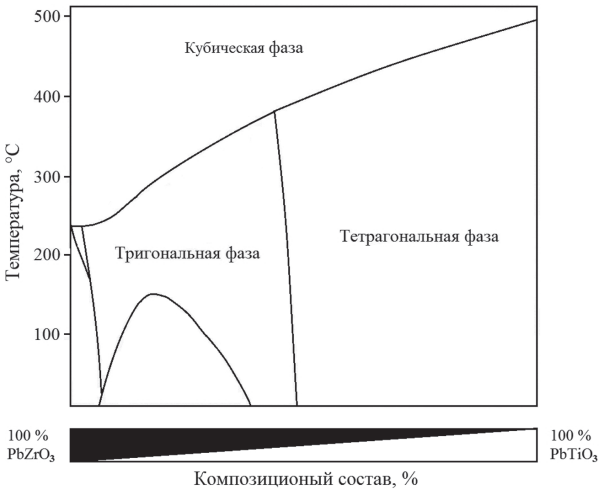



Рис. 1. Фазовая диаграмма для цирконата-титаната свинца $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ [3]

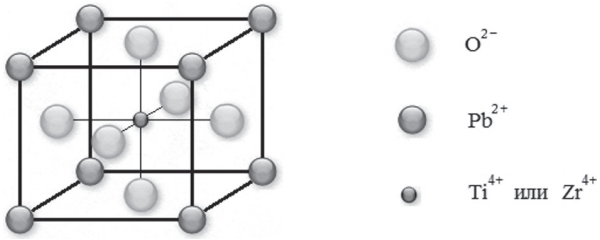



Рис. 2. Базовая форма кубической перовскитоподобной структуры ЦТС

При температуре ниже точки Кюри $T_C$ малые смещения ионов вызывают разделение положительного и отрицательного зарядов, что приводит к возникновению электрического диполя и сопровождается растяжением элементарной ячейки вдоль направления поляризации. В тетрагональной фазе оси поляризации ориентированы вдоль одного из шести направлений вида $\langle 001 \rangle$, а в тригональной – вдоль одного из восьми направлений вида $\langle 111 \rangle$. Если приложить электрическое поле, то можно переориентировать спонтанную поляризацию вдоль любого из группы эквивалентных направлений. При температурах выше точки Кюри спонтанная поляризация исчезает, материал становится параэлектриком [4].

Наиболее интересные свойства ЦТС были обнаружены при соотношении 52/48 элементов состава Zr/Ti, рядом с практически вертикальной фазовой границей (изменение температуры на 90 K при изменении содержания титана на 1%), разделяющей тетрагональную и тригональную фазы и получившей название морфотропной фазовой границы (МФГ). При приближении к МФГ на фазовой диаграмме у пьезоэлектрического коэффициента и диэлектрической проницаемости наблюдаются аномально резкие максимумы [5]. Последующие исследования ЦТС с помощью дифракции рентгеновского излучения с высоким разрешением показали существование не обнаруженной ранее моноклинной фазы при 48-процентном содержании титана в широком температурном диапазоне – от 20 до 300 K. Вскоре после этого были исследованы соединения с содержанием титана от 45 до 52 % и получена новая, уточненная фазовая диаграмма ЦТС (рис. 3). Как видно из рисунка, моноклинная фаза представляет собой узкую область треугольной формы,

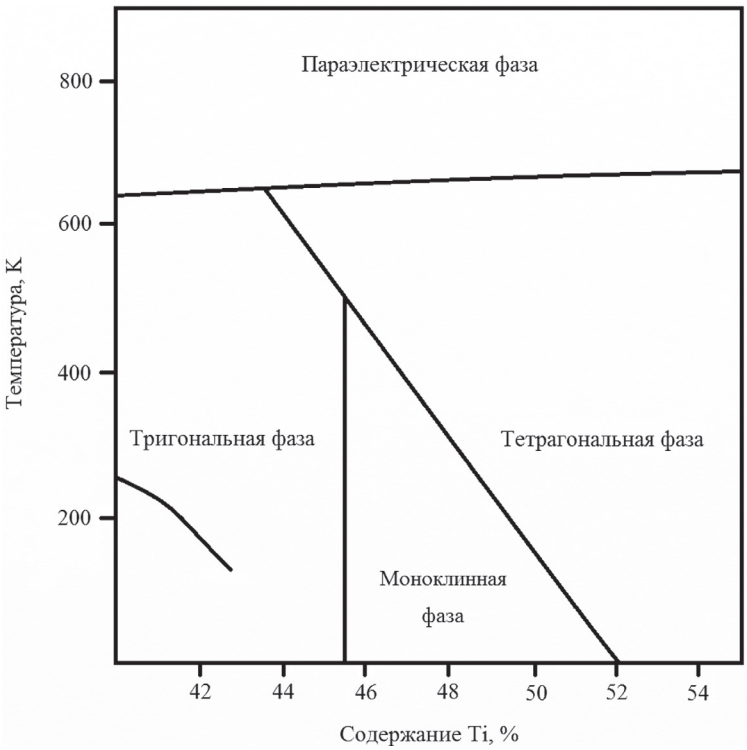



Рис. 3. Фазовая диаграмма $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ рядом с морфотропной фазовой границей, полученная из данных по дифракции рентгеновского синхротронного излучения [6]

расположенную между тетрагональной и тригональной фазами. Она имеет строго вертикальную тригонально-моноклинную и слегка наклонную тетрагонально-моноклинную границы [5].

Существование моноклинной фазы в кристаллах ЦТС было также подтверждено методами рамановской спектроскопии (спектроскопии комбинационного рассеяния) и дифракции нейтронов [5]. Однако имеется точка зрения, трактующая результаты этих экспериментов как наличие не чистой моноклинной фазы, а как сосуществование областей тригональной и моноклинной фаз либо тригональной и тетрагональной фаз [7], что также позволяет интерпретировать полученные экспериментальные данные. Вопрос макроскопической (в случае наличия истинной моноклинной фазы) и локальной (в случае, если наблюдаемая моноклинная симметрия не является макроскопической, но эффективной, получаемой в результате усреднения по ансамблю локальных искажений иной симметрии) структуры является крайне важным для понимания механизмов, приводящих к исключительно выгодным практическим характеристикам соединений с морфотропной фазовой границей, к которым наряду с ЦТС относится также и ряд экологически чистых бессвинцовых соединений. Длительное время проведение исследований локальной структуры ЦТС представлялось чрезвычайно затруднительным в силу отсутствия монокристаллических образцов, необходимых для снятия усреднения по углу (оно неизбежно возникает при проведении экспериментов по порошковой дифракции). В последние несколько лет исследователям из Университета Саймона Фрейзера (Канада) удалось разработать методику, позволяющую выращивать монокристаллы достаточного объема для проведения экспериментов по дифракции. Это достижение уже позволило провести ряд экспериментов по изучению средней структуры с использованием монокристальной дифракции [8, 9].

В данной работе в рамках коллаборации с канадскими исследователями проведен экс-

перимент по изучению локальной структуры ЦТС в области морфотропной фазовой границы методом квазиупругого диффузного рассеяния синхротронного излучения.

### Методика исследования

При выполнении настоящей работы в качестве метода исследования было выбрано квазиупругое диффузное рассеяние (ДР) синхротронного излучения. Такая методика получила широкое распространение в исследованиях структурных особенностей сегнетоэлектриков, так как ДР отражает отклонение реальной кристаллической структуры от идеальной решетки. Такое рассеяние может быть вызвано локальными квазистатическими искажениями решетки и композиционным беспорядком. Распределению интенсивности ДР в зоне Бриллюэна с точностью до аппаратной погрешности соответствует функция $S(\mathbf{Q})$, являющаяся квадратом структурного фактора; при этом структурный фактор рассчитывается по всему рассеивающему объему. Выражение, связывающее $S(\mathbf{Q})$ с положениями рассеивающих центров в кристалле, имеет вид

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\frac{f_i(\mathbf{Q})f_j(\mathbf{Q})}{\langle f(\mathbf{Q})\rangle^2}\exp(i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)), \quad (1)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ – вектор рассеяния, вычисляемый как разность между волновыми векторами рассеянного и падающего излучения; $N$ – полное количество атомов в рассеивающей системе; $f_i(\mathbf{Q})$ – атомные форм-факторы, зависящие от величины переданного волнового вектора; $\langle f(\mathbf{Q})\rangle$ – атомный фактор рассеяния, усредненный по ансамблю; $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_j$ – положения $i$-го и $j$-го атомов.

В случае, когда векторы $\mathbf{r}_i$ соответствуют решетке, в которой атомы незначительно смещены из идеальных кристаллографических положений, слагаемые выражения (1) могут быть представлены в виде степенного ряда

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\frac{f_i(\mathbf{Q})f_i(\mathbf{Q})}{\langle f(\mathbf{Q})\rangle^2}\exp\left[i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right]\times \times\left[1+(\mathbf{Q}\times\mathbf{u}_i)(\mathbf{Q}\times\mathbf{u}_j)+\ldots\right], \quad (2)$$

где векторы $\mathbf{u}_i$ определяются как смещение $i$-го атома относительно соответствующего идеального положения $\mathbf{R}_i(\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i)$. Как правило, в данном разложении можно ограничиться членами второго порядка по $\mathbf{u}_i$ [10].

Экспериментально метод ДР может быть осуществлен с использованием любого излучения, способного дифрагировать на изучаемых объектах, в том числе при помощи рассеяния рентгеновских фотонов, электронов или нейтронов. В данной работе был выбран метод ДР синхротронного излучения, что, с одной стороны, позволило использовать образец сравнительно малых размеров, а с другой – добиться высокого экспериментального разрешения.

### Экспериментальная часть

В данной работе было проведено экспериментальное изучение локальных структурных искажений в области МФГ ЦТС $Pb(Zr_{0,52}Ti_{0,48})O_3$, а также их эволюции с изменением температуры методом ДР синхротронного излучения. Объект исследования представлял собой объемный монокристалл (около 0,05 мм$^3$) указанного композиционного состава, близкого к МФГ. Образец был предоставлен для выполнения эксперимента Университетом Саймона Фрейзера (г. Ванкувер, Канада). Измерения проводились на Европейском синхротронном источнике ESRF (г. Гренобль, Франция). Данный синхротрон принадлежит к третьему поколению подобных установок. Для проведения эксперимента использовался дифрактометр КМ-6, установленный на экспериментальной линии BM1A Швейцарско-норвежского отделения.

Схема установки представлена на рис. 4. Дифрактометр КМ-6 был оборудован позиционно-чувствительным детектором *2*, позволяющим регистрировать интенсивность рассеяния на матрице высокого разрешения 2048 × 2048. Монокристаллический образец *1* был закреплен на острие иглообразного держателя (при помощи высокотемпературного клея). Для анализа структуры кристалла применялось сканирование с максимально приближенным к образцу детектором, за счет чего происходила регистрация интенсивности рассеяния в максимально большом объеме обратного пространства, содержащего большое количество брэгговских рефлексов. Для изучения окрестностей отдельных узлов обратной решетки, содержащих ДР, детектор отодвигался на допустимо большое расстояние (0,36 м) для получения максимальной разрешающей способности прибора.

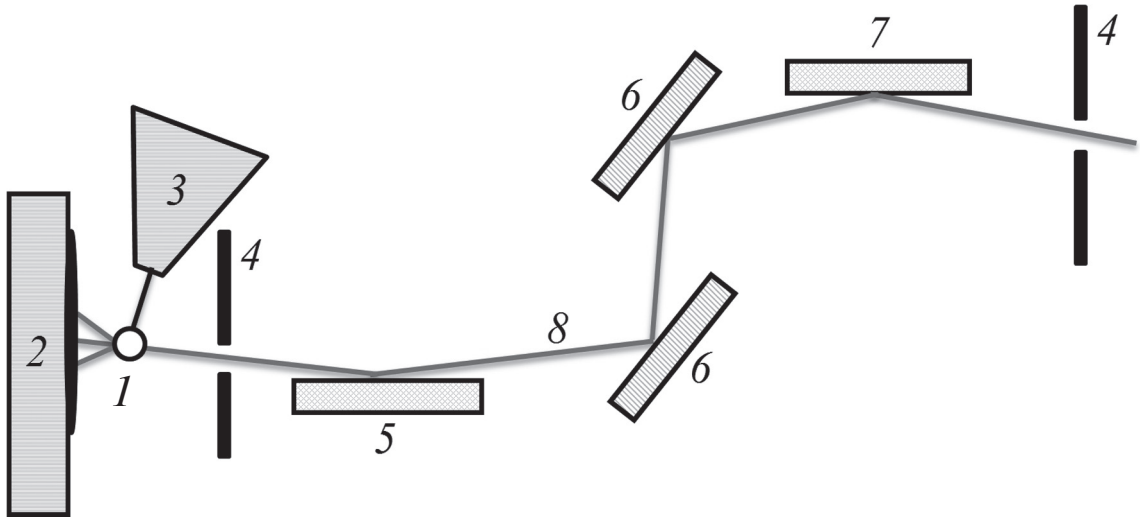



Рис. 4. Схема экспериментальной установки:
*1* – образец; *2* – детектор; *3* – гониометр; *4* – диафрагмы; *5*, *7* – фокусирующее и коллимирующее зеркала; *6* – двойной монохроматор; *8* – траектория пучка фотонов

За счет использования коллимирующего зеркала *7*, находящегося на расстоянии 26 м от источника, получается высокопараллельный пучок и отсеиваются все фотоны с энергией более 23 кэВ. При помощи второго зеркала *5* происходит фокусировка пучка на образце; при этом пучок удается сфокусировать до сечения 0,5×0,5 мм, угловой разброс – 2 мрад. Двойной монохроматор *6* выполнен на монокристаллах кремния, на которых в рентгеновском диапазоне длин волн дифракция осуществляется на регулярной атомной решетке. Брэгговское отражение происходит от атомных плоскостей монокристаллов с индексами (111). Попадая на кристалл, узкий пучок расщепляется в спектр подобно солнечному лучу в стеклянной призме. Меняя температуру монохроматора и ориентацию его кристаллической решетки относительно падающего пучка фотонов, подбирают такое его выходное окно, которое выбирает из всего спектра лишь излучение нужной длины волны; в результате достигается монохроматизация пучка.

В описанном эксперименте длина волны на выходе второго монохроматора составляла $\lambda = 0{,}984$ Å, что соответствует энергии в 12,6 кэВ.

Измерения интенсивности квазиупругого ДР синхротронного излучения в монокристаллическом сегнетоэлектрике ЦТС проведены в широком температурном диапазоне (300–790 K) в режимах нагрева и охлаждения образца. Для проведения измерений при температурах выше комнатной монокристаллический образец обдувался термостабилизированной струей подогреваемого азота; точность поддержания температуры образца составляла 5 K.

Экспериментальные данные, полученные на высокочувствительном позиционном детекторе, регистрировались в виде двумерных дифракционных картин. Эти картины были обработаны с использованием следующих прикладных программ:

программного пакета CrysAlis (Oxford Diffraction) [11], позволяющего на основе имеющихся снимков получать двумерные реконструкции обратного пространства;

программы VOLVOX [12], разработанной в Научно-образовательном центре «Физика нанокомпозитных материалов и электронной техники» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета и служащей для создания трехмерных реконструкций обратного пространства вблизи узлов обратной решетки;

набора программ, предназначенных для выполнения в среде MatLab [13], для численного анализа экспериментальных данных.

Кристаллическая структура образца, постоянные решетки, а также ориентация его

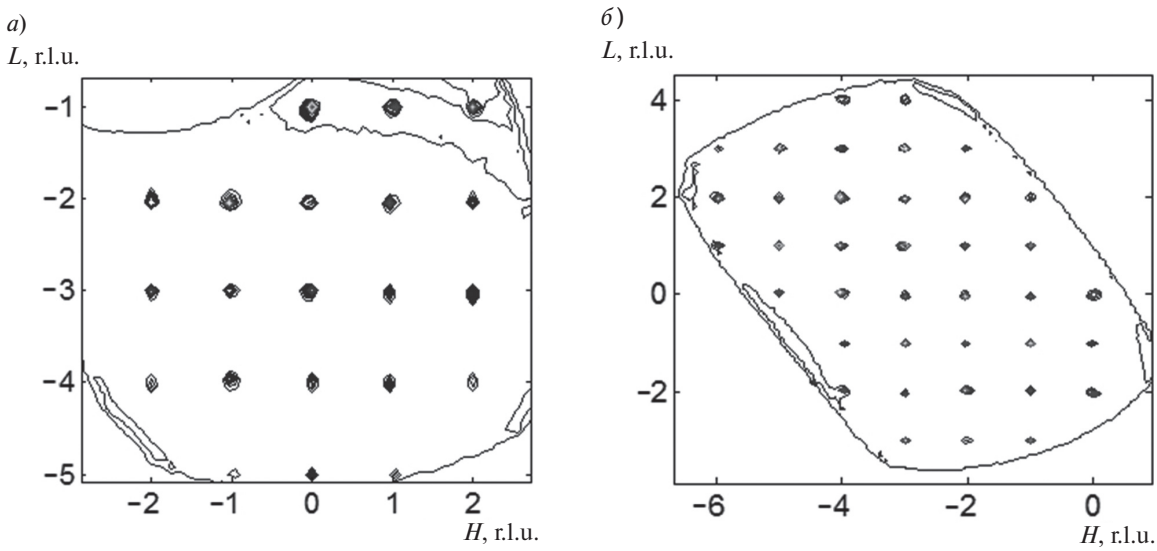



Рис. 5. Реконструкции обратного пространства монокристалла $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ с большим количеством пиков брэгговских отражений, полученные при помощи программы CrysAlis: *а*, *б* – плоскости (H 1 L) и (H K 3) соответственно

кристаллической решетки относительно первичного пучка рентгеновских фотонов были определены с помощью снимков, полученных при максимальном приближении детектора к образцу. Реконструкции этих снимков, полученные с использованием программы CrysAlis, приведены на рис. 5.

После определения ориентации и кристаллической структуры образца были проведены прецизионные измерения ДР. Одним из наиболее наглядных графических представлений ДР являются двумерные карты его интенсивности, снятые в плоскости, проходящей через узел обратной решетки и построенной на векторах, соответствующих направлениям высокой симметрии. При помощи созданных программой VOLVOX трехмерных реконструкций обратного пространства были получены такие двумерные карты (рис. 6). Форма изоконтуров ДР при температурах ниже 150 °С (см. рис. 6) аналогична форме контуров, наблюдаемых в кристаллах, которые подвергаются неоднородным упругим деформациям, вызванным дефектами тетрагональной симметрии [14].

Для выяснения характера диффузного рассеяния была исследована зависимость интенсивности рассеянного излучения от переданного волнового вектора вдоль высокосимметричных направлений (рис. 7).

Кривая на рис. 7,*б* получена с помощью программного пакета CrysAlis методом восстановления плоскости обратного пространства по имеющимся дифракционным картинам. Эта восстановленная зависимость содержит излишне большое количество точек (относительно реального эксперимента) вследствие того, что указанный программный пакет при реконструкции обратного пространства «привязывает» шаг по импульсу к разбиению по пикселям восстановленного изображения. Для сокращения количества точек до уровня, соответствующего действительному уровню информативности эксперимента, а также для оценки погрешности экспериментальных данных применялся следующий дополнительный метод обработки. На первом этапе выбирались оптимальные количество и шаг следования «новых» реконструированных точек вдоль анализируемого направления в расчете на попадание в среднем одной точки на одну фотографию из серии дифракционных снимков. На втором этапе восстановленная программой CrysAlis «старая» масса точек делилась на группы по $n$ ($n$ – число «старых» точек, приходящихся на одну «новую»). На третьем этапе для каждой группы высчитывались среднее арифметическое интенсивности и среднеквадратичная погрешность среднего арифметического по формулам

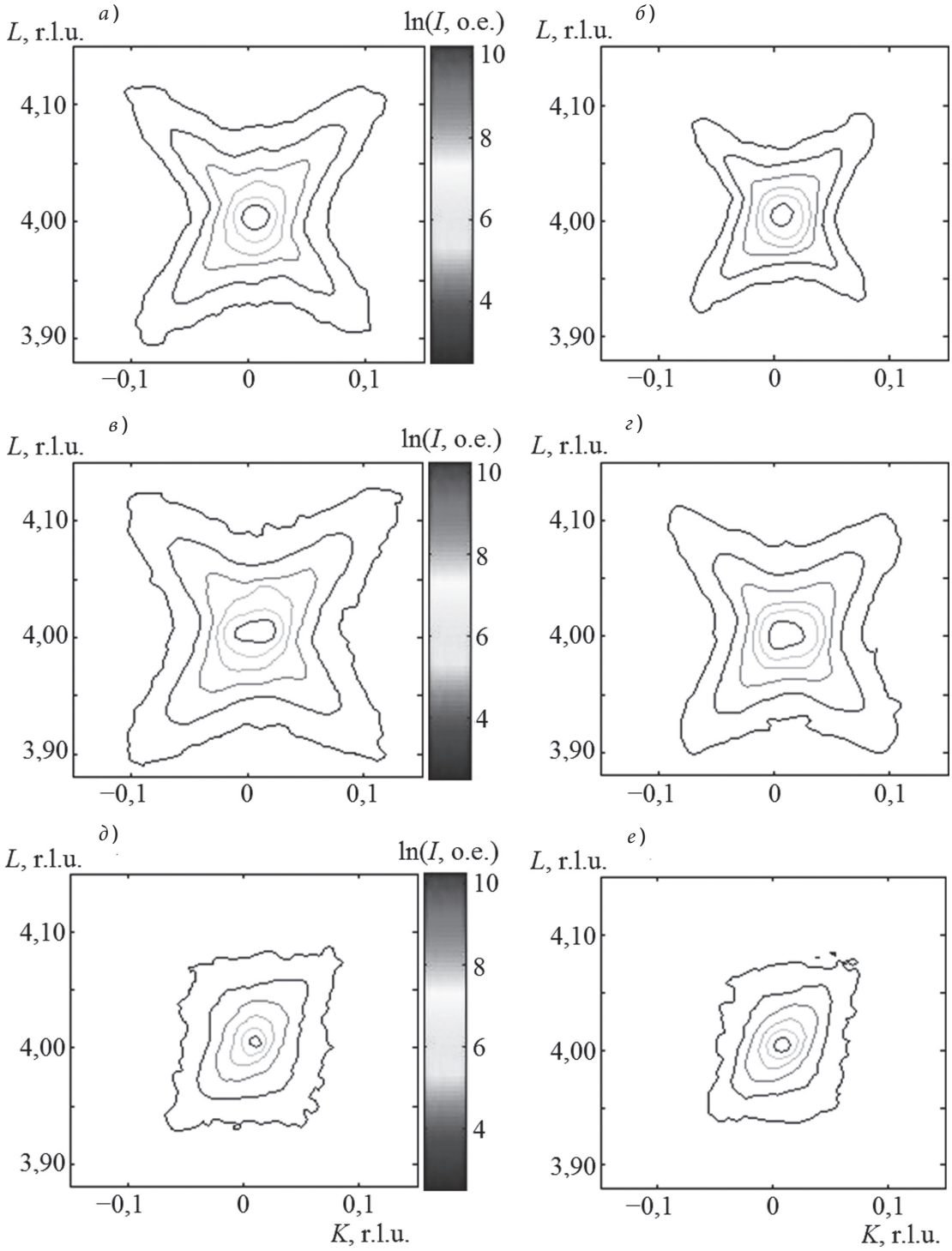



Рис. 6. Карты диффузного рассеяния синхротронного излучения на этапах нагрева (*а*, *в*, *д*) и охлаждения (*б*, *г*, *е*) монокристалла ЦТС. Температура образца, °С: 20 (*а*, *б*); 100 (*в*, *г*); 150 (*д*, *е*). Сплошные контуры – участки одной интенсивности по тоновой шкале. Карты соответствуют сечениям обратного пространства плоскостями, перпендикулярными оси *h* и проходящими через узел обратной решетки 004

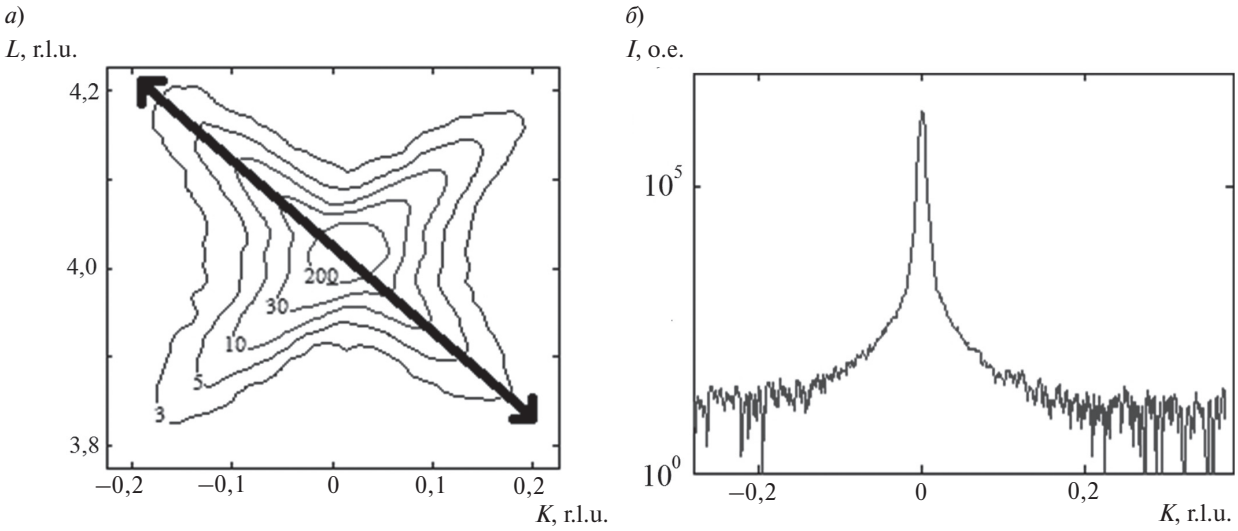



Рис. 7. Зависимость интенсивности рассеяния от переданного волнового вектора вдоль высокосимметричного направления (показано жирной прямой линией): *а* – реконструкция плоскости OKL обратного пространства, сплошные контуры – участки одной интенсивности; *б* – зависимость интенсивности рассеяния от проекции на ось *k* переданного волнового вектора

$$I_{\text{ср}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I_i; \qquad (3)$$

$$\Delta I = \left\{ \sum_{i=1}^{n} \left[ (I_i - I_{\text{ср}})^2 \big/ (n(n-1)) \right] \right\}^{1/2}. \qquad (4)$$

Таким образом количество точек уменьшалось в *n* раз, а шаг между ними возрастал в *n* раз.

Параметры полученных зависимостей вычислялись при помощи оптимизации функции невязки $\chi^2$ методом наименьших квадратов. В качестве значений погрешности измерений использовались результаты расчетов по формуле (4). На двумерных картах интенсивности (см. рис. 6) отчетливо видно, что во вторичное излучение вносят свой вклад два принципиально различных эффекта: брэгговское и диффузное виды рассеяния. Это означает, что полную интенсивность можно представить в виде суммы двух вкладов: $I = I_1 + I_2$. При анализе данных мы считали, что слагаемое $I_1$, соответствующее брэгговскому отражению, описывается пиком гауссовой формы. Зависимость интенсивности диффузного рассеяния от приведенного волнового вектора (компонента $I_2$) является предметом исследования данной работы.

Для сегнетоэлектрических материалов наиболее типична ситуация, когда профили диффузного рассеяния имеют форму лоренцианов. Поэтому в качестве стартовой (подлежащей определению и уточнению) зависимости была взята функция вида

$$I_2 = \frac{A}{\omega^s + (q - q_0)^s}. \qquad (5)$$

Выражение для полной интенсивности как суперпозиции брэгговского и диффузного вкладов во вторичное излучение при этом принимает вид

$$I(q) = I_1(q) + I_2(q) = B\exp\left(-\frac{(q-q_0)^2}{2\sigma^2}\right) + \frac{A}{\omega^s + (q-q_0)^s} + I_0, \qquad (6)$$

где *B*, *A* – амплитуды вкладов первого и второго слагаемых, соответственно; σ – дисперсия распределения Гаусса; ω – полуширина на половине высоты второго распределения; *s* – показатель степени (вместо постоянного для распределения Лоренца показателя $s = 2$ значение величины варьировалось); $I_0$ – вклад фона; *q* – проекция приведенного волнового вектора.

Для упрощения расчетов было учтено, что вклад в суммарную интенсивность от пика

гауссовой формы существен только вблизи узла обратной решетки. При удалении от центра зоны он спадает пропорционально $\exp(-x^2)$, что гораздо быстрее степенной зависимости, и при значениях волнового вектора, отличающихся на 0,02 r.l.u. от положения узла обратной решетки, его вклад в интенсивность много меньше вклада от диффузного рассеяния. Таким образом, вследствие невозможности извлечения полезной информации о ДР в интервале $-0{,}02\ \text{r.l.u.} < q < 0{,}02\ \text{r.l.u.}$, при анализе формы линии диффузного рассеяния точки, находящиеся в этом интервале, были исключены из рассмотрения (рис. 8). При этом значение $\omega^s$ в знаменателе дроби (в выражениях (5), (6)) оказывается неопределимым и также исключается из рассмотрения. В результате проделанных упрощений модельная функция принимает вид

$$I(q) = \frac{A}{(q - q_0)^s} + I_0 . \qquad (7)$$

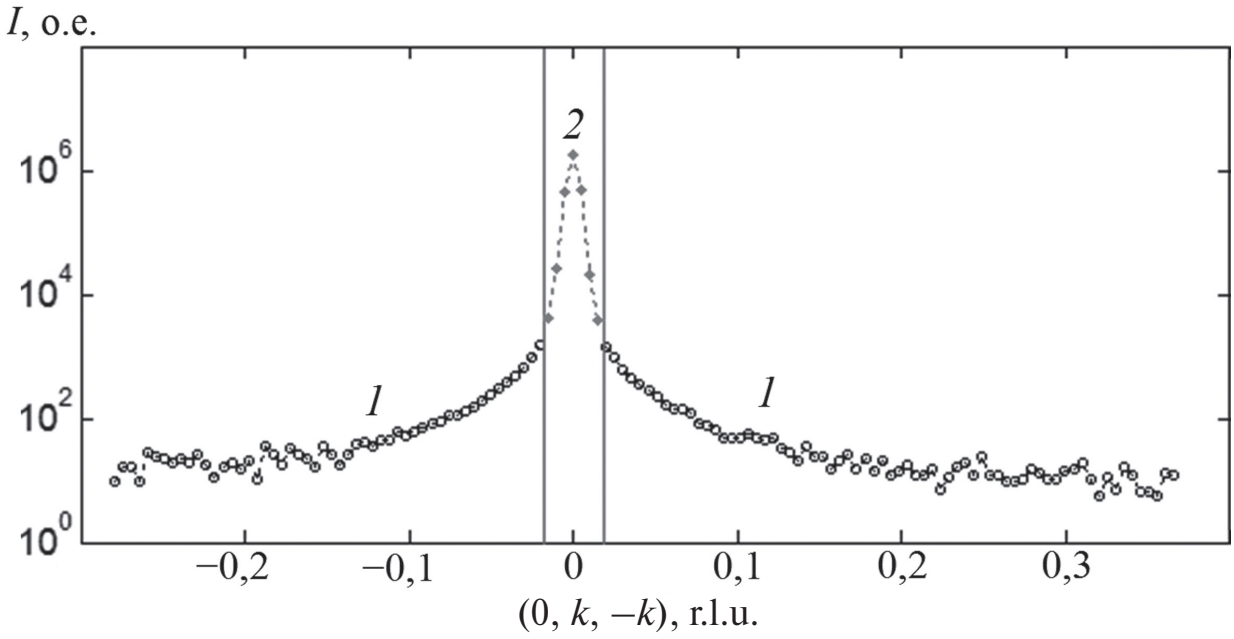



Рис. 8. Зависимость интенсивности рассеяния от проекции переданного волнового вектора на ось *k* вдоль направления (0, 1, – 1) в обратном пространстве и проходящего через узел (0 0 4); *1*, *2* – аппроксимируемые и «вырезанные» точки соответственно

Как уже упоминалось выше, параметры аппроксимирующей кривой определялись при помощи оптимизации функции невязки $\chi^2$ методом наименьших квадратов:

$$\chi^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(I_i - I_{\text{мод}}(q_i))^2\omega^s; \qquad (8)$$

$$\omega_i = \frac{1}{\Delta I_i^{\,2}}, \qquad (9)$$

где $\omega_i$ – весовые коэффициенты; $\Delta I_i$– погрешности измерений.

В ходе обработки экспериментальных данных были проанализированы зависимости функции невязки от отклонения различных параметров от оптимальных значений. Распределения функции невязки приведены на рис. 9. Между параметрами модельной функции *A* (амплитуда интенсивности рассеяния) и *s* (показатель степени) наблюдается существенная корреляция; она состоит в том, что вблизи минимума функции $\chi^2$ квадратичная форма, аппроксимирующая эту функцию, имеет выраженные недиагональные элементы.

В результате численного анализа данных было определено, что параметр *s* равен 2 с точностью до 0,2. Такая степенная зависимость может быть связана с наличием в монокри-

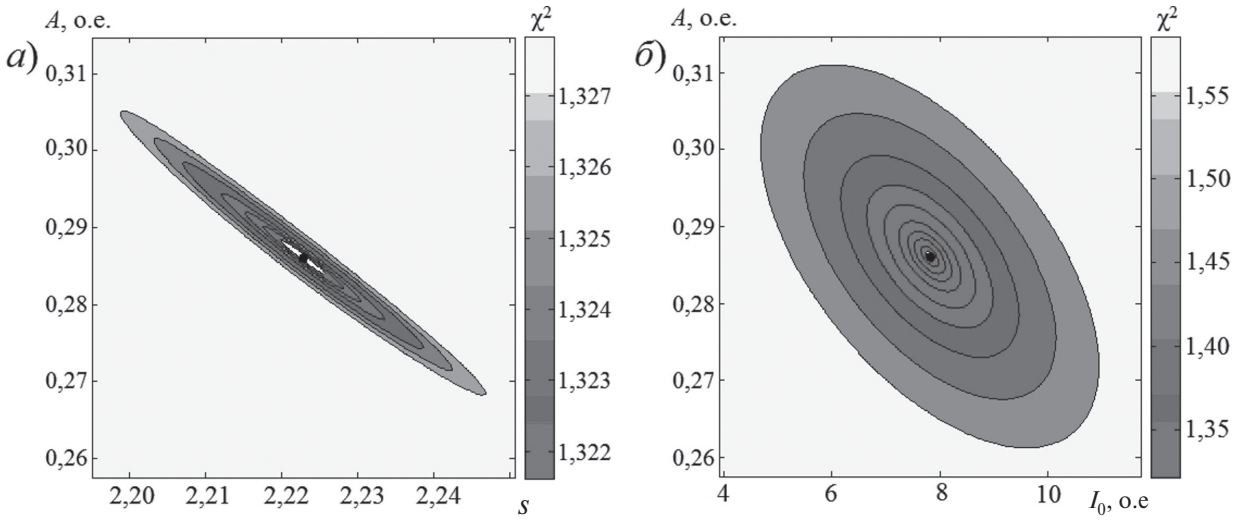



Рис. 9. Распределения функции невязки $\chi^2$ в зависимости от отклонения пар параметров от оптимальных значений: *а*, *б* – квадратичные формы ($s$, $A$) и ($I_0$, $A$) соответственно, обнаруживающие (*а*) и не обнаруживающие (*б*) корреляции между указанными параметрами

сталле ЦТС локальных упругих деформаций, рассеянием излучения на флуктуациях поляризации [15, 16] или на фрактальных кластерах с фрактальной размерностью 2 [17]. Ввиду наличия корреляции между параметрами $A$ и $s$ для корректного определения температурной зависимости одного из них второй нужно зафиксировать. В модельной функции (7) параметр $s$ был заменен на 2.

Степенной характер зависимости интенсивности рассеяния от волнового вектора подтверждается графиком, выполненным в двойном логарифмическом масштабе (рис. 10). На нем совместно представлены аппроксимирую-

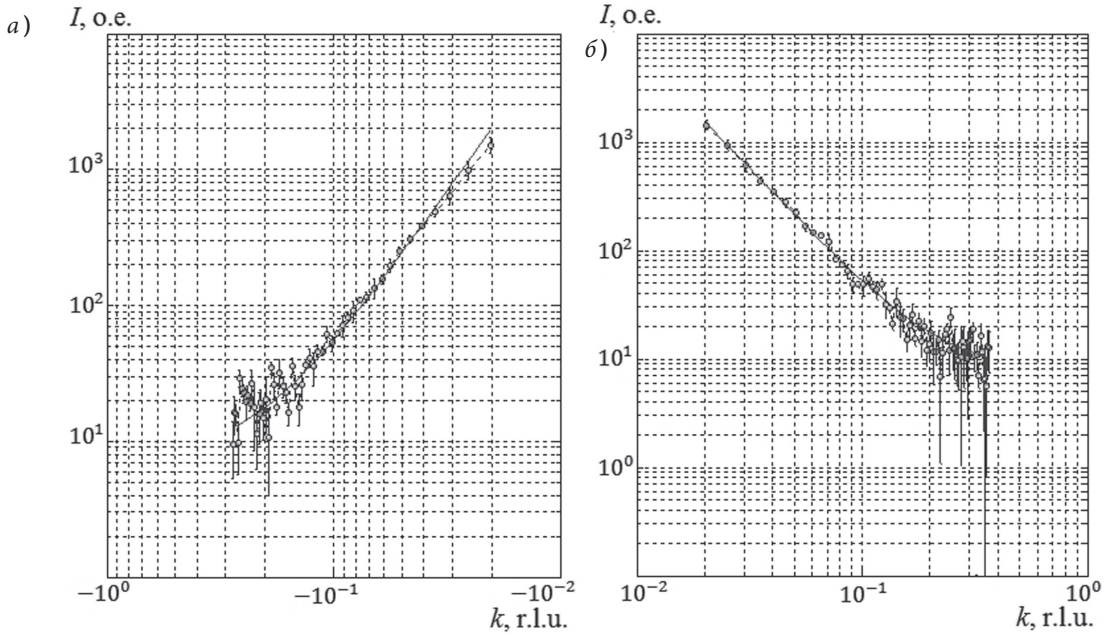



Рис. 10. Аппроксимация экспериментальной зависимости интенсивности рассеяния от приведенного волнового вектора модельной степенной функцией. Представлены точки интенсивности рассеяния только из аппроксимируемых областей (*а*, *б*)

щая кривая и экспериментальные точки. Видно, что в логарифмическом масштабе точки ложатся на прямую линию.

На основе результатов численного анализа данных была построена зависимость интенсивности рассеяния (параметра *A*) от температуры (рис. 11). На графике отмечены точки, полученные в процессе нагрева и охлаждения образца. Видно, что характерное диффузное рассеяние наблюдается в интервале температур от комнатной до 150 °С. В высокотемпературной области за пределами данного интервала амплитуда интенсивности резко спадает, становится крайне малой, и при дальнейшем увеличении температуры почти не меняется. Такое поведение амплитуды интенсивности подтверждается двумерными картами распределения интенсивности рассеяния (см. рис. 6). Наблюдение ненулевых значений параметра *A* в интервале температур свыше 150 °С связано с аппаратной погрешностью. На основе построенной зависимости можно заключить, что в области температур от 150 до 500 °С ДР в монокристаллическом ЦТС отсутствует в пределах погрешности проведенного эксперимента. Сопоставляя эти результаты с фазовой диаграммой ЦТС (см. рис. 3), можно сделать вывод, что отсутствие ДР в указанном температурном интервале, вероятнее всего, связано с выходом образца из области сосуществования тригональной и тетрагональной фаз в область чистой тетрагональной фазы. На рис. 11 видно, что амплитуда интенсивности ДР, измеренная в цикле охлаждения образца, значительно меньше, чем в цикле нагрева при тех же значениях температуры. Это, скорее всего, связано с изменением количества локальных индивидуальных вкраплений областей тетрагональной фазы в тригональную вследствие сильного температурного воздействия.

Итак, нами было проведено экспериментальное изучение локальных структурных искажений в области морфотропной фазовой границы монокристалла ЦТС $Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$ методом квазиупругого диффузного рассеяния синхротронного излучения. В результате обработки полученных данных по ДР в окрестности узла (004) обратной решетки монокристалла ЦТС обнаружено существование ярко выраженной анизотропии этого рассеяния. Показано, что распределения интенсивности диффузного рассеяния $I(q, T)$ вдоль высокосимметричного направления (0, 1, −1) обратного пространства подчиняется степенной зависимости с показателем степени 2±0,2. Прослежена температурная эволюция интенсивности рассеяния $I(q, T)$ в интервале температур от комнатной до 500 °С. Установлено, что компонента, которая характеризуется выраженной анизотропией, присутствует при температурах до 150 °С.

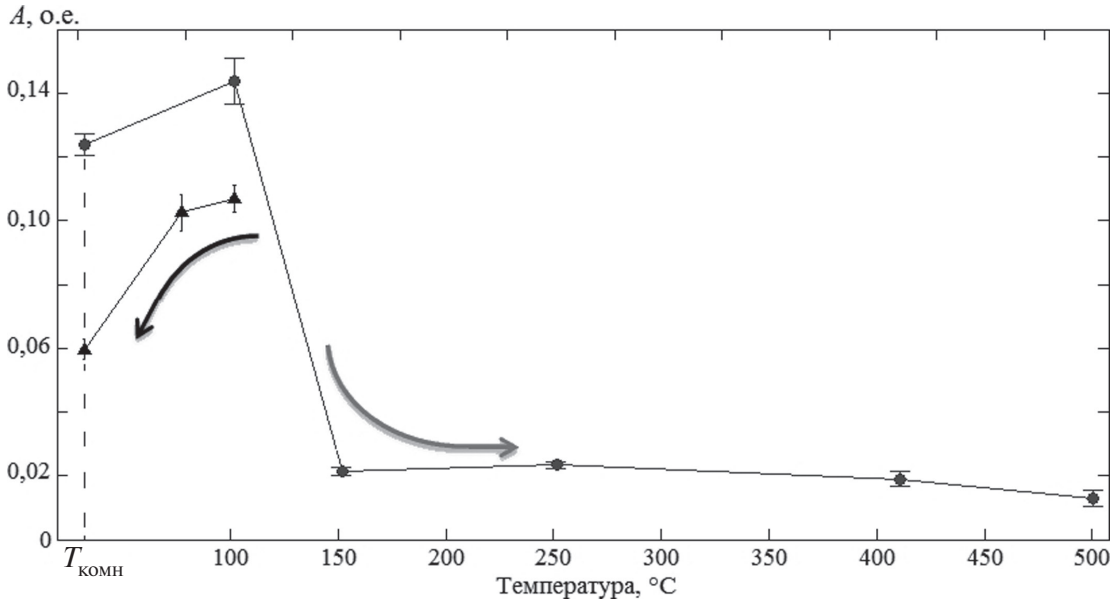



Рис. 11. Зависимость интенсивности диффузного рассеяния от температуры образца

С учетом выявленных особенностей формы линии, характера анизотропии рассеяния, а также температурной зависимости интегральной интенсивности рассеяния сделано заключение, что наиболее вероятной причиной его появления являются неоднородные упругие микродеформации решетки, возникающие в результате появления вкраплений областей тетрагональной фазы в тригональную. Таким образом, было получено экспериментальное подтверждение выдвинутой ранее гипотезы о двухфазности ЦТС в области морфотропной фазовой границы в интервале температур от комнатной до 150 °С.

Работа поддержана в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы, а также грантами Комитета по науке и высшей школе Санкт-Петербурга.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Haertling, G.H.** Ferroelectric ceramics: History and technology [Text] / G.H. Haertling // Amer. Cer. Soc.– 1999.– Vol. 82.– No. 4.– P. 797–818.

2. **Scott, J.F.** Application of modern ferroelectrics [Text] / J.F. Scott // Science.– 2007.– Vol. 315.– P. 954–959.

3. **Cross, E.** Materials science: Lead-free at last [Text] / E. Cross // Nature.– 2004.– Vol. 432.– P. 24–25.

4. **Gross, S.J.** Micromachined switches and cantilever actuators based on piezoelectric lead zirconate titanate (PZT) [Text] / S.J. Gross // A Thesis (Ph. D.) The Pennsylvania State University, 2004.– P. 19–20.

5. **Noheda, B.** Structure and high-piezoelectricity in lead oxide solid solutions [Text] / B. Noheda // Current Opinion in Solid State and Materials Science.– 2002.– Vol. 6.– P. 27–34.

6. **Noheda, B.** Tetragonal-to-monoclinic phase transition in a ferroelectric perovskite: The structure of $PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$ [Text] / B. Noheda, J.A. Gonzalo, L.E. Cross, [et al.] // Phys. Rev. B.– 2000.– Vol. 61.– P. 8687–8695.

7. **Hlinka, J.** Soft antiferroelectric fluctuations in morphotropic $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ single crystals as evidenced by inelastic X-ray scattering [Text] / J. Hlinka, P. Ondrejkovic, M. Kempa, [et al.] // Physical Review B.– 2011.– Vol. 83.– P. 140101.

8. **Bokov, A.A.** Optically isotropic and monoclinic ferroelectric phases in $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ (PZT) single crystals morphotropic phase boundary [Text] / A.A. Bokov, X. Long, Z.-G. Ye // Phys. Rev. B.– 2010.– Vol. 81.– P. 172103.

9. **Phelan, D.** Single crystal study of competing rhombohedral and monoclinic order in lead zirconate titanate [Text] / D. Phelan, X. Long, Z.-G. Ye, [et al.] // Phys. Rev. Lett.– 2010. – Vol. 105.– P. 207601.

10. **Бурковский, Р.Г.** Мягкомодовая динамика и температурная эволюция корреляций ионных смещений в сегнетоэлектрике релаксоре магнониобате свинца [Текст]: дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.04: защищена 24.02.2011: утв. 10.06.2011 / Бурковский Роман Георгиевич.– СПб.: СПбГПУ, 2011.– 120 с.– Библиогр.: с. 110.

11. CrysAlis Pro Data collection and processing for X-ray diffractometers user manual [Электронный ресурс].– 2011. http://www.chem.agilent.com/Library/usermanuals/Public/CrysAlis%20Pro%20User%20Manual_v4.pdf.

12. Volvox Manual [Электронный ресурс].– 2011. http://ncm.spbstu.ru/software/volvox/volvoxManual.pdf

13. MATLAB Getting started guide [Электронный ресурс].– 2011. http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/matlab/getstart.pdf

14. **Krivoglaz, M.A.** X-ray and neutron diffraction in nonideal crystals [Text] / M.A. Krivoglaz, O.H. Glebov, V.G. Bar'yakhart, [et al.] // Berlin, Heidelferg, New-York: Springer-Verlag.– 1996.– 465 p.

15. **Yamada, Y.** Study of critical fluctuations in $BaTiO_3$ by neutron scattering [Text] / Y. Yamada, G. Shirane, A. Linz // Phys. Rev.– 1969.– Vol. 177.– No. 2.– P. 848–857.

16. **Lines, M.E.** Polarization fluctuations near a ferroelectric phase transition [Text] / M.E. Lines // Phys. Rev. B.– 1972.– Vol. 5.– No. 9.– P. 3690–3702.

17. **Sinha, S.K.** Kinetics of aggregation and gelation [Text] / S.K. Sinha, T. Freltoft, J.K. Kjems // Intern. Top. Conf. on Kinetics of Aggregation and Gelation.– North-Holland, Amsterdam: Elsevier Science Pub., 1984. – P. 87–90.

УДК 538.915

*Д.В. Ковалевский*

# ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ КРОНИГА – ПЕННИ С ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ РЕШЕТКОЙ СЛУЧАЙНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ

Движение электронов в неупорядоченных средах качественно отличается от движения в идеальных периодических кристаллах. В пионерской работе Ф. Андерсона [1] было показано, что в трехмерной системе потенциальных ям случайной глубины при некотором значении относительной степени беспорядка происходит переход металл – изолятор, приводящий к локализации волновых функций электронов. Дальнейшие исследования показали, что в одномерном случае, в отличие от трехмерного, андерсоновская локализация имеет место при произвольной, сколь угодно малой величине беспорядка [2].

Популярной моделью одномерной системы с беспорядком является классическая модель Кронига – Пенни [3], модифицированная путем введения случайных добавок к мощности дельтообразных барьеров [4, 5]. Несложно показать (см. следующий раздел), что подобная модель математически эквивалентна модели сильно связанных электронов, с которой исторически началось изучение электронных свойств неупорядоченных систем. Исследование модифицированной модели Кронига – Пенни возможно как в рамках формализма матриц перехода (используемого в настоящей работе), так и с помощью изящной классической аналогии, сводящей рассматриваемую систему к классическому гармоническому осциллятору, на который воздействует случайная квазипериодическая внешняя сила [4–6].

В настоящей работе при помощи формализма матриц перехода решается задача о падении блоховской волны на полубесконечную одномерную решетку дельтообразных барьеров случайной мощности (модифицированная модель Кронига – Пенни). Показано, что сколь угодно малая случайная некоррелированная добавка к периодическому потенциалу приводит к невозможности распространения в глубь решетки незатухающих блоховских волн, характерных для классической модели Кронига – Пенни; рассчитана глубина затухания.

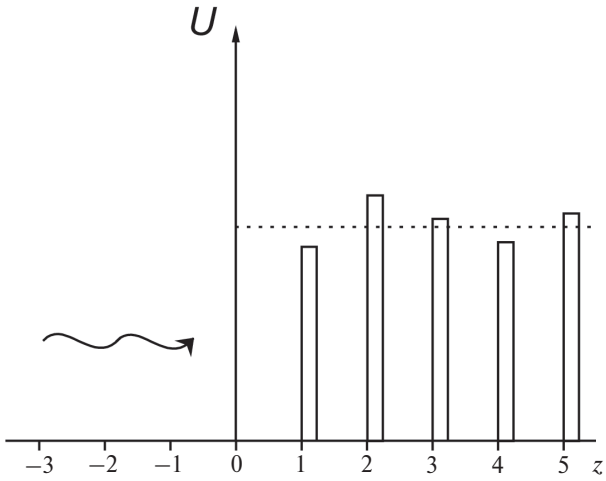
## Модель Кронига – Пенни со случайным потенциалом

Рассмотрим движение частицы в одномерном потенциале $(-\infty < z < +\infty)$, образованном полубесконечной последовательностью дельтообразных барьеров, расположенных в узлах решетки $z_n = n$ ($n = 1, 2, ..., +\infty$) (см. рисунок). Мощность барьеров в общем случае различна и порождает последовательность $\{\varepsilon_n\}$, при этом стационарное уравнение Шредингера принимает вид

$$E\psi(z) = -\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n \delta(z-n)\psi(z) .$$

Несложно показать [4], что для данной модели значения волновых функций $\psi_n$ в узлах решетки связаны рекуррентным соотношением

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = v_n \psi_n ,$$




Одномерный потенциал, образованный полубесконечной последовательностью эквидистантных дельтообразных барьеров различной мощности

где введено обозначение

$$v_n = 2\cos q + \varepsilon_n \frac{\sin q}{q} \quad \left(q^2 = E\right). \qquad (1)$$

Вводя вектор

$$\mathbf{X}_n = \left(\psi_n, \quad \psi_{n-1}\right)^{\mathrm{T}}$$

(T – операция транспонирования), запишем соотношение (1) в матричной форме:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{Q}_n \mathbf{X}_n, \qquad (2)$$

где введена матрица

$$\mathbf{Q}_n = \begin{pmatrix} v_n, & -1 \\ 1, & 0 \end{pmatrix}.$$

Стандартная модель Кронига – Пенни соответствует случаю дельтообразных барьеров равной мощности:

$$\varepsilon_n = \varepsilon, \; v_n = v, \; \mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}.$$

Хорошо известно, что для бесконечной решетки подобного вида решения в виде бегущих волн возможны лишь при выполнении условия

$$-2 < v < 2, \qquad (3)$$

порождающего соответствующую зонную структуру. При этом на периоде решетки фазы компонентов вектора **X** получают приращение $\phi^{\pm}$, удовлетворяющее условию

$$\cos\phi^{\pm} = \frac{v}{2}; \; \sin\phi^{\pm} = \pm\sqrt{1 - \frac{v^2}{4}},$$

а собственные числа матрицы **Q** равны соответственно

$$\lambda_{\pm}^{*} = \cos\phi^{\pm} + i\sin\phi^{\pm}. \qquad (4)$$

Предположим теперь, что мощности дельтообразных барьеров имеют малую некоррелированную случайную составляющую:

$$\varepsilon_n = \varepsilon + \Delta\varepsilon_n.$$

Тогда, в соответствии с выражением (1),

$$v_n = v + \Delta v_n, \qquad (5)$$

причем будем полагать, что

$$\left\langle \Delta v_n \right\rangle = 0, \; \left\langle \Delta v_n \Delta v_k \right\rangle = v_*^2 \delta_{nk},$$

где $\delta_{nk}$ – символ Кронекера.

Как станет ясно из следующего раздела, наличие у потенциала случайной составляющей делает невозможным распространение бегущих волн в одномерном кристалле.

### Ансамблевое усреднение

Выпишем в явном виде рекуррентное соотношение (2) для случайного потенциала (4), (5):

$$\mathbf{X}_{n+1} = \begin{pmatrix} v + \Delta v_n, & -1 \\ 1, & 0 \end{pmatrix} \mathbf{X}_n. \qquad (6)$$

Вводя обозначение $\mathbf{X}_n^*$ для вектора, эрмитово сопряженного вектору $\mathbf{X}_n$, можем записать с учетом соотношения (6):

$$\left\langle \mathbf{X}_{n+1}^* \mathbf{X}_{n+1} \right\rangle = \left\langle \mathbf{X}_n^* \mathbf{Q}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_n \mathbf{X}_n \right\rangle, \qquad (7)$$

где угловые скобки означают усреднение по ансамблю реализаций случайного потенциала, т. е. рассчитываются характеристики смешанного состояния.

Сделаем далее предположение о том, что усреднение в правой части (7) можно выполнить в два этапа (на первом усредняется случайная матрица $\mathbf{Q}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_n$, на втором – вычисляется среднее значение соответствующей эрмитовой формы):

$$\left\langle \mathbf{X}_{n+1}^* \mathbf{X}_{n+1} \right\rangle = \left\langle \mathbf{X}_n^* \left\langle \mathbf{Q}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_n \right\rangle \mathbf{X}_n \right\rangle. \qquad (8)$$

Фактически данное приближение означает пренебрежение обратным рассеянием.

Усредняя непосредственно случайную матрицу $\mathbf{Q}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_n$, находим:

$$\left\langle \mathbf{Q}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_n \right\rangle = \begin{pmatrix} v^2 + v_*^2 + 1, & -v \\ -v, & 1 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Подставляя затем (9) в (8), находим рекуррентное соотношение, связывающее корреляторы

$$\left\langle \psi_{n+1}^* \psi_{n+1} \right\rangle, \; \left\langle \psi_n^* \psi_n \right\rangle, \; \left\langle \psi_{n-1}^* \psi_{n-1} \right\rangle, \; \mathrm{Re}\left\langle \psi_n^* \psi_{n-1} \right\rangle.$$

Необходимое рекуррентное соотношение для перекрестного коррелятора выводится из усредненного уравнения (6), согласно которому

$$\left\langle \psi_{n+1}^* \psi_n \right\rangle = v \left\langle \psi_n^* \psi_n \right\rangle - \left\langle \psi_{n-1}^* \psi_n \right\rangle,$$

откуда

$$\mathrm{Re}\left\langle \psi_{n+1}^* \psi_n \right\rangle = v \left\langle \psi_n^* \psi_n \right\rangle - \mathrm{Re}\left\langle \psi_n^* \psi_{n-1} \right\rangle.$$

И наконец, вводя трехмерный вектор

$$\mathbf{Y}_n = \left(\left\langle \psi_n^* \psi_n \right\rangle, \quad \left\langle \psi_{n-1}^* \psi_{n-1} \right\rangle, \quad \mathrm{Re}\left\langle \psi_n^* \psi_{n-1} \right\rangle\right)^{\mathrm{T}},$$

получаем для него рекуррентное соотношение

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{R}\mathbf{Y}_n, \tag{10}$$

где матрица **R** имеет вид

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} v^2 + v_*^2, & 1, & -2v \\ 1, & 0, & 0, \\ v, & 0, & -1 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Решением уравнения (10) является показательная функция

$$\mathbf{Y}_n = \mathbf{R}^n \mathbf{Y}_0, \quad n = 1, 2, \ldots, +\infty, \tag{12}$$

асимптотические свойства которой определяются спектром матрицы **R**.

### Спектральный анализ задачи

Непосредственное вычисление показывает, что для матрицы (11) характеристическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} f(v_*^2, \lambda) \equiv \lambda^3 - \left(v^2 + v_*^2 - 1\right)\lambda^2 + \\ + \left(v^2 - v_*^2 - 1\right)\lambda - 1 = 0. \end{aligned} \tag{13}$$

Рассмотрим сначала случай отсутствия беспорядка и идеального периодического потенциала $\left(v_*^2 = 0\right)$. Корни невозмущенного уравнения $f(0, \lambda) = 0$ будем помечать верхней горизонтальной чертой. Несложные выкладки приводят к следующему результату:

$$\bar{\lambda}_0 = 1; \quad \bar{\lambda}_\pm = \left(\lambda_\pm^*\right)^2,$$

где $\lambda_\pm^*$ дается соотношением (4).

Соответствующие собственные векторы имеют вид

$$\bar{\mathbf{X}}_0 = \left(1, \quad 1, \quad v/2\right)^{\mathrm{T}}; \quad \bar{\mathbf{X}}_\pm = \left(\left(\lambda_\pm^*\right)^2, \quad 1, \quad \lambda_\pm^*\right)^{\mathrm{T}}.$$

Формируя из них общее решение уравнения (12), мы должны (ввиду вещественности компонентов вектора **Y**) составить вещественнозначную линейную комбинацию векторов $\bar{\mathbf{X}}_+$ и $\bar{\mathbf{X}}_-$. Несложно видеть, что пара $\bar{\lambda}_0$, $\bar{\mathbf{X}}_0$ порождает бегущую волну, соответствующую хорошо известному решению классической модели Кронига – Пенни (см. раздел, посвященный описанию модели), а комбинация пар $\bar{\lambda}_\pm$, $\bar{\mathbf{X}}_+$ – стоячую волну.

Вернемся к случаю наличия малого случайного возмущения периодического потенциала $\left(v_*^2 = 0\right)$ и рассмотрим полное (возмущенное) уравнение (13). Из явного вида характеристического многочлена (13) немедленно вытекает, что

$$f(v_*^2, 1) = -2v_*^2 < 0;$$

$$f(v_*^2, \lambda) \to +\infty \text{ при } \lambda \to +\infty,$$

откуда следует наличие у возмущенной задачи вещественного собственного числа, большего единицы. Соответствующее частное решение имело бы нефизический вид бегущей волны с экспоненциально растущей амплитудой, а это свидетельствует о невозможности распространения делокализованных бегущих волн в модели Кронига – Пенни со случайным потенциалом.

Представляет интерес расчет поправок к собственным числам $\bar{\lambda}_\pm$. В первом порядке теории возмущений для уравнения (13) имеем:

$$\Delta\lambda = -\frac{\left[\partial f / \partial\left(v_*^2\right)\right]\left(0, \bar{\lambda}\right)}{\left[\partial f / \partial\lambda\right]\left(0, \bar{\lambda}\right)} v_*^2,$$

что после ряда преобразований приводит к простому результату:

$$\Delta\lambda_\pm = \frac{\bar{\lambda}_\pm}{v^2 - 4} v_*^2. \tag{14}$$

Согласно условию (3) знаменатель в правой части (14) оказывается отрицательным, откуда следует, что невозмущенным собственным числам $\bar{\lambda}_\pm$, имеющим единичный модуль, соответствуют возмущенные собственные числа $\lambda_\pm$ с модулем, меньшим единицы. Это означает, что соответствующая стоячая волна затухает в глубь полубесконечной случайной решетки. Переходя в (12) от показательной функции к экспоненте, легко находим характерную глубину затухания

$$L = \frac{4 - v^2}{v_*^2}.$$

Отметим в заключение, что, как следует из полученного выражения (14), развитая теория

возмущений становится неприменимой вблизи краев разрешенных зон модели Кронига – Пенни, соответствующих условию $v^2 = 4$.

Более тщательный анализ показывает, что сделанное выше заключение о невозможности распространения бегущих волн в случайной одномерной модели Кронига – Пенни существенным образом опирается на предположение о некоррелированности случайных добавок к потенциалу на различных узлах решетки. Так, в случае, когда система состоит из случайной последовательности дельтообразных барьеров с одним из двух возможных значений мощности, но барьеры сгруппированы парами, т. е. мощность первого и второго, третьего и четвертого, ..., $(2n-1)$-го и $2n$-го барьеров одинакова (так называемая димерная модель), возможно наличие делокализованных состояний [2, 4, 7].

Перспективным направлением дальнейших исследований может стать использование развитого выше формализма для случая модели Кронига – Пенни со структурным беспорядком, когда расстояние между соседними потенциальными барьерами является случайной величиной [5]. Наконец, представляет значительный интерес моделирование в рамках предложенного формализма неупорядоченных систем с *PT*-симметрией, активно исследуемых в последние годы как теоретически, так и экспериментально [8, 9].

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**


1. **Anderson, P.W.** Absence of diffusion in certain random lattices [Text] / P.W. Anderson // Phys. Rev.– 1958.– Vol. 109.– No. 2.– P. 1492–1505.

2. **Гантмахер, В.Ф.** Электроны в неупорядоченных средах [Текст] / В.Ф. Гантмахер.– М.: Физматлит, 2003.– 176 с.

3. **Kronig, R. de L.** Quantum mechanics of electrons in crystal lattices [Text] / R. de L. Kronig, W.G. Penney // Proc. Roy. Soc. London, Ser. A.– 1931.– Vol. 130.– No. 814.– P. 499–513.

4. **Kottos, T.** Transport properties of one-dimensional Kronig–Penney models with correlated disorder [Text] / T. Kottos, G.P. Tsironis, F.M. Izrailev // J. Phys: Condens. Matter.– 1997.– Vol. 9.– P. 1777–1791.

5. **Hernández-Herrejón, J.C.** Electronic states and transport properties in the Kronig–Penney model with correlated compositional and structural disorder [Text] / J.C. Hernández-Herrejón, F.M. Izrailev, L. Tessieri // Physica E.– 2010. – Vol. 42.– P. 2203–2010.

6. **Ossipov, A.** Statistical properties of phases and delay times of the one-dimensional Anderson model with one open channel [Text] / A. Ossipov, T. Kottos, T. Geisel // Phys. Rev. B.– 2000.– Vol. 61.– No. 17.– P. 11411–11415.

7. **Dunlap, D.H.** Absence of localization in a random-dimer model [Text] / D.H. Dunlap, H.-L. Wu, P.W. Phillips // Phys. Rev. Lett.– 1990.– Vol. 65.– No. 1.– P. 88–91.

8. **West, C.T.** *PT*-symmetric wave chaos [Text] / C.T. West, T. Kottos, T. Prosen // Phys. Rev. Lett.– 2010.– Vol. 104.– P. 054102.

9. **Lin, Zin.** Unidirectional invisibility induced by *PT*-symmetric periodic structures [Text] / Zin Lin, H. Ramezani, T. Eichelkraut,[et al.] // Phys. Rev. Lett.– 2011.– Vol. 106.– P. 213901.


УДК 535.323

*А.А. Пастор, П.Ю. Сердобинцев, Н.А. Тимофеев, М.А. Ходорковский, А.А. Накозина*

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ КАТОДОВ

В настоящей работе проведено исследование свойств наноструктурированных материалов; при этом измерены времена затухания свободных носителей, создаваемых в объеме и на поверхности твердотельного образца импульсным излучением фемтосекундного ла-

зера. Регистрация времени отклика свободных носителей позволяет определять характерные особенности наноструктурированных материалов, обеспечивающие их электрические свойства (сопротивление, напряжение пробоя и т. п.) а также их эмиссионную способность. Таким образом, может быть произведен выбор материалов, перспективных для создания катодов электроразрядных устройств с улучшенными эмиссионными свойствами. Добавление к материалам на основе редкоземельных элементов легирующих включений, обладающих полупроводниковыми свойствами, таких как InGaAs, позволяет рассчитывать на улучшение эмиссионных свойств наноструктурированных катодов, что и обусловило необходимость проведения данного исследования электрокинетических характеристик свободных носителей в полупроводниковых образцах на основе арсенида галлия GaAs. Улучшение эмиссионных свойств катодов, представляющих собой полупроводниковый материал с включениями цезия, было продемонстрировано в работе [1]. Мы предполагаем, что указанный эффект обусловлен нанокомпозитным составом подобных катодов, в которых наночастицы металла облегчают выход электронов, снижая работу выхода. Указанное снижение наблюдалось в работе [1], что делает актуальным исследование влияния полупроводниковых материалов с квантовыми ямами на основе наночастиц металла на свойства нанокомпозитных катодов.

Низкотемпературные полупроводники, такие как GaAs и InGaAs, обладают полезными электрокинетическими свойствами, которые можно применять в электронике [2]. Среди этих свойств наиболее уникальным является малое время жизни свободных носителей (порядка $10^2$ фс), которое непосредственно зависит от процесса синтеза материала [3]. Кроме сверхбыстрого электронного отклика, полупроводник LT-InGaAs (Low-Temperature InGaAs) привлекает внимание благодаря его большому электрическому сопротивлению и высокому напряжению пробоя. Таким образом, этот материал перспективен для создания изолирующих слоев и областей, препятствующих растеканию тока и для пассивации [4].

### Экспериментальная часть

В данной работе экспериментально изучены времена релаксации свободных носителей, создаваемых излучением фемтосекундной лазерной установкой «Пульсар-10» на длине волны 790–800 нм в полупроводниковой системе InGaAs с квантовыми точками – наноразмерными включениями металлического мышьяка. Экспериментальная схема измерения наведенных изменений показателя преломления твердотельных образцов выглядит следующим образом: два пучка (импульс накачки и зондирующий пробный импульс с интенсивностью, меньшей в 100 раз) сходятся на образце InGaAs, пересекаясь под небольшим углом так, что их волновые поверхности встречаются на поверхности образца только на одной прямой, а в других местах запаздывает либо накачка, либо

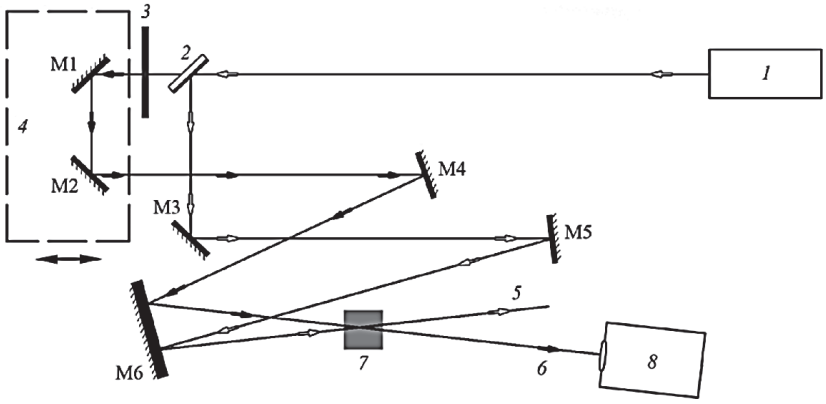



Рис. 1. Схема экспериментальной установки:
*1* – фемтосекундный лазер; *2* – автокоррелятор (светоделитель); *3* – нейтральный светофильтр; *4* – линия задержки; *5*, *6* – импульсы накачки и зондирующий; *7* – образец; *8* – камера с ПЗС-матрицей; M1 – M6 – система зеркал

пробный импульс (в зависимости от задержки). Отражение пробного импульса регистрировалось вблизи угла Брюстера, чтобы уменьшить фон от накачки.

На рис. 1 изображена схема экспериментальной установки. В эксперименте использовался фемтосекундный лазер *1* (энергия в импульсе 1–5 мДж, частота повторения импульсов – 10 Гц, длительность импульса – 50 фс, длина волны – 800 нм). Фемтосекундные импульсы лазера (пробный *6* и накачка *5*) попадают на схему зеркал М1 – М6 автокоррелятора *2*, где М1 и М2 образуют линию задержки *4*; с их помощью мы имеем возможность менять задержку между импульсами. В результате два пучка (*5*, *6*) попадают на образец *7*, а дальше регистрируются CCD-камерой, объектив которой сфокусирован на поверхность образца.

Угол падения импульса накачки и пробного импульса на поверхность образца был выбран равным углу Брюстера, так что коэффициент отражения *p*-поляризованных пучков света равнялся нулю для образца, не возбужденного импульсом накачки. Отражение возникало лишь за счет изучаемого эффекта наведенного отражения при генерации свободных носителей. На поверхности образца пространственно были разделены зоны, в которых импульс накачки опережал пробный и в которых импульс накачки запаздывал по отношению к пробному.

**Результаты и обсуждение**

В процессе измерений было проделано несколько записей экспериментов, в результате которых был получен набор изображений поверхности образца, снятых CCD-камерой. Вычитанием двух различных сигналов от накачивающего и зондирующего импульсов было определено время релаксации наведенного коэффициента преломления. Импульсы разделены временным промежутком, задаваемым изменением длины линии задержки.

На рис. 2 приведены изображения поверхности образца, полученные в результате вычитания одного изображения из другого; снимки были разделены временным интервалом задержки пробного импульса в 667 и 1333 фс.

Изображения, представленные на рис. 2, позволяют определить время релаксации исследуемого эффекта наведенного коэффициента отражения. График зависимости интенсивности отраженного сигнала от времени (в относительных единицах) приведен на рис. 3. Поскольку CCD-камера была сфокусирована на поверхность образца, она регистрировала пространственное распределение интенсивности пробного пучка, отраженного от поверхности. Различие коэффициента отражения в различных точках поверхности обусловлено (как уже упоминалось выше) тем, что задержка между временем прихода импульса накачки и пробного в выбранной схеме эксперимента меняется вдоль поверхности. Таким образом, распределение интенсивности отраженного пробного пучка по поверхности образца может быть пересчитано для получения временных вариаций наведенного коэффициента отражения, вызванного генерацией свободных носителей во время действия импульса накачки и их последующей релаксацией. При этом задержка пробного импульса на 833 фс приводит к пространственному сдвигу на поверхности образца, соответствующему 100 п (пикселям) на детекторе CCD-камеры.

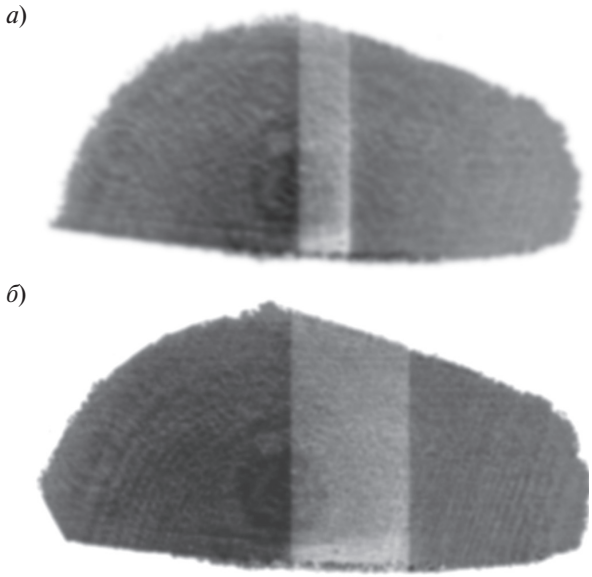



Рис. 2. Результаты вычитания двух пар изображений (одно из другого в паре) пробных импульсов, разделенных временными промежутками в 667 (*а*) и 1333 (*б*) фс

На графике, приведенном на рис. 3, выделены области релаксации. Если аппроксимировать эти области экспонентой вида

$$y = y_0 + Ae^{\frac{x-x_0}{t}},$$

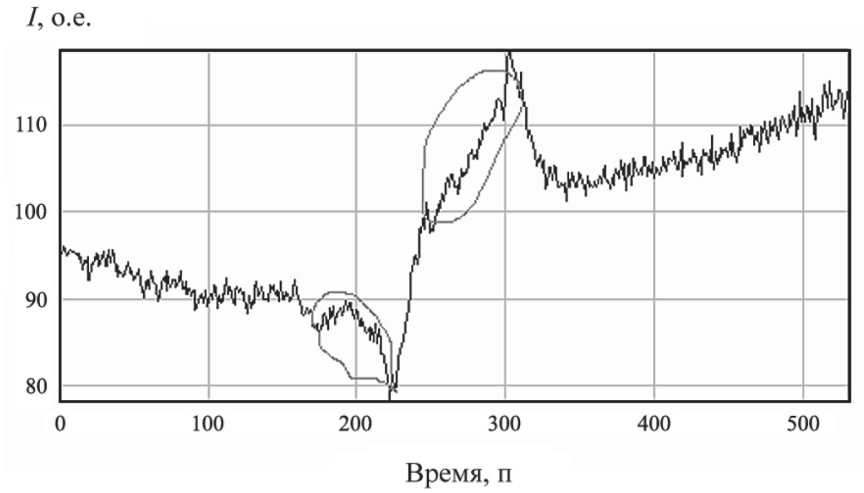



Рис. 3. Зависимость интенсивности отраженного сигнала (уровня серого тона) от времени (80 пикселей (п) соответствуют 667 фс); выделены области релаксации

то можно определить характерную величину $t$, которая определяет время релаксации свободных носителей в исследуемом образце.

После обработки и усреднения экспериментальных данных было получено значение времени релаксации свободных носителей $t = 200 \pm 35$ фс.

Таким образом, в работе проведены измерения времени релаксации полупроводникового образца InGaAs с квантовыми точками мышьяка As. Установлено, что время релаксации составляет 200 фс. Столь быстрая релаксация свободных носителей демонстрирует перспективность этого материала для создания наноструктурированных катодов на базе редкоземельных элементов с полупроводниковыми включениями, содержащими квантовые точки As. Полученное малое время релаксации однозначно указывает на присутствие наноразмерных металлических включений, которые (как следует из анализа данных, приведенных авторами работы [1]) способны понижать работу выхода нанокомпозитных катодов, содержащих как металлические включения, так и полупроводниковый материал.

На основе полученных данных можно заключить, что предложенная схема измерения может быть использована для выбора материалов, перспективных для создания катодов электроразрядных устройств с улучшенными эмиссионными свойствами. Добавление к материалам на основе редкоземельных элементов легирующих включений, обладающих полупроводниковыми свойствами, таких как InGaAs, позволяет рассчитывать на улучшение эмиссионных свойств наноструктурированных катодов, чем и была обусловлена необходимость проведения данного исследования электрокинетических характеристик свободных носителей в полупроводниковых образцах на основе InGaAs.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (государственный контракт № 16.513.11.3041 с использованием научного оборудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ».

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Mimura, H.** Improvement of the emission current from a cesiated metal-oxide-semiconductor cathode [Text] / H. Mimura, Y. Neo, H. Shimavaki, [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 88. – P. 123514–123516.

2. **Roux, J.F.** Time-resolved reflectivity characterization of polycrystalline low-temperature-grown GaAs [Text] / J.F. Roux, J.L. Coutaz, A. Krotkus // Appl. Phys. Lett. – 1999. – Vol. 74. – Iss. 17. – P. 2462–2464.

3. **Loukakos, P.A.** Role of As precipitates on ultrafast electron trapping in low-temperature-grown GaAs and AlGaAs alloys [Text] / P.A. Loukakos, C. Kalpouzos, I.E. Perakis [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2002. – Vol. 91. – Iss. 12. – P. 9863–9868.

4. **Бер, Б.Я.** Исследование дельта-легированных LT-GaAs наноструктур методом ВИМС [Текст] / Б.Я. Бер // Роснанотех-2009: 2-й Международный форум по нанотехнологиям 2009. Тез. докл. М.: Роснано, 2009. – С. 43–45.

5. **Yu, P.Y.** Fundamentals of semiconductors: physics and material properties [Text] / P.Y. Yu, M. Cardona. –Berlin, Heidelberg: Springer–Verlag, 2001. – 556 p.

6. **Bimberg, D.** Quantum dot heterostructures [Text] / D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov. – UK, JohnWiley & Sons, 1998. – 338 p.

7. **Дубровский, В.Г.** Теоретические основы полупроводниковой нанотехнологии [Текст] / В.Г. Дубровский. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2007. – 343 с.

8. **Fry, P.W.** Inverted electron-hole alignment in InAs-GaAs self-assembled quantum dots [Text] / P.W. Fry, I.E. Itskevich, D.J. Mowbray [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 84. – P. 733–736.

УДК 535.211

*В.И. Иванов, А.А. Кузин, А.И. Ливашвили, В.К. Хе*

# ДИНАМИКА СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЙ ТЕПЛОВОЙ ЛИНЗЫ В ЖИДКОФАЗНОЙ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЕ

Образование тепловой линзы под действием излучения в поглощающей среде является одним из первых нелинейно-оптических эффектов, хорошо изученных как экспериментально, так и теоретически [1, 2]. Значительно меньше изучено самовоздействие излучения в двухкомпонентных средах, в которых существуют концентрационные механизмы кубичной нелинейности среды, обусловленные, в частности, таким явлением, как термодиффузия (в жидкостях – эффект Соре [3]). Термодиффузионное самовоздействие излучения исследовалось в ряде работ [3–6], посвященных в основном изучению стационарных режимов тепловой линзы. Детальное исследование динамики светоиндуцированного тепломассопереноса в двухкомпонентной среде позволит решить важную прикладную задачу термолинзовой спектроскопии многокомпонентных сред.

Цель работы – теоретический анализ динамики тепловой линзы, возникающей в жидкофазной бинарной среде под действием Гауссова пучка излучения, обусловленной в том числе термодиффузионными потоками компонент.

Объектом исследования является двухкомпонентная жидкофазная среда (коллоидный раствор, двухкомпонентная смесь), состоящая из дисперсной фазы и дисперсной среды.

Излучение с Гауссовым поперечным профилем интенсивности падает на слой среды толщиной $d$. Коэффициент поглощения среды не зависит от концентраций компонент и значительно меньше обратной длины рассматриваемого слоя, так что затуханием излучения можно пренебречь и задача становится цилиндрически симметричной. При взаимодействии светового поля с рассматриваемой средой возникают радиальные тепловой и концентрационный потоки, обусловленные соответствующими градиентами. Систему балансных уравнений, связывающих эти потоки, можно записать в следующем виде [6]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\nabla^2 T + \frac{\alpha I_0}{c_p \rho}\exp(-r^2/r_0^2); \qquad (1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C + D_T C \nabla^2 T, \qquad (2)$$

где $T$ – температура среды; $C(r,t)$ – массовая концентрация растворенной компоненты; $a = \lambda/c_p\rho$ ($\lambda$ – коэффициент теплопроводности среды); $c_p, \rho$ – соответственно теплоемкость и плотность среды; $\alpha$ – коэффициент поглощения излучения, $\alpha = \text{const}$; $I_0$ – интенсивность света в центре Гауссова пучка; $D$ – коэффициент диффузии частиц дисперсной фазы; $r_0$ – радиус светового пучка; $\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)$.

Рассмотрим случай малых концентраций дисперсной фазы ($C \ll 1$) и малых ее изменений; это позволяет линеаризовать второе уравнение системы, записав искомую концен-

трацию в виде суммы невозмущенной части $C_0$ и возмущенной $C_N$:

$$C(r,t) = C_0 + C_N(r,t) = C_0(1 + C'(r,t)),$$

где

$$C'(r,t) = \frac{C_N(r,t)}{C_0} << 1. \qquad (3)$$

После проведения соответствующих преобразований, с учетом неравенства (3), получим систему уравнений переноса с начальными условиями:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\nabla^2 T + \frac{\alpha I_0}{c_p \rho}\exp(-r^2/r_0^2); \qquad (4)$$

$$\frac{\partial C'}{\partial t} = D\nabla^2 C' + D_T C' \nabla^2 T; \qquad (5)$$

$$T(r,0) = T_0, \ \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0; \qquad (6)$$

$$C'(r,0) = 0, \ \frac{\partial C'}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0; \ 0 \le r < \infty. \qquad (7)$$

Равенство нулю производных на оси кюветы выражает факт конечности искомых функций $T(r, t)$ и $C'(r,t)$.

Температура среды устанавливается значительно быстрее и не зависит от пространственного распределения частиц. Поэтому решим сначала тепловую задачу (4), (6), используя соответствующую для нее функцию Грина [7]. После проведения необходимого интегрирования получим точное решение:

$$T(r,t) = T_0 + \frac{\alpha I_0 r_0^2}{4\lambda}\left[\mathrm{Ei}(-r^2/r_0^2) - \mathrm{Ei}(-r^2/(r_0^2 + 4at))\right], \qquad (8)$$

где Ei – интегральная показательная функция.

Воспользовавшись соответствующим представлением интегральных показательных функций [8], можно из формулы (8) получить выражение для температуры, справедливое для приосевого приближения ($r^2/r_0^2 << 1$):

$$\tilde{T}(r,t) = T_0 + \frac{\alpha I_0 r_0^2}{4\lambda}\left[\ln\left(1 + \frac{4at}{r_0^2}\right) - \frac{r^2}{r_0^2}\frac{4at}{r_0^2 + 4at}\right] + O\left(\frac{r^4}{r_0^4}\right). \qquad (9)$$

Используя выражение (8), перепишем уравнение (5) в виде

$$\frac{\partial C'}{\partial t} = D\nabla^2 C' - \xi\left[\exp(-r^2/r_0^2) - \frac{r_0^2}{r_0^2 + 4at}\exp(-r^2/(r_0^2 + 4at))\right], \qquad (10)$$

где $\xi = \dfrac{\alpha I_0 D_T}{\lambda}$.

Задача допускает точное решение методом функции Грина [7], которое можно записать в следующем виде:

$$C'(r,t) = \frac{\xi r_0^2}{4D}\left\{\mathrm{Ei}\left(-\frac{r^2}{r_0^2 + 4Dt}\right) - \mathrm{Ei}\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) + \frac{a}{a-D}\left[\mathrm{Ei}\left(-\frac{r^2}{r_0^2 + 4Dt}\right) - \mathrm{Ei}\left(-\frac{r^2}{r_0^2 + 4at}\right)\right]\right\}. \qquad (11)$$

Асимптотика этого выражения вблизи оси пучка (при $r^2/r_0^2 << 1$) имеет вид:

$$C'_{\text{ас}} = -\frac{\xi r_0^2}{4D}\left\{\frac{a}{a-D}\ln\left(1 + \frac{4Dt}{r_0^2}\right) - \frac{D}{a-D}\ln\left(1 + \frac{4at}{r_0^2}\right) - \frac{r^2}{r_0^2}\frac{16aDt^2}{(r_0^2 + 4Dt)(r_0^2 + 4at)}\right\}. \qquad (12)$$

Полученные результаты позволяют вычислить фокусное расстояние $F$ линзы, образованной в слое среды (считаем линзу тонкой, так что самовоздействие пучка заключается только в модуляции его фазы, поперечное распределение интенсивности на длине слоя не изменяется).

Поскольку в однофазной жидкости при неоднородном нагреве также возникает тепловая линза (обусловленная, например, тепловым расширением среды и соответствующим уменьшением показателя преломления), то в дисперсной среде существуют два тепловых механизма нелинейности, вклады от которых аддитивны. Фокусные расстояния тепловой и концентрационной линз соответственно равны [9]:

$$F_T = \left[-d\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right)\right]_{r=0}^{-1}; \qquad (13)$$

$$F_C = \left[-d\left(\frac{\partial n}{\partial C}\right)\left(\frac{\partial^2 C'}{\partial r^2}\right)\right]_{r=0}^{-1}, \qquad (14)$$

где $\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)$ и $\left(\frac{\partial n}{\partial C}\right)$ являются постоянными для данного вещества (и для разных сред могут иметь разный знак).

Проводя вычисления для фокусных расстояний тепловой и концентрационной линз с использованием равенств (9) –(14), получим:

$$F_T = \frac{\lambda}{8d\alpha\tilde{I}_0}\left(1+\frac{r_0^2}{4at}\right)\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)^{-1}; \qquad (15)$$

$$F_C = -\frac{\lambda}{8d\alpha I_0 C_0 D_T}\frac{(r_0^2+4Dt)(r_0^2+4at)}{at^2}\left(\frac{\partial n}{\partial C}\right)^{-1}. \qquad (16)$$

Таким образом, временные закономерности формирования обычной тепловой (обусловленной только изменением температуры в однокомпонентной среде) и термодиффузионной линз существенно разные. Для оптической силы результирующей линзы $D_\Sigma = F_T^{-1} + F_C^{-1}$ имеем окончательное выражение:

$$D_\Sigma = \frac{8d\alpha I_0}{\lambda}\left\{\left(1+\frac{r_0^2}{4at}\right)^{-1}\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right) - C_0 D_T \frac{at^2}{(r_0^2+4Dt)(r_0^2+4at)}\left(\frac{\partial n}{\partial C}\right)\right\}. \qquad (17)$$

Полученные результаты могут быть использованы для развития методов термолинзовой спектроскопии и диагностики многокомпонентных жидкофазных сред.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Ахманов, С.А.** Самофокусировка и дифракция света в нелинейной среде [Текст] / С.А. Ахманов, А.П. Сухоруков, Р.В. Хохлов // Успехи физических наук.–1967.– Т. 93.–Вып.1– С. 19–70.
2. **Альтшулер, Г.Б.** Нелинейные линзы и их применение [Текст] / Г.Б. Альтшулер, Г.Б. Инночкин // Успехи физических наук.–Т. 163.–№ 7–С. 65–84.
3. **Giglio, M.** Thermal lens effect in a binary liquid mixture: A new effect [Text] / M. Giglio, A. Vendramini // Appl. Phys. Lett.–1974.–Vol. 25.–No. 10. – P. 555–557.
4. **Vicary, L.** Pump-probe detection of optical nonlinearity in water-in-oil microemulsion [Text] / L. Vicary // Philosoph. Mag. B.–2002.–Vol. 82.– P. 447–452.
5. **Иванов, В.И.** Самовоздействие гауссова пучка в жидкофазной микрогетерогенной среде [Текст] / В.И. Иванов, К.Н. Окишев, Ю.М. Карпец, А.И. Ливашвили // Изв. Томск. политехн. ун-та.– 2005.– Т. 308.– № 5 – С. 23–24.
6. **Иванов, В.И.** Термоиндуцированное самовоздействие гауссова пучка излучения в жидкой дисперсной среде [Текст] / В.И. Иванов, А.И. Ливашвили, А.А. Кузин // Вестник НГУ. Сер. Физика.– 2010.– Т. 5.– № 1– С. 5–8.
7. **Полянин, А.Д.** Справочник по линейным уравнениям математической физики [Текст] / А.Д. Полянин. – М.: Физматлит, 2000.– 576 с.
8. **Лебедев, Н.Н.** Специальные функции и их приложения [Текст] / Н.Н. Лебедев. – М.: Физматгиз, 1963– 312 с.
9. **Там, Э.Э.** Сверхчувствительная лазерная спектроскопия [Текст] / Э.Э. Там, Р.Р. Бердж, Х.Л. Фанг [и др.] Под ред. Клайджера Д. // М.: Мир, 1986.– 520 с.


УДК 539.3

*В.М. Жгутов*

# ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕРМОУПРУГОСТИ ОБОЛОЧЕК ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНЫ

Оболочки как элементы разного рода конструкций широко применяются в различных областях техники и строительства.

Тонкостенные элементы современных конструкций в виде оболочек предназначены для работы под воздействием механических

нагрузок (как статических, так и динамических) и нередко температурного поля, вызывающего появление чисто температурных деформаций.

Для придания в нужных местах большей жесткости профиль тонких оболочек может иметь плавные утолщения. С целью повышения жесткости тонкостенная часть оболочки может быть подкреплена дискретно расположенными ребрами. В обоих случаях существенно повышается несущая способность конструкции при незначительном увеличении ее массы.

Таким образом, всю конструкцию следует рассматривать как объект переменной толщины. В зависимости от характера изменения толщины будем различать оболочки гладкопеременной и, соответственно, ступенчатопеременной толщины (ребристые оболочки).

Известно, что тонкие оболочки могут допускать прогибы, соизмеримые с их толщиной (даже под воздействием только механических нагрузок, далеких от критических значений).

Расчеты на прочность, устойчивость и колебания оболочечных конструкций играют важную роль при проектировании современных аппаратов, машин и сооружений. Тем не менее, поведение тонкостенных конструкций переменной толщины, при котором проявляются геометрическая нелинейность, поперечные сдвиги, переменность профиля и возникают чисто температурные деформации, исследовано недостаточно. Причины этого состоят в сложности совместного учета упомянутых факторов и необходимости решения громоздких нелинейных краевых задач.

Физические основы теплопроводности и термоупругости изложены в энциклопедическом курсе [1]. Анализ современного состояния теории оболочек, формулировка основополагающих принципов и построение модели термоупругих оболочек постоянной толщины приводится в весьма содержательной работе [2]. Разработке математических моделей термоупругости оболочек переменной толщины для задач статики посвящены публикации [3, 4], однако в статье [4] не учитываются поперечные сдвиги (используется модель Кирхгофа – Лява) и геометрическая нелинейность, а также не рассматриваются ребристые оболочки. В монографии [3] в задачах термоупругости (приведенных исключительно для ребристых оболочек) применяется модель Кирхгофа – Лява при учете геометрической нелинейности.

Математическому моделированию деформирования ребристых оболочек и оболочек гладко-переменной толщины при учете различных свойств материала (нелинейная упругость, вязкоупругость) посвящены работы В.М. Жгутова [5–7] и другие, а также Р.А. Абдикаримова и В.М. Жгутова [8, 9]. Но в указанных работах не учитываются возможное влияние температурного поля на напряженно-деформированное состояние и устойчивость исследуемых оболочек.

Проектирование и последующее создание легких, но вместе с тем прочных и надежных конструкций требует дальнейшего совершенствования механических моделей деформируемых тел, а также разработки новых интегральных методов их расчета.

В связи с этим разработка более совершенной математической модели термоупругости оболочек – актуальная и важная задача.

В настоящей статье предложены математические модели термоупругости оболочек переменной толщины (для задач статики и динамики), основанные на модели Тимошенко – Рейсснера (учитывает поперечные сдвиги).

В случае ребристых оболочек учитывается также дискретность расположения ребер, их ширина, сдвиговая и крутильная жесткости.

**Постановка задачи**

Рассматриваем оболочки общего вида с краем (пологие на прямоугольном плане, а также оболочки вращения, в частности цилиндрические, конические, сферические, торообразные, а также многие другие).

Некоторую внутреннюю поверхность оболочки принимаем за отсчетную поверхность $z = 0$. Координатные линии $x$ и $y$ криволинейной ортогональной системы координат ($-a/2 \le x \le a/2$ и $-b/2 \le y \le b/2$) направляем по линиям кривизны (параллелям и меридианам в случае поверхности вращения), а ось $z$ – по внутренней нормали отсчетной поверхности так, чтобы система координат $x$, $y$, $z$ была правой (полагаем, что определенная таким образом сеть координатных линий на отсчетной поверхности оболочки обеспечивает гладкость и регулярность ее параметризации).

Переменную толщину оболочки $\tilde{h} = \tilde{h}(x, y) \in C^k$ задаем ограничивающими ее (в направлениях нормалей к отсчетной поверхности) гладкими или непрерывными поверхностями $z_в = z_в(x, y)$ и $z_н = z_н(x, y)$ так, что $\tilde{h} = z_н - z_в$ и $z_в \le z \le z_н$. Отметим, что принадлежность функции $f(x, y)$ к классу гладкости $C^k$ означает, что функция имеет непрерывные частные производные до порядка $k \ge 1$ включительно (запись $f(x, y) \in C^0$ требует только непрерывности по совокупности аргументов). Полагаем, что векторы (ковекторы) градиентов $\overrightarrow{\nabla z_в}$ и $\overrightarrow{\nabla z_н}$ отличны от нуля и коллинеарны

$$\left(\operatorname{rang}\begin{bmatrix} \partial z_в / \partial x & \partial z_в / \partial y \\ \partial z_н / \partial x & \partial z_н / \partial y \end{bmatrix} = 1\right)$$

в любой точке поверхности $z = 0$.

В случае ребристой оболочки за отсчетную поверхность $z = 0$ принимаем срединную поверхность обшивки толщиной $h$. Ребра задаем с помощью функции $H = H(x, y) \in C^0$, характеризующей распределение ребер по оболочке (как правило, с внутренней стороны обшивки вдоль координатных линий), их ширину и высоту [10, 11]. Таким образом, толщина ребристой оболочки равна $\tilde{h} = h + H$, причем $z_в = -h/2$ и $z_н = h/2 + H$.

Считаем, что оболочка находится в стационарном температурном поле $T = T(x, y, z)$ (в градусах Кельвина) и под действием механической нагрузки (статической или динамической) при определенном закреплении ее края (контура).

Будем совместно учитывать геометрическую нелинейность, влияние температуры, поперечные сдвиги. В случае ребристых оболочек учитываем также дискретное расположение ребер, их ширину, сдвиговую и крутильную жесткости.

### Математическая модель термоупругости рассматриваемых оболочек

Как известно, математическая модель деформирования оболочки состоит из геометрических соотношений, физических соотношений и функционала полной энергии ее деформации (из условия минимума которого следуют уравнения равновесия или движения).

**Геометрические соотношения.** В отсчетной поверхности $z = 0$ с учетом геометрической нелинейности и влияния температуры указанные соотношения имеют вид:

$$\tilde{\varepsilon}_x = \varepsilon_x - \tilde{\varepsilon}_0;\ \tilde{\varepsilon}_y = \varepsilon_y - \tilde{\varepsilon}_0;\ \tilde{\gamma}_{xy} = \gamma_{xy},$$

где $\varepsilon_x$, $\varepsilon_y$, $\gamma_{xy}$ – деформации удлинения вдоль линий $x$, $y$ и сдвига в касательной плоскости ($dx$, $dy$), обусловленные механической нагрузкой; $\tilde{\varepsilon}_0$ – чисто температурные деформации.

Данные величины выражаются следующим образом:

$$\varepsilon_x = \frac{1}{A}\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{AB}\frac{\partial A}{\partial y}V - K_x W + \frac{1}{2}\theta_1^2;$$

$$\varepsilon_y = \frac{1}{B}\frac{\partial V}{\partial y} + \frac{1}{AB}\frac{\partial B}{\partial x}U - K_y W + \frac{1}{2}\theta_2^2;$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{A}\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{B}\frac{\partial U}{\partial y} - \frac{1}{AB}\left(\frac{\partial A}{\partial y}U + \frac{\partial B}{\partial x}V\right) + \theta_1\theta_2,$$

где $U$, $V$ и $W$ – компоненты вектора перемещений точек вдоль линий $x$, $y$ и оси $z$; $A$, $B$ – метрические коэффициенты Ламе, зависящие от вида оболочки (например, $A \equiv B \equiv 1$ для пластин и пологих оболочек; $A \equiv \text{const}$, $B = B(x)$ в случае оболочек вращения); $K_x$, $K_y$ – главные величины кривизны оболочки вдоль линий $x$ и $y$ соответственно (в частности $K_x \equiv K_y \equiv 0$ для пластин; $0 \ne K_x \equiv K_y \equiv \text{const}$ для сферических и $K_x \equiv 0 \ne K_y \equiv \text{const}$ для цилиндрических оболочек вращения);

$$\theta_1 = -\left(\frac{1}{A}\frac{\partial W}{\partial x} + K_x U\right) \approx -\frac{1}{A}\frac{\partial W}{\partial x};$$

$$\theta_2 = -\left(\frac{1}{B}\frac{\partial W}{\partial y} + K_y V\right) \approx -\frac{1}{B}\frac{\partial W}{\partial y}.$$

Деформации поперечных (так же как и продольных) сдвигов не зависят от температуры [1, 2] и могут быть определены по формулам

$$\tilde{\gamma}_{xz} = \gamma_{xz} = c f(z)(\Psi_1 - \theta_1);$$

$$\tilde{\gamma}_{yz} = \gamma_{yz} = c f(z)(\Psi_2 - \theta_2),$$

где $c$ – константа; $f(z)$ – функция, характеризующая распределение напряжений $\tau_{xz}$, $\tau_{yz}$ в главных нормальных плоскостях; она обладает такими свойствами, что выполняются соотношения

$$f(z_в) = f(z_н) = 0;$$

$$\frac{1}{h}\int_{z_в}^{z_н} f(z)dz = 1;$$

$$\frac{1}{h}\int_{z_в}^{z_н} f^2(z)dz = 1/c.$$

Далее, $\Psi_1 = \mathrm{tg}\psi_x$, $\Psi_2 = \mathrm{tg}\psi_y$ ($\psi_x$, $\psi_y$ – углы поворота отрезка нормали к отсчетной поверхности в главных нормальных плоскостях $(dx,dz)$ и $(dy,dz)$).

Будем использовать квадратичную (параболическую) зависимость

$$f(z) = -\frac{6}{h^2}(z - z_н)(z - z_в) = f_0 + f_1 z + f_2 z^2,$$

где $f_0 = -6z_н z_в / h^2$, $f_1 = 6(z_н + z_в)/h^2$, $f_2 = -6/h^2$.

Тогда $c = 5/6$.

Перемещения и деформации в слоях $z = \mathrm{const}$ вычисляем по формулам

$$U^z = U + z\Phi_1;\ V^z = V + z\Phi_2;\ W^z = W; \quad (1)$$

$$\tilde{\varepsilon}_x^z = \tilde{\varepsilon}_x + z\mathrm{X}_1 = \varepsilon_x^z - \tilde{\varepsilon};\ \tilde{\varepsilon}_y^z = \tilde{\varepsilon}_y + z\mathrm{X}_2 = \varepsilon_y^z - \tilde{\varepsilon};$$
$$\gamma_{xy}^z = \gamma_{xy} + z\cdot 2\mathrm{X}_{12}, \quad (2)$$

где $\Phi_1 = \Psi_1 - \theta_1, \Phi_2 = \Psi_2 - \theta_2; \tilde{\varepsilon} = \alpha T; \varepsilon_x^z = \varepsilon_x + z\mathrm{X}_1$, $\varepsilon_y^z = \varepsilon_y + z\mathrm{X}_2$.

Здесь $\alpha$, $\mathrm{K}^{-1}$ – коэффициент линейного теплового расширения материала; $T$ – температура оболочки в данной точке;

$$\mathrm{X}_1 = \frac{1}{A}\frac{\partial\Phi_1}{\partial x} + \frac{1}{AB}\frac{\partial A}{\partial y}\Phi_2;$$

$$\mathrm{X}_2 = \frac{1}{B}\frac{\partial\Phi_2}{\partial y} + \frac{1}{AB}\frac{\partial B}{\partial x}\Phi_1;$$

$$2\mathrm{X}_{12} = \frac{1}{A}\frac{\partial\Phi_2}{\partial x} + \frac{1}{B}\frac{\partial\Phi_1}{\partial y} - \frac{1}{AB}\left(\frac{\partial A}{\partial y}\Phi_1 + \frac{\partial B}{\partial x}\Phi_2\right).$$

Считаем, что температурное поле $T(x,y,z)$ задано (и соответствует установившемуся тепловому режиму теплопроводности). Вдоль оси $z$ оно может быть представлено с помощью квадратичного закона распределения:

$$T(x,y,z) = T_0(x,y) + T_1(x,y)z + T_2(x,y)z^2 = \sum_{i=1}^{3} T_{i-1}z^{i-1}, \quad (3)$$

или линейной зависимости, применимой для тонких оболочек:

$$T(x,y,z) = T_0(x,y) + T_1(x,y)z = \sum_{i=1}^{2} T_{i-1}z^{i-1},$$

где $T_0 = T_0(x,y)$, $T_1 = T_1(x,y)$, $T_2 = T_2(x,y)$ – известные функции.

В ряде случаев можно предполагать (равномерное температурное поле):

$$T(x,y,z) = T_0(x,y).$$

Известно, что для многих материалов (например металлов) при достаточно высоких или низких температурах модуль упругости $E$ и коэффициент $\alpha$ заметно изменяются. В этом случае для вычисления их значений могут быть использованы аппроксимации

$$E = E(T) = E_0 + E_1 T + E_2 T^2 = \sum_{i=1}^{3} E_{i-1}T^{i-1}; \quad (4)$$

$$\alpha = \alpha(T) = \alpha_0 + \alpha_1 T = \sum_{j=1}^{2} \alpha_{j-1}T^{j-1}, \quad (5)$$

где $E_0$ и $\alpha_0$ – некоторые «начальные» значения $E$ и $\alpha$; $E_1$, $E_2$, $\alpha_1$ – экспериментальные параметры.

Как правило, $E_0$, $\alpha_0$ (и, соответственно, коэффициенты $E_1$, $E_2$, $\alpha_1$) отвечают значениям при $T = 20$ °C.

В большинстве случаев модуль упругости материала понижается с ростом температуры ($E_1$, $E_2 < 0$). Для металлов и сплавов характерно возрастание модуля упругости при снижении температуры. Однако для некоторых неметаллических материалов модуль упругости с понижением температуры до –60 °C может снижаться более чем в два раза.

В целом коэффициент Пуассона $\mu$ материала не зависит от изменений температуры в достаточно обширной температурной области.

С учетом представления (3) аппроксимации (4), (5) могут быть записаны для каждой точки $P = P(x,y,z)$ оболочки в виде

$$E = E(P) = E(x,y,z) = \tilde{E}_0 + \tilde{E}_1 z + \tilde{E}_2 z^2 + \tilde{E}_3 z^3 + \tilde{E}_4 z^4 = \sum_{i=1}^{5} \tilde{E}_{i-1}z^{i-1}; \quad (6)$$

$$\alpha = \alpha(P) = \alpha(x,y,z) = \tilde{\alpha}_0 + \tilde{\alpha}_1 z + \tilde{\alpha}_2 z^2 = \sum_{i=1}^{3} \tilde{\alpha}_{i-1}z^{i-1}, \quad (7)$$

где

$$\tilde{E}_0 = \tilde{E}_0(P_0) = \tilde{E}_0(x,y) = \\ = E_0 + E_1 T_0(x,y) + E_2 T_0^2(x,y);$$

$$\tilde{E}_1 = \tilde{E}_1(P_0) = \tilde{E}_1(x,y) = \\ = E_1 T_1(x,y) + 2E_2 T_0(x,y) T_1(x,y);$$

$$\tilde{E}_2 = \tilde{E}_2(P_0) = \tilde{E}_2(x,y) = E_1 T_2(x,y) + \\ + E_2\left[2T_0(x,y)T_2(x,y) + T_1^2(x,y)\right];$$

$$\tilde{E}_3 = \tilde{E}_3(P_0) = \tilde{E}_3(x,y) = 2E_2 T_1(x,y) T_2(x,y);$$

$$\tilde{E}_4 = \tilde{E}_4(P_0) = \tilde{E}_4(x,y) = E_2 T_2^2(x,y);$$

$$\tilde{\alpha}_0 = \tilde{\alpha}_0(P_0) = \tilde{\alpha}_0(x,y) = \alpha_0 + \alpha_1 T_0(x,y);$$

$$\tilde{\alpha}_1 = \tilde{\alpha}_1(P_0) = \tilde{\alpha}_1(x,y) = \alpha_1 T_1(x,y);$$

$$\tilde{\alpha}_2 = \tilde{\alpha}_2(P_0) = \tilde{\alpha}_2(x,y) = \alpha_1 T_2(x,y)$$

– суть функции точки $P_0 = P_0(x,y)$ отсчетной поверхности $z = 0$ оболочки.

Для чисто температурных деформаций $\tilde{\varepsilon} = \alpha T$ с учетом выражений (6) и (7) будем иметь:

$$\tilde{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}(P) = \alpha(P)T(P) = \\ = \tilde{\varepsilon}_0 + \tilde{\varepsilon}_1 z + \tilde{\varepsilon}_2 z^2 + \tilde{\varepsilon}_3 z^3 + \tilde{\varepsilon}_4 z^4 = \sum_{i=0}^{5} \tilde{\varepsilon}_{i-1} z^{i-1}, \quad (8)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_k = \tilde{\varepsilon}_k(P_0) = \tilde{\varepsilon}_k(x,y) = \sum_{i=0}^{k} \tilde{\alpha}_i T_{k-i} \quad (0 \le k \le 4) \quad (9)$$

– суть коэффициенты при $z^k$ в представлении (8) (считаем, что $\tilde{\alpha}_i = 0$ при $i > 2$ и $T_{k-i} = 0$ при $k - i > 2$).

В развернутом виде выражения (9) для коэффициентов $\tilde{\varepsilon}_k$ в соотношении (8) приведены в приложении 1.

**Физические соотношения.** В случае линейно упругого изотропного материала оболочки, находящейся в температурном поле, эти соотношения могут быть представлены в следующем виде:

напряжения растяжения (сжатия) –

$$\tilde{\sigma}_x = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\tilde{\varepsilon}_x^z + \mu\tilde{\varepsilon}_y^z\right] = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y + \right. \\ \left. + z(X_1 + \mu X_2) - (1+\mu)\tilde{\varepsilon}(P)\right] = \sigma_x^M - \sigma^T; \quad (10)$$

$$\tilde{\sigma}_y = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\tilde{\varepsilon}_y^z + \mu\tilde{\varepsilon}_x^z\right] = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x + \right. \\ \left. + z(X_2 + \mu X_1) - (1+\mu)\tilde{\varepsilon}(P)\right] = \sigma_y^M - \sigma^T, \quad (11)$$

где

$$\sigma_x^M = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y + z(X_1 + \mu X_2)\right],$$

$$\sigma_y^M = \frac{E(P)}{1-\mu^2}\left[\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x + z(X_2 + \mu X_1)\right]$$

– составляющие напряжений вдоль линий $x$ и $y$, имеющие тот же вид, что и при чисто механической нагрузке (с той разницей, что входящий в их выражения модуль упругости $E = E(P)$ зависит от температуры в точке $P$);

$$\sigma^T = \frac{(1+\mu)\tilde{\sigma}(P)}{1-\mu^2}$$

– составляющая напряжений, обусловленная чисто температурными деформациями;

сдвиговые напряжения (имеют тот же вид, что и при чисто механической нагрузке) –

$$\tilde{\tau}_{xy} = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\gamma_{xy}^z = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\left(\gamma_{xy} + z2X_{12}\right) = \tau_{xy}^M; \quad (12)$$

$$\tilde{\tau}_{xz} = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\gamma_{xz} = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\left[cf(z)(\Psi_1 - \theta_1)\right] = \\ = \frac{c(\Psi_1 - \theta_1)\tilde{\tau}(P)}{2(1+\mu)} = \tau_{xz}^M; \quad (13)$$

$$\tilde{\tau}_{yz} = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\gamma_{yz} = \frac{E(P)}{2(1+\mu)}\left[cf(z)(\Psi_2 - \theta_2)\right] = \\ = \frac{c(\Psi_2 - \theta_2)\tilde{\tau}(P)}{2(1+\mu)} = \tau_{yz}^M. \quad (14)$$

В формулах (10) – (14)

$$\tilde{\sigma}(P) = E(P)\cdot\tilde{\varepsilon}(P) = \tilde{\sigma}_0 + \tilde{\sigma}_1 z + \tilde{\sigma}_2 z^2 + \tilde{\sigma}_3 z^3 + \\ + \tilde{\sigma}_4 z^4 + \tilde{\sigma}_5 z^5 + \tilde{\sigma}_6 z^6 + \tilde{\sigma}_7 z^7 + \tilde{\sigma}_8 z^8 = \sum_{i=1}^{9} \tilde{\sigma}_{i-1} z^{i-1}; \quad (15)$$

$$\tilde{\tau}(P) = E(P)\cdot f(z) = \tilde{\tau}_0 + \tilde{\tau}_1 z + \tilde{\tau}_2 z^2 + \\ + \tilde{\tau}_3 z^3 + \tilde{\tau}_4 z^4 + \tilde{\tau}_5 z^5 + \tilde{\tau}_6 z^6 = \sum_{i=1}^{7} \tilde{\tau}_{i-1} z^{i-1}, \quad (16)$$

где

$$\tilde{\sigma}_k = \tilde{\sigma}_k(P_0) = \tilde{\sigma}_k(x,y) = \sum_{i=0}^{k} \tilde{E}_i \cdot \tilde{\varepsilon}_{k-i}\ ,$$
$$0 \le k \le 8\ ; \qquad (17)$$

$$\tilde{\tau}_k = \tilde{\tau}_k(P_0) = \tilde{\tau}_k(x,y) = \sum_{i=0}^{k} \tilde{E}_i \cdot f_{k-i}\ ,$$
$$0 \le k \le 6 \qquad (18)$$

(считаем, что $\tilde{E}_i = 0$ при $i > 4$; $\tilde{\varepsilon}_{k-i} = 0$ при $k - i > 4$, $f_{k-i} = 0$ при $k - i > 2$).

В развернутом виде выражения (17) и (18) для коэффициентов $\tilde{\sigma}_k$ и $\tilde{\tau}_k$ в соотношениях (15) и (16) представлены в приложениях 2 и 3 соответственно.

Проинтегрируем напряжения (10) – (14) по переменной $z$, $z_в \le z \le z_н$. Получим выражения для внутренних силовых факторов, приведенных к отсчетной поверхности оболочки (и приходящихся на единицу длины сечения, т. е. погонных):

усилия растяжения (сжатия) и сдвига –

$$\tilde{N}_x = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\sigma}_x dz = I_1\left(\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y\right) +$$
$$+ I_2\left(X_1 + \mu X_2\right) - (1+\mu)\tilde{N}(P_0) = N_x^M - N^T; \qquad (19)$$

$$\tilde{N}_y = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\sigma}_y dz = I_1\left(\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x\right) + I_2\left(X_2 + \mu X_1\right) -$$
$$-(1+\mu)\tilde{N}(P_0) = N_y^M - N^T; \qquad (20)$$

$$\tilde{N}_{xy} = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\tau}_{xy} dz = \mu_1\left[I_1\gamma_{xy} + 2I_2 X_{12}\right] = N_{xy}^M, \qquad (21)$$

где

$$N_x^M = I_1\left(\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y\right) + I_2\left(X_1 + \mu X_2\right),$$

$$N_y^M = I_1\left(\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x\right) + I_2\left(X_2 + \mu X_1\right)$$

и $N_{xy}^M$ – составляющие усилий, имеющие тот же вид, что и при чисто механической нагрузке; $N^T = (1+\mu)\tilde{N}(P_0)$ – составляющая усилий растяжения (сжатия), обусловленная чисто температурными деформациями;

изгибающие и крутящий моменты –

$$\tilde{M}_x = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\sigma}_x z dz = I_2\left(\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y\right) +$$
$$+ I_3\left(X_1 + \mu X_2\right) - (1+\mu)\tilde{M}(P_0) = M_x^M - M^T; \qquad (22)$$

$$\tilde{M}_y = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\sigma}_y z dz = I_2\left(\varepsilon_y + \mu\varepsilon_x\right) +$$
$$+ I_3\left(X_2 + \mu X_1\right) - (1+\mu)\tilde{M}(P_0) = M_y^M - M^T; \qquad (23)$$

$$\tilde{M}_{xy} = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\tau}_{xy} z dz = \mu_1\left[I_2\gamma_{xy} + 2I_3 X_{12}\right] = M_{xy}^M, \qquad (24)$$

где

$$M_x^M = I_2\left(\varepsilon_x + \mu\varepsilon_y\right) + I_3\left(X_1 + \mu X_2\right)$$

и $M_{xy}^M$ – составляющие моментов, имеющие тот же вид, что и при чисто механической нагрузке; $N^T = (1+\mu)\tilde{N}(P_0)$ – составляющая изгибающих моментов, обусловленная чисто температурными деформациями;

поперечные, или перерезывающие усилия (имеют тот же вид, что и при чисто температурных деформациях) –

$$\tilde{Q}_x = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\tau}_{xz} dz = c(\Psi_1 - \theta_1)\cdot\tilde{Q}(P_0) = Q_x^M; \qquad (25)$$

$$\tilde{Q}_y = \int_{z_в}^{z_н} \tilde{\tau}_{yz} dz = c(\Psi_2 - \theta_2)\cdot\tilde{Q}(P_0) = Q_y^M. \qquad (26)$$

В формулах (19) – (26)

$$I_1 = \frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н} E(P)dz = \frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{5}\tilde{E}_{m-1}A_{m-1} =$$
$$= \frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{E}_0 A_0 + \tilde{E}_1 A_1 + \tilde{E}_2 A_2 + \tilde{E}_3 A_3 + \tilde{E}_4 A_4\right]; \qquad (27)$$

$$I_2 = \frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н} E(P)zdz = \frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{5}\tilde{E}_{m-1}A_m =$$
$$= \frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{E}_0 A_1 + \tilde{E}_1 A_2 + \tilde{E}_2 A_3 + \tilde{E}_3 A_4 + \tilde{E}_4 A_5\right]; \qquad (28)$$

$$N(P_0)=\frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н}\tilde{\sigma}(P)dz=\frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{9}\tilde{\sigma}_{m-1}A_{m-1}=$$
$$=\frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{\sigma}_0A_0+\tilde{\sigma}_1A_1+\tilde{\sigma}_2A_2+\tilde{\sigma}_3A_3+\right. \quad (29)$$
$$\left.+\tilde{\sigma}_4A_4+\tilde{\sigma}_5A_5+\tilde{\sigma}_6A_6+\tilde{\sigma}_7A_7+\tilde{\sigma}_8A_8\right];$$
$$\mu_1=(1-\mu)/2;$$

$$I_3=\frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н}E(P)z^2dz=\frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{5}\tilde{E}_{m-1}A_{m+1}=$$
$$=\frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{E}_0A_2+\tilde{E}_1A_3+\tilde{E}_2A_4+\tilde{E}_3A_5+\tilde{E}_4A_6\right]; \quad (30)$$

$$M(P_0)=\frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н}\tilde{\sigma}(P)zdz=\frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{9}\tilde{\sigma}_{m-1}A_m=$$
$$=\frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{\sigma}_0A_1+\tilde{\sigma}_1A_2+\tilde{\sigma}_2A_3+\tilde{\sigma}_3A_4+\right. \quad (31)$$
$$\left.+\tilde{\sigma}_4A_5+\tilde{\sigma}_5A_6+\tilde{\sigma}_6A_7+\tilde{\sigma}_7A_8+\tilde{\sigma}_8A_9\right];$$

$$\tilde{Q}(P_0)=\frac{1}{2(1+\mu)}\int_{z_в}^{z_н}\tilde{\tau}(P)dz=$$
$$=\frac{1}{2(1+\mu)}\sum_{m=1}^{7}\tilde{\tau}_{m-1}A_{m-1}=\frac{1}{2(1+\mu)}\left[\tilde{\tau}_0A_0+\right. \quad (32)$$
$$\left.\tilde{\tau}_1A_1+\tilde{\tau}_2A_2+\tilde{\tau}_3A_3+\tilde{\tau}_4A_4+\tilde{\tau}_5A_5+\tilde{\tau}_6A_6\right].$$

Нам понадобится также выражение

$$N_1(P_0)=\frac{1}{1-\mu^2}\int_{z_в}^{z_н}\tilde{\pi}(P)dz=$$
$$=\frac{1}{1-\mu^2}\sum_{m=1}^{12}\tilde{\pi}_{m-1}A_{m-1}=\frac{1}{1-\mu^2}\left[\tilde{\pi}_0A_0+\right. \quad (33)$$
$$\left.\tilde{\pi}_1A_1+\tilde{\pi}_2A_2+\ldots+\tilde{\pi}_{10}A_{10}+\tilde{\pi}_{11}A_{11}+\tilde{\pi}_{12}A_{12}\right],$$

где

$$\tilde{\pi}(P)=\tilde{\sigma}(P)\cdot\tilde{\varepsilon}(P)=\tilde{\pi}_0+\tilde{\pi}_1z+\tilde{\pi}_2z^2+\ldots+$$
$$+\tilde{\pi}_{10}z^{10}+\tilde{\pi}_{11}z^{11}+\tilde{\pi}_{12}z^{12}=\sum_{i=1}^{13}\tilde{\pi}_{i-1}z^{i-1}; \quad (34)$$

при этом

$$\tilde{\pi}_k=\tilde{\pi}_k(P_0)=\tilde{\pi}_k(x,y)=\sum_{i=0}^{k}\tilde{\sigma}_i\cdot\tilde{\varepsilon}_{k-i},\quad 0\le k\le 12 \quad (35)$$

(считаем, что $\tilde{\sigma}_i=0$ при $i>8$; $\tilde{\varepsilon}_{k-i}=0$ при $k-i>4$).

Выражения (35) для коэффициентов $\tilde{\pi}_k$, входящих в соотношение (34), в развернутом виде помещены в приложение 4.

В формулах (27)–(33)

$$A_{m-1}=\int_{z_в}^{z_н}z^{m-1}dz,\ 1\le m\le 12$$

– геометрические характеристики главных нормальных сечений оболочки. Величины $A_0=\int_{z_в}^{z_н}dz$, $A_1=\int_{z_в}^{z_н}zdz$ и $A_2=\int_{z_в}^{z_н}z^2dz$ имеют смысл погонных площади, статического момента и момента инерции данного главного нормального сечения оболочки (соответственно).

Заметим, что в случае симметричной по толщине оболочки ($z_в=-z_н$) величины

$$A_{m-1}=\int_{z_в}^{z_н}z^{m-1}dz=0,$$

если $m-1$ нечетно (сравнимо с 1 по модулю 2: $m-1\equiv 1(\mathrm{mod}\,2)$), и соотношения для внутренних силовых факторов существенно упрощаются. Поэтому целесообразно (если при этом не нарушается условие гладкости отсчетной поверхности, как например, в случае ребристых оболочек) ввести новую отсчетную поверхность $z_0=z_0(x,y)$ так, чтобы $A_{m-1}=0$, если $m-1\equiv 1(\mathrm{mod}\,2)$.

Положение поверхности $z_0$ можно определить из условия $z_0=(z_н+z_в)/2$ [9] и тогда

$$A_{m-1}=\int_{z_в^*}^{z_н^*}\left(z^*\right)^{m-1}dz^*=0,$$

где $m-1\equiv 1(\mathrm{mod}\,2)$, $z^*=z-z_0$, $z_н^*=z_н-z_0$, $z_в^*=z_в-z_0$.

**Функционал E полной энергии деформации.** Указанный функционал рассматриваемых оболочек на данном отрезке $[t_0,t_1]$ времени $t$ для задач динамики, в соответствии с [4, 12], имеет вид

$$\mathrm{E}=\int_{t_0}^{t_1}\left(K-\tilde{\Pi}+A^E\right)dt, \quad (36)$$

где $K$ и $\tilde{\Pi}$ – кинетическая и потенциальная энергии оболочки; $A^E$ – работа внешних сил.

В задачах динамики подлежащие определению функции перемещений $U$, $V$, $W$ и углов $\Psi_1$, $\Psi_2$ есть не только функции координат $x$, $y$, но и времени $t$: $U = U(x, y, t)$, $V = V(x, y, t)$, $W = W(x, y, t)$ и $\Psi_1 = \Psi_1(x, y, t)$, $\Psi_2 = \Psi_2(x, y, t)$.

Для задач статики полная энергия деформации оболочки (функционал Лагранжа) может быть записана в виде [1, 2, 4–12]

$$\mathrm{E} = \tilde{\Pi} - A^E. \tag{37}$$

В соотношениях (36) и (37)

$$K = \frac{\rho}{2}\iiint\limits_{\Omega}\left[\left(A\frac{\partial U^z}{\partial t}\right)^2 + \left(B\frac{\partial V^z}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial W^z}{\partial t}\right)^2\right]d\Omega; \tag{38}$$

$$\tilde{\Pi} = \frac{1}{2}\iiint\limits_{\Omega}\left[\tilde{\sigma}_x\tilde{\varepsilon}_x^z + \tilde{\sigma}_y\tilde{\varepsilon}_y^z + \tilde{\tau}_{xy}\gamma_{xy}^z + \tilde{\tau}_{xz}\gamma_{xz} + \tilde{\tau}_{yz}\gamma_{yz}\right]d\Omega; \tag{39}$$

$$A^E = \iint\limits_{S}(P_xU + P_yV + qW)dS, \tag{40}$$

где $\rho$ – плотность материала оболочки ($\rho \approx \mathrm{const}$); $P_x$, $P_y$ и $q \equiv P_z$ – компоненты внешней механической нагрузки в направлениях $x$, $y$, $z$ (в задачах динамики это функции не только координат $x$, $y$, но и времени $t$);

$$\Omega = [-a/2, a/2]\cdot[-b/2, b/2]\cdot[z_{\text{в}}, z_{\text{н}}]$$

– компакт (замкнутое связное множество) в пространстве ($x$, $y$, $z$);

$$S = [-a/2, a/2]\cdot[-b/2, b/2]$$

– компакт на плоскости ($x$, $y$); $d\Omega$, $dS$ – дифференциалы объема и отсчетной поверхности данной оболочки;

$$d\Omega = ABdxdydz;\ dS = ABdxdy;$$

координаты $x$, $y$, $z$ считаются неподвижными.

С учетом соотношений (2), (10) – (14) выражение для потенциальной энергии (39) запишем в виде

$$\tilde{\Pi} = \frac{1}{2}\iiint\limits_{\Omega}\Big[(\sigma_x^M - \sigma^T)(\varepsilon_x^z - \tilde{\varepsilon}) + (\sigma_y^M - \sigma^T)(\varepsilon_y^z - \tilde{\varepsilon}) + \tilde{\tau}_{xy}\gamma_{xy}^z + \tilde{\tau}_{xz}\gamma_{xz} + \tilde{\tau}_{yz}\gamma_{yz}\Big]d\Omega = \Pi^M - \Pi^T, \tag{41}$$

где

$$\Pi^M = \frac{1}{2}\iiint\limits_{\Omega}\left(\sigma_x^M\varepsilon_x^z + \sigma_y^M\varepsilon_y^z + \tilde{\tau}_{xy}\gamma_{xy}^z + \tilde{\tau}_{xz}\gamma_{xz} + \tilde{\tau}_{yz}\gamma_{yz}\right)d\Omega \tag{42}$$

представляет собой составляющую потенциальной энергии (39), имеющую тот же вид, что и при чисто механической нагрузке;

$$\Pi^T = \frac{1}{2}\iiint\limits_{\Omega}\left[\sigma^T\left(\varepsilon_x^z + \varepsilon_y^z\right) + \left(\sigma_x^M + \sigma_y^M\right)\tilde{\varepsilon} + 2\sigma^T\tilde{\varepsilon}\right]d\Omega \tag{43}$$

есть составляющая потенциальной энергии (39), обусловленная чисто температурными деформациями.

Проинтегрируем по переменной $z$, $z_{\text{в}} \le z \le z_{\text{н}}$ выражения (38), (39) в функционалах (36), (37) с учетом соотношений (1), (41) – (43), (19) – (26).

В результате получаем следующие выражения:

$$K = \frac{\rho}{2}\iint\limits_{S}\left\{A_0\left[\left(A\frac{\partial U}{\partial t}\right)^2 + \left(B\frac{\partial V}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial t}\right)^2\right] + 2A_1\left[A\frac{\partial U}{\partial t}\frac{\partial \Phi_1}{\partial t} + B\frac{\partial V}{\partial t}\frac{\partial \Phi_2}{\partial t}\right] + A_2\left[\left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Phi_2}{\partial t}\right)^2\right]\right\}dS; \tag{44}$$

$$\mathrm{E} = \left(\Pi^M - A^E\right) - \Pi^T, \tag{45}$$

где с учетом формулы (40)

$$\Pi^M - A^E = \frac{1}{2}\iint\limits_{S}\Big[N_x^M\varepsilon_x + N_y^M\varepsilon_y + N_{xy}^M\gamma_{xy} + M_x^M\mathrm{X}_1 + M_y^M\mathrm{X}_2 + 2M_{xy}^M\mathrm{X}_{12} - 2(P_xU + P_yV + qW)\Big]dS; \tag{46}$$

$$\Pi^T = \frac{1}{2}\iint_S \Big[ 2N^T \left(\varepsilon_x + \varepsilon_y\right) + \\ + 2M^T \left(\mathrm{X}_1 + \mathrm{X}_2\right) - 2N_1^T \Big] dS. \quad (47)$$

В формуле (47) $N_1^T = (1+\mu) N_1(P_0)$, где величина $N_1(P_0)$ вычисляется по формуле (33).

Уравнения движения или равновесия оболочки могут быть получены, исходя из фундаментальных принципов наименьшего действия (в форме Гамильтона–Остроградского) или минимума потенциальной энергии (в форме Лагранжа) [1, 2, 4–12], согласно которым

$$\delta \mathrm{E} = \delta \int_{t_0}^{t_1} \left( K - \tilde{\Pi} + A^E \right) dt = 0 \quad (48)$$

или, соответственно,

$$\delta \mathrm{E} = \delta(\tilde{\Pi} - A^E) = 0,$$

где $\delta$ – символ вариации.

Таким образом, математическая модель деформирования оболочек переменной толщины, находящихся под воздействием механической нагрузки и температурного поля, для задач статики и динамики построена. Начальные и граничные условия, соответствующие тому или иному способу закрепления контура оболочки, предполагаются заданными.

Предложенная математическая модель термоупругости может быть обобщена на случаи различных свойств материалов рассматриваемых оболочек (нелинейная упругость, вязкоупругость, ортотропия и другие)

В задачах статики для отыскания минимума функционала (37), записанного с учетом выражений (44) – (47), может быть эффективно применен метод Ритца при разложении искомых функций перемещений $U$, $V$, $W$ и углов $\Psi_1$, $\Psi_2$ в ряды.

В задачах динамики для решения системы уравнений движения оболочки, эквивалентной вариационному уравнению (48), целесообразно последовательно применять методы Власова–Канторовича и Рунге – Кутта.

Если считать функции перемещений $u_1$, $u_2$, $u_3$ компонентами потенциального вектора, то в этом случае

$$\frac{Du_1}{\partial l_2} = \frac{Du_2}{\partial l_1};$$

$$\Psi_1 = \frac{Du_1}{\partial x_3} = \frac{Du_3}{\partial l_1};$$

$$\Psi_2 = \frac{Du_2}{\partial x_3} = \frac{Du_3}{\partial l_2},$$

а, значит полные углы сдвигов –

$$\Phi_1 = 2\frac{Du_3}{\partial l_1}; \quad \Phi_2 = 2\frac{Du_3}{\partial l_2}$$

и кроме того,

$$\mathrm{X}_1 = 2\frac{Du_3}{\partial l_1}; \quad \mathrm{X}_2 = 2\frac{Du_3}{\partial l_2}, \quad \mathrm{X}_{12} = 2\frac{D^2 u_3}{\partial l_1 \partial l_2}.$$

Таким образом, полученные математические модели существенно упрощаются.

*Приложение 1*

**Выражения коэффициентов $\tilde{\varepsilon}_k$ в развернутом виде (формулы (9) в соотношении (8) основного текста)**

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \tilde{\varepsilon}_0(P_0) = \tilde{\alpha}_0(x,y) T_0(x,y);$$

$$\tilde{\varepsilon}_1 = \tilde{\varepsilon}_1(P_0) = \tilde{\alpha}_0(x,y) T_1(x,y) + \tilde{\alpha}_1(x,y) T_0(x,y);$$

$$\tilde{\varepsilon}_2 = \tilde{\varepsilon}_2(P_0) = \tilde{\alpha}_0(x,y) T_2(x,y) + \\ + \tilde{\alpha}_1(x,y) T_1(x,y) + \tilde{\alpha}_2(x,y) T_0(x,y);$$

$$\tilde{\varepsilon}_3 = \tilde{\varepsilon}_3(P_0) = \tilde{\alpha}_1(x,y) T_2(x,y) + \tilde{\alpha}_2(x,y) T_1(x,y);$$

$$\tilde{\varepsilon}_4 = \tilde{\varepsilon}_4(P_0) = \tilde{\alpha}_2(x,y) T_2(x,y).$$

*Приложение 2*

**Выражения коэффициентов $\tilde{\sigma}_k$ в развернутом виде (формулы (17) в соотношении (15) основного текста)**

$$\tilde{\sigma}_0 = \tilde{\sigma}_0(P_0) = \tilde{E}_0(x,y) \tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_1 = \tilde{\sigma}_1(P_0) = \tilde{E}_0(x,y) \tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{E}_1(x,y) \tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_2 = \tilde{\sigma}_2(P_0) = \tilde{E}_0(x,y) \tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_1(x,y) \tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{E}_2(x,y) \tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_3 = \tilde{\sigma}_3(P_0) = \tilde{E}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \tilde{E}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{E}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_4 = \tilde{\sigma}_4(P_0) = \tilde{E}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \\ + \tilde{E}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \tilde{E}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_5 = \tilde{\sigma}_5(P_0) = \tilde{E}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{E}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{E}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_6 = \tilde{\sigma}_6(P_0) = \tilde{E}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \\ + \tilde{E}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_7 = \tilde{\sigma}_7(P_0) = \tilde{E}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y);$$

$$\tilde{\sigma}_8 = \tilde{\sigma}_8(P_0) = \tilde{E}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y).$$

*Приложение 3*

**Выражения коэффициентов $\tilde{\tau}_k$ в развернутом виде (формулы (18) в соотношении (16) основного текста)**

$$\tilde{\tau}_0 = \tilde{\tau}_0(P_0) = \tilde{E}_0(x,y)f_0(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_1 = \tilde{\tau}_1(P_0) = \tilde{E}_0(x,y)f_1(x,y) + \tilde{E}_1(x,y)f_0(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_2 = \tilde{\tau}_2(P_0) = \tilde{E}_0(x,y)f_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_1(x,y)f_1(x,y) + \tilde{E}_2(x,y)f_0(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_3 = \tilde{\tau}_3(P_0) = \tilde{E}_1(x,y)f_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_2(x,y)f_1(x,y) + \tilde{E}_3(x,y)f_0(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_4 = \tilde{\tau}_4(P_0) = \tilde{E}_2(x,y)f_2(x,y) + \\ + \tilde{E}_3(x,y)f_1(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)f_0(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_5 = \tilde{\tau}_5(P_0) = \tilde{E}_3(x,y)f_2(x,y) + \tilde{E}_4(x,y)f_1(x,y);$$

$$\tilde{\tau}_6 = \tilde{\tau}_6(P_0) = \tilde{E}_4(x,y)f_2(x,y).$$

*Приложение 4*

**Выражения коэффициентов $\tilde{\pi}_k$ в развернутом виде (формулы (35) в соотношении (34) основного текста)**

$$\tilde{\pi}_0 = \tilde{\pi}_0(P_0) = \tilde{\sigma}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_1 = \tilde{\pi}_1(P_0) = \tilde{\sigma}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_2 = \tilde{\pi}_2(P_0) = \tilde{\sigma}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_3 = \tilde{\pi}_3(P_0) = \tilde{\sigma}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_4 = \tilde{\pi}_4(P_0) = \tilde{\sigma}_0(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_5 = \tilde{\pi}_5(P_0) = \tilde{\sigma}_1(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_5(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_6 = \tilde{\pi}_6(P_0) = \tilde{\sigma}_2(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_5(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_6(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_7 = \tilde{\pi}_7(P_0) = \tilde{\sigma}_3(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_5(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_6(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_7(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_8 = \tilde{\pi}_8(P_0) = \tilde{\sigma}_4(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_5(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_6(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_7(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y) + \tilde{\sigma}_8(x,y)\tilde{\varepsilon}_0(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_9 = \tilde{\pi}_9(P_0) = \tilde{\sigma}_5(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_6(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \tilde{\sigma}_7(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y) + \tilde{\sigma}_8(x,y)\tilde{\varepsilon}_1(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_{10} = \tilde{\pi}_{10}(P_0) = \tilde{\sigma}_6(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \\ + \tilde{\sigma}_7(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y) + \tilde{\sigma}_8(x,y)\tilde{\varepsilon}_2(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_{11} = \tilde{\pi}_{11}(P_0) = \tilde{\sigma}_7(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y) + \tilde{\sigma}_8(x,y)\tilde{\varepsilon}_3(x,y);$$

$$\tilde{\pi}_{12} = \tilde{\pi}_{12}(P_0) = \tilde{\sigma}_8(x,y)\tilde{\varepsilon}_4(x,y).$$

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика. В 10 т. Т. VII. Теория упругости [Текст]: Учеб. пос. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2007. – 264 с.

2. **Жилин, П.А.** Прикладная механика. Основы теории оболочек [Текст]: Учеб. пос. / П.А. Жилин. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2006. – 167 с.

3. **Карпов, В.В.** Математические модели термоупругости оболочек переменной толщины при учете различных свойств материала [Текст] / В.В. Карпов, В.Н. Филатов // Вестник гражданских инженеров. – 2006. – № 3. – С. 42–45.

4. **Карпов, В.В.** Нелинейные математические модели деформирования оболочек переменной толщины и алгоритмы их исследования [Текст]: Учеб. пос. / В.В. Карпов, О.В. Игнатьев, А.Ю. Сальников. – М.: АСВ; СПб.: СПбГАСУ, 2002.– 420 с.

5. **Жгутов, В.М.** Математическая модель, алгоритм исследования и анализ устойчивости нелинейно-упругих ребристых оболочек при больших перемещениях [Текст] / В.М. Жгутов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2009. – № 4. – С. 24–30.

6. **Жгутов, В.М.** Математические модели, алгоритм исследования и анализ устойчивости ребристых оболочек с учетом ползучести материала при конечных прогибах [Текст] / В.М. Жгутов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. – № 2. – С. 53–59.

7. **Жгутов, В.М.** Математические модели, алгоритм исследования и анализ устойчивости упругих ребристых оболочек при конечных прогибах [Текст] / В.М. Жгутов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2011. – № 1. – С. 122 – 129.

8. **Абдикаримов, Р.А.** Математические модели задач нелинейной динамики вязкоупругих ортотропных пластин и оболочек переменной толщины [Текст] / Р.А. Абдикаримов, В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. – 2010. – № 6. – С. 38 – 47.

9. **Абдикаримов, Р.А.** Математические модели задач нелинейной динамики вязкоупругих изотропных пластин и оболочек гладко-переменной толщины (асимметричный случай) [Текст] / Р.А. Абдикаримов, В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. – 2010. – № 8. – С. 47 – 55.

10. **Жгутов, В.М.** Метод конструктивной анизотропии для ортотропных и изотропных ребристых оболочек [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. – 2009. – № 8. – С. 40 – 46.

11. **Жгутов, В.М.** Ответ профессору Карпову Владимиру Васильевичу (о научном приоритете в методе конструктивной анизотропии для ребристых оболочек и на функционал, описывающий ползучесть их материала) [Текст] / В.М. Жгутов // Инженерно-строительный журнал. – 2011. – № 3. – С. 75 – 80.

12. **Жилин, П.А.** Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики [Текст]: Учеб. пос. / П.А. Жилин. – СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2003. – 339 с.


УДК 539.3, 537.226.4

*Н.Г. Осипова, А.С. Семёнов*

# МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ПОВЕДЕНИЯ ПЬЕЗОКЕРАМИКИ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЙ ГОМОГЕНИЗАЦИИ

Сегнетоэластики и сегнетоэлектрики являются перспективными материалами новой техники и находят все более широкое применение на практике. Они используются в автомобилестроении, IT-технологиях, радиоэлектронике, медицинской технике в качестве актюаторов, сенсоров, датчиков давлений, позиционеров, микромоторов и элементов памяти. Сегнетоэлектроупругие материалы обладают способностью сохранять остаточные деформации и спонтанную поляризацию даже при удалении источников механического или электрического воздействия.

Необходимость решения краевых задач для оценки прочности и долговечности таких устройств, ставшая в последнее время актуальной, требует разработки и использования в расчетах сравнительно простых моделей сегнетоэлектроупругого материала, учитывающих его нелинейное поведение и отражающих реальные механизмы деформирования.

Цели данной работы – разработка модели сегнетоэлектроупругого материала для поликристаллической пьезокерамики на основе определения эффективных свойств поликристалла методами конечно-элементной (КЭ) гомогенизации, а также сравнение прогнозов данной модели с результатами экспериментов при различных программах нагружения.

Идентификация характеристик модели производится на основе результатов вычислительных экспериментов с представительным объемом поликристалла, содержащим значительное количество произвольно ориентированных монокристаллов, для описания поведения которых используются микромеханические модели.

В отличие от простейших подходов, не учитывающих взаимное влияние монокристаллов друг на друга и основанных на простом осреднении откликов в предположении равенства воздействий во всех монокристаллах [1–3] (приближение Рейсса) или упрощенно учитывающих это влияние при применении самосогласованных моделей [4, 5], используемый подход, основанный на непосредственном рассмотрении представительного объема поликристалла и применении МКЭ для его анализа, позволяет детально описать взаимное влияние отдельных кристаллитов друг на друга. Учет взаимного влияния и возникающих вследствие этого микронапряжений важен при анализе поведения при сложном непропорциональном и циклическом нагружении.

### Определяющие уравнения микроэлектромеханической модели

Рассматриваются определяющие уравнения сегнетоэлектроупругого монокристалла, математическая форма записи которых вводится по аналогии с теорией пластического деформирования кристаллов. Данный подход был предложен в работе [4] и позволил учесть мультидоменную структуру и диссипативный характер движения доменных стенок.

Предполагая, что тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ и вектор электрической индукции $\mathbf{D}$ допускают декомпозицию в виде суммы линейных (обратимых) $\boldsymbol{\varepsilon}^l$-, $\mathbf{D}^l$- и остаточных (аналог пластических) $\boldsymbol{\varepsilon}^r$-, $\mathbf{P}^r$- составляющих, и, используя для первых уравнения линейного пьезоэлектрического отклика, получаем определяющие уравнения в виде:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \boldsymbol{\varepsilon}^l + \boldsymbol{\varepsilon}^r = {}^4\mathbf{S}^E \cdot\cdot\, \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{d} + \boldsymbol{\varepsilon}^r; \\ \mathbf{D} &= \mathbf{D}^l + \mathbf{P}^r = {}^3\mathbf{d} \cdot\cdot\, \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\kappa}^\sigma \cdot \mathbf{E} + \mathbf{P}^r, \end{aligned} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, $\mathbf{E}$ – вектор напряженности электрического поля, $\boldsymbol{\varepsilon}^r$ – тензор остаточной деформации, $\mathbf{P}^r$ – вектор спонтанной поляризации, ${}^4\mathbf{S}^E$ – тензор модулей упругой податливости кристалла (4-го ранга), ${}^3\mathbf{d}$ – тензор пьезоэлектрических модулей кристалла (3-го ранга) и $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$ – тензор модулей диэлектрической проницаемости (2-го ранга).

Обращенная форма определяющих уравнений (1), используемая при проведении КЭ-расчетов, допускает следующее представление:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= {}^4\mathbf{C}^D \cdot\cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r\right) - \left(\mathbf{D} - \mathbf{P}^r\right) \cdot {}^3\mathbf{h}; \\ \mathbf{E} &= -{}^3\mathbf{h} \cdot\cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r\right) + \boldsymbol{\beta}^\varepsilon \cdot \left(\mathbf{D} - \mathbf{P}^r\right), \end{aligned} \tag{2}$$

где тензоры ${}^4\mathbf{C}^D$, ${}^3\mathbf{h}$, $\boldsymbol{\beta}^\varepsilon$, характеризующие линейные электромеханические свойства монокристалла, определяются на основе инверсии ${}^4\mathbf{S}^E$, ${}^3\mathbf{d}$, $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$. В дополнение к представлениям (1) и (2) необходимо ввести уравнения для $\boldsymbol{\varepsilon}^r$ и $\mathbf{P}^r$.

Процессы необратимого деформирования и спонтанной поляризации пьезокерамики связаны с возможностью скачкообразного перемещения нецентральносимметричных атомов кристаллической решетки. В тетрагональном монокристалле реализуется шесть ориентаций спонтанной поляризации (вдоль положительных и отрицательных направлений трех кристаллографических осей), соответствующих шести возможным вариантам доменов и 30 системам переключения. Тензор остаточной деформации и вектор спонтанной поляризации могут быть записаны в этом случае как сумма вкладов отдельных доменов:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^r = \sum_{I=1}^{6} c_I \boldsymbol{\varepsilon}_I; \qquad \mathbf{P}^r = \sum_{I=1}^{6} c_I \mathbf{P}_I, \tag{3}$$

где $c_I$ – концентрация (объемная доля) $I$-го домена в монокристалле, удовлетворяющая ограничениям

$$0 \le c_I \le 1, \quad \sum_{I=1}^{6} c_I = 1. \tag{4}$$

Модули монокристалла ${}^4\mathbf{S}^E$, ${}^3\mathbf{d}$, $\boldsymbol{\kappa}^\sigma$ определяются на основе модулей отдельных доменов ${}^4\mathbf{S}_I^E$, ${}^3\mathbf{d}_I$, $\boldsymbol{\kappa}_I^\sigma$ соотношениями, аналогичными (3):

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{S}^E &= \sum_{I=1}^{6} c_I\, {}^4\mathbf{S}_I^E, \\ {}^3\mathbf{d} &= \sum_{I=1}^{6} c_I\, {}^3\mathbf{d}_I, \\ \boldsymbol{\kappa}^\sigma &= \sum_{I=1}^{6} c_I \boldsymbol{\kappa}_I^\sigma. \end{aligned} \tag{5}$$

Изменение концентрации $I$-го домена монокристалла выражается через скорость переключения из состояния с ориентацией $I$ в состояние с ориентацией $J$:

$$\dot{c}_I = \sum_{\alpha=1}^{30} A^{I\alpha} \dot{f}^\alpha, \tag{6}$$

где $A^{I\alpha} = 1$, если $I$-й домен является реципиентом $\alpha$-ой системы переключений ($\alpha : J \to I$); $A^{I\alpha} = -1$, если $I$-й домен является донором $\alpha$-й системы переключений ($\alpha : I \to J$); $A^{I\alpha} = 0$ в остальных случаях.

С учетом выражений (3) и (6) скорости остаточных деформаций и поляризации могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r &= \sum_{I=1}^{6} \dot{c}_I \boldsymbol{\varepsilon}_I = \sum_{\alpha=1}^{30} \dot{f}^\alpha \mu_\alpha \gamma_\alpha; \\ \dot{\mathbf{P}}^r &= \sum_{I=1}^{6} \dot{c}_I \mathbf{P}_I = \sum_{\alpha=1}^{30} \dot{f}^\alpha \mathbf{s}_\alpha P_\alpha, \end{aligned} \tag{7}$$

где $\boldsymbol{\mu}_\alpha = \frac{1}{2}(\mathbf{s}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \mathbf{n}_\alpha \mathbf{s}_\alpha)$ – тензор Шмида; $\mathbf{s}_\alpha$ – единичный вектор в направлении изменения поляризации; $\gamma_\alpha, P_\alpha$ – константы материала.

Уравнения для определения кинематических переменных $\dot{f}^\alpha$, играющих фундаментальную роль при описании процессов переключения, вводятся из условия априорного удовлетворения термодинамических ограничений. Мощность диссипации определяется равенством

$$\delta = \boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot\, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot\, \boldsymbol{\varepsilon}^l + \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}^l\right)^\bullet = \sum_{\alpha=1}^{30} G^\alpha \dot{f}^\alpha, \tag{8}$$

на основе которого с учетом уравнений (1), (3), (5)–(7) вычисляется движущая сила $G^\alpha$, сопряженная с $\dot{f}^\alpha$:

$$\begin{aligned} G^\alpha = &\left[\gamma^\alpha \boldsymbol{\mu}^\alpha + \frac{1}{2}\sum_{I=1}^{6} A^{I\alpha}\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot\cdot\, {}^4\mathbf{S}_I^E + \mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{d}_I\right)\right] \cdot\cdot\, \boldsymbol{\sigma} + \\ &+ \mathbf{E} \cdot \left[P^\alpha \mathbf{s}^\alpha + \frac{1}{2}\sum_{I=1}^{6} A^{I\alpha}\left({}^3\mathbf{d}_I \cdot\cdot\, \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\kappa}_I^\sigma \cdot \mathbf{E}\right)\right]. \end{aligned} \tag{9}$$

Уравнение эволюции $\dot{f}^\alpha$, удовлетворяющее условию неотрицательности диссипации $\delta \ge 0$, принимаем в следующем виде:

$$\dot{f}^\alpha = B^\alpha \frac{G^\alpha}{G_c^\alpha}\left|\frac{G^\alpha}{G_c^\alpha}\right|^{n-1}\left(\frac{c_I^{donor(\alpha)}}{C_0}\right)^m, \tag{10}$$

где $G_c^\alpha > 0, B^\alpha > 0, n > 0, m > 0, C_0 > 0$ – константы материала, определяющие форму гистерезисных кривых; $c_I^{donor(\alpha)}$ – концентрация $I$-го домена (донора $\alpha$-й системы переключений).

Для описания склерономного поведения следует выбрать $n >> 1$, как обычно и поступают при анализе пластичности кристаллов. Введение последнего сомножителя в уравнение (10) позволяет описать эффект насыщения и удовлетворить неравенствам (4).

### Представительный объем поликристалла

В качестве представительного объема поликристалла рассматривался куб с различным числом разбиений (рис. 1). Каждая Гауссова точка конечного элемента рассматривалась как отдельный монокристалл; ориентация таких монокристаллов генерировалась случайным образом (нормальное распределение для каждого их трех углов Эйлера). При проведении вычислительных экспериментов с использованием КЭ комплекса PANTOCRATOR [6]

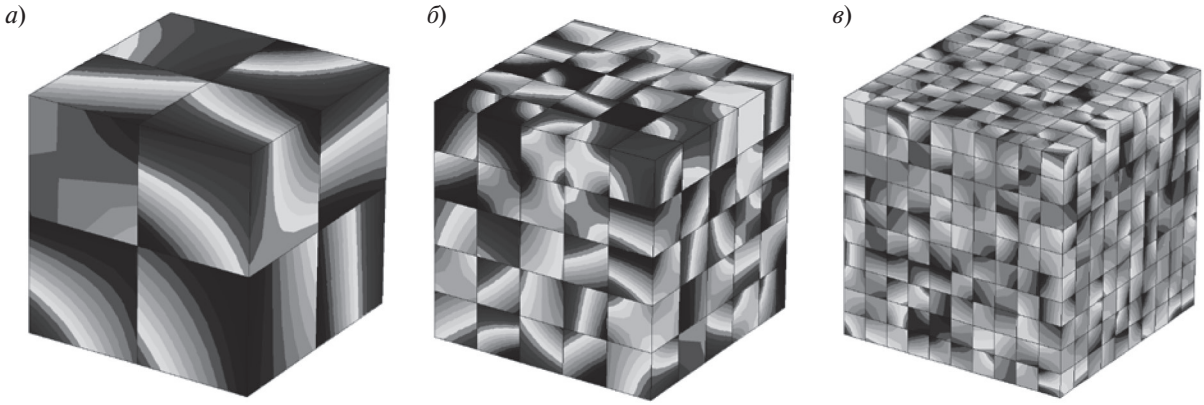



Рис. 1. Примеры представительных объемов поликристалла сегнетоэластика с различным числом разбиений: $2\times2\times2$ (*а*), $5\times5\times5$ (*б*), $10\times10\times10$ (*в*).
Показаны поля распределения угловых отклонений ориентаций $\langle 001\rangle$ кристаллов от вертикали

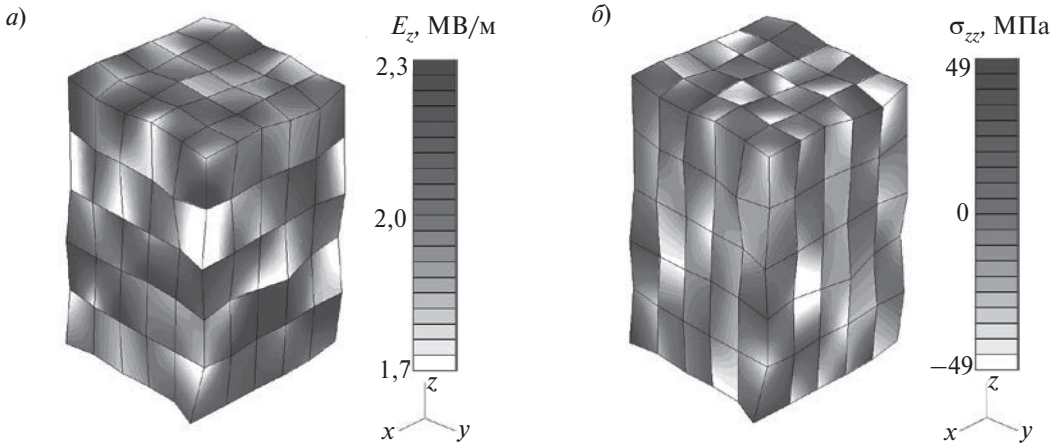



Рис. 2. Распределение вертикальных компонент электрического поля $E_z$ (*а*) и тензора напряжений $\sigma_{zz}$ (*б*).
Деформированное состояние для наглядности увеличено в 300 раз

исследовалось поведение различных вариантов поликристаллов с разбиениями от $1\times1\times1$ до $10\times10\times10$ элементов, содержащих от 8 до 8 000 монокристаллов и имеющих от 48 до 48 000 доменов соответственно.

На рис. 2 представлены характерные результаты КЭ-вычислительных экспериментов с представительным объемом поликристалла при задании граничных условий $\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\big|_S=\mathbf{0}$, $\varphi\big|_S=-\bar{E}_z z$. Полученные в результате расчетов поля обладают ярко выраженной неоднородностью.

Целью проведения расчетов является определение эффективных значений полей $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{\boldsymbol{\sigma}}, \bar{\mathbf{D}}, \bar{\mathbf{E}}$:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}=\frac{1}{V}\int_V \boldsymbol{\varepsilon}dV;\quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}=\frac{1}{V}\int_V \boldsymbol{\sigma}dV;$$
$$\bar{\mathbf{D}}=\frac{1}{V}\int_V \mathbf{D}\,dV;\quad \bar{\mathbf{E}}=\frac{1}{V}\int_V \mathbf{E}\,dV \qquad (11)$$

и установления связей между ними при различных способах задания граничных условий.

В данной работе основное внимание уделяется исследованию нелинейных характеристик, определяющих форму механического и диэлектрического видов гистерезиса. Определение линейных эффективных характеристик ${}^4\mathbf{S}^E$, ${}^3\mathbf{d}$, $\boldsymbol{\kappa}_*^\sigma$ выполнялось стандартными методами гомогенизации для трансверсально-изотропного материала.

Формулировка краевой задачи для представительного объема поликристалла включает уравнения в объеме $V$:

$$\begin{aligned} &\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}=\mathbf{0};\quad \boldsymbol{\varepsilon}=\left(\nabla\mathbf{u}\right)^S;\\ &\nabla\cdot\mathbf{D}=0;\quad \mathbf{E}=-\nabla\varphi, \end{aligned} \tag{12}$$

определяющие уравнения (2) и граничные условия на внешней поверхности $S$:

$$\begin{aligned} &\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\big|_{S_\sigma}=\mathbf{n}\cdot\bar{\boldsymbol{\sigma}};\quad \mathbf{u}\big|_{S_u}=\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{r};\\ &\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}\big|_{S_D}=\mathbf{n}\cdot\bar{\mathbf{D}};\quad \varphi\big|_{S_\varphi}=\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{r}. \end{aligned} \tag{13}$$

При получении КЭ-решений связанных электромеханических краевых задач (12), (13) использовалась векторно-потенциальная формулировка [7, 8], основанная на вариационной формулировке с выбором в качестве варьируемых величин вектора перемещения $\mathbf{u}$ и электрического векторного потенциала $\boldsymbol{\psi}$ [8]:

$$\begin{aligned} &\int_V\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\cdot\,\delta\boldsymbol{\varepsilon}+\mathbf{E}\cdot\delta\mathbf{D}\right)\,dV=\\ &=\int_S\left(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\delta\mathrm{u}+\mathbf{n}\times\mathbf{E}\cdot\delta\psi\right)\,dS. \end{aligned} \tag{14}$$

### Сравнение прогнозов моделей конечно-элементной гомогенизации с экспериментами

На рис. 3 представлено сравнение результатов КЭ-моделирования поведения поликристалла (представительный объем с разбиением $3\times3\times3$) при циклическом нагружении с результатами экспериментов для трех различных пьезокерамических материалов: PIC 151 [9], PZT-5H [10], PLZT 8/65/35 [11]. Во всех случаях наблюдаются лишь незначительные отклонения результатов расчета от эксперимента, что указывает на возможность использования рассматриваемой модели материала для адекватного описания поведения поликристаллической пьезокерамики. Найденные в результате проведения многовариантных вычислительных экспериментов параметры материала приведены в таблице.

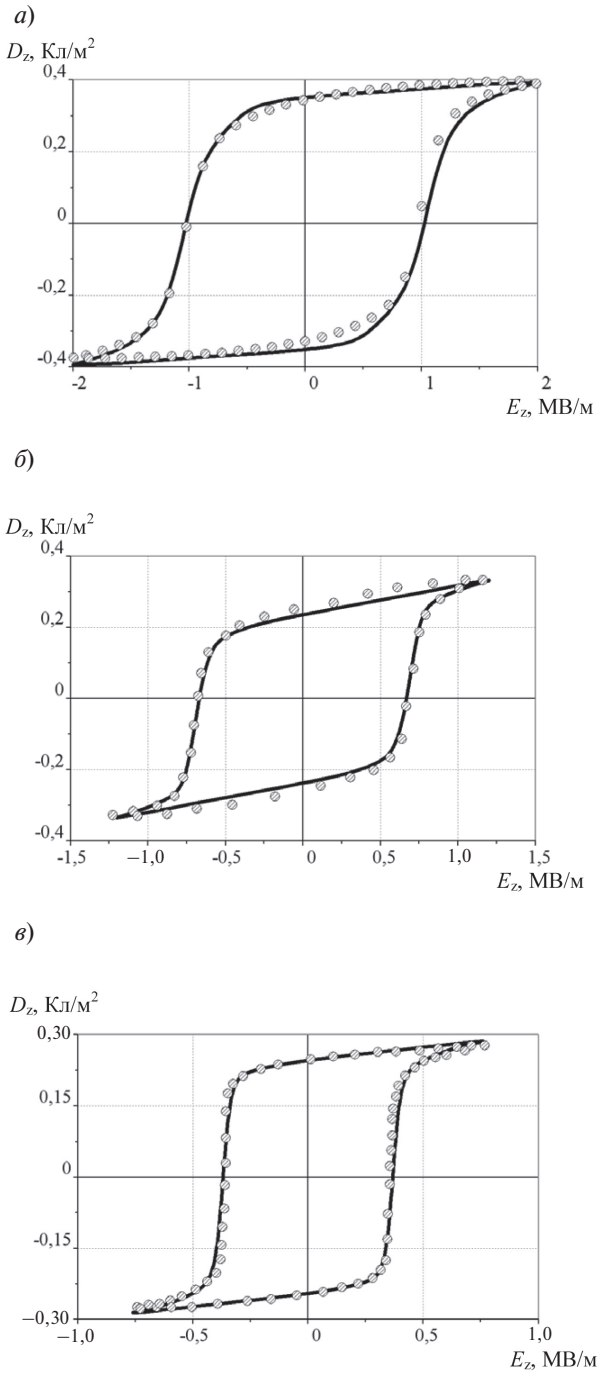



Рис. 3. Сравнение результатов КЭ-расчета (линии ) с экспериментом (символы ) для трех материалов: PIC 151 (*а*), PZT-5H (*б*), PLZT 8/65/35 (*в*)

**Константы материалов, используемые в КЭ расчетах**

| Величина | Обозначение | Размерность | Материал | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | PIC 151 | PZT-5H | PLZT 8/65/35 |
| Упругие модули | $C^D_{1111}$<br>$C^D_{3333}$<br>$C^D_{1133}$ | МПа | $1{,}26\cdot10^5$<br>$1{,}18\cdot10^5$<br>$0{,}53\cdot10^5$ | $0{,}75\cdot10^5$<br>$0{,}34\cdot10^5$<br>$0{,}21\cdot10^5$ | $1{,}65\cdot10^{11}$<br>$1{,}32\cdot10^{11}$<br>$0{,}95\cdot10^{11}$ |
| Диэлектрическая проницаемость | $\kappa^\sigma_{33}$ | Ф/м | $2{,}20\cdot10^{-8}$ | $8{,}8\cdot10^{-8}$ | $5{,}63\cdot10^{-8}$ |
| Пьезоэлектрические модули | $d_{33}$<br>$d_{31}$<br>$d_{15}$ | м/В | $3{,}15\cdot10^{-10}$<br>$-1{,}28\cdot10^{-10}$<br>$4{,}82\cdot10^{-10}$ | $2{,}2\cdot10^{-10}$<br>$-1{,}1\cdot10^{-10}$<br>$1{,}8\cdot10^{-10}$ | $5{,}94\cdot10^{-10}$<br>$-3{,}95\cdot10^{-10}$<br>$3{,}70\cdot10^{-10}$ |
| Спонтанная поляризация и деформация | $P_0$<br>$\varepsilon_0$ | Кл/м$^2$<br>% | 0,57<br>0,3 | 0,49<br>0,3 | 0,38<br>0,05 |
| Критическое значение движущей силы | $G^{90}_c$ | В·Кл/м$^3$ | $0{,}44\cdot10^6$ | $0{,}38\cdot10^6$ | $0{,}18\cdot10^6$ |
| Коэффициент вязкости | $B^{90}$ | — | 0,00015 | 0,05 | 1 |
| Показатели степени уравнения эволюции | $n$<br>$m$ | — | 12<br>2,5 | 15<br>1,5 | 21<br>1,4 |
| Параметр насыщения | $C_0$ | — | 0,01 | 0,01 | 0,01 |

## Сравнение прогнозов моделей КЭ-гомогенизации с прогнозами моделей прямого осреднения и монокристалла

Основным преимуществом рассматриваемой модели сегнетоэлектроупругого материала, основанной на КЭ-гомогенизации, является учет взаимного влияния отдельных кристаллитов друг на друга. Это наглядно проявляется в сравнении с прогнозами других моделей. На рис. 4 показано сравнение кривых диэлектрического гистерезиса, полученных на основе модели гомогенизации (представительный объем с разбиением $2\times2\times2$), модели прямого осреднения (60 монокристаллов) и модели одиночного монокристалла с результатами эксперимента

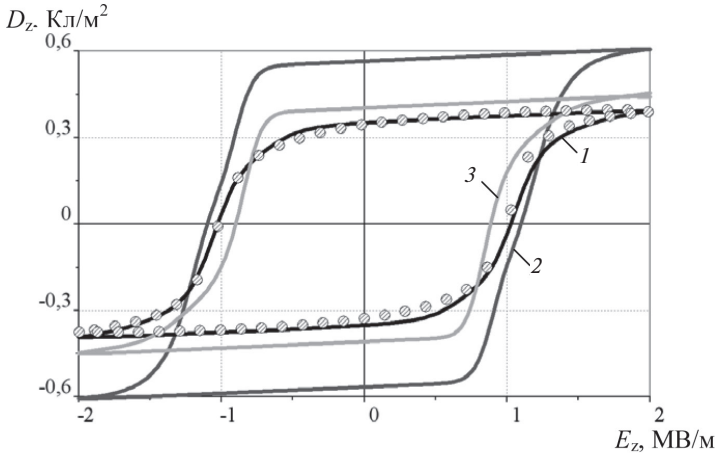



Рис. 4. Сравнение результатов прогнозов модели КЭ-гомогенизации (*1*) с моделью прямого осреднения (*2*) и с моделью монокристалла (*3*)

для материала PIC 151 [9]. Неучет взаимного влияния приводит к увеличению высоты гистерезиса и резкому переходу от его верхних и нижних сторон к боковым (соответствующих процессам переключений).

Недостатком рассматриваемой модели является значительное увеличение времени счета, связанное с необходимостью КЭ-решения задачи. Для получения решения задачи гомогенизации (64 монокристалла, 162 степени свободы в КЭ-модели, 1800 инкрементов нагрузки) потребовалось в 16 раз больше времени, чем для задачи прямого осреднения (60 монокристаллов, 500 инкрементов), и в 69 раз больше, чем в расчете с использованием модели монокристалла (500 инкрементов).

### Влияние числа монокристаллов в представительном объеме поликристалла

Исследование влияний числа разбиений представительного объема поликристалла на форму кривой диэлектрического гистерезиса показало, что начиная с числа разбиений $3 \times 3 \times 3$ (216 монокристаллов), кривые становятся визуально неотличимы (рис. 5). В данной серии расчетов разбиение $1 \times 1 \times 1$ дает границу сверху, а $2 \times 2 \times 2$ является нижней границей.

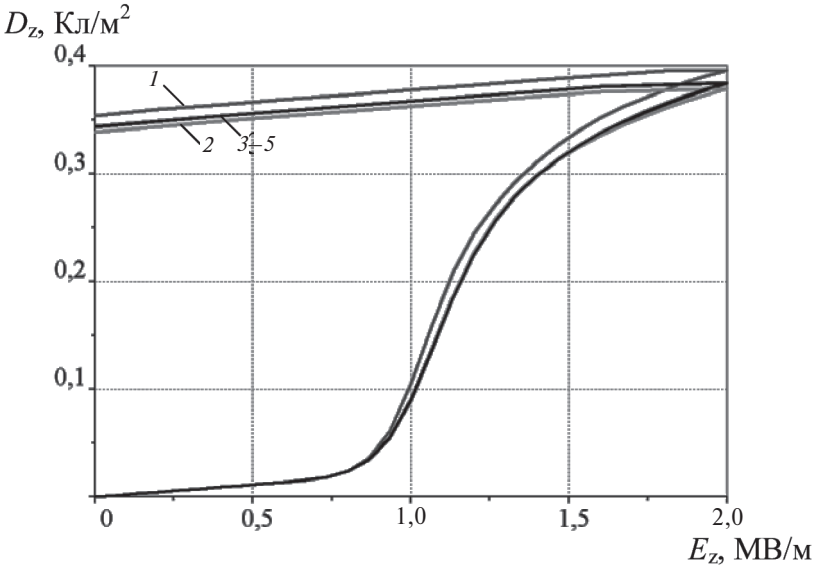



Рис. 5. Влияние числа разбиений представительного объема поликристалла на кривые гистерезиса: *1* – 1×1×1 разбиений (8 кристаллов), *2* – 2×2×2 разбиений (64 кристалла), *3–5* – 3×3×3–5×5×5 разбиений (216–1000 кристаллов)

### Анализ влияния механических напряжений на диэлектрический гистерезис

Рассмотренные выше задачи соответствовали пропорциональному нагружению. На практике возникают ситуации, когда реализуется непропорциональное многоосное комбинированное электромеханическое нагружение. Характерным примером подобного нагружения является действие постоянных механических напряжений при циклически изменяющемся электрическом поле. На рис. 6 показаны расчетные кривые гистерезиса при различных значениях сжимающих напряжений. Наблюдается удовлетворительное совпадение кривых,полученных на основе применения модели КЭ-гомогенизации, с экспериментальными результатами для материала PIC 151 [9]. Несколько заниженный уровень деформаций объясняется неучетом ромбоэдрической фазы в расчетах.

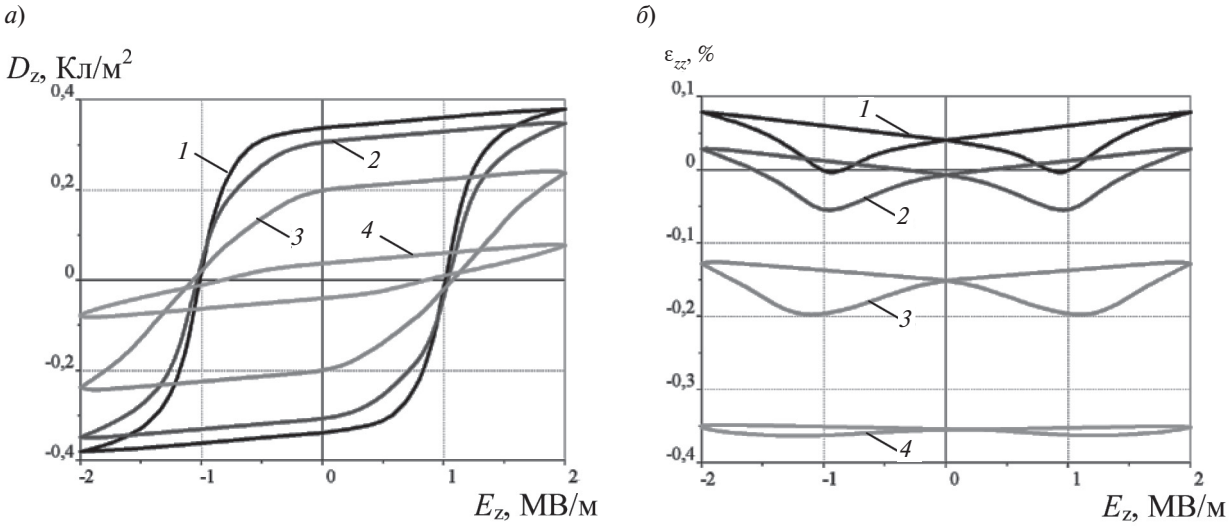



Рис. 6. Зависимость формы петли диэлектрического (*а*) и электромеханического (*б*) гистерезисов от уровня механических сжимающих напряжений σ, МПа: 0 (*1*), –50 (*2*), –200 (*3*), –400 (*4*)

**Моделирование диэлектрического гистерезиса с выдержками**

В условиях нагружения с различными скоростями и программах нагружения с промежуточными выдержками проявляются вязкие свойства сегнетоэлектроупругих материалов. В целях проверки возможности предсказания данных эффектов рассматриваемой моделью были проведены расчеты цикла нагружения с амплитудой 2 МВ/м со скоростью нагружения 0,08 МВ/(м·с) при наличии промежуточных выдержек в течении 300 с через каждые 0,5 МВ/м (т. е. при $E_z = \pm 0{,}5;\ \pm 1{,}0;\ \pm 1{,}5;\ \pm 2.0$ МВ/м). Результаты подобных испытаний представлены в работе для материала PIC 151 [9].

На рис. 7 показаны расчетные кривые диэлектрического и электромеханического гистерезисов в форме бабочки для рассматриваемой программы нагружения с выдержками. При фиксированных постоянных уровнях нагрузки с течением времени наблюдается ярко выраженная ползучесть. Полученные результаты демонстрируют качественное совпадение с результатами опытов [9].

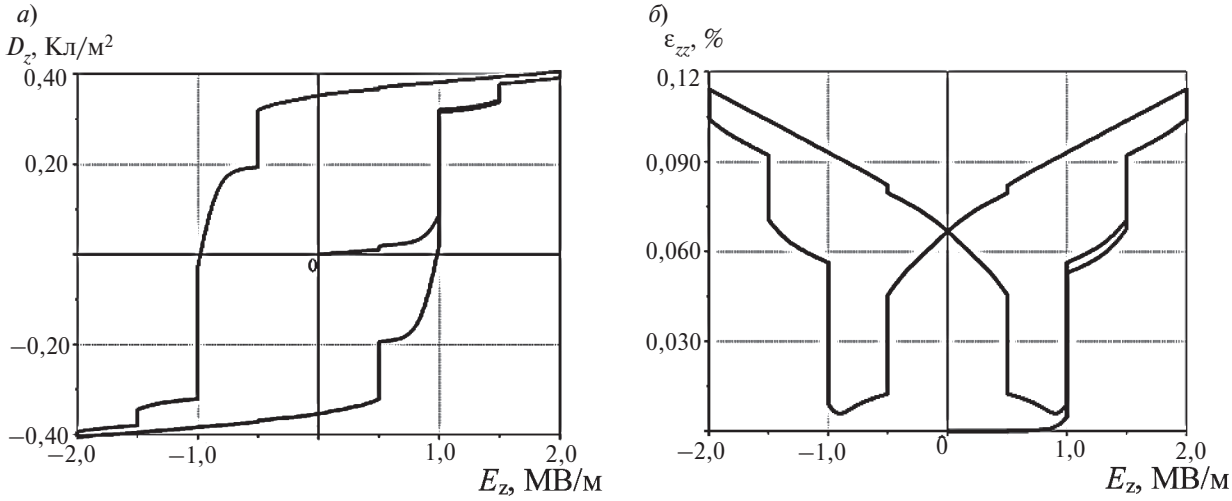



Рис. **7.** Расчетные кривые диэлектрического гистерезиса при наличии выдержек в процессе нагружения

Итак, результаты проведенных многочисленных вычислительных экспериментов с использованием микромеханически мотивированной модели сегнетоэлектроупругого материала, основанной на определении эффективных свойств поликристалла методами конечно-элементной гомогенизации, продемонстрировали качественное и количественное совпадение с результатами известных экспериментов при различных программах нагружения, включающих монотонное и циклическое, пропорциональное и непропорциональное, электрическое и комбинированное электромеханическое воздействия.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Hwang, S.C.** Ferroelectric/ferroelastic interactions and a polarization switching model [Text] / S.C. Hwang, C.S. Lynch, R.M. McMeeking // Acta Met. – 1995. – Vol. 43. – P. 2073–2084.

2. **Huber, J.E.** Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: Theory versus experiment [Text] / J.E. Huber, N.A. Fleck // J. Mech. Phys. Solids. – 2001. – Vol. 49. – P. 785–811.

3. **Belov, A.Y.** Viscoplastic models for ferroelectric ceramics [Text] / A.Y. Belov, W.S. Kreher // J. Eur. Ceram. Soc. – 2005. – Vol. 25. – P. 2567–2571.

4. **Huber, J.E.** A constitutive model for ferroelectric polycrystals [Text] / J.E. Huber, N.A. Fleck, C.M. Landis, R.M. McMeeking // J. Mech. Phys. Solids. – 1999. – Vol. 47. – P. 1663–1697.

5. **Landis, C.M.** A self-consistent constitutive model for switching in polycrystalline barium titanate [Text] / C.M. Landis, R.M. McMeeking // Ferroelectrics. – 2001. – Vol. 255. –P. 13–34.

6. **Семёнов, А.С.** PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики [Текст] / А.С. Семёнов // Тр. V-й Междунар. конф. «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решения». СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. – С. 466–480.

7. **Семёнов, А.С.** Эффективные методы решения нелинейных краевых задач сегнетоэлектроупругости [Текст] / А.С. Семёнов, А.Ч. Лисковски, П. Ноймайстер [и др.] // Морские интелектуальные технологии. – 2010. – № 1. – С. 55–61.

8. **Semenov, A.S.** Return mapping algorithms and consistent tangent operators in ferroelectroelasticity [Text] / A.S. Semenov, A.C. Liskowsky, H. Balke // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 2010. – Vol. 81. – P. 1298–1340.

9. **Zhou, D.** Experimental investigation of non-linear constitutive behavior of PZT piezoceramics [Text] / D. Zhou // Dissertation. Karlsruhe, 2003. – 139 p.

10. **Huber, J.** Ferroelectrics: models and applications [Text] / J. Huber // Dissertation. Cambridge, 1998. – 177 p.

11. **Lynch, C.S.** The effect of uniaxial stress on the electro-mechanical response of 8/65/35 PLZT [Text] / C.S. Lynch // Acta Materialia. – 1996. – Vol. 44. – P. 4137–4148.

УДК 519.62: 537.8

*М.М. Корсун, М.Э. Рояк*

# УЧЕТ ШИХТОВАННОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПРОЦЕССОВ

Одна из распространенных технологий снижения влияния вихревых или паразитных токов на электромагнитный процесс в электротехнических установках заключается в том, чтобы выполнять отдельные конструктивные элементы из шихтованных материалов; последние представляют собой набор тонких пластинок из ферромагнитного вещества, разделенных специальным слоем лака. Такая технология препятствуют возникновению вихревых токов, вследствие чего

снижается вероятность перегрева установки, повышается эффективность ее работы.

Вычислительные схемы для компьютерного моделирования конструкций, содержащих шихтованные материалы, должны очень точно учитывать распределение вихревых токов. Решение дифференциальных уравнений из системы Максвелла, описывающих электромагнитные процессы, на основе метода конечных элементов для точного учета вихревых токов потребует существенно подробных конечноэлементных сеток. Получаемые на таких сетках системы линейных алгебраических уравнений имеют большое число неизвестных; кроме того, в задачах электромагнетизма матрица системы уравнений обладает плохими спектральными свойствами. Решение таких систем уравнений не только затруднительно, но и требует значительного увеличения вычислительных ресурсов. Поэтому довольно перспективной является разработка методов моделирования, которые позволяют заменить шихтованный материал единым объектом с анизотропными свойствами. В этом случае нет необходимости задавать все слои шихтованного материала в расчетной области, однако требуется специальным образом вычислять коэффициенты магнитной проницаемости и электрической проводимости.

### Вычисление коэффициентов, учитывающих шихтованные материалы

Нестационарные электромагнитные процессы, в которых влияние токов смещения пренебрежимо мало по сравнению с влиянием токов проводимости, описываются уравнениями из системы уравнений Максвелла:

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{J}^{\text{ст}} + \sigma\mathbf{E}; \qquad (1)$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}; \qquad (2)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0; \qquad (3)$$

$$\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}, \qquad (4)$$

где $\mathbf{H}$, А/м – напряженность магнитного поля; $\mathbf{J}^{\text{ст}}$, А/м$^2$ – вектор плотностей сторонних токов (возбуждающих электромагнитное поле); $\mathbf{E}$, В/м – напряженность электрического поля; $\boldsymbol{\sigma}$, См/м – проводимость среды; $\mathbf{B}$, Тл – индукция магнитного поля; $\mu$, Гн/м – коэффициент магнитной проницаемости, возможно, зависящий от $\mathbf{B}$.

Анизотропная среда характеризуется тем, что физические коэффициенты находятся в зависимости от различных направлений внутри среды, поэтому для учета анизотропных коэффициентов в уравнениях Максвелла (1)–(4) коэффициенты магнитной проницаемости $\mu$ и электрической проводимости $\sigma$ запишем в виде тензоров размерности три на три. Далее рассмотрим вычисление элементов матрицы этих тензоров.

Пусть шихтованный материал представляет собой набор чередующихся пластинок шихтовки двух типов с различными коэффициентами проводимости и проницаемости; слои разделены слоями лака, ось шихтовки направлена вдоль оси $Oz$. Обозначим магнитную проницаемость, электрическую проводимость, а также относительные коэффициенты заполнения объема материала к общему объему каждого из материалов следующим образом: $\mu_1$, $\sigma_1$, $\omega_1$ и $\mu_2$, $\sigma_2$, $\omega_2$.

Тогда тензоры усредненных коэффициентов магнитной проницаемости $\mu$ и удельной проводимости $\sigma$ примут следующий вид:

$$\mu^* = \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{pmatrix}; \ \sigma^* = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix}; \qquad (5)$$

при этом $\mu_x = \mu_y$; $\sigma_x = \sigma_y$; $\sigma_z = 0$ ввиду того, что материалы разделяются вдоль оси $Oz$.

Для начала получим формулу зависимости $\mu_z = \mu_z(\mu_1, \omega_1; \mu_2, \omega_2)$, основываясь на том, что слои распределены по оси $Oz$, а вектор магнитной индукции $\mathbf{B}$ имеет непрерывную нормальную составляющую. Усредняя нормальную составляющую вектора напряженности (она сонаправлена с осью $Oz$), получаем равенство

$$\omega_1 \frac{\mathbf{B}_z}{\mu_1\mu_0} + \omega_2 \frac{\mathbf{B}_z}{\mu_2\mu_0} = \frac{\mathbf{B}_z}{\mu_z\mu_0}, \qquad (6)$$

откуда следует, что

$$\mu_z = \frac{1}{\omega_1 \dfrac{1}{\mu_1} + \omega_2 \dfrac{1}{\mu_2}}. \qquad (7)$$

Теперь перейдем к выводу соотношений для $\mu_x$, $\mu_y$. Оси $Ox$, $Oy$ являются касательными к

границе раздела материалов, а вектор напряженности магнитного поля **H** обладает непрерывной тангенциальной составляющей. Усредняя тангенциальную составляющую вектора магнитной индукции $\mathbf{B}_\tau = \mu_\tau \mu_0 \mathbf{H}_\tau$, получаем равенство

$$\omega_1 \mu_1 \mu_0 \mathbf{H}_\tau + \omega_2 \mu_2 \mu_0 \mathbf{H}_\tau = \mu_\tau \mu_0 \mathbf{H}_\tau, \qquad (8)$$

откуда, учитывая, что оси *Ox*, *Oy* – касательные к границе материалов, находим:

$$\mu_\tau = \mu_x = \mu_y = \omega_1 \mu_1 + \omega_2 \mu_2. \qquad (9)$$

Для вывода анизотропного тензора электрической проводимости будем усреднять непрерывную тангенциальную составляющую тока $\mathbf{J}_\tau = \sigma_\tau \mathbf{E}_\tau$, в результате получим

$$\omega_1 \sigma_1 \mathbf{E}_\tau + \omega_2 \sigma_2 \mathbf{E}_\tau = \sigma_\tau \mathbf{E}_\tau, \qquad (10)$$

откуда следует, что

$$\sigma_\tau = \sigma_x = \sigma_y = \omega_1 \sigma_1 + \omega_2 \sigma_2. \qquad (11)$$

Поскольку в направлении, перпендикулярном к границе раздела материалов, разделенных непроводящим слоем, ток не течет, то $\sigma_z = 0$.

Для случая, когда число разнотипных слоев в шихтовке равно *k*, коэффициенты магнитной проницаемости и электрической проводимости вычисляются по формулам:

$$\mu_z = \frac{1}{\omega_1 \dfrac{1}{\mu_1} + \omega_2 \dfrac{1}{\mu_2} + \ldots + \omega_k \dfrac{1}{\mu_k}}; \qquad (12)$$

$$\mu_\tau = \mu_x = \mu_y = \omega_1 \mu_1 + \omega_2 \mu_2 + \ldots + \omega_k \mu_k; \qquad (13)$$

$$\sigma_\tau = \sigma_x = \sigma_y = \omega_1 \sigma_1 + \omega_2 \sigma_2 + \ldots + \omega_k \sigma_k. \qquad (14)$$

Рассмотренные формулы могут быть легко преобразованы в случае, когда ось шихтовки совпадает с направлением оси *Ox* или *Oy*.

Перейдем к более общему случаю, когда ось шихтовки не только не сонаправлена ни с одной из координатных осей, но и меняет свое направление в зависимости от рассматриваемой точки. В этом случае в каждой точке можно поворачивать систему координат так, чтобы перпендикуляр к плоскости шихтовки совпадал с осью *Oz*.

Обозначим через *P* матрицу поворота, совмещающую вектор, перпендикулярный к плоскости шихтовки в рассматриваемой точке, с осью *Oz*; тогда тензоры магнитной проницаемости и электрической проводимости могут быть вычислены следующим образом:

$$\mu^* = P^T \begin{pmatrix} \mu_x & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z \end{pmatrix} P;$$

$$\sigma^* = P^T \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} P. \qquad (15)$$

Очевидно, что диагональные элементы матриц тензоров магнитной проницаемости и электрической проводимости также могут зависеть от координат рассматриваемой точки.

Рассмотренная технология учета анизотропных коэффициентов была реализована на основе вычислительной схемы с векторным и скалярным потенциалами [1, 2]. Далее приводятся результаты моделирования электромагнитных полей в областях с различным направлением внешнего поля относительно шихтовки слоистого материала.

### Моделирование электромагнитного поля для случая параллельной ориентации внешнего магнитного поля относительно направления шихтовки

Бóльшая часть оборудования, изготавливаемая и применяемая в области ускорительной физики, требует специальной термической обработки элементов и узлов этого оборудования. Магнитные элементы, выполненные по этой технологии, помимо хороших электрических характеристик могут иметь сложную конфигурацию и обладают малыми механическими допусками. В том случае, если нагревание магнитных элементов в печи происходит в результате электромагнитного воздействия (за счет вихревых токов, циркулирующих в проводящих материалах), необходимо решать задачу индукционного нагрева.

Рассмотрим одну из модельных задач индукционного нагрева. На рис. 1 приведен фрагмент моделируемого устройства, предназначенного для «спекания» тонких пластинок электротехнической стали, разделенных слоями лака, в единый шихтованный материал. Нагрев выполняется от стабилизированного источника тока на промышленной частоте (50 Гц).

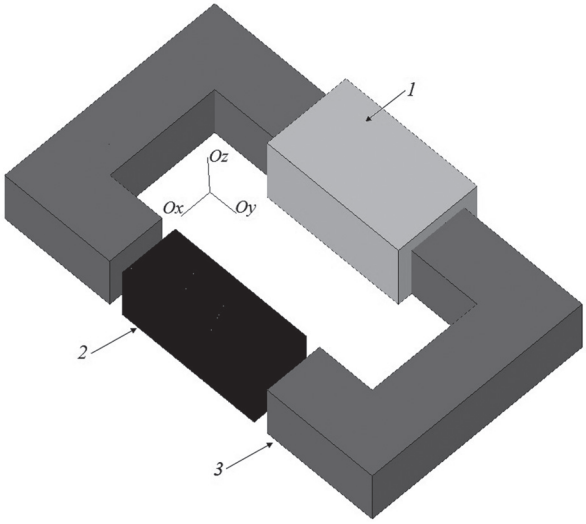



Рис. 1. Трехмерное изображение конструкции моделируемого устройства:
*1* – токовая обмотка; *2* – шихтованный материал; *3* – магнит

Тепловое поле, создаваемое конструкцией, описывается уравнением теплопроводности

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\lambda \operatorname{grad} T\right) = f, \qquad (16)$$

где $T$ – неизвестная температура (°С), $\rho$ – плотность (кг/м$^3$), $c_p$ – теплоемкость (Дж/К), $\lambda$ – теплопроводность (Вт/(м·К)), $f$ – объемная плотность источников тепловыделения (Вт м$^3$).

Плотность источников тепловыделения $f$ определяется через модуль $E$ напряженности электрического поля **E** как $f = \sigma E^2$.

Следовательно, решение задачи индукционного нагрева можно представить в виде двух связанных задач: тепловой и электромагнитной; связь осуществляется как по соответствующим коэффициентам уравнений (в общем случае магнитная проницаемость $\mu$ и электрическая проводимость $\sigma$ зависят не только от индукции поля, но и от температуры), так и по правой части уравнения (16).

Весь процесс решения задачи можно описать следующими этапами:

решение электромагнитной задачи с коэффициентами, зависящими от текущего температурного поля (начальная температура определяется начальными условиями);

решение тепловой задачи с источником, вычисляемым от электромагнитного поля.

Первый и второй этапы выполняются последовательно до тех пор, пока необходимо решение тепловой задачи.

На каждом периоде времени будем вычислять интеграл

$$\frac{1}{t_n - t_0} \int_{t_0}^{t_n} \sigma E^2(t)\, dt$$

в узлах конечноэлементной сетки. Тогда под установлением поля (первый этап) следует понимать выполнение следующего критерия: если на двух соседних периодах сумма квадратов разностей этих значений в узлах сетки не меняется, то поле считается установившимся.

Рассмотрим этап моделирования электромагнитного поля. Для упрощения будем полагать, что коэффициенты магнитной проницаемости и электрической проводимости не зависят ни от магнитного, ни от теплового полей. Пусть внешний магнит выполнен из ферромагнитной стали с коэффициентом относительной магнитной проницаемости $\tilde{\mu} = 2000$. Шихтованный материал состоит из стальных пластинок толщиной 2 мм, доля лака между пластинками составляет 3 % от общего объема, направление шихтовки совпадает с осью $Oy$. Относительная магнитная проницаемость «спекаемых» пластинок $\tilde{\mu} = 2000$, удельная проводимость $\sigma = 3{,}3 \cdot 10^6$ См/м.

Поскольку ось шихтовки совпадает с направлением оси $Oy$, для вычисления коэффициентов магнитной проницаемости $\mu_x$ и $\mu_z$ используется соотношение (6), для $\mu_y$ – соотношение (7); коэффициенты $\sigma_x$ и $\sigma_z$ рассчитываются по формуле (11), $\sigma_y = 0$.

Учитывая, что конструкция симметрична относительно плоскостей $y = 0$ и $z = 0$, перейдем к решению задачи в четверти $y \geq 0$, $z \geq 0$. Основные размеры конструкции указаны на рис. 2.

Результаты решения задачи с анизотропными коэффициентами будем сравнивать с результатами решения задачи, в которой шихтованный материал задан полностью с учетом всех пластинок.

Число пластинок железа составляет 60 штук, межслоевых прослоек воздуха – 59. Число неизвестных для конечноэлементных сеток, на которых проводились расчеты, приведено в таблице. Там же приведены результаты вычисления (для

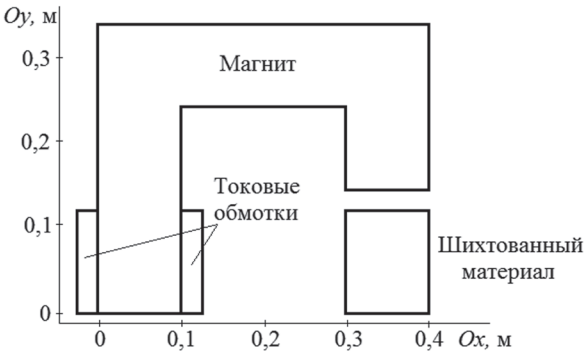



Рис. 2. Расчетная область в сечении $z = 0$

единичного полного тока в обмотках) мощности теплового источника, которая рассчитывается по формуле

$$W = \frac{1}{t_n - t_0} \int_V \int_{t_0}^{t_n} \sigma E^2(t)\, dt dV,$$

где $V$ – область, занимаемая шихтованным материалом.

**Результаты вычисления мощности теплового источника при различных условиях моделирования**

| Условие моделирования | Число степеней свободы в сетке | Мощность, нВт |
|---|---|---|
| Слои шихтовки объекта заданы в сетке | 203787 | 5,881 |
| | 346438 | 5,896 |
| Замена шихтованного объекта анизотропной средой | 44575 | 5,996 |
| | 337984 | 5,952 |

На рис. 3 приведено распределение плотности теплового источника, вычисляемое как

$$\frac{1}{t_n - t_0} \int_{t_0}^{t_n} \sigma E^2(t)\, dt,$$

в сечении $y = 0{,}07$ м изучаемого объекта в случаях, когда задача решена с шихтованным материалом и когда шихтованный материал задан в виде единого материала с анизотропными коэффициентами.

Результаты исследований показывают, что задание единого материала с анизотропными коэффициентами вместо шихтованного материала позволяет сократить вычислительные затраты в 4–5 раз, при этом разница между решениями составляет от 1 до 2 %.

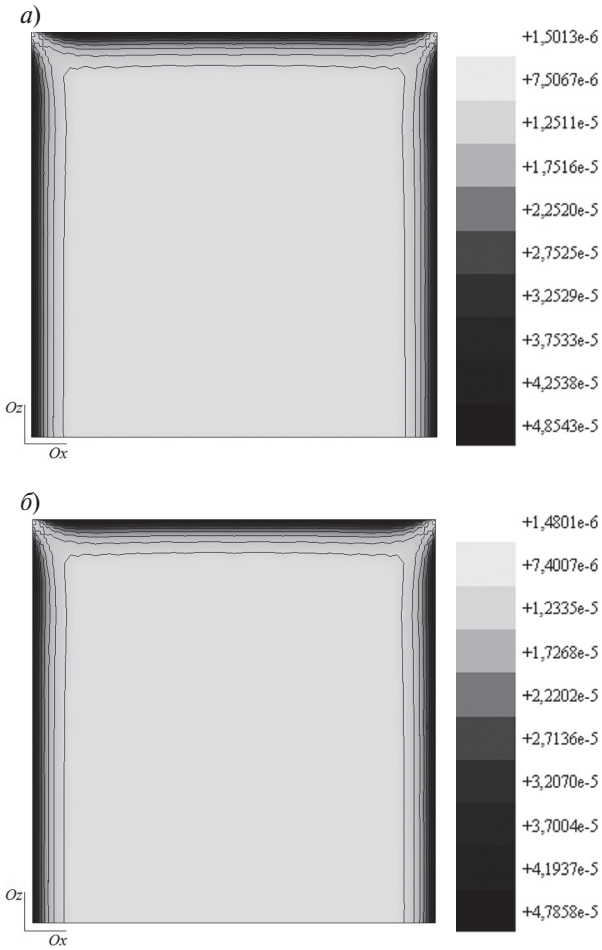



Рис. 3. Распределение плотности теплового источника в сечении $y = 0{,}07$ м изучаемого объекта: решения задачи с шихтованным материалом (*а*) и анизотропными коэффициентами (*б*)

## Моделирование электромагнитного поля для случая перпендикулярной ориентации внешнего магнитного поля относительно направления шихтовки

Проведем моделирование нестационарного электромагнитного поля с использованием технологии задания анизотропных коэффициентов в задаче проектирования системы экстракции пучка заряженных частиц из синхротрона, где применяются многослойные экраны, выполняющие роль перепускных каналов [3]. Сечение магнитного экрана состоит из чередующихся слоев меди и железа (электротехнической стали); внешний радиус экрана равен 9,5 мм, внутренний – 6,0 мм. Толщина кольца меди составляет 0,10 мм, стали – 0,08 мм, толщина

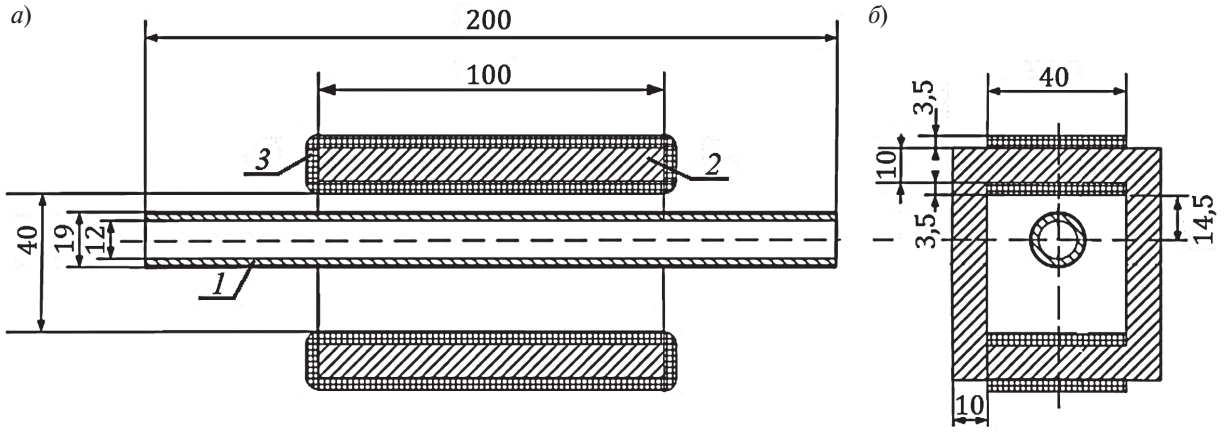



Рис. 4. Схема конструкции магнита в проекциях на плоскости $ZY$ (*а*) и $XY$ (*б*):
*1* – материал экрана; *2* – электротехническая сталь; *3* – токовая обмотка.
Размеры указаны в миллиметрах

воздушного зазора между кольцами – 0,11 мм. Относительная магнитная проницаемость электротехнической стали задана кривой намагничивания $\mu(\mathbf{B})$, коэффициент проводимости меди $\sigma = 57\cdot10^6$ См/м, стали $\sigma = 3{,}3\cdot10^6$ См/м. Длина магнитного экрана (рис. 4) составляет 200 мм; трубка экрана помещена в дипольный магнит и смещена относительно его центра по оси $Oy$ на 5,5 мм. Относительная магнитная проницаемость электротехнической стали, из которой выполнен дипольный магнит, составляет $\tilde{\mu} = 1000$. Ток $I$ (в амперах) в каждой из обмоток изменяется по закону

$$I = 5580\sin\left(\frac{\pi t}{24\cdot10^{-4}}\right).$$

Наибольший интерес представляет возмущение поля магнитным экраном в первые 500 мкс от начала импульса [3].

Для задания магнитного экрана как единого материала с анизотропными свойствами тензоры магнитной проницаемости и электрической проводимости будем вычислять с помощью соотношения (15), записанного в виде

$$\mu^* = P^T \begin{pmatrix} \mu_z & 0 & 0 \\ 0 & \mu_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \mu_r \end{pmatrix} P;$$

$$\sigma^* = P^T \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_r \end{pmatrix} P. \qquad (17)$$

Предположим, что точка, в которой вычисляются $\mu^*$ и $\sigma^*$, расположена в некоторой плоскости $z = \text{const}$, тогда ввиду того, что магнитный экран имеет цилиндрическую форму, удобно ввести локальную систему координат, в которой $R$ – радиус-вектор в точке в указанной плоскости, $\Phi$ – касательный вектор, $Z$ – перпендикуляр к плоскости. Следовательно, в такой системе координат для вычисления $\mu_z$ и $\mu_\varphi$ можно использовать соотношение (13), для вычисления $\mu_r$ – соотношение (12), для $\sigma_z$ и $\sigma_\varphi$ – соотношение (14); элемент $\sigma_r = 0$ ввиду разделения слоев вдоль оси $R$.

В качестве измеряемой характеристики требуется вычислять $\mathbf{B}_y$ в точках, расположенных вдоль оси $Oy$, на расстоянии от 13 до 20 мм от центра экрана. Таким образом, результаты моделирования будем рассматривать, например, в середине этого участка – при $y = 17{,}5$ мм.

Поскольку основная цель моделирования – выяснение возможности задания анизотропных коэффициентов в слоистых средах, достаточно провести двумерное моделирование (например в плоскости $z = 0$) описанной конструкции.

На рис. 5 показан результат решения двумерной задачи, в которой экран был задан как слоистая среда и как материал с анизотропными коэффициентами.

На основании проведенных исследований и полученных результатов можно сделать вывод, что решение задачи с учетом слоистого экрана как материала с анизотропными коэффициентами кардинально отличается от решения задачи, в которой слои магнитного экрана заданы

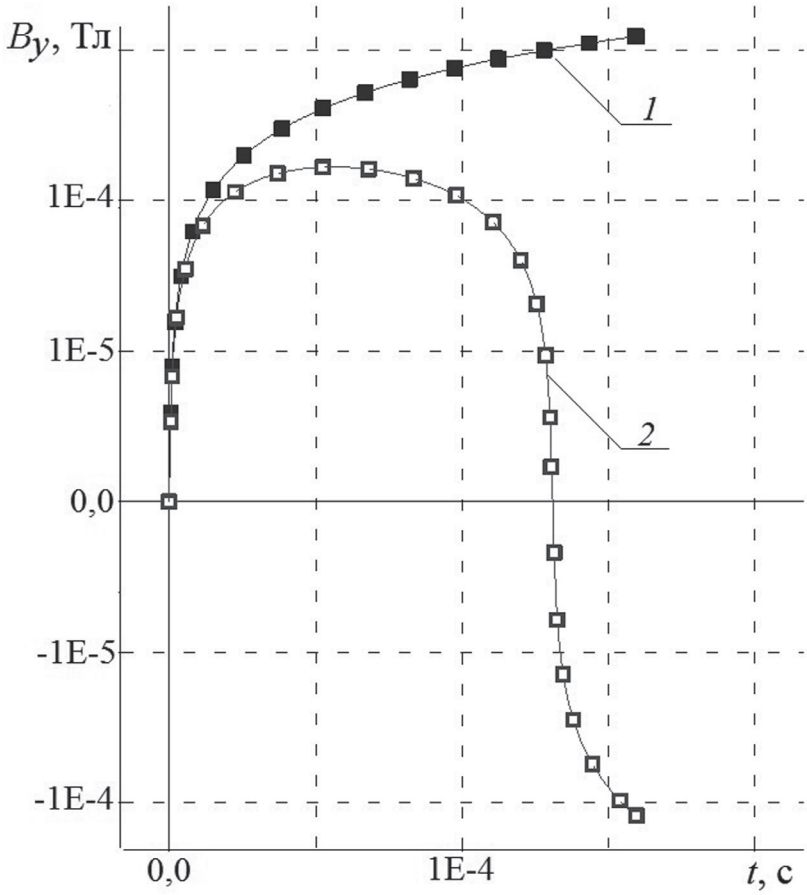



Рис. 5. Графики зависимости $B_y$ от времени в указанной точке измерения:
*1*, *2* – решения с анизотропными коэффициентами и со слоистым экраном

в конечноэлементной сетке. Электромагнитные процессы в этих двух случаях развиваются с течением времени по разным законам, и объясняется это следующим образом. Ввиду того, что распределение вихревых токов в кольцах моделируемой конструкции экрана зависит от их радиуса (с уменьшением радиуса колец будет наблюдаться все меньший по величине вихревой ток), в начальный момент времени основной ток будет сформирован в скин-слое внешнего кольца, и только с течением времени достигнет аналогичного уровня на внутренних кольцах. Очевидно, что не только описанное формулой (17) усреднение коэффициентов σ и μ вдоль радиуса колец, но и любое другое, не учитывающее реальную геометрию устройства и конфигурацию электромагнитного поля в нем, приведет к принципиально неправильному развитию физического процесса.

Итак, в данной статье были рассмотрены две задачи, разделенные по типу формирования скин-эффектов в проводящих элементах слоистых (шихтованных) материалов и его влияния на электромагнитный процесс.

К первому типу относятся задачи, в которых вихревой ток проникает внутрь каждого слоя объекта единообразно и время проникновения практически не зависит от расположения этого слоя в пространстве. Исследование возможности задания единого объекта с анизотропными свойствами в таких задачах показало, что решение может быть получено с гораздо меньшими вычислительными затратами, чем при задании всех слоев шихтовки в конечноэлементной сетке. Точность такого решения в сравнении с решениями на сетках, где заданы все слои, достаточно высока.

Второй тип задач характеризуется тем, что в каждом отдельном слое шихтованного мате-

риала наблюдается различная зависимость формирования вихревого тока от времени и существенное влияние скин-эффектов на электромагнитное поле. Возможность применения технологии усреднения коэффициентов магнитной проницаемости и электрической проводимости в подобных задачах невозможна или крайне ограничена в силу того, что это усреднение должно учитывать не только геометрию моделируемого устройства, но и конфигурацию формируемого электромагнитного поля.

Работа поддержана в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Корсун, М.М.** Об использовании граничных элементов при моделировании электромагнитных процессов с существенным влиянием вихревых токов [Текст] / М.М. Корсун, И.М. Ступаков, М.Э. Рояк // Научный вестник Новосибирского государственного технического университета. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. – № 2 (39). – С. 100–109.

2. **Соловейчик, Ю.Г.** Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач [Текст] / Ю.Г. Соловейчик, М.Э. Рояк, М.Г. Персова. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007. – 869 с.

3. **Bondarenko, A.V.** Beam extraction from a synchrotron through a magnetic shield [Текст] / A.V. Bondarenko, N.A. Vinokurov // Digest reports of the 17 International Synchrotron Radiation Conf., Novosibirsk (Budker INP). – 2008. – P. 4.

УДК 543.427.4, 519.24

*А.П. Мороз, А.С. Серебряков, Я.А. Бердников*

# ЧИСЛЕННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ КОЛИЧЕСТВЕННОГО РЕНТГЕН-ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА ОБРАЗЦОВ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Рентген-флуоресцентный анализ (РФА) является одним из современных методов экспресс-анализа элементного состава образцов. Он основан на сборе и последующем анализе спектра, полученного путем регистрации рассеянных и возбужденных в образце фотонов после облучения последнего источником излучения на основе рентгеновской трубки. Идентификация элементов становится возможной за счет того, что каждому конкретному элементу таблицы Менделеева соответствует набор своих собственных, так называемых характеристических, энергий фотонов, испускаемых в процессе флуоресценции.

Классический метод РФА предполагает наличие однородного, предварительно гомогенизированного образца, в то время как современные потребности анализа значительно шире. Существует ряд задач, в которых анализируемый образец имеет сложную неоднородную структуру, при этом содержание элементов необходимо определить раздельно для различных структурных областей образца. Такие задачи возникают в медицине (анализ включения на основе раствора гадолиния в теле пациента при проведении нейтрон-захватной терапии), на производстве (анализ толщин покрытий), в художественной сфере (послойный анализ состава произведений искусства) и в других областях. Значимость и актуальность проблемы заключается в том, что до сих пор не существует недеструктивного экспресс-метода элементно-

го анализа, способного одновременно получать информацию о положении внутренних границ различных объектов.

Проблемы анализа неоднородных объектов могут быть решены на основе применения метода РФА и соответствующего программного обеспечения. Специализированное программное обеспечение анализатора должно содержать программу обработки спектров и идентификации образцов (качественный анализ) и программу количественного анализа.

Современные тенденции развития метода РФА привели к необходимости создания универсальной программы количественного анализа на базе метода фундаментальных параметров. Очевидно, что предпочтительным решением проблемы определения количественного состава образца является использование бесстандартных методов анализа. В этом случае обычно применяется программа на основе формулы Блохина для записи интенсивностей характеристических линий [1]. Однако при сегодняшнем уровне развития вычислительной техники и технологии вычислительного моделирования программа на основе метода Монте-Карло является лучшим решением задачи, поскольку дает более точные результаты, включающие эффекты всех процессов взаимодействия излучения с веществом, подвозбуждения одних элементов другими и процесса регистрации излучения в детекторах. Но главное преимущество программ моделирования с применением метода Монте-Карло заключается в том, что становится возможным учет любых (достаточно сложных) граничных условий.

### Метод РФ-томографии

Для решения задачи абсолютного измерения толщин и состава слоев неоднородных объектов был предложен метод РФ-томографии [2]. Метод основан на использовании спектрометра с кремниевым полупроводниковым детектором, легированным литием (Si(Li)). Положение объекта измерений изменяется пошагово с высокой точностью вдоль рабочей оси $z$ анализатора, которая нормальна поверхности образца (рис. 1). Размер каждого шага – порядка 10 мкм. В покрытии и в подложке выбираются два различных элемента (I) и (II), каждый из которых присутствует только в одном слое. Интенсивности сигналов $I_{\mathrm{I}}$ и $I_{\mathrm{II}}$, соответствующие этим элементам, равны нулю, когда объект находится далеко от анализатора.

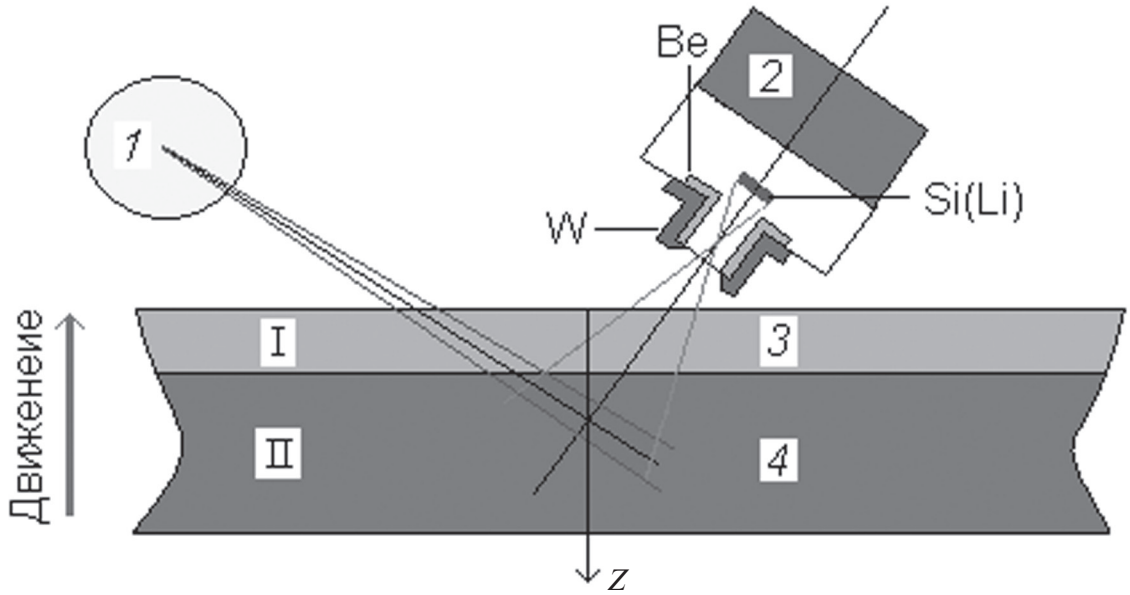



Рис. 1. Схема измерений методом РФ-томографии:
*1* – рентгеновская трубка, *2* – блок детектирования, *3* – покрытие, *4* – подложка; I, II – реперные элементы покрытия и подложки; показано движение тест-объекта относительно анализатора и пересечение конусов телесных углов видимости детектора и пучка рентгеновского излучения

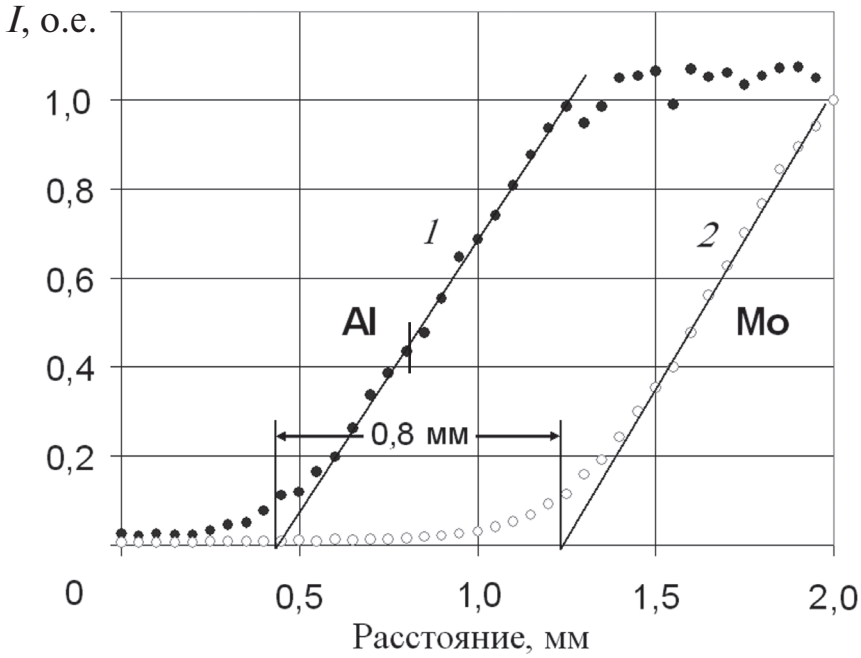



Рис. 2. Зависимость относительной интенсивности характеристических сигналов реперных элементов покрытия (*1*) и подложки (*2*) тест-объекта от расстояния до образца; 0,8 мм – абсолютная толщина покрытия

По мере придвижения объекта к прибору первичный пучок рентгеновского излучения, падающий на объект под углом 30° относительно его поверхности, касается сначала покрытия и возбуждает элемент (1). В процессе дальнейшего перемещения объекта нарастают оба сигнала $I_1$ и $I_2$, что дает возможность построить два графика зависимости интенсивностей от положения объекта. Эти две кривые, нормированные на максимальное значение интенсивности каждая, имеют различный наклон, и можно определить точки пересечения касательных к этим кривым с осью $z$. Абсолютная толщина покрытия равна разности между этими двумя точками (рис. 2). Этот метод также применим к объектам с количеством слоев больше двух.

Для проверки предложенного метода измерений было изготовлено несколько тест-объектов из чистого алюминия 400 и 800 мкм на титановой, медной и молибденовой подложках. Показано, что типичная ошибка метода не хуже 5 %, если время измерения для каждого положения объекта составляет 60 с.

Данный подход позволит решать актуальные искусствоведческие задачи послойного анализа. В этом случае упрощается процесс распознавания и атрибуции различных слоев живописи при экспертизе и реставрации картин.

Кроме того, метод можно применять при определении положения и конфигурации инъекций раствора с гадолинием в задачах нейтрон-захватной терапии [3] и растворов с тяжелыми металлами (платина, золото, висмут) в задачах фотон-захватной терапии [4].

**Программа количественного анализа.** Количественный послойный анализ можно выполнить с применением моделирующей программы на основе метода фундаментальных параметров. Анализ спектров от различных слоев образца позволяет судить об их количественном составе.

Для решения задачи в простейшем случае однородного образца (типичная обратная задача) необходимо сначала создать моделирующую программу, которая бы с достаточной точностью получала реальные спектры стандартных образцов (прямая задача). Такая программа должна содержать информацию о геометрии спектрометрической установки, спектре первичного ионизирующего излуче-

ния, количественном составе образца, а также о наборе фундаментальных параметров по атомам вещества, входящим в составы образца и детектора. Типичная история фотона выглядит следующим образом: рождение в источнике излучения, взаимодействие с атомами образца до момента поглощения с образованием характеристического излучения или момента вылета за пределы образца и далее – проверка на попадание рассеянных и характеристических фотонов в детектор, а также моделирование их взаимодействия в детекторе.

Спектр первичного излучения (рентгеновской трубки) измерен с помощью вольфрамовой диафрагмы с отверстием 100 мкм в геометрии прямого попадания излучения в Si(Li)-детектор толщиной 3,5 мм. После этого спектр исправлен с учетом зависимости эффективности регистрации детектора от энергии.

Существует три основных типа взаимодействия рентгеновского излучения с энергией до 100 кэВ с веществом образца: фотоэффект, некогерентное и когерентное тыпы рассеяния. Полное сечение взаимодействия $\sigma_{tot}$ состоит из суммы трех сечений, соответствующих этим типам взаимодействия:

$$\sigma_{tot} = \sigma_{\tau} + \sigma_{incoh} + \sigma_{coh}. \qquad (1)$$

Значения полных и парциальных сечений могут быть взяты, например, из данных работ [5, 6]. Угловое распределение флуоресцентных фотонов изотропно. Розыгрыш энергии характеристического фотона проводится по данным справочника [7].

Дифференциальное сечение когерентного рассеяния записывается в следующем виде:

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2}\left(1+\cos^2\theta\right)\left[F\left(q,Z\right)^2\right], \qquad (2)$$

где $r_0 = \dfrac{e^2}{mc^2}$ ($e$, $m$ – заряд и масса электрона, $c$ – скорость света); $\theta$ – угол между волновыми векторами первичного и рассеянного фотонов; величина форм-фактора $F(q, Z)$ определяет вероятность того, что импульс $q$ будет передан $Z$ электронам атома без какого-либо поглощения энергии [8].

Угловое распределение $A(\theta, E)$ когерентно-рассеянных фотонов задается следующей функцией:

$$A(\theta, E) = \frac{F^2(Z,\theta,E)\sin\theta}{2(1+\cos^2\theta)}, \qquad (3)$$

где $F(Z, \theta, E)$ – форм-фактор.

Согласно работе [9] формула для форм-фактора имеет вид

$$F(x) = \begin{cases} 1-1,23x^{1,5},\ 0<x<0,1266; \\ 1,0277-0,6562x,\ 0,1266<x<0,5; \\ -1,1144125+1,5803x^{-0,18272}+ \\ +0,0066(x-2,25)^2,\ 0,5<x<4,0; \\ 1,5045987x^{-1,5}-1,776644x^{-2,5}, \\ 4,0<x<\infty, \end{cases} \qquad (4)$$

где $\cos\theta = 1-\dfrac{2x^2}{A^2}$, $A = \dfrac{2E}{mc^2}\cdot\dfrac{137}{Z^{1/3}}$, $Z$ – заряд атома, $E$ – энергия фотона.

Предварительная программа составляет таблицы вероятности рассеяния фотона на определенный угол при заданной энергии для каждого конкретного типа атома. Далее составляются таблицы, в которых с целью ускорения работы основной моделирующей программы углы заменяются соответствующими косинусами.

Энергия фотона при когерентном рассеянии на атоме не меняется.

Дифференциальное сечение некогерентного рассеяния задается формулой Клейна – Нишины:

$$\frac{d\sigma_{incoh}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2}\left(\frac{E'}{E}\right)\left(\frac{E}{E'}+\frac{E'}{E}-\sin^2\theta\right), \qquad (5)$$

где $E$ и $E'$ – энергия фотона до и после рассеяния.

Угловое распределение $A(\theta, E)$ некогерентно рассеянных фотонов записывается как [8]:

$$A(\theta,E) = \frac{\left(\dfrac{1}{1+Tx}+1+Tx-\sin^2\theta\right)}{\left(1+Tx\right)^2}\times \qquad (6)$$
$$\times Z\left[S(Z,\theta,E)\right]\sin\theta,$$

где $x = 1-\cos\theta$; $T$ – энергия фотона в единицах $mc^2$; $S(Z,\theta,E)$ – функция некогерентного рассеяния.

Выражение для вычисления функции $S(Z,\theta,E)$ дано в работе [9]:

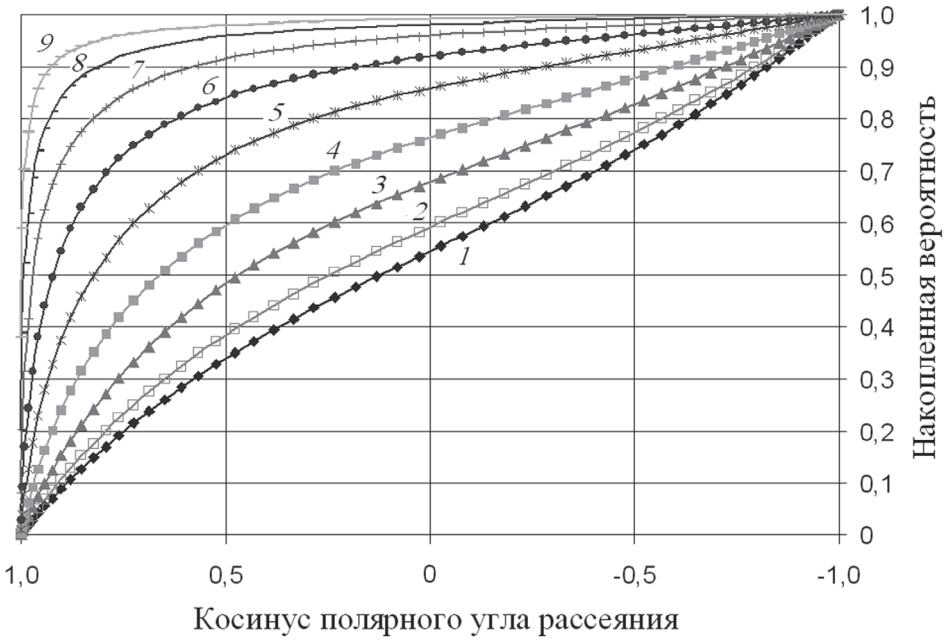



Рис. 3. Набор зависимостей накопленной вероятности когерентного рассеяния от косинуса полярного угла рассеяния на атоме углерода при различных энергиях $E$, кэВ: 1(*1*), 2(*2*), 4(*3*), 8(*4*), 16(*5*), 32(*6*), 64(*7*), 128(*8*), 256(*9*)

$$S(Z,\theta,E)=1-(10e^{AV}-9e^{\left[C^2-(V-C)^2\right]}B)^{-1}, \quad (7)$$

где $V$ определется соотношением

$$\cos\theta=1-\frac{2V^2}{D}\quad\left(D=\frac{137}{3Z^{2/3}}\cdot\frac{2E}{mc^2}\right);$$

коэффициенты $A=1{,}34738$, $B=0{,}37612$, $C=0{,}8$.

На рис. 3 для примера приводится кумулятивный вид распределений когерентного рассеяния по формулам (3), (4) для ряда энергий $E$ фотона в углероде. В моделирующей программе из подобных распределений когерентного и некогерентного рассеяния происходит выборка угла рассеяния с помощью случайного числа и двойной линейной интерполяции – по значению косинуса угла и по двоичному логарифму $E$. Этот прием, использованный нами по аналогии с работой [10], посвященной моделированию переноса электронов, позволяет достичь малой погрешности при розыгрыше углов рассеяния.

Пересчет энергии при некогерентном рассеянии производится по формуле Комптона:

$$E'=\frac{E}{1+\frac{E}{m\,c^2}(1-\cos\theta)}. \quad (8)$$

Розыгрыш типа атома, с которым будет взаимодействовать фотон, из $n$ возможных типов проводится путем сравнения

$$\xi<\frac{\sum_i^k c_i\sigma_i}{\sum_i^n c_i\sigma_i},$$

где $\xi$ – равномерно распределенное случайное число из диапазона (0, 1); $c_i$ – концентрация $i$-го атома; $\sigma_i$ – полное сечение для $i$-го атома при заданной энергии фотона; $k$ = 1, 2, ..., ($n$–1).

При удовлетворении данного условия выбирается рассеяние на атоме типа $k$, в противном случае то же случайное число сравнивается с отношением для ($k$ + 1)-го типа и так до $k$ = $n$ – 1; последний тип атома выбирается автоматически.

Розыгрыш типа взаимодействия на выбранном типе атома производится с помощью сравнения

$$\xi < \frac{\sigma_\tau}{\sigma_{tot}}.$$

Если условие выполняется, то выбирается фотоэффект, если нет – то другое случайное число сравнивается с отношением

$$\frac{\sigma_{coh}}{\sigma_{coh} + \sigma_{incoh}}.$$

Если оно меньше последнего отношения, то выбирается когерентное рассеяние, в противном случае – некогерентное.

Целью настоящей работы было проведение расчетов по моделирующей программе для случая образцов, содержащих тяжелые металлы в легкой углеродной матрице. Из сравнения с экспериментом требуется показать, что программа получает корректный фон рассеянного излучения – за счет легкой матрицы – и правильные интенсивности пиков характеристического излучения.

### Обсуждение результатов

К настоящему моменту создана программа моделирования рентген-флуоресцентного анализатора для однородных образцов. Она моделирует образцы любого элементного состава. Программа получает результаты с погрешностью не хуже 5 % по концентрациям элементов и моделирует $10^9$ первичных фотонов на персональном компьютере около 25 мин. На рис. 4 показано сравнение расчетного и экспериментального спектров образца, содержащего железо и никель в углеродной матрице. Анодное напряжение на рентгеновской трубке с серебряным анодом – 30 кВ. Также приведен расчетный

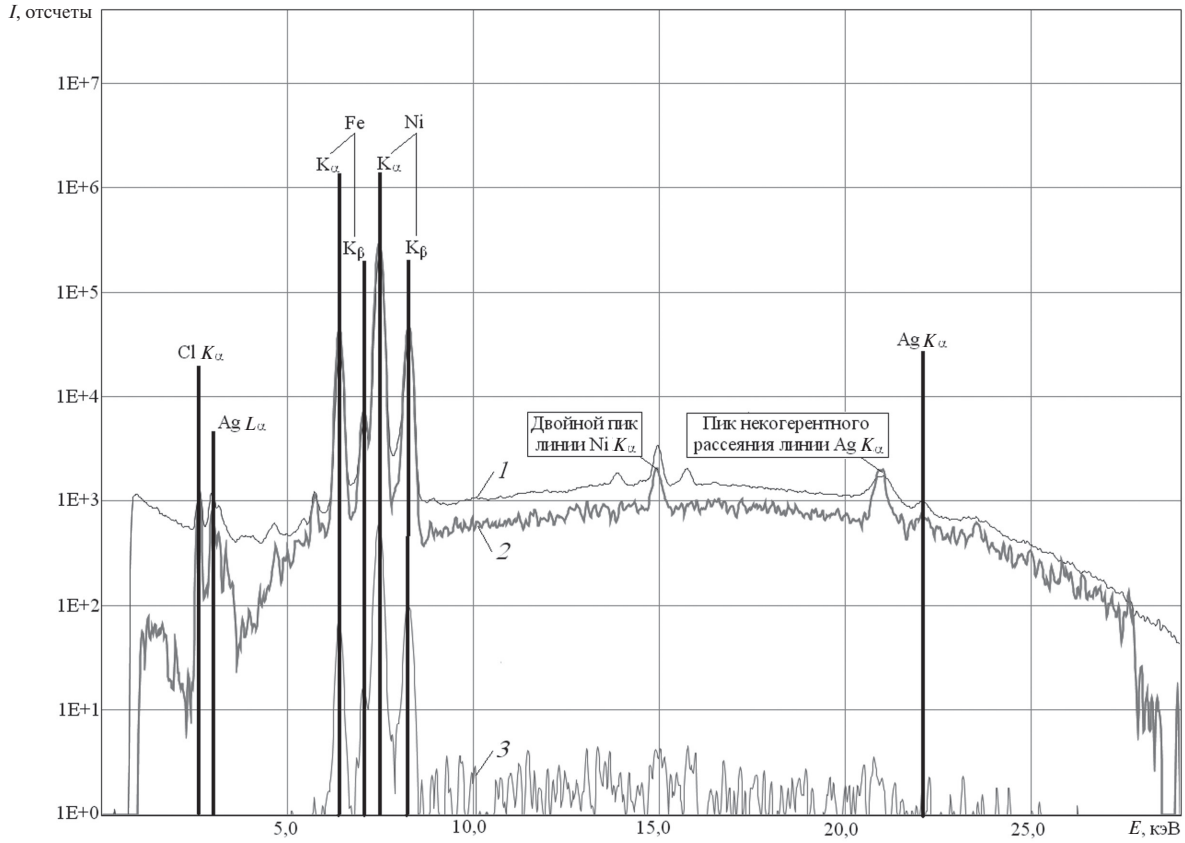



Рис. 4. Сравнение экспериментального (*1*) и расчетного (*2*) спектров образца, содержащего железо (Fe), никель (Ni), хлор (Cl) в углеродной матрице; *3* – расчетный спектр фотонов, отраженных от коллиматора; рентгеновская трубка с серебряным анодом (Ag);
жирными линиями показаны характеристические пики элементов

спектр фотонов, отраженных от внутренней поверхности цилиндрического коллиматора на детекторе (выполнен из бериллия толщиной 1,2 мм и окружен защитой из вольфрама, см. рис. 1). Видно, что статистика отсчетов в нем намного меньше, чем в основном спектре, который сформирован фотонами, попавшими непосредственно в детектор из образца. Таким образом, можно считать, что внутренняя поверхность коллиматора является поглощающей, и не учитывать ее в дальнейших расчетах по программе количественного анализа.

Существенное различие расчетного и экспериментального спектров имеется в области энергий до 4–5 кэВ, где экспериментальный фон выше. Это можно объяснить следующими причинами. Во-первых, часть фотонов, падающих на детектор, отражается в результате некогерентного рассеяния (по формуле (8)), оставляя в чувствительном объеме небольшую энергию из указанного диапазона. В расчетном спектре учтен этот эффект, но он не приводит к совпадению с экспериментом. Во-вторых, вторичные электроны, образовавшиеся в детекторе вблизи его поверхности, могут вынести часть энергии за пределы чувствительного объема, что приведет к регистрации малой доли первичной энергии фотона. Но этот эффект, вероятно, незначителен. Более вероятен эффект выхода фотоэлектронов в вакуум на внутренней поверхности коллиматора, приводящий к резкому увеличению фона в районе до 4–5 кэВ. Другими словами, фотоны с энергией 10–30 кэВ, попадая на поверхность коллиматора под скользящими углами, согласно работе [11] создают фотоэлектроны неглубоко в материале, поэтому они выходят в вакуумный объем коллиматора с относительно большой вероятностью и с энергией до 5 кэВ; далее они могут быть зарегистрированы детектором.

Одной из причин различия экспериментального и расчетного спектров в области низких энергий является нестрогое задание спектра первичного излучения от рентгеновской трубки. Процедура воссоздания истинного спектра по измеренному представляет собой самостоятельную задачу, которая будет решена точно при создании следующей версии программы. Существенное влияние на искажение спектра оказывает процесс неполного энерговыделения в детекторе. Он обусловлен выходом флуоресцентных фотонов материала детектора (пик вылета, который существует для всех энергий непрерывного тормозного спектра трубки) и некогерентно рассеянных фотонов из чувствительного объема детектора. Влияние первого процесса рассмотрено в работах [12, 13] на примере детектора из теллурида кадмия.

Некоторое различие расчетного и экспериментального спектров наблюдается в форме пика некогерентного рассеяния характеристического излучения рентгеновской трубки с серебряным анодом. Оно связано с тем, что в расчете не учитывалось доплеровское уширение этого пика. Однако процедура моделирования доплеровского уширения, описанная, например, в работе [13], в дальнейшем будет использована в моделирующей программе.

Совпадение с экспериментом в информационной части спектра, содержащей пики характеристического излучения железа $K_{\alpha\beta}$ и никеля $K_{\alpha\beta}$, – неплохое с учетом того, что измеренные стандарты на основе чистого графита готовились методом точного взвешивания и, возможно, не были достаточно хорошо гомогенизированы. Аналогичные расчетные и экспериментальные результаты получены для образцов, содержащих не только железо и никель, но также олово и свинец.

В итоге текущая версия программы моделирования находится в стадии доработки. Скорость и точность расчетов по программе будут улучшены за счет применения существенной выборки, то есть моделирования методом Монте-Карло с использованием физических и геометрических статистических весов. Также разработана программа, моделирующая многослойные образцы, и программа, моделирующая геометрию со сферической неоднородностью в гомогенном образце.

В дальнейшем планируется доработка программ для моделирования неоднородных образцов с более сложной конфигурацией границ. Ситуация с многочисленными включениями произвольной формы имеет место при анализе продуктов изнашивания

в авиационных моторных маслах [14]. Если размеры металлических частиц изнашивания приближаются по порядку величины к длинам свободных пробегов регистрируемых рентгеновских фотонов, то самопоглощение в них может существенно изменить соответствующие сигналы, и в этом случае информация о количестве продуктов изнашивания может быть искажена.

Авторы выражают благодарность кандидату химических наук Н.К. Черезову (ФГУП НПО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина») за неоценимую помощь при изготовлении стандартных образцов на основе чистого графита.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Пшеничный, Г.А.** Высокочувствительный рентгенофлуоресцентный анализ на базе полупроводниковых спектрометров [Текст]: Учеб. пос. / Г.А. Пшеничный, А.Н. Жуковский, А.В. Мейер. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1986. – 72 с.

2. **Serebryakov, A.S.** Absolute measurement of the coating thickness with the use of ED XRF spectrometer [Text] / A.S. Serebryakov, V.I. Koudryashov, V.Yu. Toropov [et al.]: Abstracts Art2008, 9th Intern. conf. "Non-destructive investigations and microanalysis for the diagnostics and conservation of cultural and environmental heritage" (Jerusalem Israel, 25-30 May 2008). – Jerusalem Israel, 2008. – P. 148. – Режим доступа: www.ndt.net/article/art2008/papers/096Serebryakov.pdf.

3. **Koudryashov, V.I.** Detection of a heavy metal inclusion in the tissue with the use of ED XRF approach [Text] / V.I. Koudryashov, A.P. Moroz, A.S. Serebryakov [et al.]: Book of abstracts, EXRS 2008 Europ. conf. on X-Ray Spectrometry (Cavtat, Dubrovnic, Croatia, 16-20 June 2008). – Cavtat, Dubrovnic, Croatia. – P. 44.

4. **Липенгольц, А.А.** Определение доз саплиментарных препаратов в биологических тканях [Текст] / А.А. Липенгольц, Ю.А. Федотов, К.Н. Зайцев [и др.]: Матер. IV Всерос. конгресса лучевых диагностов и терапевтов «Радиология – 2010» (Москва, 25 – 27 мая 2010). – М., 2010. – С. 262 – 263.

5. **Маренков, О.С.** Парциальные коэффициенты ослабления *K*-серии характеристического излучения [Текст]: Методические рекомендации / О.С. Маренков. – Вычислительный центр. Владивосток: ДВО АН СССР, 1988. – 180 с.

6. **Маренков, О.С.** Парциальные коэффициенты ослабления *L*-серии характеристического излучения [Текст]: Методические рекомендации / О.С. Маренков. – Вычислительный центр. Владивосток: ДВО АН СССР, 1988. – 138 с.

7. **Блохин, М.А.** Рентгеноспектральный справочник [Текст] / М.А. Блохин, И.Г. Швейцер. – М.: Наука, 1982. – 375 с.

8. **Аккерман, А.Ф.** Вторичное электронное излучение из твердых тел под действием гамма-квантов [Текст] / А.Ф. Аккерман, М.Я. Грудский, В.В. Смирнов. – М.: Энергоатомиздат, 1986. –168 с.

9. **Colbert, H.M.** SANDYL: A computer program for calculating combined photon-electron transport in complex systems [Text]: Sandia Laboratories Report / H.M. Colbert // SLL-74-12, 1974. – 122 p.

10. **Berger**, **M.J.** Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles [Text] / M.J. Berger // Methods in Computational Phys., N-Y – London: Academic Press, 1963. – Vol. 1. – P. 135–215.

11. **Серебряков, А.С.** Выход фото- и конверсионных электронов из мишени, облучаемой источником $^{57}$Co при скользящих углах падения первичного пучка [Текст] / А.С. Серебряков, В.В. Смирнов // Письма в ЖЭТФ. – 1997. – Т. 66. – Вып. 9. – С. 585–587.

12. **Redus, R.** CdTe measurement of X-ray tube spectra: Escape events [Electronic resource] / Official web page Amptek Inc. – Access mode: http://www.amptek.com/pdf/ancdte1.pdf

13. **Redus, R.** Characterization of CdTe detectors for quantitative X-ray spectroscopy [Text] / R. Redus, J. Pantazis, T. Pantazis [et al.] // IEEE Transs. Nucl. Sci. – 2009. – Vol. 56. – No. 4. – P. 2524 – 2532.

14. **Vincze, L.** A general Monte Carlo simulation of energy-dispersive X-ray fluorescence spectrometers – I. Unpolarized radiation [Text] / L. Vincze, K. Janssens, F. Adams // Spectrochim. Acta. – 1993. – Vol. 48B. – No. 4. – P. 553–573.

15. **Кудряшов, В.И.** Оценка содержания продуктов изнашивания в моторных маслах методом ЭД РФА без отбора проб на фильтры [Текст] / В.И. Кудряшов, А.П. Мороз, А.С. Серебряков // Сб. научн. тр. IX Межд. конф. «Трибология и надежность» (С.-Петербург, 8 – 10 окт. 2009). – СПб.: Изд-во Петербургского гос. ун-та путей сообщения. 2009. – С. 157 – 158.

УДК 524, 539.1

*Г.И. Васильев, Е.Е. Холупенко, Д.А. Байко,*
*А.М. Быков, А.М. Красильщиков, Г.Г. Павлов*

# ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧЕРЕНКОВСКИХ ФОТОНОВ В СТВОЛЕ ШИРОКОГО АТМОСФЕРНОГО ЛИВНЯ, ВЫЗВАННОГО ГАММА-КВАНТОМ С ЭНЕРГИЕЙ 5 ГэВ

В своем развитии черенковская гамма-астрономия прошла несколько этапов. Вслед за первыми экспериментами по регистрации вспышек черенковского излучения от первичных гамма-квантов (генерируемых в удаленных космических объектах и достигающих атмосферы Земли), проведенными в 1960-е годы А.Е. Чудаковым и др. [1] в СССР, а также Дж. Джелли и Н. Портером [2] в США, были созданы относительно простые черенковские гамма-телескопы первого поколения, такие как РЧВ-1 (4 рефлектора диаметром 1,5 м, Крымская астрофизическая обсерватория) (см. например работу [3]), первый гамма-телескоп обсерватории «Маунт Хопкинс», США (5 рефлекторов диаметром 1,5 м) (см. например [4]), и телескоп Дублинской группы (два рефлектора 90 см [5]). Эти инструменты фиксировали факт черенковской вспышки и работали по принципу прохождения источника через поле зрения телескопа вследствие вращения Земли. На следующем этапе были разработаны достаточно сложные и эффективные черенковские гамма-телескопы ГТ-48 в Крымской обсерватории и 10-метровый рефлектор Уиппл в обсерватории «Маунт Хопкинс» (сейчас – Обсерватория им. Фреда Лоуренса Уиппла (F. L. Whipple)). Они давали возможность непрерывно отслеживать положение источника гамма-излучения, а также строить карты вспышек черенковского излучения, что позволило существенно сократить время наблюдения, более эффективно учитывать фон, связанный с космическими лучами, и повысить качество получаемых экспериментальных данных. На этих инструментах было сделано немало важных наблюдений гамма-источников, например микроквазара Cyg X-1, блазаров Mk 501, BL Lac, 3C66A [6–8]. Несмотря на появление черенковских гамма-телескопов третьего поколения, инструменты ГТ-48 и Уиппл продолжали активно использоваться до недавнего времени [9, 10].

Телескопы третьего поколения, H.E.S.S. [11], MAGIC [12], VERITAS [13] и CANGAROO III [14], представляют собой сложные стереоскопические системы с большой апертурой (каждая система содержит 2–4 телескопа диаметром 10–17 м). Именно с появлением этих систем связан особенно значительный прогресс в черенковской гамма-астрономии сверхвысоких энергий; за последнее десятилетие открыто около 100 источников в диапазоне нескольких тераэлектрон-вольт.

Одним из путей развития гамма-астрономии на следующем этапе станет создание систем черенковских телескопов с еще большей апертурой (диаметром около 30 м), располагаемых на высотах не менее 4 км над уровнем моря (см. например [15]), а также модификация в этом направлении существующих систем (например вторая стадия системы H.E.S.S.). Подобное улучшение параметров телескопов направлено не только на увеличение чувствительности в традиционном для гамма-астрономии сверхвысоких энергий диапазоне 100 ГэВ – 10 ТэВ, но и на понижение пороговой энергии наблюдения до значения около 5 ГэВ. Этот шаг представляется чрезвычайно важным, поскольку в настоящее время не существует инструментов для уверенного наблюдения источников в диапазоне 5–100 ГэВ. Орбитальные гамма-телескопы не справляются с этой задачей вследствие малой апертуры, а у существующих наземных телескопов не хватает чувствительности для регистрации слишком слабых черенковских вспышек, порождаемых первичными квантами с указанной энергией.

Среди множества проблем, возникающих при планировании черенковских гамма-телескопов нового поколения, важнейшей

является изучение широких атмосферных ливней (ШАЛ) и черенковских вспышек, порождаемых гамма-квантами с низкими энергиями (около 5 ГэВ). Этот вопрос должен быть тщательно изучен для определения параметров разрабатываемых гамма-телескопов (в частности площади собирающей поверхности) и создания методов надежного определения энергии и направления прихода первичных квантов по имеющимся образцам вспышки в разных проекциях. В рамках решения этой задачи в данной статье выявляются особенности статистики пространственного распределения черенковских фотонов в широком атмосферном ливне, вызванном первичным гамма-квантом с энергией 5 ГэВ.

### Метод расчета и анализа статистики черенковских фотонов, рождающихся в широких атмосферных ливнях

Расчет потока черенковских фотонов в диапазоне 300–600 нм, генерируемых в ШАЛ от первичного 5 ГэВ-кванта, проводился с помощью оригинального вычислительного кода, использующего пакет библиотек GEANT4 [16]. Созданный код моделирует развитие ШАЛ и позволяет определить состав ливня на заданной высоте над уровнем моря. В результате численных экспериментов была набрана статистика из 56 000 событий.

Для расчетов были приняты следующие условия: стандартная модель атмосферы [17], вертикальное распространение первичного кванта, магнитное поле 0,3 Гс (выбрано значение, примерно соответствующее значению геомагнитного поля в районе пустыни Атакама в Чили, высота и астроклимат которой благоприятны для наблюдения ШАЛ). Следует отметить, что геомагнитное поле оказывает существенное влияние на развитие ШАЛ, так как ларморовские радиусы частиц ШАЛ, рождаемого гамма-квантом с энергией 5 ГэВ, составляют 1 – 300 км в зависимости от поколения вторичных частиц, что сравнимо с длиной распространения ШАЛ. После набора статистики были рассчитаны следующие характеристики потока черенковских фотонов на высоте 5 км над уровнем моря:

число $F$ черенковских фотонов, падающих на единицу поверхности от одного ШАЛ (т. е. поверхностная плотность черенковских фотонов (ППЧФ));

средняя ППЧФ $\bar{F}$ (м$^{-2}$) как функция расстояния $r$ до оси ливня;

среднеквадратичное отклонение $\sigma_F$ как функция расстояния до оси ливня;

плотность вероятности $\rho$ реализации различных значений величины $F$, параметрически зависящая от расстояния;

показатель $\gamma$ степенной асимптотики распределения $\rho(F)$ при $F >> \bar{F}$ для различных расстояний от оси ливня;

среднеквадратичное отклонение показателя степени $\sigma_\gamma$.

Результатом работы вычислительного кода была совокупность декартовых координат точек падения черенковских фотонов от каждого первичного гамма-кванта. Далее подсчитывалось количество фотонов $N^I(r)$ (индекс $I$ означает номер первичного гамма-кванта), попавших в кольцо, ограниченное радиусами $r-\Delta r/2$ и $r+\Delta r/2$, где $\Delta r$ = 10 м (что соответствует типичным размерам чаш современных наземных гамма-телескопов). ППЧФ вычислялась по формуле

$$F^I(r) = N^I(r)/(2\pi r\Delta r).$$

Средняя ППЧФ и ее среднеквадратичное отклонение определялись как

$$\bar{F}(r) = M^{-1}\sum_{I=1}^{M} F^I(r); \qquad (1)$$

$$\sigma_F(r) = \left(M^{-1}\sum_{I=1}^{M}\left(F^I(r)-\bar{F}(r)\right)^2\right)^{-1/2}, \qquad (2)$$

где $M$ – количество смоделированных событий.

Полученные функции $\bar{F}(r)$ и $\sigma_F(r)$ представлены на рис. 1. Для определения плотности вероятности $\rho$ шкала ППЧФ была разделена на интервалы с шагом $\Delta F = 0{,}2$ м$^{-2}$ и подсчитывалось количество событий $M_j$, при которых значения ППЧФ попадают в интервал от $j\Delta F$ до $(j+1)\Delta F$ ($j$ = 0, 1, 2, ...). Плотность вероятности в точке $F_j = (j+1/2)\Delta F$ вычислялась по формуле $\rho_j = M_j/(M\Delta F)$. Рассчитанная функция распределения $\rho$ для различных расстояний от оси ливня представлена на рис. 2.

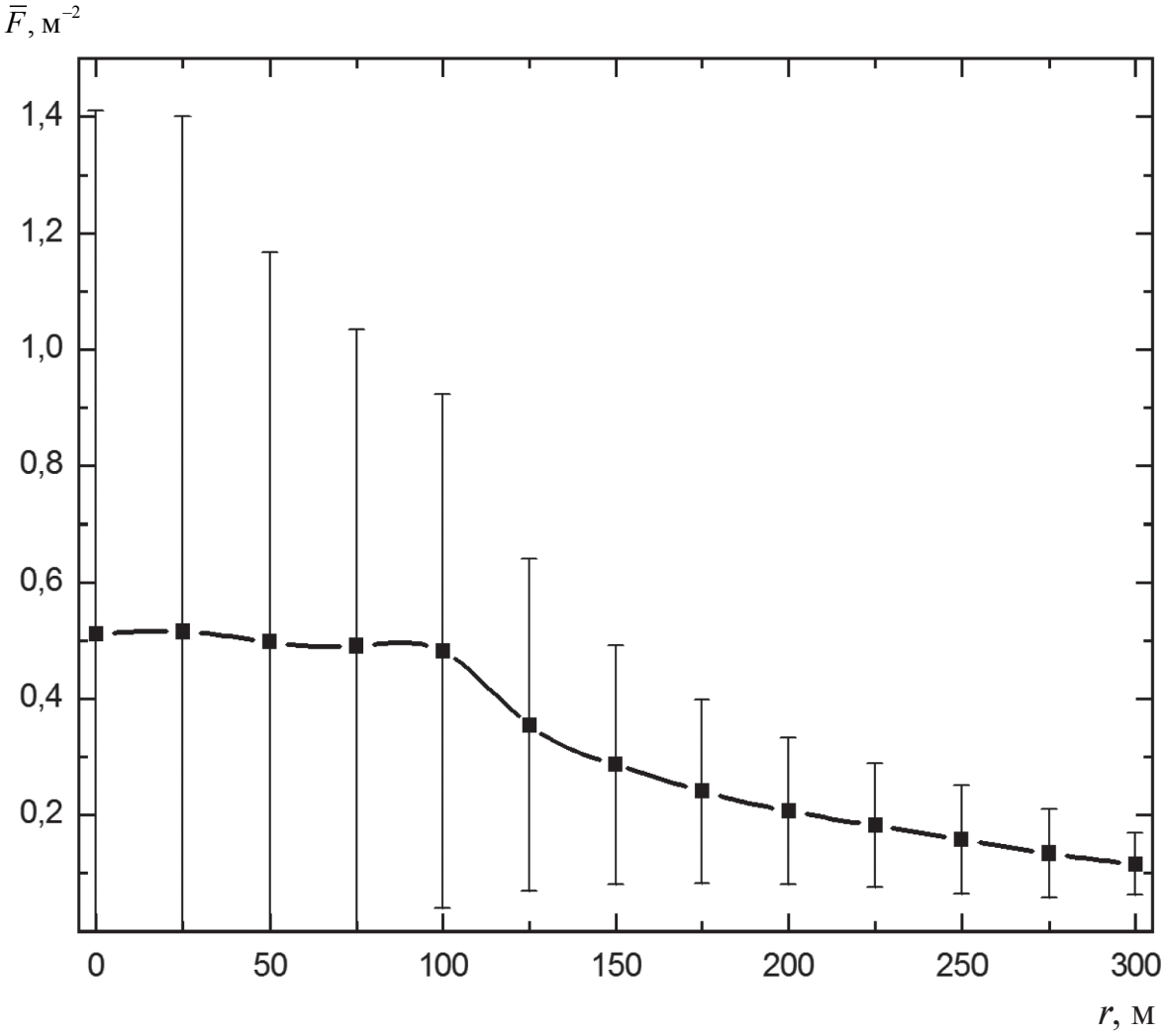



Рис. 1. Зависимость средней поверхностной плотности черенковских фотонов от расстояния до оси ливня на высоте наблюдения 5 км над уровнем моря (рассчитана по 56000 событий для энергии первичного гамма-кванта 5 ГэВ).

Вертикальные отрезки показывают величину среднеквадратичного отклонения ППЧФ от среднего значения

Оценка показателя степени осуществлялась методом линейной регрессии для логарифмов ППЧФ $f_j = \ln F_j$ и плотности вероятности $p_j = \ln \rho_j$ (т. е. методом наименьших квадратов определялись величины $\gamma$ и $\sigma_\gamma$ в предположении линейной связи $p_j = \gamma f_j + b$ при $F \to \infty$) в соответствии со следующими соотношениями [18]:

$$Z = N_\rho \sum_{j=j_0}^{j_1} f_j^2 - \left( \sum_{j=j_0}^{j_1} f_j \right)^2; \qquad (3)$$

$$b = Z^{-1} \left( \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} p_j \right] \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} f_j^2 \right] - \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} p_j f_j \right] \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} f_j \right] \right); \qquad (4)$$

$$\gamma = Z^{-1} \left( N_\rho \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} p_j f_j \right] - \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} p_j \right] \left[ \sum_{j=j_0}^{j_1} f_j \right] \right); \qquad (5)$$

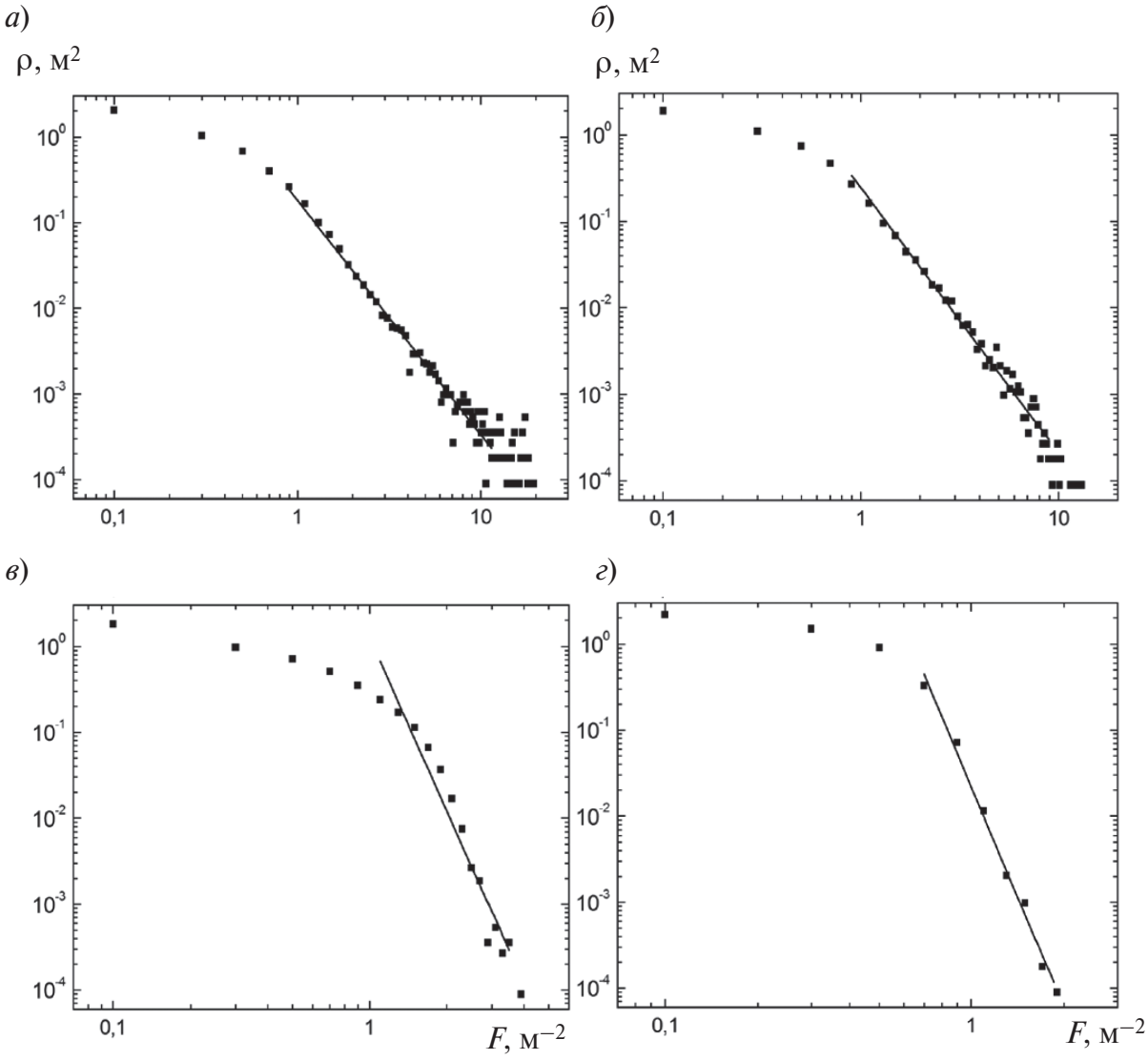



Рис. 2. Расчетная функция плотности вероятности ρ (символы) значений поверхностной плотности черенковских фотонов $F$ для различных расстояний $r$ от оси ливня; $r$, м: 0 (*а*), 50 (*б*), 100 (*в*), 150 (*г*), (см. также таблицу).
Сплошная линия – аппроксимация величины ρ для больших значений $F$

$$\sigma_b = \left( Z^{-1}\left(N_\rho - 2\right)^{-1}\left[\sum_{j=j_0}^{j_1} f_j^2\right] \times \left[\sum_{j=j_0}^{j_1}\left(\left[\gamma f_j + b\right] - p_j\right)^2\right]\right)^{1/2}; \quad (6)$$

$$\sigma_\gamma = \left(\frac{N_\rho}{Z\left(N_\rho - 2\right)}\left[\sum_{j=j_0}^{j_1}\left(\left[\gamma f_j + b\right] - p_j\right)^2\right]\right)^{1/2}, \quad (7)$$

где $N_\rho = \left(j_1 - j_0 + 1\right)$ – количество точек, по которым производилась оценка.

Значения граничных индексов $j_0$ и $j_1$ выбирались на основе следующих условий:

индекс $j_0$ имеет максимальное значение такое, что выполняется неравенство

$$\sum_{j=0}^{j_0} \rho_j \Delta F \le 0{,}8, \quad (8)$$

т. е. показатель степени определялся по области больших значений $F$, интеграл по которой

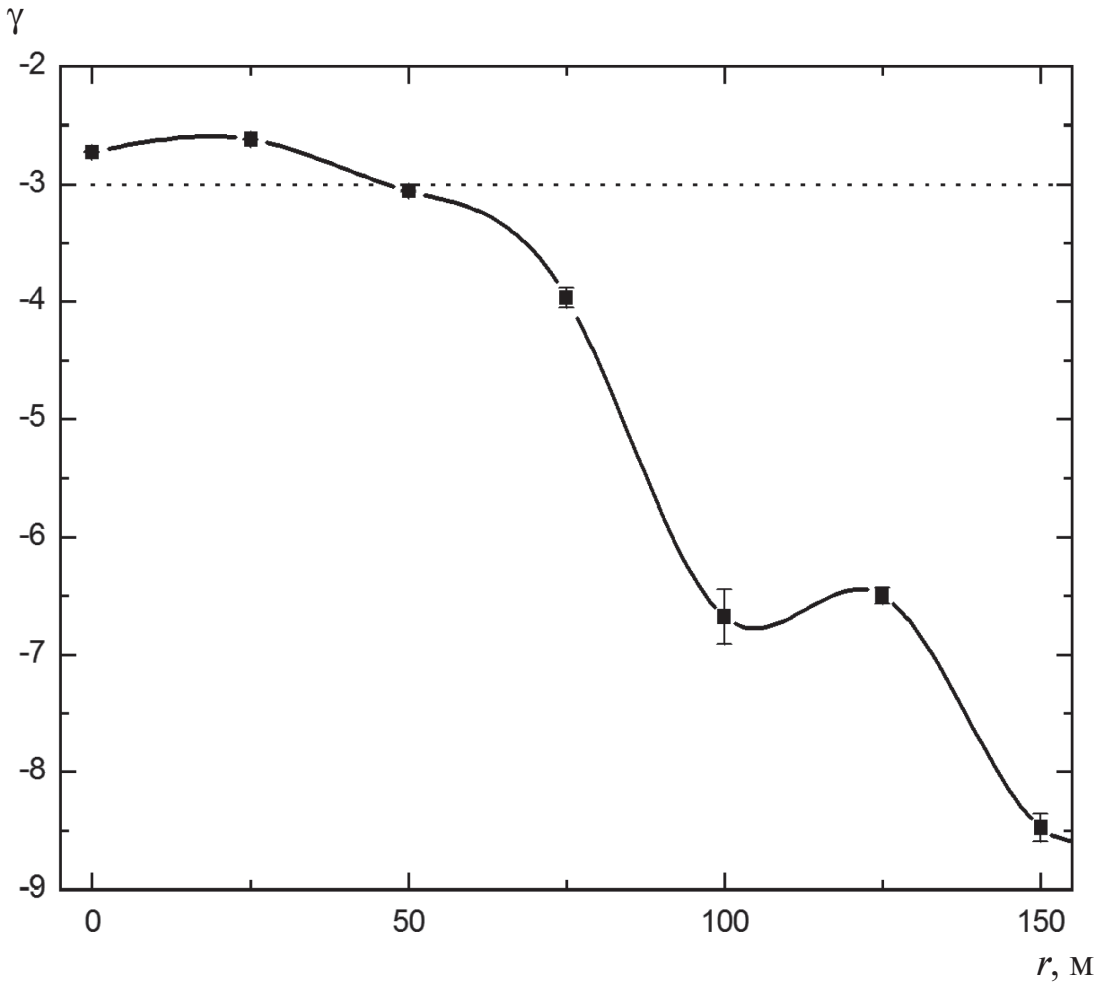



Рис. 3. Зависимость показателя степени γ асимптотик плотности вероятности от расстояния *r* до оси ливня. Вертикальные отрезки показывают величину среднеквадратичного отклонения $\sigma_\gamma$ от среднего значения. Пунктиром показан критический уровень: –3

от плотности вероятности $\rho(F)$ составляет 0,2;

индекс $j_1$ имеет минимальное значение такое, что $\rho_{j_1+1} = 0$, т. е. это последняя точка перед первым из нулей в последовательности $\rho_j$.

Степенные аппроксимации функции распределения $\rho \approx AF^\gamma$ для различных расстояний от оси ливня также представлены на рис. 2. Функциональная зависимость $\gamma(r)$ приведена на рис. 3.

### Результаты и их обсуждение

Одним из наиболее важных результатов настоящей работы, позволяющим оценить возможность и целесообразность создания черенковского гамма-телескопа с порогом регистрации 5 ГэВ, является зависимость средней поверхностной плотности черенковских фотонов от расстояния до оси ливня и среднеквадратичное отклонение этой величины (см. рис. 1 и таблицу). Указанный результат хорошо согласуется с полученным на основе интерполяции данных работы [15] (расчет с помощью кода ALTAI) и экстраполяции результатов другой работы [19] (расчет с помощью кода CORSIKA 6), с учетом некоторых различий в значениях энергии первичного кванта, магнитного поля и сопутствующих условий. В таблице приведены численные значения некоторых характеристик

ППЧФ от расстояния до оси ШАЛ, вызванного первичным гамма-квантом с энергией 5 ГэВ.

**Зависимость основных характеристик поверхностной плотности черенковских фотонов от расстояния *r* до оси ливня**

| $r$, м | $F_{max}$ | $\bar{F}$ | $\sigma_F$ | $\gamma$ | $\sigma_\gamma$ |
|---|---|---|---|---|---|
| | м$^{-2}$ | | | | |
| 0 | 15,5 | 0,51 | 0,90 | –2,73 | 0,01 |
| 50 | 13,1 | 0,50 | 0,67 | –3,06 | 0,01 |
| 100 | 3,9 | 0,48 | 0,44 | –6,68 | 0,23 |
| 150 | 1,9 | 0,29 | 0,21 | –8,47 | 0,12 |
| 200 | – | 0,21 | 0,13 | –8,12 | 0,45 |
| 250 | – | 0,16 | 0,09 | –5,22 | 1,35 |
| 300 | – | 0,12 | 0,05 | –9,15 | 0,86 |

Энергия первичного кванта – 5 ГэВ.

Обозначения: $\bar{F}$, $F_{max}$ – среднее и максимальное значения поверхностной плотности; $\sigma_F$ – ее среднеквадратичное отклонение; $\gamma$, $\sigma_\gamma$ – показатель аппроксимирующей степенной зависимости и его среднеквадратичное отклонение.

Большие значения среднеквадратичного отклонения $\sigma_\gamma$ при $r \geq 100$ м обусловлены двумя факторами: во-первых, систематической ошибкой, появляющейся вследствие использования недостаточно большого числа (0,8) в правой части условия (8), единого для всех *r*. Оказывается, что при некоторых *r* степенная аппроксимация недостаточно точно описывает реальную функцию распределения $\rho(F)$ в области *F*, удовлетворяющей неравенству (8); во-вторых, недостаточно большим количеством точек для анализа и построения функции плотности вероятности в «крыльях» ливня, что в свою очередь связано с недостаточной статистикой. Для более точного определения показателя степени в области $r \geq 100$ м (для достижения значения $|\sigma_\gamma/\gamma|$ порядка $10^{-2}$) требуется анализировать статистику по примерно 300 тысячам событий.

Полученные функции плотности вероятности $\rho(F)$ заданы на положительной полуоси, поскольку ППЧФ по определению неотрицательна. Все функции $\rho(F)$ являются монотонно убывающими (максимумы отсутствуют), т.е. наиболее вероятны малые, близкие к нулю значения поверхностной плотности. Все показанные функции $\rho(F)$ имеют степенные асимптотики, пропорциональные $F^\gamma$, которые становятся круче с ростом расстояния до оси ливня (см. таблицу).

Типичная ширина функции плотности вероятности $\rho(F)$ уменьшается при увеличении расстояния до оси ливня, т. е. вероятность реализации больших ППЧФ (3–10 фотон/м$^2$) существенно падает. В то же время в центральной области ствола ливня ($r < 50$ м) функция $\rho(F)$ существенно шире, чем в его «крыльях», что и приводит к относительно большим значениям среднеквадратичного отклонения (т. е. к менее определенному среднему значению ППЧФ). Более того, в области $r < 50$ м абсолютное значение показателя степени $|\gamma| < 3$ (см. рис. 3), что означает отсутствие среднеквадратичного отклонения в пределе бесконечно большой статистики (так как второй момент функции распределения $\int F^2\rho(F)dF$ расходится). Столь медленное убывание функции распределения $\rho(F)$ объясняет относительно большие значения среднеквадратичного отклонения, рассчитанные по результатам конечной серии испытаний. Перегиб кривой $\gamma(r)$ в области расстояний $r = 75 - 125$ м, вероятно, обусловлен недостаточной для данного интервала расстояний статистикой (см. пояснения выше), о чем свидетельствуют, в частности, большие значения среднеквадратичного отклонения $\sigma_\gamma$ при $r = 100$ м (см. рис. 3).

Расчет функций плотности вероятности $\rho(F)$ для различных расстояний от оси ливня (см. рис. 2 и таблицу) показывает, что поверхностная плотность черенковских фотонов, рождающихся при взаимодействии первичного гамма-кванта с энергией 5 ГэВ с атмосферой, имеет негауссову статистику. Отклонения от распределения Гаусса наиболее сильны в центральной области ливня. Это может приводить к дополнительным сложностям в обработке результатов. Например, понятие среднеквадратичного отклонения уже не столь явно связано с шириной распределения, как в случае Гауссовой статистики, и, соответственно, попадание измеренного значения ППЧФ в интервал $\pm 3\sigma_F$ от среднего значения уже не соответствует уровню достоверности 99,7 %. Возможно, что более подходящими окажутся методы статистического анализа, оперирующие

не средними значениями исследуемых величин, а соответствующими заданным уровням вероятности, например медианными (т. е. отвечающими уровню вероятности 50 %).

Таким образом расчеты показывают, что среднее значение поверхностной плотности черенковских фотонов, рождающихся при взаимодействии первичного гамма-кванта энергии 5 ГэВ с атмосферой, составляет 0,2–0,5 фотон/м$^2$ в пределах 200 м от оси ливня. Это позволяет рассчитывать на то, что оптический телескоп с эффективным диаметром зеркала 30 м, установленный на высоте 5 км, сможет регистрировать такие события.

Однако при определении энергии первичного гамма-кванта могут возникнуть существенные сложности, связанные с большими флуктуациями поверхностной плотности черенковских фотонов, генерируемых в ливне. Так, неопределенность ППЧФ, характеризуемая среднеквадратичным отклонением от среднего, составляет примерно 0,1–0,9 фотон/м$^2$ (в пределах 200 м от оси ливня), т. е. 50–180 % в зависимости от расстояния до оси ливня. В области ствола ливня, где ППЧФ имеет наибольшие значения (0,5 фотон/м$^2$), неопределенность превышает 100 % от среднего значения и уменьшается до 50–70 % к «крыльям» ливня, где ППЧФ относительно мала (0,2–0,3 фотон/м$^2$). Это заставляет говорить о необходимости дополнительных методов определения энергии первичного кванта, более эффективных по сравнению с калориметрией. К таким методам относится анализ морфологии пятна-образа широкого атмосферного ливня в фокальной плоскости телескопа, а также использование стереоскопической системы телескопов. Возможны и иные вспомогательные методы наблюдения, например регистрация радиоизлучения широких атмосферных ливней.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (договор 11.G34.31.0001) и РФФИ (гранты 11-02-12082-ОФИ-М-2011 и 11-02-00253-а).

Научные сотрудники Е.Е. Холупенко и Д.А. Байко благодарят за поддержку научную школу НШ-3769.2010.2. Часть расчетов выполнена в Межведомственном суперкомьютерном центре РАН, а также в его филиале в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Чудаков, А.Е.** Поиск фотонов высокой энергии от локальных источников космического радиоизлучения [Текст] / А.Е. Чудаков, В.Л. Дадыкин, В.И. Зацепин, Н.М. Нестерова // Труды ФИАН. – 1963.– Т. 26.– С. 118 – 141.

2. **Jelley, J.V.** Cherenkov radiation from the night sky, and its fpplication to γ-ray astronomy [Текст] / J.V. Jelley, N.A. Porter // Quarterly Journal of the Royal Astronomical Society. – 1963. – Vol. 4.– P. 275 – 293.

3. **Stepanian, A.A.** A search for discrete gamma-ray sources of energy greater than $2\cdot10^{12}$ eV [Текст] / A.A. Stepanian, B.M. Vladimirsky, Yu.I. Neshpor, V.P. Fomin // Astrophysics and Space Science. – 1975.– Vol. 38.– P. 267–282.

4. **Fazio, G.G.** A search for discrete sources of cosmic gamma-rays of energies near $2\cdot10^{12}$ eV [Текст] / G.G. Fazio, H.F. Helmken, G.H. Rieke, T.C. Weekes // Astrophysical Journal. – 1968.– Vol. 154.– P. L83 – L89.

5. **Fegan, D.J.** A fast optical Cerenkov system for directional studies of possible gamma-ray sources [Текст] / D.J. Fegan, B. McBreen, E.P. O'Mongain, [et al.] // Canadian Journal of Physics. – 1968.– Vol. 46.– P. S433 – S436.

6. **Андреева, Н.А.** Результаты наблюдений потока гамма-квантов от галактики Mk 501 [Текст] / Н.А. Андреева, Ю.Л. Зыскин, О.Р. Калекин [и др.] // Письма в Астрономический журнал. – 2000.– Т. 26. № 4. – С. 243 – 248.

7. **Нешпор, Ю.И.** Результаты наблюдений Cyg γ-2, BL Lac, 3C 66A, Mk 501 и Крабовидной туманности на гамма-телескопе ГТ-48 в 2006 году [Текст] / Ю.И. Нешпор, А.В. Жовтан, Н.А. Жоголев [и др.] // Изв. КрАО. – 2008.– Т. 104.– С. 191 – 196.

8. **Catanese, M.** Multiwavelength observations of a flare from Markarian 501 [Текст] / M. Catanese, S.M. Bradbury, A.C. Breslin [et al.] // Astrophysical Journal. – 1997.– Vol. 487.– P. L143 – L146.

9. **Pichel, A.** Highlights from the Whipple 10-m VHE Blazar Monitoring Program [Текст] / A. Pichel // Proc. of the 31st ICRC – 2009. – arXiv:0908.0010 – P. 1 – 4.

10. **Fidelis, V.V.** The X-ray variability of Mrk 421 [Текст] / V.V. Fidelis, D.A. Iakubovskyi // Astronomy Reports. – 2008.– Vol. 52, No. R7– P. 526 – 538.

11. **Aharonian, F.A.** H.E.S.S. – the high energy stereoscopic system [Текст] / F.A. Aharonian, H.E.S.S. Collaboration // Bulletin of the American Astronomical Society. – 2000.– Vol. 32– P. 1261.

12. **Mirzoyan, R.** 17m diameter MAGIC telescope project for sub-100 GeV gamma ray astronomy [Текст] /

R. Mirzoyan // Nuclear Physics. B. Proc. Suppl. – 1997.– Vol. 54.– P. 350 – 361.

13. **Weekes, T.C.** VERITAS: Very Energetic Radiation Imaging Telescope Array System [Текст] / T.C. Weekes, C. Akerlof, S. Biller [et al.] // Proc. of the 25th Internat. Cosmic Ray Conf.; eds. M.S. Potgieter, C. Raubenheimer, and D. J. van der Walt. – 1997.– Vol. 5.– P. 173 – 176.

14. **Mori, M.** The CANGAROO-III project [Текст] / M. Mori, S.A. Dazeley, P.G. Edwards [et al.] // GeV-TeV Gamma Ray Astrophysics Workshop, AIP Conf. Proc. – 2000.– Vol. 515.– P. 485 – 491.

15. **Aharonian, F.A.** 5@5 – a 5 GeV energy threshold array of imaging atmospheric Cherenkov telescopes at 5 km altitude [Текст] / F.A. Aharonian, A.K. Konopelko, H.J. Volk, H. Quintana // Astroparticle Physics – 2001.– Vol. 15. – Iss. 4.– P. 335 – 356.

16. **Allison, J.** Geant4 developments and applications [Текст] / J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis [et al.] // Nuclear Science. – 2006.– Vol. 53.– P. 270 – 278; http://geant4.cern.ch

17. ICAO. Manual of the ICAO Standard Atmosphere (extended to 80 kilometres (262 500 feet)) [Текст]: Doc 7488-CD. Third Edition – 1993. ISBN 92-9194-004-6.

18. **Ивченко, Г.И.** Математическая статистика [Текст]: Учеб. пос. для втузов / Г.И. Ивченко, Ю.И. Медведев. – М.: Высш. шк., 1984.

19. **Mishev, A.L.** Gamma rays studies based on atmospheric Cherenkov technique at high mountain altitude [Текст] / A.L. Mishev, S. Cht. Mavrodiev, J.N. Stamenov // Internat. Journal of Modern Physics. A. – 2005.– Vol. 20. –Iss. 29.– P. 7016 – 7019.

УДК 534.6: 534.232

*А.В. Шацкий, Л.А. Шацкая*

# ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ИМПЕДАНС ПЬЕЗОПЛАСТИНЫ, НАГРУЖЕННОЙ НА СРЕДУ ЧЕРЕЗ КОНТАКТНЫЙ СЛОЙ ЖИДКОСТИ

В различных акустических измерительных приборах в качестве устройств, излучающих и принимающих звуковой сигнал, широко применяются пьезопреобразователи. Для каждого акустического прибора, использующего такие преобразователи, существует своя оптимальная схема крепления и формы пьезопластины, позволяющая в той или иной степени уменьшить потери энергии на стыках пьезопластин со средой, в которую излучается или принимается сигнал (а соответственно, и повысить уровень акустического сигнала). Так например, в импульсном методе измерения коэффициента поглощения ультразвука в жидкости пьезопреобразователи присоединяются к линиям задержки сигнала через контактный слой жидкости. Экспериментально установлено [1], что такая схема установки позволяет значительно уменьшить потери излучаемой энергии в жидкость. В данной работе проводится теоретическое исследование данного вопроса.

### Электрический импеданс пьезопластины, нагруженной на среду

Рассмотрим цилиндрическую пьезопластину, одна сторона которой граничит с вакуумом, т. е. $Z_1 = 0$, а другая – с произвольной изотропной средой, $Z_2 = \rho_2 c_2$, где $Z_1, Z_2$ – акустические импедансы; $\rho_2$, $c_2$ – плотность и скорость ультразвука в среде.

Для этого случая в работе [2] получено выражение для электрического импеданса пьезопластины следующего вида:

$$Z = \frac{1}{i\omega C_0}\left\{1 + \frac{k_t^2}{k_1 b}\frac{i\left[\gamma_1 \sin(k_1 b) - 2(1-\cos(k_1 b))\right]}{\sin(k_1 b) - i\gamma_1 \cos(k_1 b)}\right\}, \quad (1)$$

где $\omega$ – циклическая частота колебаний, $C_0$ – электроемкость пьезопластины, $k_t$ – коэффициент электромеханической связи, $b$ – толщина пьезопластины, $k_1$ – волновое число пьезопластины, $\gamma_1 = \rho_2 c_2 / \rho_1 c_1$ – отношение акустических импедансов среды и пьезопластины:

Подставляя в выражение (1) условие резонанса пьезопластины $k_1 b = \pi \cdot n$, где $n = 1, 3, 5, ...$, можно получить выражение для добротности односторонне нагруженной пьезопластины:

$$Q = \pi n / 2\gamma_1 . \quad (2)$$

Легко видеть, что если пьезопластина нагружена на среду с обеих сторон, то есть $Z_1 = Z_2 = \rho_2 c_2$, то добротность уменьшится вдвое:

$$Q = \pi n / 4\gamma_1 . \quad (3)$$

Полученный результат показывает, что чем меньше импеданс среды $Z_2$, тем выше добротность пьезопластины. Добротность также пропорциональна номеру гармоники $n$ возбуждаемого резонансного колебания. Электрический импеданс преобразователя с учетом выражения (2) будет иметь вид:

$$Z = (1/\omega C_0) \cdot (1 + 4ik_t^2 / \pi n \gamma_1) . \quad (4)$$

### Электрический импеданс пьезопластины, нагруженной на среду через контактный слой

Рассмотрим пьезопластину, излучающую в твердую среду через тонкий контактный слой

жидкости, и покажем, что в этом случае добротность пьезопластины $Q$, по сравнению с ее добротностью при излучении в жидкость, на порядок больше, а следовательно, можно увеличить на порядок эффективность электроакустического преобразования $\eta$.

Пусть пьезопластина толщиной $b$ нагружена через контактный слой толщиной $h$ на среду, а отношения удельных импедансов контактного слоя к удельным импедансам пьезопластины и материала задержки равны, соответственно $\gamma_1 = \rho_2 c_2 / \rho_1 c_1$ и $\gamma_2 = \rho_2 c_2 / \rho_3 c_3$, где $\rho_1$, $\rho_2$, $\rho_3$ и $c_1$, $c_2$, $c_3$ есть плотности вещества и скорости продольных волн для пьезопластины, контактного слоя и линии задержки соответственно.

Вторая сторона пьезопластины пусть будет не нагружена, т. е. $Z_1 = 0$. Согласно выражению (1), электрический импеданс пьезопластины запишется в виде

$$Z = \frac{1}{i\omega C_0} \times \left[1 + \frac{k_t^2}{k_1 b} \frac{i(Z_2/Z_C)\sin(k_1 b) - 2(1-\cos(k_1 b))}{\sin(k_1 b) - i(Z_2/Z_C)\cos(k_1 b)}\right], \quad (5)$$

где $k_1$ – волновое число для пьезопластины.

Величина $Z_2/Z_C$ есть отношение импеданса контактного слоя линии задержки к импедансу пьезопластины и согласно [3] может быть определена по формуле

$$\frac{Z_2}{Z_C} = \frac{\gamma_1 \cdot \left[\cos(k_2 h) + i\gamma_2 \sin(k_2 h)\right]}{\gamma_2 \cos(k_2 h) + i \sin(k_2 h)}, \quad (6)$$

где $k_2$ – волновое число контактного слоя.

Подставляя выражение (6) в (5), получим:

$$Z = (1/i\omega C_0)\left[1 + (k_t^2/k_1 b)P\right], \quad (7)$$

где $P = \dfrac{\gamma_1 G_1 + 2GG_2 + i\gamma_1 G_1 G_2 - 2iG}{[G_1 G_2 - \gamma_1] - i\gamma_2 [G_1 + \gamma_1 G_2]}$; $G = 1 - \cos^{-1}(k_1 b)$;

$G_1 = \mathrm{tg}(k_1 b)$; $G_2 = \mathrm{tg}(k_2 h)$.

Если положить $\gamma_1 = 1$ и $h = 0$, то выражение (7) переходит в выражение для импеданса пьезопластины, нагруженной на среду без контактного слоя. При настройке пьезопластины на резонансную частоту максимум амплитуды излучаемого сигнала будет наблюдаться при следующем резонансном условии:

$$\mathrm{tg}(k_1 b) = \gamma_1 \mathrm{ctg}(k_2 h),$$

т. е. при равенстве нулю действительной части знаменателя в выражении (7).

Полагая $b = \lambda(n+y)/2$, с учетом равенства $k = 2\pi/\lambda$ представим резонансное условие в виде

$$\mathrm{tg}[\pi(n+y)] = \mathrm{tg}(\pi y) = \gamma_1 \mathrm{ctg}(k_2 h), \quad (8)$$

где $n = 1, 2, 3, \ldots$ .

Из последнего равенства получим выражение

$$y = \pi^{-1} \mathrm{arctg}\left[\gamma_1 \mathrm{ctg}(k_2 h)\right].$$

Введем фундаментальную частоту колебаний по толщине $f_0 = c_1/2b$ и запишем равенство $b = \lambda(n+y)/2$ в виде $f_n = f_0(n+y)$, или окончательно

$$f_n = f_0 \left\{n + \pi^{-1} \mathrm{arctg}\left[\gamma_1 \cdot \mathrm{ctg}(k_2 h)\right]\right\}, \quad (9)$$

где $f_n$ – резонансная частота $n$-й гармоники.

Для пьезопластины, ненагруженной или нагруженной на среду без контактного слоя, $f_n / n$ = const. Выражение (9) показывает, что резонансные частоты $f_n$ не являются кратными, как обычно принято считать, т. е. наличие контактного слоя приводит к нарушению кратности. При малых $n$ величина $y > 0$, и частоты $f_n$ значительно завышены по сравнению с величиной $f_0 n$. Экспериментально определенные величины $f_n / n$ в зависимости от номера гармоники $n$ показаны в таблице.

**Зависимость экспериментально найденных величин от номера гармоники**

| $n$ | $f_n / n$, МГц | $\Delta f_n$, МГц | $Q_n$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 7,66 | 0,153 | 50 |
| 3 | 7,23 | 0,217 | 100 |
| 5 | 7,18 | 0,449 | 80 |
| 7 | 7,20 | 0,475 | 106 |
| 9 | 7,20 | 0,432 | 150 |
| 11 | 7,18 | 0,395 | 200 |

Для нагруженной на среду пьезопластины величина $f_n / n$ = const, но наличие контактного слоя нарушает это равенство. Обработка экспериментальных результатов по формуле (9) дала следующие значения: $f_0 = 7{,}185$ МГц; $f_1/f_0 = 1{,}061$; $f_3/f_0 = 3{,}02$, что согласуется с расчетами по теоретической формуле. Два последних значения позволили рассчитать по формуле (9) среднюю величину контактного

слоя: $h$ = 13 мкм ($c_2 = 1{,}45 \cdot 10^5$ см/с; $\gamma_1 = 0{,}1$); она вполне разумна, и ее можно использовать для различных оценок.

Любопытно, что при очень малой толщине слоя, когда $k_2 h \to 0$, в пределе получим $f_n = f_0(n + 0{,}5)$, однако такие резонансные пики имеют очень низкую добротность и их трудно обнаружить.

Подставляя в выражение (7) резонансное условие, получим величину резонансного значения импеданса в следующем виде:

$$Z_r = \frac{1}{i\omega C_0} \cdot \left[ 1 + \frac{k_t^{\,2}}{k_1 b} \cdot \left( d_1/\gamma_1 - 2i\, d_2/\gamma_1\gamma_2 \right) \right], \quad (10)$$

где $d_1 = d \sin(2k_2 h)$, $d_2 = d \sin^2(k_2 h) + \gamma_1^{\,2} \cos^2(k_2 h)$, $d = 1 - \cos(k_1 b)$.

Выражение для добротности пьезопластины, нагруженной через слой жидкости, примет вид

$$Q = (\pi n / 2\gamma_1 \gamma_2) \sin^2(k_2 h). \quad (11)$$

Для $\gamma_1 = \gamma_2 = 0{,}1$ получим $Q = 157 n \sin^2(k_2 h)$, и для $n = 27$ максимальное значение $Q = 3300$. Величина $Q$ зависит от $k_2 h$, и реальные значения $Q$ для резонансных частот пьезопластины, как правило, бывают на порядок меньше. Обычно каждый новый контактный слой имеет существенно различную толщину. Экспериментальные расчеты добротности пьезопластины $Q_n$, измеренные по ширине резонансного пика $\Delta f_n$, полученные для конкретного контактного слоя, приведены в таблице.

Полученные экспериментальные данные подтверждают теоретические результаты, разумно с ними согласуются и показывают, что реальная добротность пьезопластины на порядок выше, чем таковая для пьезопластины, излучающей непосредственно в жидкость. Если сравнить выражения (11) и (2), то видно, что соединение пьезопластины через жидкий слой с твердой средой, по сравнению с непосредственным контактом пьезопластины на жидкую среду, позволяет получить на порядок более высокие значения добротности колебаний.

Итак, в работе показано, что при излучении пьезопреобразователя через тонкий контактный слой жидкости спектр собственных частот становится неэквидистантным. Также, согласно формуле (11) и экспериментальным данным, акустический преобразователь имеет добротность существенно большую, чем нагруженный на твердую среду без жидкого слоя. Использование таких пьезопреобразователей позволяет получить ультразвуковой сигнал большей амплитуды и более высокой спектральной чистоты, а это ведет к уменьшению влияния паразитных шумов и повышению точности измерений.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кононенко, В.С.** Физические основы прецизионной ультразвуковой спектроскопии и ее применение для исследования релаксационных процессов в слабопоглощающих жидких средах [Текст]: дисс. докт. физ-мат. наук: 01.04.06: защищ. 17.10.1994: утв. 8.06.1995 / Кононенко Вадим Степанович. – Ташкент: АН УзССР, 1994. – 300 с. – Библиогр.: с. 129.

2. **Шацкий, А.В.** Электрический импеданс пьезопластины, нагруженной на среду [Текст] / А.В. Шацкий, В.С. Кононенко // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. Самара. – 2005.– Т. 8. – № 3. – С. 39 – 43.

3. **Кайно, Г**. Акустические волны [Текст] / Г. Кайно // М.: Мир, 1990. – 652 с.

УДК 539.3+53:51

*А.Н. Златин*

# НОВЫЕ КЛЮЧЕВЫЕ ПАРНЫЕ СУММАТОРНЫЕ УРАВНЕНИЯ, СВЯЗАННЫЕ С ЗАДАЧЕЙ ОСЕСИММЕТРИЧНОГО КРУЧЕНИЯ ПРОСТРАНСТВА СО СФЕРИЧЕСКОЙ ТРЕЩИНОЙ

Решению парных сумматорных уравнений по присоединенным функциям Лежандра посвящен целый ряд статей; так, в работе [1] используется модифицированный метод парных уравнений, а в работе [2] рассмотрена задача о кручении упругого пространства, содержащего сферическую трещину, свободную от напряжений, усилиями, заданными на бесконечности. Задача сведена (в рамках метода парных уравнений [3, 4]) к регулярному интегральному уравнению Фредгольма второго рода. Решение этого уравнения приведено в [6].

Цель настоящей работы – представить решение парных сумматорных уравнений по присоединенным функциям Лежандра, которые встречаются в осесимметричной задаче кручения упругого пространства, причем пространство ослаблено трещиной в виде сферического сегмента [7].

## Парные уравнения

Рассмотрим парные сумматорные уравнения следующего вида:

$$\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(n+2)(n-1)}{n(n+1)}C_n P_n^1(x) = F(x),\ 0\le\theta<\theta_0\,; \quad (1)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{N_n^1}C_n P_n^1(x) = 0,\ \theta_0<\theta\le\pi, \quad (2)$$

где $x=\cos\theta$, $P_n^1(x)$ – присоединенные функции Лежандра первого рода [8].

Указанные функции ортогональны на промежутке [–1, 1]:

$$\int_{-1}^{1} P_n^1(x)P_m^1(x)dx = N_n^1\delta_{nm},\ n, m = 1, 2, 3, \ldots;$$

$$N_n^1 = \frac{n(n+1)}{n+0,5}. \quad (4)$$

($\delta_{nm}$ – символ Кронекера).

Искомые коэффициенты $C_n$ разыскиваются в классе последовательностей, имеющих асимптотическое поведение:

$$C_n = \mathrm{O}(n^{-1}) \text{ при } n\to\infty. \quad (5)$$

## Введение специальных операторов

Для преобразования системы парных сумматорных уравнений (1), (2) введем специальные римув-операторы (от английского to remove – перемещать).

Выпишем сначала уравнение Лежандра:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dy}{d\theta}\right)+n(n+1)y=0, \quad (6)$$

полагая здесь

$$y = P_n(x); \quad (7)$$

$P_n(x)$ – полиномы Лежандра [8], удовлетворяющие соотношению ортогональности:

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = N_n^0\delta_{nm},$$

$$N_n^0 = \frac{1}{n+0,5},\ n, m = 0, 1, 2, \ldots.$$

Учитывая представленные выражения из работы [8], получаем, что

$$\frac{\partial y}{\partial\theta} = P_n^1(x). \quad (8)$$

Введем теперь оператор

$$\mathrm{D}(z) = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\cdot z), \quad (9)$$

где $z=\dfrac{\partial y}{\partial\theta}$.

Из формул (6)–(8) заключаем, что оператор (9) обладает характеристическим свойством:

$$\mathrm{D}\left(P_n^1(x)\right) = n(n+1)\ P_n(x),\ n = 1, 2, 3, \ldots, \quad (10)$$

или

$$\mathrm{D}\left(\frac{1}{N_n^1}P_n^1(x)\right)=\frac{1}{N_n^0}\ P_n(x)\,. \qquad (11)$$

Рассмотрим теперь уравнение Лежандра для присоединенной функции $y=P_n^1(x)$:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dy}{d\theta}\right)+\left(n(n+1)-\frac{1}{\sin^2\theta}\right)y=0.$$

Введем в рассмотрение римув-оператор:

$$\mathrm{W}(y)=-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dy}{d\theta}\right)-\\ -\left(2-\frac{1}{\sin^2\theta}\right)y; \qquad (12)$$

его характеристическое свойство можно представить в виде

$$\mathrm{W}(P_n^1(x))=(n+2)(n-1)P_n^1(x),\ n=1,\,2,\,3,\,\ldots\,. \qquad (13)$$

**Сведение парных уравнений к системе уравнений по полиномам Лежандра**

Для упрощения изложения будем предполагать сначала, что правая часть уравнения (1) имеет такую же структуру, как и левая, то есть

$$F(x)=\sum_{n=2}^{\infty}F_nP_n^1(x) \qquad (14)$$

(здесь коэффициенты $F_n$ заданы).

Рассмотрим вспомогательное уравнение

$$\frac{1}{2}\overline{C}P_1^1(x)+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n(n+1)}C_nP_n^1(x)=\\ =\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{(n+2)(n-1)}F_nP_n^1(x),\ 0\le\theta<\theta_0, \qquad (15)$$

где $\overline{C}$ – некая константа.

Уравнение (1) является следствием этого уравнения, что легко проверить, воздействуя на обе части уравнения (15) римув-оператором W (см. выражения (12), (13)). Другими словами, уравнение (15) оказывается дважды проинтегрированным уравнением (1).

Продифференцируем теперь уравнение (15) по $\theta$, используя для этого оператор D (см. формулы (9), (10)). Аналогичным образом продифференцируем и второе из исходных сумматорных уравнений (2) (см. (9) и (11)).

В итоге приходим к простейшей системе парных сумматорных уравнений по полиномам Лежандра:

$$\sum_{n=0}^{\infty}C_nP_n(x)=C_*P_1(x)+\\ +\sum_{n=2}^{\infty}\frac{n(n+1)}{(n+2)(n-1)}F_nP_n(x),\ 0\le\theta<\theta_0; \qquad (16)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{N_n^0}C_nP_n(x)=0\ ,\ \theta_0<\theta\le\pi\,. \qquad (17)$$

Здесь введены новые константы:

$$C_*=C_1-\overline{C}\ ;$$

$$C_0=0\,. \qquad (18)$$

**Решение парных уравнений**

Полученная парная сумматорная система (16), (17), к которой была сведена исходная система (1), (2), является ключевой [3], т. е. она допускает точное элементарное решение. В самом деле, в соответствии с общими принципами метода парных уравнений положим

$$C_n=\int_0^{\theta_0}g(t)\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)tdt\ ,\ n=0,\,1,\,2,\,\ldots, \qquad (19)$$

где $g(t)$ – вспомогательная функция, требующая дальнейшего определения.

Функцию эту заранее можно считать, например, гладкой на промежутке $[0,\theta_0]$, что позволяет, применяя к выражению (19) формулу интегрирования по частям, установить справедливость оценки (5).

Уравнение (17) при замене (19) выполняется тождественно (см. например с. 165 [3]). Что же касается первого из полученных парных уравнений, то представив его временно в виде

$$\sum_{n=0}^{\infty}C_nP_n(x)=f(\theta),\ 0<\theta<\theta_0\,, \qquad (20)$$

после подстановки выражения (19) в уравнение (16) и при использовании разрывного ряда Мелера–Дирихле [3], т. е.

$$\sum_{n=0}^{\infty}\cos(n+1)t\ P_n(x)=$$

$$=\begin{cases}(2(\cos t-\cos\theta))^{-1/2}, & 0\le t<\theta<\pi;\\ 0, & 0<\theta<t\le\pi,\end{cases}$$

получаем интегральное уравнение типа Абеля первого рода:

$$\int_0^{\theta}\frac{g(t)dt}{\sqrt{2(\cos t-\cos\theta)}}=f(\theta)\,,\ 0\le\theta\le\theta_0\,. \quad (21)$$

Решение уравнения (21) дается соотношением [3, 4]:

$$\frac{\pi}{2}g(t)=\frac{d}{dt}\int_0^t\frac{f(\theta)\sin\theta\,d\theta}{\sqrt{2(\cos\theta-\cos t)}}\,. \quad (22)$$

Отметим, что в частном случае, когда

$$f(\theta)=P_n(\cos\theta)\,,\ n=1,2,3,\ldots,$$

оказывается (см. eq. (2.6.35) [4]), что

$$\frac{\pi}{2}g_n(t)=\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)t. \quad (23)$$

Таким образом, из уравнения (16) (см. (20)–(23)) получаем окончательно:

$$\frac{\pi}{2}g(t)=C_*\cos\frac{3}{2}t+ +\sum_{n=2}^{\infty}\frac{n(n+1)}{(n+2)(n-1)}F_n\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)t. \quad (24)$$

Константы $C_*$ здесь определяется из условия (см. (18), (19)):

$$\int_0^{\theta_0}g(t)\cos\frac{t}{2}dt=0\,. \quad (25)$$

**Особый случай**

Рассмотрим теперь такой случай, когда правая часть уравнения (1) содержит присоединенную функцию Лежандра $P_1^1(x)$. Предположим пока, что

$$F(x)=P_1^1(x)\,.$$

Чтобы построить вспомогательную функцию $g(t)=g_1(t)$, соответствующую такой правой части (1), следуя схеме преобразования системы уравнений (1), (2) в систему парных уравнений (16), (17), найдем сначала решение уравнения

$$W(y)=P_1^1(x)\,,$$

или подробнее (см. выражение (12)):

$$y''+\mathrm{ctg}\theta\,y'+\left(2-\frac{1}{\sin^2\theta}\right)y=-P_1^1(x).$$

Воспользуемся методом вариации произвольных постоянных (Лагранжа), полагая ($Q_1^1(x)$ – присоединенная функция Лежандра второго рода [8]), что

$$y_1(\theta)=C(\theta)P_1^1(x)+D(\theta)Q_1^1(x)\,.$$

Опуская громоздкие подробности, приведем только результат:

$$C(\theta)=\frac{3-x^2}{6}Q_1(x)+\frac{1}{6}\ln(1-x^2)+C_1\,;$$

$$D(\theta)=-\frac{1}{6}(3-x^2)P_1(x)+D_1\,.$$

Константа $D_1$ может быть найдена из условия ограниченности решения $y_1(\theta)$ в нуле:

$$D_1=\frac{1}{3}\,,$$

а $C_1$ (для обеспечения компактности окончательного результата) можно положить равной

$$C_1=\frac{1}{3}(1-\ln 2)\,.$$

В итоге окажется, что

$$y_1=\frac{1-\cos\theta}{3\sin\theta}-\frac{\sin\theta}{3}\ln(1+\cos\theta)+ +\frac{1}{3}(1-\ln 2)P_1^1(x).$$

Теперь приведем результат дифференцирования:

$$f(\theta)=D(y_1)=\frac{2}{3}\cos\theta\ln(1+\cos\theta)- -\frac{2}{3}+\frac{2}{3}(1-\ln 2)P_1(x).$$

Вспомогательная функция $g(t)=g_1(t)$, найденная для этого частного случая при использовании (22), принимает вид

$$\frac{\pi}{2}g_1(t)=-\frac{2}{3}t\sin\frac{3t}{2}\,.$$

Ясно, что «общее» решение парных уравнений (1), (2) в случае задания правой части (1) в виде

$$F(x)=\sum_{n=1}^{\infty}F_nP_n^1(x), \qquad (26)$$

может быть записано следующим образом:

$$\frac{\pi}{2}g(t)=C_*\cos\frac{3}{2}t-F_1\frac{2}{3}t\sin\frac{3t}{2}+ \\ +\sum_{n=2}^{\infty}\frac{n(n+1)}{(n+2)(n-1)}F_n\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)t. \qquad (27)$$

Напомним, что константа $C_*$ здесь попрежнему определяется из условия (25). Удовлетворяя этому условию, получаем:

$$\frac{\pi}{2}g(t)=F_1\,\psi_1(t)+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{n(n+1)}{(n+2)(n-1)}F_n\psi_n(t).$$

Здесь введены функции

$$\psi_1(t)=-\frac{2}{3}t\sin\frac{3}{2}t+ \\ +\frac{2+\cos\theta_0-\dfrac{\theta_0}{\sin\theta_0}(\cos2\theta_0+2\cos\theta_0)}{3(1+\cos\theta_0)}\cos\frac{3}{2}t;$$

$$\psi_n(t)=\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)t- \\ -\frac{(n+1)\sin n\theta_0+n\sin(n+1)\theta_0}{n(n+1)(1+\cos\theta_0)\sin\theta_0}\cos\frac{3}{2}t, \\ n=2,\ 3,\ldots,$$

определяющие окончательный вид решения парных уравнений (1), (2).

Итак, в работе показано, что система парных сумматорных уравнений по присоединенным функциям Лежандра, к которой сводится смешанная задача о кручении упругого пространства, ослабленного сферической трещиной, является ключевой [3]. Другими словами, система допускает точное элементарное решение, а не сводится к интегральному уравнению Фредгольма второго рода относительно вспомогательной функции, как это обычно бывает в методе парных уравнений [7].

Полученное решение позволяет расширить возможности метода парных уравнений при рассмотрении статических и динамических смешанных осесимметричных задач теории кручения упругих тел со сферическими дефектами.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Мартыненко, М.А**. Решение парных уравнений по полиномам Лежандра первого порядка [Текст] / М.А. Мартыненко // Математическая физика. – 1979. – № 25. – С. 106–109.

2. **Godin, Yu.A**. An exact solution to a problem of axisymmetric torsion of an elastic space with a spherical crack [Text] / Yu.A. Godin // Quart. Appl. Math. – 1995. – Vol. 53. – P. 679–682.

3. **Уфлянд, Я.С**. Метод парных уравнений в задачах математической физики [Текст] / Я.С.Уфлянд. – Л.: Наука, 1977. – 220 с.

4. **Sneddon, I.N.** Mixed boundary value problem in potential theory [Text] / I.N. Sneddon. – Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1966. – 283 p.

5. **Godin, Yu.A**. Corrigenda: An exact solution to a problem of axisymmetric torsion of an elastic space with a spherical crack [Text] / Yu.A. Godin // Quart. Appl. Math. – 2000. – Vol. 58. – P. 795–796.

6. **Златин, А.Н.** Осесимметричная задача кручения упругого пространства, ослабленного сферической трещиной (ключевые парные уравнения) [Текст] / А.Н. Златин // ДАН. – 2011. – Т. 438. – № 1. – С. 1–3.

7. **Златин, А.Н.** Метод парных уравнений в контактных задачах [Текст]: В кн.: Механика контактных взаимодействий / А.Н. Златин, И.Н. Златина. – М.: Физматлит, 2001. – С. 116–124.

8. **Лебедев, Н.Н**. Специальные функции и их приложения [Текст] / Н.Н. Лебедев. – СПб.: Изд-во «Лань», 2010. – 358 с.

УДК: 621.386.85, 66.085.3/.5, 53.088

*В.О. Миронов*

# РАЗРАБОТКА МЕТОДИК КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ДЛЯ МНОГОЛЕПЕСТКОВОГО КОЛЛИМАТОРА В ДИСТАНЦИОНОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ

При проведении дистанционной лучевой терапии фотонными пучками возникает необходимость формирования определенной геометрии поля для заданной локализации облучаемого объекта. Для этого на линейных медицинских ускорителях электронов устанавливают многолепестковые коллиматоры (МЛК) [1, 2], состоящие из двух блоков параллельных вольфрамовых пластин (лепестков), способных перемещаться во взаимно противоположных направлениях (рис. 1). Геометрия облучаемого поля в области локализации объекта определяется взаимным расположением лепестков МЛК и скоростью их взаимного перемещения. Можно проводить облучение при неподвижном положении лепестков (случай фиксированной геометрии поля облучения), а также при синхронном передвижении лепестков относительно друг друга с постоянной скоростью, сохраняя фиксированное значение мощности исходного пучка (случай формирования треугольного дозного распределения поля – виртуальный клин). Треугольную геометрию распределения поля в области его локализации можно получать и с помощью специального клиновидного фильтра, представляющего собой однородную металлическую призму с заданным углом наклона (устанавливается в специальный слот держателя коллиматора). Такой фильтр получил название физического клиновидного фильтра, или просто физического клина. Соответственно функция МЛК, с помощью которой достигается такая же геометрия облучающего поля, как и с помощью физического клина, получила название функции виртуального клиновидного фильтра (виртуальный клин). Угол наклона дозного распределения поля в этом случае определяется скоростью передвижения лепестков МЛК [3]. Для свободного перемещения лепестков относительно друг друга между их боковыми поверхностями предусмотрен зазор. Над лепестками МЛК располагаются две однородные металлические пластины (диафрагмы), которые могут двигаться перпендикулярно движению лепестков и тем самым формировать координатную систему всего коллиматора. Таким образом, диафрагмы определяют выставление границ поля облучения по оси *Y*, а лепестки МЛК – по оси *X*.

На геометрию облучающего поля и его интенсивность в зоне облучения (дозу, получаемую пациентом) могут влиять такие «паразитные» факторы, как неконтролируемое просачивание падающего пучка через лепестковую структуру коллиматора (межлепестковые «утечки») и сквозь замкнутые торцевые поверхности лепестков МЛК (межблочные «утечки») (рис. 1,*б*). Обычно для минимизации межлепестковых утечек боковая поверхность лепестков выполняется в форме ступени (см. рис. 1, *а*). Влияние межблочной утечки особенно критично при формировании полей с «симметричным» расположением облучаемых областей (см. рис. 1, *б*).

На формирование геометрии облучающих полей, их интенсивность в зоне облучения и

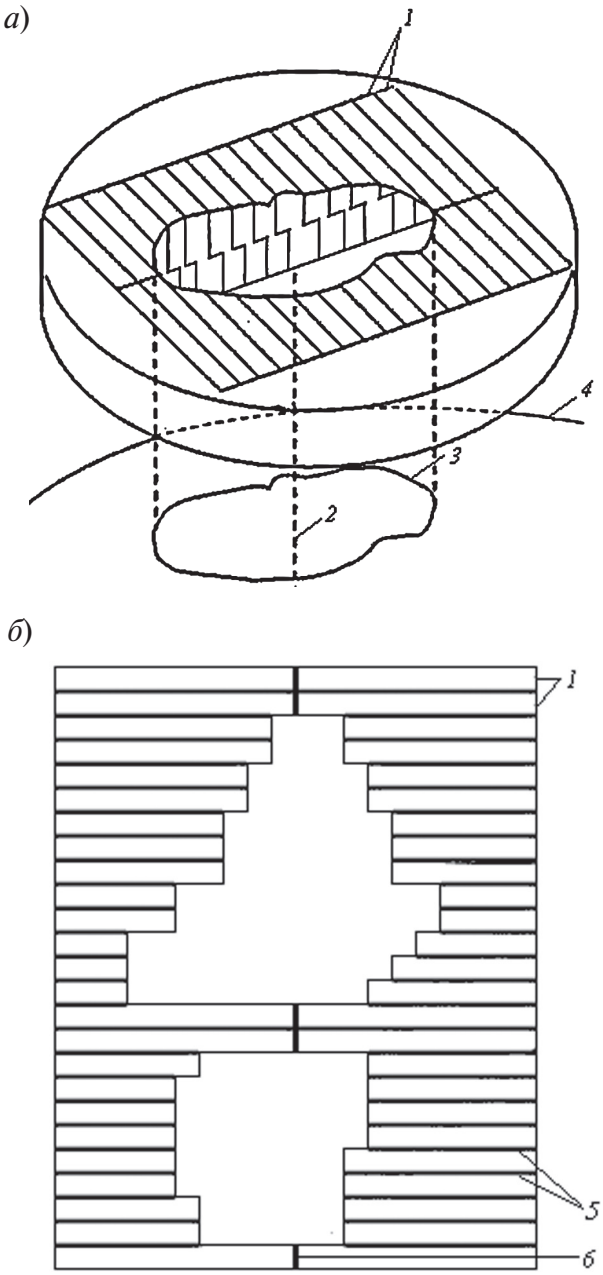



Рис. 1. Схематическое изображение многолепесткового коллиматора (МЛК) и расположения полей ионизирующего излучения:
*а* – общий вид МЛК, *б* – портальное расположение полей облучения в МЛК с указанием возможных утечек; *1* – лепестки МЛК, *2* – центральная ось МЛК; *3*, *4* – поле и поверхность облучения; *5*, *6* – межлепестковая и межблочная утечки

особенно на реализацию функции виртуального клина существенное влияние оказывают и чисто конструкционные особенности того или иного типа МЛК. В частности, самопроизвольное, неконтролируемое передвижение лепестков МЛК может возникнуть при повороте коллиматора или поворотной платформы ускорителя (гентри), например, при проведении интенсивно-модулированной лучевой терапии. В этом случае смещения лепестков МЛК – это следствие инерционности подвижных механизмов коллиматора, гравитационного воздействия и т. п.

Неучет этих факторов в конечном счете приводит к существенным ошибкам величины «лечебной» дозы при разработке терапевтических планов лечения. Поэтому они должны в обязательном порядке учитываться в клинических условиях при расчете отпускаемой дозы на станциях планирования дистанционной лучевой терапии для любого типа коллиматоров.

Исходя из вышеизложенного, цель настоящей работы – создание методики, позволяющей осуществлять контроль качества функционирования МЛК в клинических условиях. Методика предусматривает разработку относительно простых, но в то же время достаточно эффективных процедур, которые бы обеспечивали определение степени влияния коллиматора на характеристики облучающего поля. В частности, эти процедуры должны позволять проводить оценку таких параметров, как уровень межлепестковой и межблочной утечек ионизирующего излучения, определять угол наклона, размер и границы поля облучения, процентное распределение отпускаемой дозы (продольный профиль пучка), положение лепестков МЛК при движении коллиматора. Кроме того, процедуры должны обеспечивать возможность расчета фактора клина. Данный параметр определяет процентное отношение значения дозы на центральной оси в присутствии клиновидного фильтра (виртуального/физического) к значению дозы в открытом поле.

Работа выполнялась на базе Санкт-Петербургского клинического научно-практического центра специализированных видов медицинской помощи (онкологической), при использовании линейного медицинского ускорителя электронов Mevatron Primus Siemens и системы планирования дистанционной лучевой терапии XiO CMS. Все измерения проводились при расстоянии источник – поверх-

ность, равном 100 см, и энергии фотонного пучка 6 МэВ.

В качестве расходных материалов использовались набор рентгеновских пленок X-Omat V Kodak, проявитель X-Fix Fuji Hunt и закрепитель Anatomix Fuji Hunt. Пленки проявлялись на проявочной машине Kodak 101/102 и переводились в цифровую форму при сканировании на рентгеновском сканере Vidar Dosimetry Pro Advantage Vidar System. Оценка поглощенной дозы определялась по степени почернения пленки при помощи приложения MultiVox DICOM Viewer «Лаборатория компьютерных медицинских систем», тогда как для первичного контроля качества степени почернения использовался клинический денситометр DensiX PTW. Для достижения требуемой глубины измерения использовался набор водоэквивалентных фантомов RW3 «Белая вода», представляющих собой полистереновые пластины с примесью 2,1 % $TiO_2$ и номинальными значениями толщины 1, 5 и 10 мм.

### Методика проведения измерений

Исследование энергетических и пространственных характеристик формируемых коллиматором полей в зоне облучения проводились методом пленочной дозиметрии [4, 5].

При проведении дозиметрических измерений с целью оценки диапазона регистрируемой оптической плотности используемых рентгеновских пленок первым шагом являлось построение калибровочной кривой. Методика проведения калибровочных измерений была изложена в работах [4, 5]. Там же представлены характеристики существующих рентгеновских и радиохромных пленок, используемых для клинической дозиметрии.

В настоящей работе калибровочная кривая для используемой рентгеновской пленки X-Omat V Kodak была получена при облучении пленки полем размером 5×5 см в диапазоне отпускаемых доз от 0 до 100 сГр с шагом 10 сГр. Пленка размещалась на терапевтическом столе на глубине 1,6 см в твердотельном фантоме RW3. На этой глубине энергия падающего пучка, согласно соотношению Брэгга – Грэя, достигает максимального значения, что позволяет получать наиболее четкое изображение. Перед проведением калибровочных измерений пленка проверялась на наличие в ней механических повреждений, проколов, сгибов; тестировались параметры пленки, связанные с ее производством. Для этого пленка облучалась в открытом поле с размерами 25×25 см, и далее оценивались гомогенность эмульсионного слоя пленки и его стабильность при химической реакции проявления. Результатом качества пленки служила равномерность почеренения по всем направлениям; степень ее почернения должна была зависеть исключительно от величины подведенной дозы. Подведение заданной дозы при различных энергиях облучения достигалось соответствующим изменением времени облучения. Проявленная пленка анализировалась также на наличие на ней отпечатков пальцев, пыли и случайных включений.

Перед проведением калибровочных измерений определялась также зависимость регистрируемой оптической плотности пленки от угла поворота пленки относительно центральной оси облучающего потока.

Проведенные эксперименты показали, что при изменении угла наклона от 0 до 45° относительное изменение регистрируемой оптической плотности нашего материала составляло 0,74–1,03 % для необлученных пленок и 2,32–2,50 % для пленок, облученных дозой в 60 сГр.

Эти данные находились в хорошем согласии с результатами работы [6], согласно которой для используемой в клинической дозиметрии рентгеновской пленки X-Omat V Kodak возможное отклонение в значениях оптической плотности при изменении угла поворота на 45°, в диапазоне поглощенных доз 0–60 сГр, не должно превышать 5 %. Полученная зависимость оптической плотности от угла поворота пленки относительно центральной оси облучающего потока использовалась далее при анализе экспериментальных результатов.

Учитывалось также влияние внешних параметров (температура и влажность окружающей среды) и температуры обрабатывающих реагентов (проявитель и фиксаж) на значения регистрируемой оптической плотности. В связи с этим во избежание погрешностей при интерпретации экспериментальных данных процедура калибровки пленки, все измерения и последующий анализ полученных результатов выполнялись в одном цикле при

строгом контроле постоянства температуры и влажности.

Калибровочная кривая для используемой в работе рентгеновской пленки X-Omat V Kodak приведена на рис. 2. Она представляет собой зависимость оптической плотности пленки от величины поглощенной дозы. На этом же рисунке для сравнения приведена аналогичная зависимость, взятая из работы [6]. Как следует из рисунка, наши данные и результаты указанной работы совпадают с точностью 0,84–1,04 %.

Полученная зависимость хорошо аппроксимируется следующим выражением:

$$OD = -3E - 0{,}9\,D^3 + 3E - \\ -0{,}5\,D^2 + 0{,}0324\,D + 0{,}3722,$$

где $OD$, о.е. – оптическая плотность; $D$, сГр – поглощенная доза.

Это выражение использовалось в дальнейшем для обработки результатов основных экспериментов. При изучении относительных дозных распределений использовалась схема, аналогичная приведенной в работе [7].

При проведении измерений пленка располагалась на терапевтическом столе, на расстоянии источник – поверхность 100 см; при этом под пленку устанавливалось десять водоэквивалентных пластин RW3 толщиной 10 мм для минимизации эффектов обратного рассеяния. Сверху на пленку накладывался слой RW3

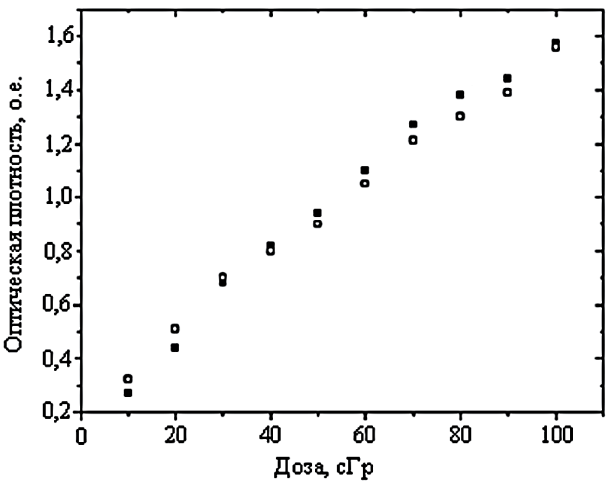



Рис. 2. Калибровочные кривые для рентгеновской пленки X-Omat V Kodak по данным эксперимента и работы [6] (светлые и затушеванные символы соответственно)

толщиной 1,6 см для достижения максимальной засветки с предельно четкими границами (согласно соотношению Брэгга – Грэя).

Использование лазерной системы позиционирования Gamex Lasers позволяло осуществлять контроль расположения конструкции пленка-твердотельный фантом на терапевтическом столе с точностью до 2 мм.

Погрешности, обусловленные характеристиками пучка излучения, его стабильностью и природой, колебаниями дозы в рабочей области, гомогенностью источника сканирования, минимизировались посредством алгоритмов сглаживания, установленных в приложении MultiVox. Использованные нами методики процедур минимизации погрешностей посредством сглаживающих алгоритмов описаны в работе [7].

Стабильность источника сканирования, механические погрешности и отношение сигнал/шум при работе рентгеновского сканера Vidar в расчет не принимались и считались оптимальными.

Точность позиционирования положений гентри и коллиматора в используемом ускорителе определялась с помощью методики, изложенной в работе [8], согласно которой исходное положение уровня гентри задавалось установкой значения 0° на консоли ускорителя. Одновременно «нулевое» положение гентри верифицировалось с помощью пузырькового уровня, устанавливаемого в слот держателя коллиматора (погрешность выставления самого уровня при этом не учитывалась). Туда же устанавливалось проволочное перекрестие. Рентгеновская пленка размещалась на расстоянии источник – поверхность, равном 50 см, и на ней выполнялись отметки положения тени от проволочного перекрестия, облучаемого стандартным источником света в направлении, перпендикулярном плоскости пленки. Затем проводилось облучение пленки полем с размерами 10×10 см, при значении подводимой дозы 50 сГр. После проявления и оцифровки полученных данных с помощью приложения MultiVox строился «экспериментальный крест» – пересечение взаимно перпендикулярных прямых, соответствующих направлениям с максимальным значением обратной оптической плотности, и проводилось сравнение взаиморасположения засвеченных

(экспериментальных) и «отмеченных» (световых) областей локализации линий креста. Аналогичные измерения проводились еще для четырех заданных значений углов установки гентри: +1°, +2°, –1°, –2°.

Полученные данные хорошо описывались выражением

$$m = \mathrm{arctg}(x/50),$$

где $m$, град – угол наклона гентри; $x$, см – отклонение перекрестия «экспериментального креста от «светового».

Чтобы повысить точность оценки отклонения угла наклона гентри от заданного значения по засвеченным областям, измерения выполнялись три раза.

Следующим шагом контроля установки была оценка точности выставления положения лепестков МЛК при различных положениях гентри и коллиматора. Задавались поля прямоугольной формы с размером поля 40 см по оси $X$ (выставлялось положением лепестков МЛК) и размером от 5 до 20 см с шагом 5 см – по оси $Y$ (положением диафрагм). Угол наклона гентри принимал следующие значения (град): 0, 90, 180, 270. Доза поглощаемого излучения составляла 100 сГр. При позициях гентри 90 и 270° рентгеновская пленка фиксировалась в вертикальном положении между слоями твердотельного фантома толщиной 1,6 см. По окончании данного этапа измерений пленку сканировали на рентгеновском сканере Vidar, и затем вычислялось положение лепестков (использовалось приложение MultiVox).

Перед выполнением описанных выше контрольных измерений оценивалась адекватность выставления положений коллиматора. Процедура состояла в следующем. Проводилось облучение при положении гентри 0 ° и двух углах поворота МЛК – 0 и 90 °. Затем оценивался угол между пересекающимися полосами засветки (размер поля облучения 5×40 см).

Оценка точности выставления лепестков МЛК включала также анализ отклонения расчетного значения поля, полученного на станции планирования дистанционной лучевой терапии XiO, от реализуемого на практике. При этом разрабатывался терапевтический план лечения на XiO, который передавался на консоль ускорителя. Проводилось запланированное облучение рентгеновской пленки, размещенной на терапевтическом столе под слоем водоэквивалентного фантома RW3 толщиной 1,6 см, с последующей обработкой пленки. В ходе этого цикла измерений использовались квадратные поля облучения с размером сторон от 5 до 25 см с шагом 5 см, а также прямоугольные при фиксированном размере по оси $Y$, равном 40 см, и изменяющемся размере по оси $X$ – от 5 до 25 см с шагом 5 см. Кроме того, использовалось еще пять терапевтических полей произвольной формы.

Дальнейший анализ полученных данных выполнялся при наложении отсканированной распечатки, выдаваемой системой планирования, на рентгеновское изображение, переведенное в цифровую форму. Положение лепестка оценивалось путем сравнения интенсивностей полученных изображений с планируемыми. В случае их совпадения полагали, что положение лепестка соответствует установочным параметрам. В противном случае вычислялась погрешность, вносимая отклонением лепестка от заданного положения (измерения проводились отдельно для каждого лепестка).

На следующем этапе разработки методики контроля качества функционирования МЛК определялась степень влияния межлепестковой и межблочной утечки радиации на формирование облучающих полей различной геометрии. При этом в число оцениваемых включались поля с положением диафрагм от 5 до 20 см с шагом 5 см (ось $Y$) и с полностью закрытыми лепестками МЛК ($X = 0$). Все измерения проводились на твердотельном фантоме RW3. Оценка значений межлепестковой утечки ионизирующего излучения проводилась для расстояний 2, 4, 6 и 8 см от центральной оси. Межблочная утечка оценивалась при центральном расположении блоков МЛК.

На заключительном этапе работы проводились измерения профильных зависимостей поглощенной дозы при работе МЛК в режиме виртуального клина. При проведении этих измерений пленка размещалась на терапевтическом столе под слоем водоэквивалентного материала твердотельного фантома RW3 при толщине 1,6 см и позиционировалась при помощи лазерной системы. Далее проводилось облучение при заданном размере поля с после-

дующим проявлением пленки, переводом в цифровую форму и выполнением анализа. В процессе анализа выполнялось измерение угла наклона клина, фактора клина и размера поля облучения с использованием инструментов, представленных в приложении MultiVox.

При проведении всех измерений учитывалась реальная проекция лепестков МЛК, проволочных перекрестий на рентгеновской пленке, в том числе и ширина полутени рентгеновского изображения. Во всех расчетах, согласно работе [9], эта величина для пленки X-Omat V Kodak, считалась равной 4,3 мм.

### Результаты и их обсуждение

**Оценка точности выставления положения гентри.** Зависимости значений углов наклона гентри, измеренных с помощью предложенной методики, от значений, задаваемых с консоли ускорителя, приведена на рис. 3.

Здесь же для сравнения представлены аналогичные зависимости, полученные в работе [8] для трех других типов ускорителей. Как следует из приведенных результатов, отклонение «истинных» значений углов от задаваемых для тестируемого ускорителя Primus лежит в диапазоне 0,10–0,45 °, что явно меньше максимально допустимого отклонения от выставленной величины угла, которое по данным работ [9, 10] для ускорителей медицинского назначения составляет ±1°.

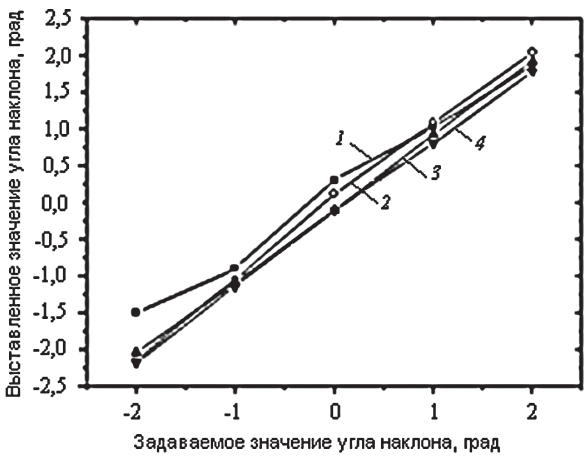



Рис. 3. Зависимости выставленного угла наклона гентри от его задаваемого значения для различных типов медицинских ускорителей электронов: *1* – Primus Siemens; *2 – 4* – соответственно Varian 2100C/D, Varian 2100C, Varian 600/C [8]

**Оценка точности выставления лепестков МЛК для угла поворота.** Указанная оценка для различных углов поворота МЛК выполнялась по методике пересекающихся засвеченных полос. Измерения показали, что при размере поля 5×40 см и нулевом угле наклона гентри величина отклонения от задаваемого значения угла поворота МЛК составляет 0,37°. Рекомендации по контролю качества работы ускорителя, связанные с вращением коллиматора, приведены в работе [11]. На основе этих рекомендаций при выставлении угла наклона гентри обычно оценивают четыре точки: 0, 90, 180 и 270°; при этом допустимое отклонение не должно превышать 1° .

**Оценка точности выставления лепестков МЛК для противолежащих углов.** Анализ точности указанного выставления оценивался при значениях углов 0 и 180° и нулевом положении гентри. Размеры исследуемых полей изменялись в диапазоне от 5×5 см до 5×25 см с шагом 5 см. Было получено, что при повороте коллиматора на угол 180° относительно выставленного угла смещение засвеченных полей лежит в диапазоне 0,5–1,0 мм.

При оценке смещения лепестков для положения гентри 270° и размеров поля от 5×40 см до 25×40 см с шагом 5 см, а также положений коллиматора 0 ° и 180 ° регистрируемое смещение специально изменяли от 1,0 до 2,2 мм (согласно заводским настройкам, допустимое отклонение лепестков МЛК не должно превышать 3 мм).

**Измерение межлепестковой и межблочной утечек ионизирующего излучения.** Проведенные измерения для МЛК, используемого на нашем ускорителе, показали, что значения межлепестковой утечки лежат в диапазоне 3,7–4,0 %, а межблочной – 4,8–5,0 % от полного количества отпущенной дозы. При этом величина максимального значения пика утечки на радиограмме слабо зависит от расстояния до центральной оси, и характер зависимости остается практически одинаковым для всех проведенных экспериментов. Поэтому можно считать, что в пределах погрешности измерений снижением значения межлепестковой утечки при увеличении расстояния от центральной оси можно пренебречь. Полученные данные лежат в пределах допустимых значений величин утечек, равных 5 %. В то же время величины межлепестковой и межблочной утечек коллиматора, используе-

мого в нашем ускорителе, существенно хуже значений величин, характерных для МЛК в ускорителях других систем. Так, по данным работы [12], значение межлепестковой и межблочной утечек для 80-лепесткового МЛК, установленного на ускорителе Sli Precise Electa, при энергии фотонного пучка 6 МэВ составляли 1,8 ± 0,1 % и 2,1 ± 0,2 %, соответственно. При измерениях авторы статьи в качестве детектора использовали рентгеновскую пленку Kodak X-Omat XV2, размещенную на глубине 5 см в твердотельном фантоме RW3, ионизационную камеру PTW 30001, клинический дозиметр PTW Unidos [13]. Такое различие может быть обусловлено разницей конструкций коллиматоров.

**Оценка функции виртуального клина.** При данной оценке исследовались профильные зависимости распределения поглощенной дозы. Типичные профильные зависимости, полученные по данным пленочной дозиметрии для виртуального клина, для четырех значений угла наклона, представлены на рис. 4, *а*. В качестве сравнения приведены те же зависимости распределения поглощенной дозы для виртуального и физического клиньев при одном значении угла наклона (рис. 4,*б*). Данные по физическому клину взяты из работы [7].

Как следует из рис. 4, *б*, распределение, полученное с использованием виртуального клина при помощи рентгеновских пленок X-Omat V Kodak, практически совпадает с распределением для физического клина, выдаваемого системой планирования XiO.

**Оценка угла наклона и размера поля облучения**. На рис. 5, *а* представлены относительные

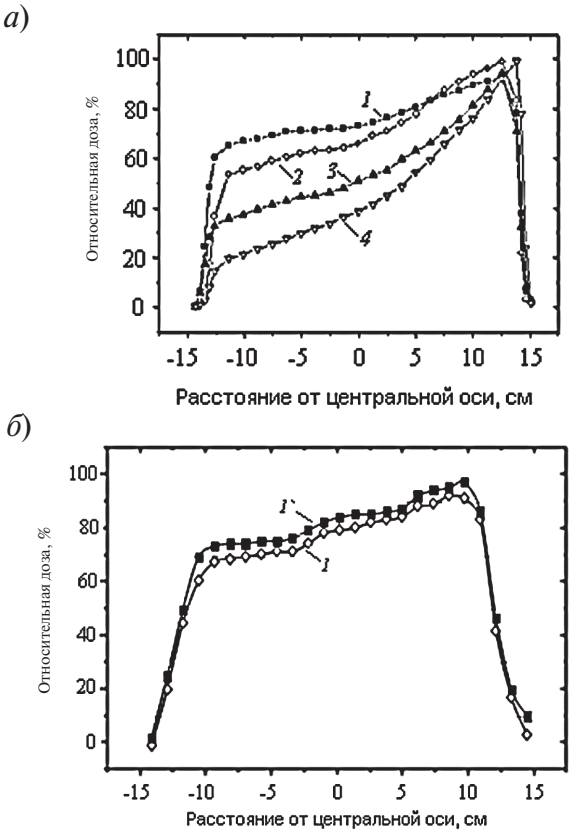



Рис. 4. Продольные профили фотонного пучка с энергией 6 МэВ для различных углов наклона клиновидного фильтра (*а*) и разных способов создания поля облучения (*б*).

Углы наклона, град: 15 (*1*), 30 (*2*), 45 (*3*), 60 (*4*); физический (*1*) и виртуальный (*1`*) клинья при значении угла 15 град. Размер поля 20 x 20 см, использована пленка X-Omat V Kodak

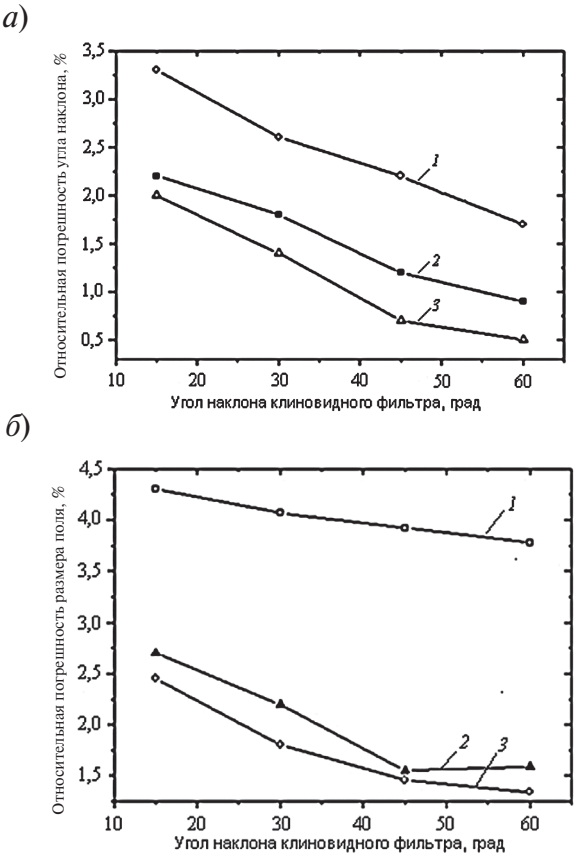



Рис. 5. Угловые зависимости относительных погрешностей выставления угла наклона (*а*) и отклонения измеренного размера поля (*б*), полученных при сравнении разных способов создания поля облучения (ВК, ФК – виртуальный и физический клинья) с заданным эталонным значением (ЭТ): ВК/ФК (*1*), ВК/ЭТ (*2*), ЭТ/ФК (*3*)

погрешности выставления угла наклона виртуального и физического клиньев. Первые получены в нашем эксперименте с использованием пленок X-Omat V Kodak, вторые взяты из системы планирования XiO. Для размера поля 10×10 см получены следующие значения погрешности: угол 15°–2,2 %; 30°–1,8 %; 45°–1,2 %; 60°–0,9 %. Для размера поля 20×20 см значения равны соответственно 3,3; 2,6; 2,2 и 1,7 %.

На рис. 5, *б* представлена зависимость относительной погрешности размера поля облучения от угла наклона клина. Наименьшее отклонение получено для отношения ВК/ФК и составляет 1,35–2,50 %. Для отношения ВК/ЭТ отклонение составило 3,8–4,3 %.

**Оценка фактора клина**. Данные об измеренных значениях фактора клина для виртуального клина представлены на рис. 6. Результаты наших измерений, выполненные на пленках X-Omat V Kodak, сопоставлены с данными из работы [14]. В процессе анализа проводилось сравнение фактора клина с данными, полученными из системы планирования PLUNC и детекторной ионизационной матрицы Profiler для размеров полей 10×10 см и 20×20 см.

Из рис. 6 видно, что наименьшее значение для размера поля 10×10 см показала система планирования PLUNC: отклонение составило 0,98–1,05 о.е.; тогда как для размера поля 20×20 см были получены значения 1,000–1,025 о.е. Наибольшее значение было обнаружено для X-Omat V Kodak при размере поля 20×20 см: 1,015–1,048 о.е., а при 10×10 см полученные значения равны 1,015–1,027 о.е. Следовательно, при увеличении размера поля и угла наклона фактор клина увеличивается как для виртуального, так и для физического клиньев (см. таблицу).

**Сравнение значений относительной погрешности оценки фактора клина по различным методикам**

| | Относительная погрешность, % | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Размер поля, см | 10×10 | | | | 20×20 | | | |
| Угол наклона, град | 15 | 30 | 45 | 60 | 15 | 30 | 45 | 60 |
| PLUNC/ Profiler | 0,0 | 0,6 | 1,1 | 1,7 | 0,2 | 0,5 | 0,8 | 1,1 |
| PLUNC/X-Omat V | 0,40 | 1,18 | 1,47 | 2,32 | 0,19 | 0,89 | 1,46 | 1,72 |
| Profiler/X-Omat V | 0,4 | 0,6 | 0,4 | 0,7 | 0,4 | 0,4 | 0,7 | 0,6 |

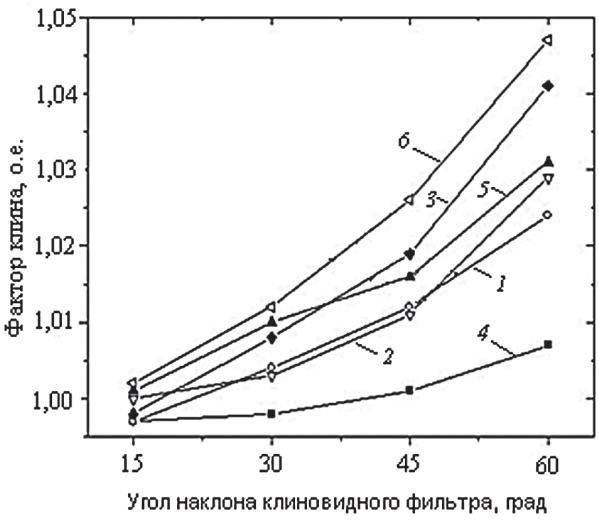



Рис. 6. Угловые зависимости фактора клина для двух размеров поля облучения (виртуальный клиновидный фильтр), найденные по разным методикам: PLUNC (*1*, *4*), Profiler (*2*, *5*), X-Omat V Kodak (*3*, *6*); размеры поля: 10 x 10 см (*1*– *3*) и 20 x 20 см (*4* – *6*)

В заключение подведем основные итоги. При выполнении данной работы были разработаны методы и процедуры тестирования межлепесткового коллиматора, установленного на линейном медицинском ускорителе электронов. К числу оцениваемых параметров относились точность выставления «нулевого» уровня для гентри; оценка положения лепестков при различных положениях МЛК; угол наклона и размер поля облучения; фактор клина для виртуального клина; межлепестковая и межблочная утечки ионизирующего излучения.

Все измерения были выполнены посредством пленочной дозиметрии на пленках X-Omat V Kodak. По результатам, относящимся к углам наклона и размерам терапевтических полей для клиновидных фильтров (виртуального и физического), было сделано заключение о взаимозаменяемости данных устройств.

Следует отметить, что при вводе в эксплуатацию станций планирования дистанционной лучевой терапии и разработке терапевтических

планов лечения необходимо учитывать размер поля облучения, а также погрешности выставления лепестков МЛК, положения коллиматора, межблочной и межлепестковой утечки, фактора клина и угла наклона.

Рекомендуется проводить процедуры тестирования МЛК с использованием предлагаемых методик не реже одного раза в месяц и каждый раз после выполнения ремонтных работ и профилактического технического обслуживания.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**


1. Multileaf collimator [Text]: United States patient. U.S. Patient Number: 5.012.506 / F.J. Span, B.S. Driver// – Philips Corporation, New York, Date patient: Apr. 30, 1991. – 12 p.

2. **Jeraj**, **M.** Multileaf collimator in radiotherapy [Text] /M. Jeraj, V. Robar //Radiol. Oncol. –2004. – Vol. 38. –No. 3. –P. 235 –240.

3. **Boyed, A.** Basic applications of multileaf collimators [Text] /A. Boyed, P. Biggs, J. Galvin [et al.] //AAPM Report No. 72. USA, Madison: Med. Phys. Pub., 2001, – 54 p.

4. Radiochromic film dosimetry [Text] //AAPM Report No. 63. Task Group 53. – Med. Phys. – 1998. – Vol. 25. – Iss. 11. –P. 2094–2113.

5. **Bouchar, H.** On the characterization and uncertainty analysis of radiochromic film dosimetry [Text] / H. Bouchar, F. Lacroix, G. Beadoin //Med. Phys. –2009. – Vol. 36. –No. 6. –P. 1931–1946.

6. **Cheung, T.** Source and detector polarization effects on radiographic film dosimetry [Text] /T. Cheung, P.K.N. Yu, M.J. Burtson // Phys. Med. Biol. –2003. – Vol. 48. –P. 329–334.

7. **Елизарова, М.В.** Оценка погрешности сглаживания дозиметрических данных при инсталляции систем планирования дистанционной лучевой терапии [Текст]// М.В. Елизарова, В.О. Миронов// Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки.–2011.–№ 1(116). –С. 82–87.

8. **Chang, L.** Technical innovation to calibrate the gantry angle indicators of linear accelerators [Text] / L. Chang, S.-Y. Ho, J.-M. Wu // Journ. Appl. Clin. Med. Phys. –2001. – Vol. 2. –No. 1. –P. 54–58.

9. **Moustafa, M.M.O.** Dosimetric measurements using radiographic and ionization chamber in radiaotherapy [Text] /M.M.O. Moustafa, A.L. El-Attar, A.H. El-Kamel [et al.] // VII Radiation Physics & Protection Conference, 27–30 Nov. 2004, Ismailia, Egypt. – 9 p.

10. **Meijer, G.J.** Quality control of medical linear accelerators [Text] /G.J. Meijer, H.J. van Kleffens, B.J. Mijnheer// Current practice and minimum requiarements. Report No. 9. NCRD, 1996. – 71 p.

11. **Klein. E.E.** Task group report: Quality assuarance of medical accelerators [Text] / E.E. Klein, J. Hanley, J. Bayouth // Med. Phys. –2009. –Vol. 36. –No. 9. – P. 4197–4212.

12. **Pasquino, M.** Transmission, penumbral and leaf position accuracy in commissioning and quality assurance program of a multileaf collimator for step-and-shoot IMRT treatments [Text] /M. Pasquino, V.C. Borca, P. Catuzzo // Tumori. – 2006. –Vol. 92. –P. 511–516.

13. **Pai, S.** TG-69: Radiographic film for megavoltage beam dosimetry [Text] /S. Pai, I.J. Das, J.F. Dempsey //Med. Phys. –2007. – Vol. 34. – No. 6. –P. 2228–2258.

14. **El-Attar, A.L.** Dosimetric measurements using radiographic film and ionization chamber in radiotherapy [Text] /A.L. El-Attar, A.H. El-Kamel, M.A. Henfi // VII Radiation physics & Protection Conference, 27–30 Nov. 2004. Ismailia , Egypt.

15. **Butson, M.J.** Rounded end multi-leaf penumbral measurements with radiochromic film [Text] /M.J. Butson, P.K.N. Yu, T. Cheung // Phys. Med. Biol. –2003. – Vol. 48.– P. 247–252.


УДК 535.31

*Е.Т. Аксенов, Г.А. Кафидова, Д.В. Мокрова, В.М. Петров*

# КОНТРОЛЬ КОНЦЕНТРАЦИИ ГЛЮКОЗЫ В БИОТКАНЯХ МЕТОДОМ КОГЕРЕНТНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИМЕТРИИ

Среди социально значимых заболеваний диабет занимает одно из ведущих мест. Своевременное выявление преддиабетического состояния человека и мониторинг динамики заболевания определяют необходимость в соответствующей диагностической аппаратуре.

В настоящее время существует несколько десятков коммерчески доступных глюкометров, однако для проведения измерения с помощью таких приборов необходимо осуществлять забор крови. Такая процедура, как правило, осуществляется проколом кожи подушечки пальца руки, а это требует строгого соблюдения мер антисептики во избежание внесения инфекции в организм. Контроль уровня сахара в крови диабетика необходимо осуществлять до восьми раз в сутки, поэтому ясны проблемы, связанные с дискомфортом и опасностью заражения. В связи с этим больной стремится либо ограничить количество процедур, либо вовсе их избежать, его состояние ухудшается, и возрастает вероятность летального исхода.

Таким образом, разработка методов и средств неинвазивного и непрерывного (или многократного) мониторинга концентрации глюкозы в крови человека является актуальной и одной из первостепенных задач современной биомедицинской диагностики.

Развитие когерентно-оптических методов изучения и диагностики биологических объектов открывает возможность создания неинвазивных датчиков динамики концентрации глюкозы в крови.

Эти методы имеют ряд преимуществ: для контроля используется неионизирующее излучение; в процессе измерения не требуется дополнительных химических реагентов; измерение можно проводить как в непрерывном режиме, так и повторять многократно; результаты измерения отображаются в реальном времени. Кроме того, процедура становится нетравматичной и не доставляет дискомфорта больному.

В предлагаемой работе исследуется поляриметрическая методика регистрации динамики концентрации глюкозы в крови и обосновывается возможность создания неинвазивного датчика на ее основе.

Изменение концентрации глюкозы в крови приводит к изменению оптических характеристик тканей человека, в том числе и кожного покрова. Известно, что повышение концентрации глюкозы приводит к уменьшению коэффициента рассеяния света тканями [1, 2]; данная величина определяется различием в показателях преломления внеклеточной жидкости и клеточных мембран. Рост концентрации глюкозы во внеклеточной жидкости приводит к увеличению коэффициента преломления, который в свою очередь снижает коэффициент рассеяния для ткани. Кроме того, глюкоза, ввиду своей хиральности, поворачивает плоскость поляризации линейно поляризованного света. Это свойство лежит в основе всех современных высокочувствительных поляриметрических методов исследования. В работах [3, 4] предлагается проводить поляриметрические измерения (на просвет) в жидкости, содержащейся в передней камере глаза (водянистая влага), так как она обладает низким коэффициентом рассеяния. Однако такой способ измерения подвержен существенным погрешностям, вызванным двулучепреломлением роговицы и движением глаза [5, 6]. Использование кожи человека как объекта исследования в поляриметрических измерениях ограничивалось сильной деполяризацией светового излучения, проходящего сквозь кожу. Благодаря рассеянию в обратном направлении части падающего на кожу линейно поляризованного светового излучения и сохранению (при определенных условиях) его поляризации появляется возможность проводить измерения направления плоскости поляризации такого излучения. Результаты такого рода измерений и соответствующие теоретические модели рассеяния поляризованного излучения в содержащих глюкозу мутных средах рассматривались в работах [7–9].

Поляриметрическое определение количества глюкозы, как отмечалось, основано на дисперсии оптического вращения, в результате которого хиральные молекулы в водном растворе поворачивают плоскость поляризации линейно-поляризованного света, проходящего через раствор. Угол поворота прямо пропорционален концентрации оптически активных молекул, длине слоя раствора и некоторой константе для данного вещества, называемой удельным вращением. Результирующий угол поворота определяется выражением

$$\varphi = \alpha_\lambda LC, \qquad (1)$$

где $\alpha_\lambda$, град·дм$^{-1}$·г$^{-1}$·л – коэффициент удельного вращения на длине волны $\lambda$; $L$, дм, – длина образца; $C$, г/л – концентрация.

Глюкоза в организме человека является правовращающей и имеет коэффициент удельного

вращения +52,6 для *D*-линии натрия с длиной волны 589 нм. При физиологических концентрациях на длине образца 0,1 дм угол поворота плоскости поляризации составляет около 0,005°.

Распространение светового излучения в биологических тканях носит сложный характер. Для каждой точки наблюдения рассеянного светового поля на поверхности ткани ансамбль эффективных оптических путей, которые свет проходит между источником и данной точкой, характеризуется разными оптическими путями, а соответствующие траектории занимают пространственную область, которая имеет банановидную форму. Сечение такого распределения для различных расстояний между источником и точкой наблюдения представлено на рис. 1. Здесь приведены результаты моделирования ме-

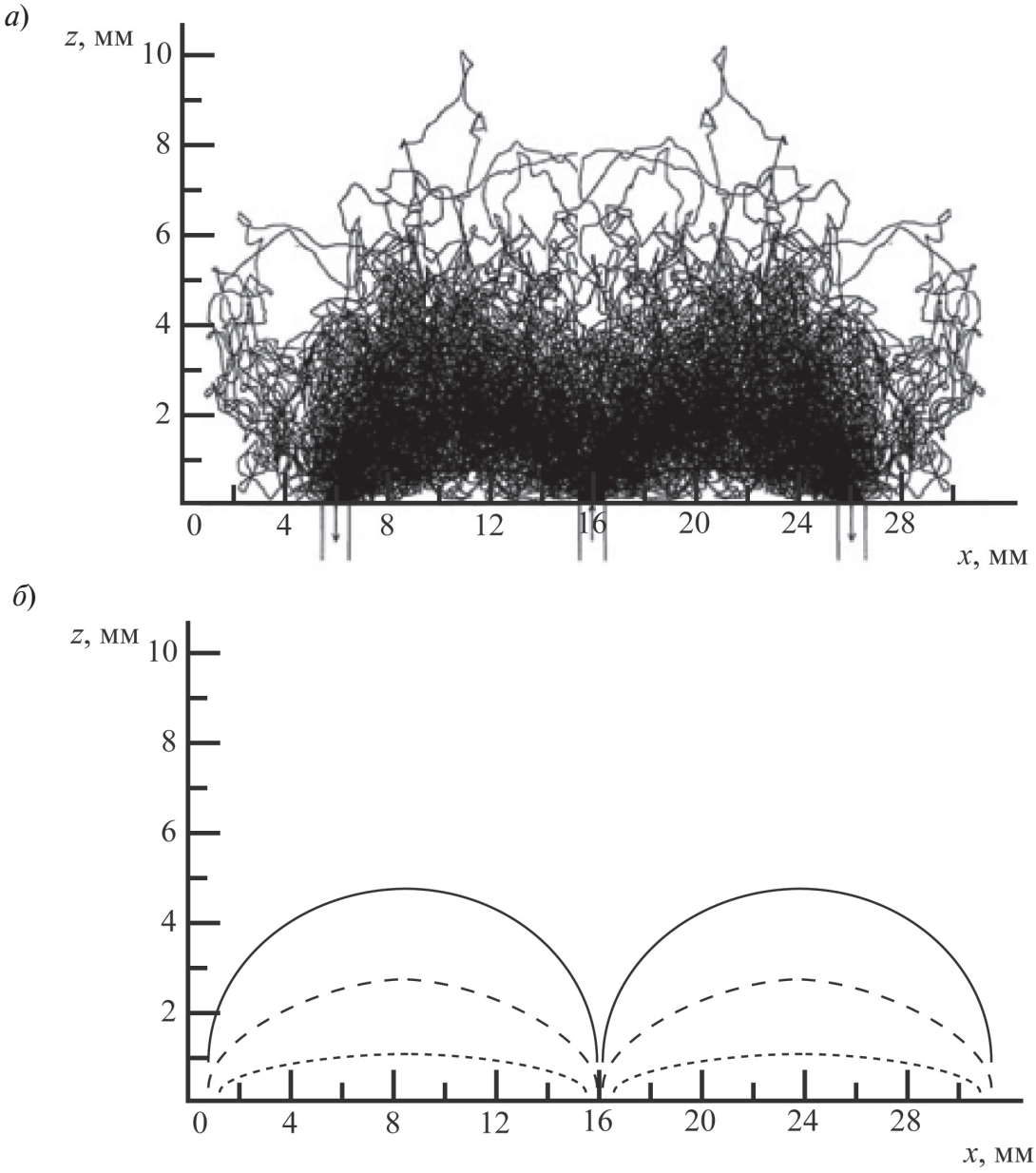



Рис. 1. Модельные представления распространения света в биологических тканях: *а* – траектории фотонов (получены методом Монте-Карло); *б* – пути их миграции в гомогенной полубесконечной сфере (получены аналитически). Оптические параметры рассеивающей среды: $\mu_a \cong 0{,}02$ мм$^{-1}$, $\mu_s \cong 10$ мм$^{-1}$, $g = 0{,}85$

тодом Монте-Карло и аналитических вычислений путей миграции фотонов в гомогенной полубесконечной сфере, проведенные в работе [10]. При определенных условиях облучения и детектирования (сильно рассеивающая среда с малым поглощением; расстояние между источником и точкой наблюдения как минимум в три раза больше, чем длина свободного пробега рассеивающей среды). Для вычисления статистических свойств ансамбля эффективных оптических путей может быть использовано диффузионное приближение. При сильном поглощении (в частности в коже человека), форма наиболее вероятной траектории может быть записана как

$$z_{mod}(x) \approx \sqrt{\frac{2x(r-x)}{\sqrt{3\mu_a\mu_s(1-g)r}}}, \qquad (2)$$

где $r$ – расстояние между источником и точкой наблюдения; ось $x$ направлена вдоль поверхности, $z$ – перпендикулярно поверхности; $\mu_a$, $\mu_s$ – коэффициенты поглощения и рассеяния; $g$ – фактор анизотропии.

Максимальная глубина проникновения соответствует $z_{mod}^{\max} \approx \sqrt{r/2k}$ при $x = r/2$.

Известно [11], что дерма кожи человека имеет значения длины деполяризации $l_p$ = 0,43 мм (476–514 нм) и 0,46 мм (633 нм). Кроме того, в работе [12] экспериментально установлено, что линейная поляризация сохраняется в пределах 2,5 транспортных длин пробега фотона $l_{tr}$. Так, для кожи, которая для красного и ближнего ИК-излучения имеет значения коэффициентов $\mu_a \cong 0{,}4$ см$^{-1}$ и $\mu_s' \cong 20$ см$^{-1}$, транспортная дина $l_{tr} \cong 0{,}48$ мм. Следовательно, свет может распространяться в коже на длине $\cong 1{,}2$ мм, сохраняя еще линейную поляризацию. Таким образом, можно предположить, что свет, прошедший по рассмотренной траектории, достигнет приемника, сохранив поляризацию; при этом вектор поляризации будет повернут на угол, соответствующий концентрации глюкозы, содержащейся в пронизывающем кожу капиллярном русле.

Поскольку угол поворота вектора поляризации, вызванный содержащейся в крови глюкозой, достаточно мал, необходимо, чтобы поляриметр обладал высокой чувствительностью. Одним из путей повышения чувствительности может быть использование дифференциальной схемы. Рассмотрим принцип ее работы (рис. 2). Два световых луча с интенсивностью $I_0$ проходят через поляризатор *1* с коэффициентом пропускания $T_1$, кювету *2* с коэффициентом пропускания $T_2$ и падают на анализаторы *3* (коэффициент пропускания $T_3$) [13]. Анализаторы двух поляризованных лучей ориентированы так, что их плоскости колебаний повернуты относительно плоскости поляризатора на углы ±45°; таким образом, угол между плоскостями анализаторов составляет 90°. Введение оптически активной жидкости в кювету приводит к повороту плоскости поляризации обоих лучей, что уменьшает интенсивность луча в одном канале (например $I'_3$) и увеличивает в другом ($I_3$).

Вычитая один сигнал из другого, получим разностную интенсивность $\Delta I = I_3 - I'_3$, пропорциональную удвоенной величине поворота плоскости колебаний оптически активным веществом. Эта величина определяется как

$$\Delta I = T_1 T_2 T_3 I_0 \sin 2\varphi\,. \qquad (3)$$

Из выражения (3) видно, что величина $\Delta I$, пропорциональна $2\varphi$, следовательно, рассматриваемая двухканальная дифференциальная схема поляриметра обладает вдвое большей чувствительностью чем одноканальная. Кроме того, предлагаемая здесь схема предполагает использование максимальной крутизны кривой пропускания поляризатора, а не традиционной настройки оптической системы «на темноту», что также должно увеличивать чувствительность оптической части прибора.

Из формулы (3) также видно, что $\Delta I$ зависит не только от измеряемого угла $\varphi$, но и от коэффициента пропускания $T_2$, зависящего

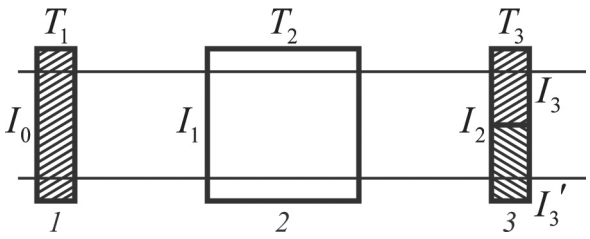



Рис. 2. Оптическая схема дифференциального поляриметра: *1* – поляризатор, *2* – кювета, *3* – анализаторы;
$T_1$ – $T_3$ – коэффициенты пропускания; $I_0$, $I_1$, $I_2$ – интенсивности падающего и прошедших элементы *1*, *2* световых лучей; $I_3$, $I'_3$ – интенсивности световых лучей в двух каналах анализатора

от оптических свойств исследуемой жидкости (коэффициенты $T_1$ и $T_3$ можно считать постоянными). Для того чтобы измеряемый прибором параметр зависел лишь от φ, найдем сумму

$$I_+ = I_3 + I_3' = T_1 T_2 T_3 I_0 . \quad (4)$$

Разделим равенство (3) на (4), тогда получим формулу

$$K = \Delta I / I_+ = \sin 2\varphi . \quad (5)$$

Необходимо отметить, что фотоэлектрические сигналы, обработанные в соответствии с (3)–(5), дают сигнал, пропорциональный измеряемому углу φ, но не зависящий от $T_2$. Последнее важно, так как исследуемые объекты могут менять коэффициент пропускания, в частности, при изменении области измерения.

В настоящей работе была изготовлена лабораторная модель неинвазивного дифференциального глюкометра для регистрации поляризации светового излучения, отраженного верхними слоями кожи (рис. 3). Глубина проникновения зондирующего светового излучения позволяет регистрировать интенсивность света, отраженного кровью микроциркуляторного русла, расположенной на расстоянии около 500 мкм от поверхности кожи.

Для проверки возможности неинвазивного измерения концентрации глюкозы в крови человека был проведен натурный эксперимент. В качестве исследуемого объекта была выбрана подушечка среднего пальца правой руки волонтера. На нее направлялся сфокусированный поляризованный луч лазерного излучения с длиной волны 650 нм и мощностью 20 мВт; рассеянное излучение регистрировалось двумя фотодиодами *5*, *6*, сопряженными с анализаторами *3*, *4*, (см. рис. 3). Далее проводилась обработка получаемых сигналов по методике, описанной выше. Измерения проводились на двух испытуемых (условно здоровые волонтеры 22 и 26 лет); они подвергались процедуре как натощак (это соответствует «–1» мин на графике), так и в течение 60 мин после перорального введения 25 г белого сахара (соответствует 0 мин на графике). Результат этого эксперимента приведен на рис. 4, *а*.

Как известно, сахароза – дисахарид, который состоит из двух моносахаридов: – α-глюкозы и β-фруктозы и относится к так называемым простым сахарам. Последним требуется лишь незначительное переваривание в кишечнике или не требуется вовсе. Поэтому, как только сахароза достигает кишечника, она

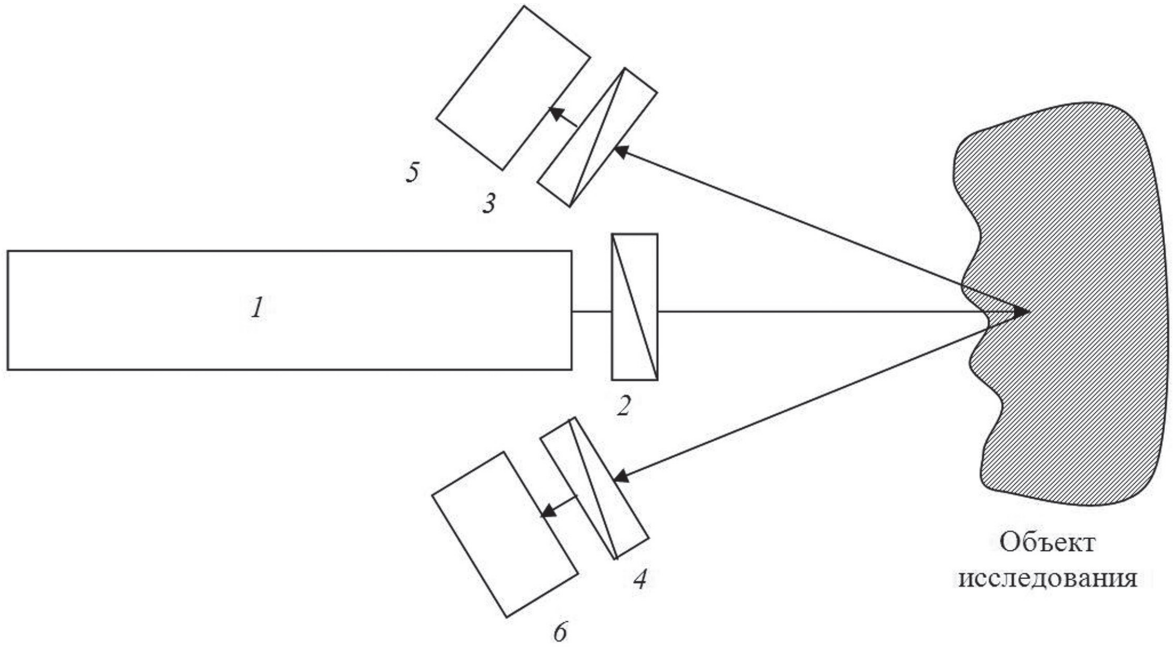



Рис. 3. Структурная схема неинвазивного спекл-глюкометра для измерения угла поворота вектора поляризации обратнорассеянного излучения:
*1* – полупроводниковый лазер; *2* – поляризатор; *3*, *4* –анализаторы; *5*, *6* – фотодиоды

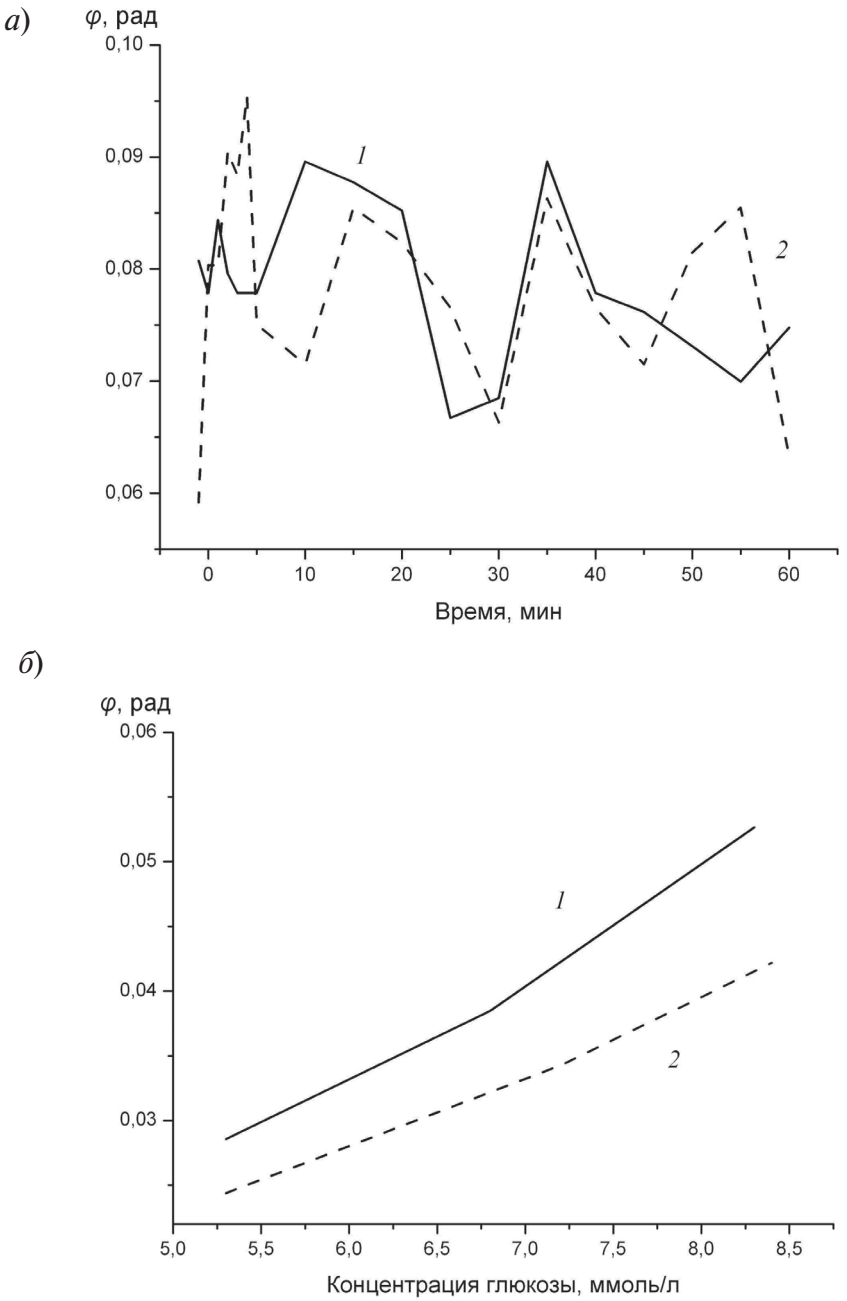



Рис. 4. Зависимости угла поворота плоскости поляризации зондирующего светового луча от времени (*а*) и концентрации глюкозы в крови (*б*) двух волонтеров;
*1*, *2* – испытуемые в возрасте 22 и 26 лет

тут же проникает в кровь. Повышение уровня сахара в крови, вызванное внезапным его поступлением в организм, включает механизм высвобождения гормона инсулина, необходимого для сопровождения этих сахаров к клеткам организма. Сахар быстро расходуется, что приводит к резкому снижению уровня сахара в крови до минимальной отметки (это состояние также известно как гипогликемия, или сахарная печаль). Это понижение вызывает выделе-

ние гормонов стресса, которые высвобождают хранящийся сахар из печени, снова повышая уровень сахара в крови. Таким образом, введение сахара приводит к волнообразному изменению концентрации глюкозы в крови, что можно наблюдать на приведенных графиках у обоих испытуемых. Следует также отметить, что в целом динамика изменения поляризации для них имеет сходный характер.

Для непосредственного определения концентрации глюкозы в крови с помощью предложенного метода потребуется индивидуальная калибровка, что было доказано в эксперименте, где в качестве референтных значений использовались показания стандартного мобильного глюкометра (Accu Chek Active). Как видно из полученных результатов (рис. 4, *б*), коэффициент корреляции между концентрацией глюкозы в крови и углом поворота вектора поляризации обратнорассеянного излучения меняется от человека к человеку. Вызвано это индивидуальными особенностями строения кожного покрова человека.

Итак, в работе обосновывается возможность неинвазивного определения динамики концентрации глюкозы в крови человека методом поляриметрии линейно-поляризованного лазерного светового излучения, обратно рассеянного кожей.

Проводится анализ характера траекторий фотонов в коже человека и делается вывод о возможности построения регистрирующей системы, состоящей из зондирующего светового канала и двух симметрично расположенных приемных каналов. На этой основе предлагается и кратко анализируется концепция построения глюкометра по дифференциальной схеме, позволяющей, как минимум, вдвое повысить чувствительность.

В результате разработана и создана лабораторная модель дифференциального неинвазивного когерентно-оптического глюкометра, позволяющего измерять динамику концентрации глюкозы в крови человека по изменению поляризации зондирующего лазерного излучения, рассеянного кожей. Экспериментальные исследования глюкометра, носящие предварительный характер, *in vivo* на волонтерах, подтверждают его работоспособность и практическую перспективность.

Работа поддержана Федеральной целевой программой «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007—2013 годы».

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kohl, M.** Influence of glucose concentration on light scattering in tissue-simulating phantoms [Text] / M. Kohl, M. Cope // Opt. Lett. – 1994. – Vol. 19. – P. 2170–2172.

2. **Bruulsema, J.T.** Correlation between blood glucose concentration in diabetics and noninvasively measured tissue optics scattering coefficient [Text] / J.T. Bruulsema, J.E. Hayward, T.J. Farrell, [et al.] // Opt. Lett. – 1997. – Vol. 22. – P. 190–192.

3. **Chou, C.** Noninvasive glucose monitoring in vivo with an optical heterodyne polarimeter [Text] / C. Chou, C.Y. Han, Wen-Chuan Kuo [et al.] // Appl. Opt. – 1998. – Vol. 37. – P. 3553–3557.

4. **Cameron, B.D.** Noninvasive glucose sensing utilizing a digital close-loop polarimetric approach [Text] / B.D. Cameron, G.L. Cote // IEEE Trans. Biomed. Eng. – 1997. – Vol. 44. – P. 1221–1227.

5. **Bueno, J.M.** Measurements of the corneal birefringence with a liquid-crystal imaging polariscope [Text] / J.M. Bueno, F.V. Martin // Appl. Opt. – 2002. – Vol. 41 – P. 116–124.

6. **Justin, S.B.** Effect of temperature, pH, and coreal birefringence on polarimetric glucose monitoring in the eye [Text] / S.B. Justin, B.D. Cameron, T. Sangeeta // J. Biomed. Opt. – 2002. – Vol. 7. – P. 321–328.

7. **Mehrubeoglu, M.** Effect of molecular concentrations in tissue-simulating phantoms on images obtained using diffuse reflectance polarimetry [Text] / M. Mehrubeoglu, N. Kehtarnavaz // Opt. Express – 1998. – Vol. 3. – P. 286–297.

8. **Wang, X.D.** Monte Carlo model and single-scattering approximation of the propagation of polarized light in turbid media containing glucose [Text] / X.D. Wang, G. Yao, L.H. Wang, // Appl. Opt. – 2002. – Vol. 41. – P. 792–801.

9. **Cameron, B.D.** Polarization-based diffuse reflectance imaging for noninvasive measurement of glucose [Text] / B.D. Cameron, Y. Li // Journal of Diabetes Science and Technology. – 2007. – Vol. 1. – P. 873–878.

10. **Studinski, R.C.N.** Methodology for examining polarized light interactions with tissues and tissuelike media in the exact backscattering direction [Text] / R.C.N. Studinski, I.A. Vitkin // Journal of Biomedical Optics. – 2000. – Vol. 3. – P. 330–337.

11. **Svaasand, L.O.** Dosimetry of laser radiation in medicine and biology [Text] / L.O. Svaasand, Ch.J.

Gomer // SPIE Inst. Advanced Opt. Techn. – 1995. – Vol. IS5. – P. 114–132.

12. **Ostermeyer, M.R.** Nearfield polarization effects on light propagation in random media [Text] / M.R. Ostermeyer, D.V. Stephens, L. Wang, S.L. Jacques // OSA TOPS on Biomedical optics spectroscopy and diagnostics. – 1996. – Vol. 3. – P. 20–25.

13. **Дубровский, В.А.** Дифференциальный оптический поляриметр [Текст] / В.А. Дубровский, С.Е. Деев // Известия Академии наук. Серия физическая. – 1995. – Т. 59. – № 6. – С. 156–161.

УДК 537.533.3:537.291

*В.В. Павлов*

# ПРИНЦИП КОНФОРМНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Традиционная теория построения электростатических энергоанализаторов целиком основывается на прямых задачах динамики заряженных частиц в электрических полях. Начальным этапом конструирования электронно-оптического устройства всегда является выбор электродной конфигурации, как правило, по соображениям симметрии и простоты изготовления. Затем следует стадия интегрирования уравнений движения и построение траекторий. В найденных таким прямым способом системах обычно не удается реализовать достаточно высокий порядок фокусировки одновременно с большой энергетической дисперсией. Для полей с плоскостью симметрии и двумерных гармонических полей можно предложить альтернативный подход к выбору структуры поля, воспользовавшись особой физической интерпретацией конформного преобразования переменных в уравнении Гамильтона–Якоби.

Предмет исследования в данной работе – двумерные электростатические поля $\varphi(x, y)$, обеспечивающие идеальную фокусировку в плоскости $0xy$, которые являются базой построения энергоанализаторов высокого разрешения для электронной спектроскопии [1]. Замысел состоит в следующем: взять за основу одно из таких полей, фокусирующее плоские пучки, и трансформировать его вместе с траекториями, используя при этом аппарат теории функций комплексного переменного. Эта теория основана на преобразовании плоскости к конформным координатам и преобразовании уравнения Гамильтона – Якоби к этим же координатам вместе с траекториями и потенциалом $\varphi(x, y)$. Необходимо также упомянуть, что все исследования ведутся в безразмерных координатах [2]. Настоящая работа направлена на развитие идей, впервые опубликованных в статье [3].

Уравнение Гамильтона – Якоби для укороченного действия (когда функция $H$ не зависит от времени явно, т. е. система консервативна) в общем случае имеет вид

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

в частности для плоского движения, –

$$\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2\right]=E-\varphi(x, y). \quad (2)$$

Преобразуем уравнение Гамильтона – Якоби (2) к конформным координатам $u$, $v$. Таким образом, старые координаты $x$, $y$ есть функции новых.

Введем комплексную величину $z = x + iy$ и будем считать, что $z$ есть аналитическая функция от комплексной величины $\omega = u + iv$.

Перейдем от переменных $x$, $y$ в уравнении (2) к переменным $z$, $\bar{z}$.

Связь между операторами дифференцирования при таком преобразовании будет иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}-i\frac{\partial}{\partial y}\right),\ \frac{\partial}{\partial \bar{z}}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right); \quad (3)$$

эти два оператора носят название операторов Колосова [4].

С учетом всех вышеприведенных соотношений уравнение Гамильтона–Якоби примет вид

$$2S_z S_{\bar{z}} = E - \varphi^*(z, \bar{z}); \qquad (4)$$

помножим обе части этого выражения на $\frac{dz}{d\omega}\frac{d\bar{z}}{d\bar{\omega}}$, тогда получим уравнение

$$2\frac{\partial S}{\partial \omega}\frac{\partial S}{\partial \bar{\omega}} = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial v}\right)^2\right] = \\ = -\varphi^{**} = -\left|\frac{dz}{d\omega}\right|^2 (\varphi^* - E). \qquad (5)$$

Это уравнение в координатах $u$, $v$ можно трактовать физически как реальное уравнение Гамильтона – Якоби в декартовых осях $u$, $v$, описывающее движение в плоскости, происходящее под действием поля с потенциалом $\varphi^{**}$ при нулевой полной энергии $E^* = 0$. На это обстоятельство впервые обратил внимание Э. Гурса [5].

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

$$u = u(x, y), \; v = v(x, y), \qquad (6)$$

подставив в них выражения траекторий $x(t)$, $y(t)$ на плоскости ($x$, $y$). Потенциал $\varphi^{**}$ ($u$, $v$) отличается от прежнего $\varphi(x, y)$ не только преобразованием аргументов, но и множителем $\left|\frac{dz}{d\omega}\right|^2$.

Если преобразование $z(\omega)$ близко к тождественному $z(\omega) = \omega$, то деформация потенциала $\varphi(x, y)$ и траекторий незначительна, а при нелинейных функциях $z(\omega)$ структура нового поля может отличаться от прежнего сколь угодно сильно. Семейства изоэнергетических траекторий деформируются в соответствии с зависимостью $z(\omega)$, но некоторые их свойства сохраняются. Известно, что конформное отображение переводит любую бесконечно малую фигуру, расположенную в окрестности точки $z_0$, в подобную ей фигуру (т. е. точка отобразится в точку) и сохраняет углы между кривыми по величине и направлению.

Поэтому, если поле было идеально фокусирующим, т. е. переводило весь поток траекторий из точки в точку, то все преобразованные поля с потенциалами $\varphi^{**}$ также будут идеально фокусирующими.

Из вышеизложенного вытекают два важных следствия.

1. Если плоскости ($x$, $y$) и ($u$, $v$) ассоциировать с электрическими полями, для которых они являются плоскостями симметрии, то изложенный алгоритм позволяет трансформировать поля с управлением дисперсионными и фокусирующими свойствами.

2. Указанный способ преобразования позволяет неограниченно размножать многообразие полей с идеальной фокусировкой, если известно хотя бы одно.

**Поле Корсунского**

Наиболее простым и интересным для нашей методики является поле Корсунского, которое и будет изучаться достаточно подробно [6]:

$$\varphi = x^2 + y^2. \qquad (7)$$

В реальности такое распределение получится для гармонического поля гиперболоидов вращения

$$\Phi = x^2 + y^2 - 2z^2$$

в плоскости симметрии $\varphi = \Phi|_{z=0}$ (рис 1, *а*).

Подставляем этот потенциал в уравнения движения

$$\ddot{x} = -\varphi_x(x, y), \; \ddot{y} = -\varphi_y(x, y); \qquad (8)$$

тогда придем к следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \ddot{x} = -2x, \\ \ddot{y} = -2y. \end{cases} \qquad (9)$$

Решая уравнения (9) с начальными условиями

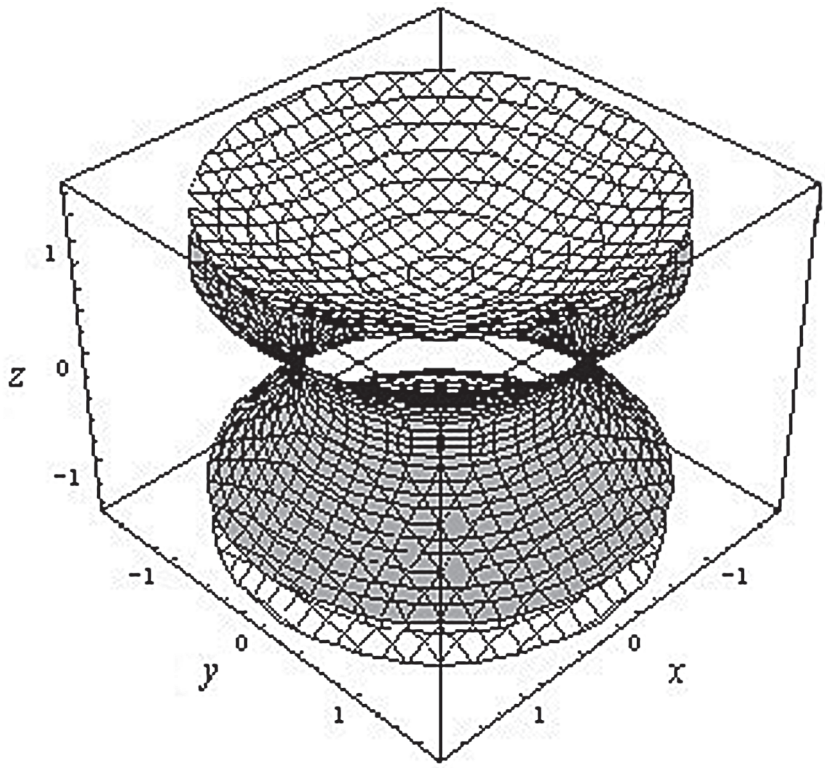
$$x, y|_{t=0} = x_0, y_0; \; \dot{x}, \dot{y}|_{t=0} = \dot{x}_0, \dot{y}_0, \qquad (10)$$

получим следующее:

$$x = x_0 \cos\sqrt{2}t + \frac{\dot{x}_0}{\sqrt{2}}\sin\sqrt{2}t;$$

$$y = y_0 \cos\sqrt{2}t + \frac{\dot{y}_0}{\sqrt{2}}\sin\sqrt{2}t. \qquad (11)$$

*а*)




*б*)

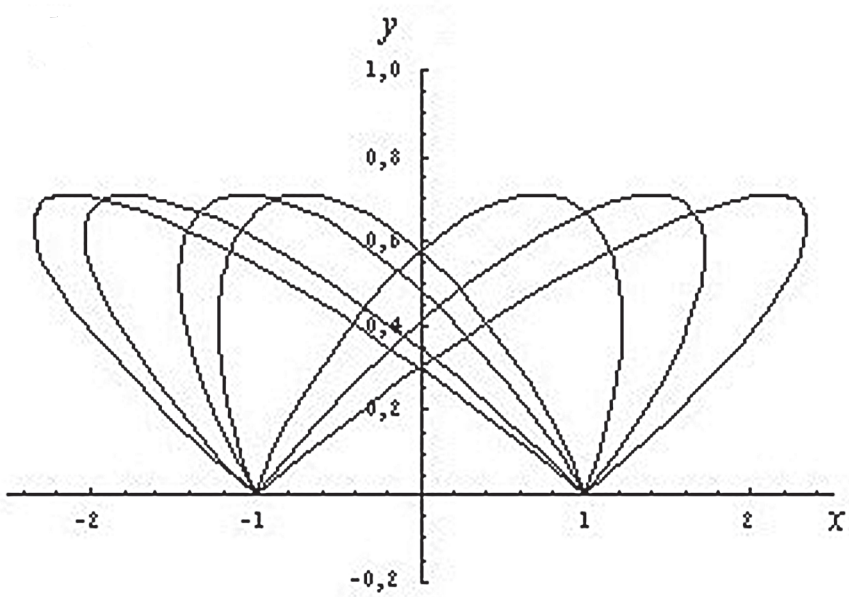



Рис. 1. Графическое представление электростатического поля Корсунского: *а* – поверхности гиперболоидов вращения; $\Phi = \pm 1$; *б* – траектории частиц при разных энергиях и углах вылета, стартовая точка $x = 1$; $y = 0$

Анализ решения показывает, что частицы, вылетевшие из точки $(x_0, y_0)$, попадут в противоположную точку $(-x_0, -y_0)$ через момент времени $\tau = \pi/\sqrt{2}$. Например, если взять в качестве стартовой точку (1; 0), то к указанному промежутку времени все частицы сфокусируются в точке (–1; 0) (рис. 1, *б*).

Энергоанализатор обязательно должен обладать двумя свойствами: во-первых, фокусирующим (фокусировка частиц по углам вылета); во-вторых, диспергирующим (разделение частиц по энергиям).

Однако видно, что поле Корсунского не подходит для использования в энергоанализе из-за невозможности обеспечить второе свойство, так как все частицы сфокусируются в одной точке не только при вылете с разными углами, но и с разными энергиями. Но если использовать теорему Гурса, то можно с помощью конформного преобразования трансформировать это поле так, чтобы у него появилась дисперсия. Покажем это.

### Варианты потенциалов полей после преобразования

Рассмотрим изменения траекторий частиц после различных конформных преобразований.

Преобразуем потенциал (7) с помощью функции $\omega = z^{1/2}$ по формуле (5). Положим $E = 1$ и учтем, что

$$\varphi = x^2 + y^2 = z\bar{z}; \qquad (12)$$

тогда получим следующее выражение для потенциала:

$$\varphi^{**}(u,v) = 4((u^2+v^2)^3 - u^2 - v^2). \qquad (13)$$

Для того чтобы определить траектории при новом потенциале (13), необходимо воспользоваться формулами преобразования (6). Используя формулу для извлечения корней из комплексных чисел, можно записать

$$u + iv = r^{1/2}\left(\cos\frac{\theta+2\pi k}{2} + i\sin\frac{\theta+2\pi k}{2}\right), \qquad (14)$$

где

$$r = \sqrt{x^2+y^2}\ ,\ \theta = \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right). \qquad (15)$$

Выделяем мнимую и вещественную части и выбираем $k = 0$, что обеспечит сохранение точки старта на прежнем месте; получим следующие траектории:

$$u(t) = \sqrt{r(t)}\cos\left[\frac{\theta(t)}{2}\right];\ \ v(t) = \sqrt{r(t)}\sin\left[\frac{\theta(t)}{2}\right]. \qquad (16)$$

Вычисления с помощью формул (16) в промежутке времени от 0 до $\tau = \pi/\sqrt{2}$ дают вид траекторий, показанных на рис. 2, *а*.

Рассмотрим другое преобразование поля Корсунского, например $\omega = \exp(z)$. Действуем как в предыдущем случае, т. е. положим $E = 1$ и используем выражение (12); тогда по формуле (5) получим (рис. 3, *а*):

$$\varphi^{**}(u,v) = \frac{\ln^2\sqrt{u^2+v^2} + \left(\arccos\dfrac{u}{\sqrt{u^2+v^2}}\right)^2 - 1}{u^2+v^2}. \qquad (17)$$

На эквипотенциальных линиях можно заметить небольшие изломы в точках, соответствующих $v = 0$; их происхождение есть следствие неоднозначности Римановой поверхности.

Траектории при таком преобразовании определяются так же, как и в предыдущем случае, т. е. из соотношений (6):

$$u + iv = e^{x+iy} = e^x e^{iy} = e^x\cos y + ie^x\sin y\ . \qquad (18)$$

Сопоставляя мнимую и вещественную части, получим

$$u(t) = e^{x(t)}\cos y(t)\ ;\ \ v(t) = e^{x(t)}\sin y(t)\ . \qquad (19)$$

На рис. 3, *б* приведены траектории (19) в промежутке времени $t \in [0, \pi/\sqrt{2}]$. Фокусировка частиц, вылетевших из точки ($e$; 0), происходит в точке с координатой ($e^{-1}$; 0).

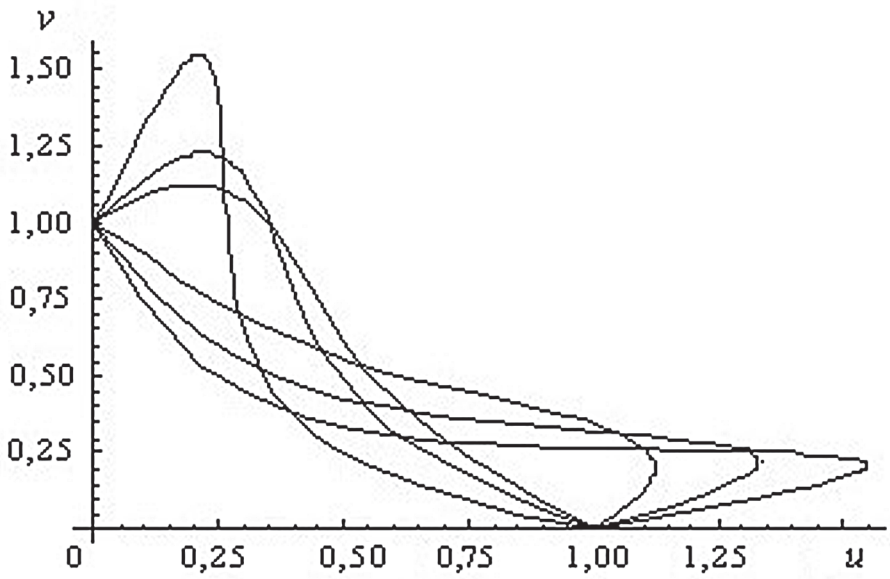
Исследуем преобразование потенциала (7) функцией $\omega = \ln z$. Положим $E = 1$ и применим к выражению (12) формулу (5). Тогда новое поле будет описываться потенциалом

$$\varphi^{**}(u) = e^{4u} - e^{2u}\ . \qquad (20)$$

Формулы преобразования (6) дадут выражения для трансформированных траекторий. Для их определения потребуется применение логарифма к комплексному числу. В этом случае получим:

$$u + iv = \ln r + i(\theta + 2\pi k); \qquad (21)$$

*а*)




*б*)

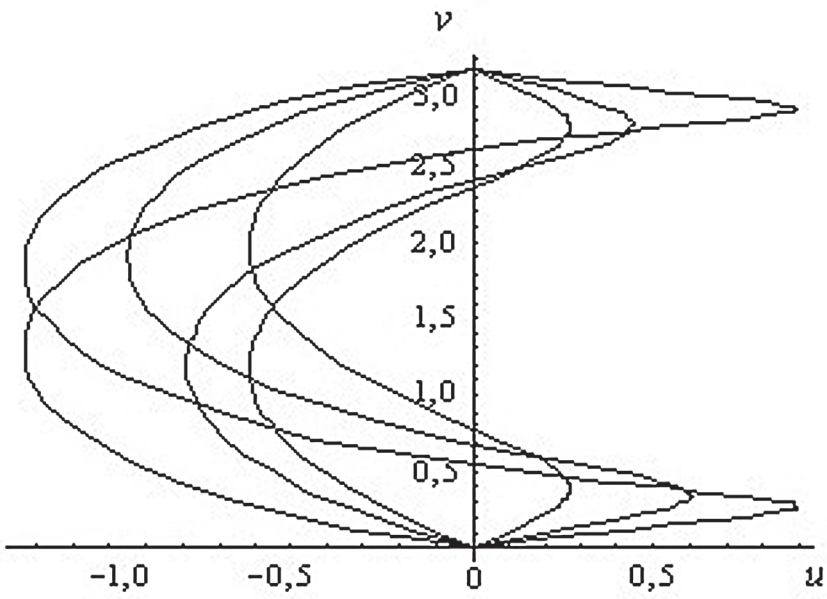
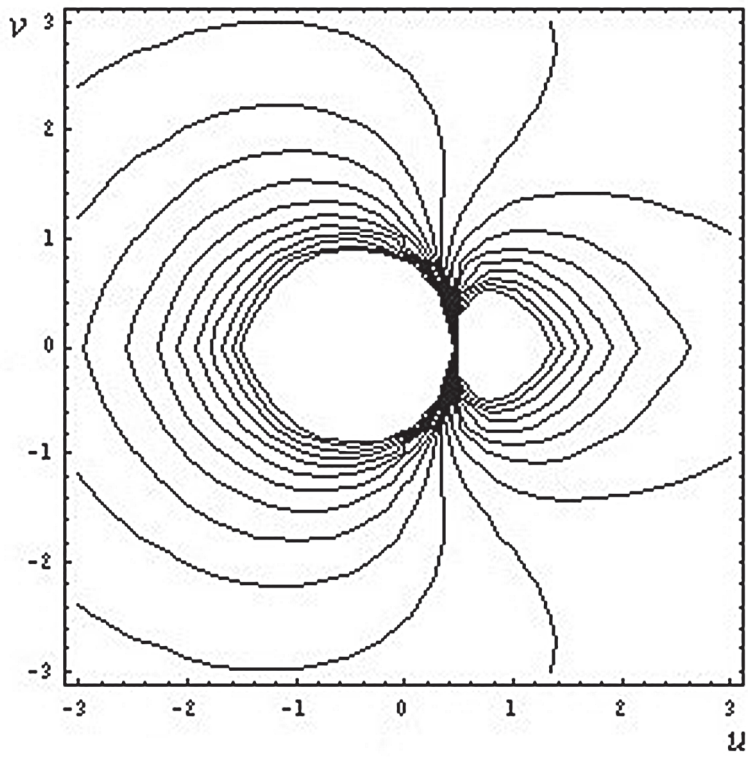



Рис. 2. Траектории частиц после преобразования потенциала по формулам: $\omega = z^{1/2}$ (*а*); $\omega = \ln z$ (*б*)

*а*)




*б*)

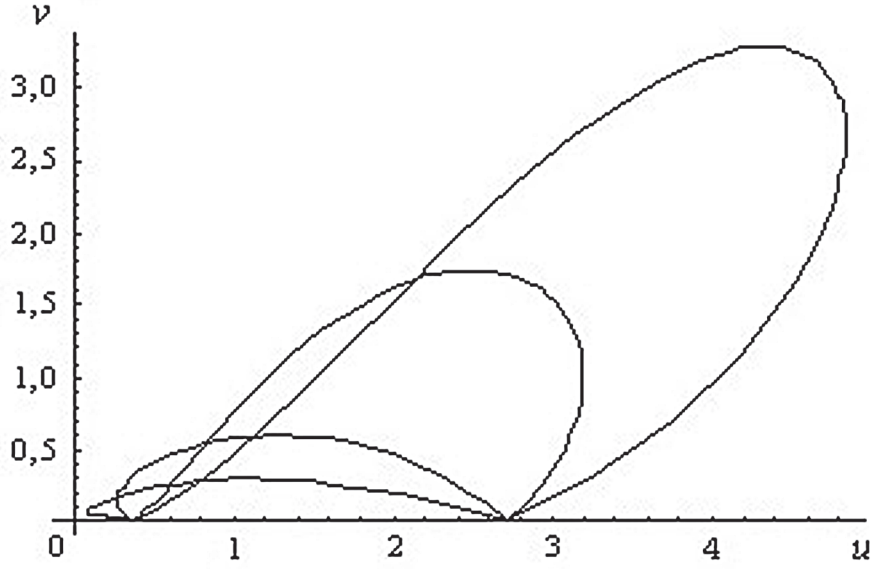



Рис. 3. Результат преобразования поля Корсунского по формуле $\omega = \exp(z)$:
*а* – эквипотенциальный портрет поля; *б* – соответствующие траектории частиц

$r$ и $\theta$ определяются из формул (15).

При $k = 0$ обеспечивается место старта в начале координат:

$$u(t) = \ln(r(t))\,;\ v(t) = \arccos(\theta(t))\,. \qquad (22)$$

После такого преобразования оказывается, что точки старта частиц и их фокусировки лежат на оси $v$ (см. рис 2, *б*).

**Расчет дисперсии**

В качестве объекта изучения возьмем потенциал (20), получаемый при преобразовании $\omega = \ln z$. Выбор можно объяснить тем, что такое поле является одномерным. Таким образом появляется возможность проинтегрировать уравнение движения в явном виде и при любых значениях энергии.

Из закона сохранения энергии получаем следующее уравнение:

$$\frac{\dot{u}^2}{2} + \varphi^{**}(u) + \frac{\dot{v}^2}{2} = E. \qquad (23)$$

Введем обозначения

$$\frac{\dot{u}^2}{2} + \varphi^{**}(u) = E_u;\ \frac{\dot{v}^2}{2} = E_v\,; \qquad (24)$$

тогда из первого соотношения получим следующие уравнение:

$$\dot{u} = \frac{du}{dt} = \sqrt{2(E_u - e^{4u} + e^{2u})}\,. \qquad (25)$$

Поскольку во время движения частиц компонента скорости вдоль оси $u$ дважды меняет свой знак, интегрирование уравнения (25) проведем в два этапа.

Сначала рассмотрим область $u > 0$. Интегрируя по этой области, получим выражение для времени $t_1$:

$$t_1 = 2\tau_1 = \frac{1}{\sqrt{2E_u}} \ln\sqrt{1+4E_u}\,. \qquad (26)$$

Аналогичные действия проводим над этим уравнением для области $u < 0$:

$$t_2 = 2\tau_2 = \frac{1}{\sqrt{2E_u}} \ln\left(\frac{1}{\sqrt{1+4E_u}}\right). \qquad (27)$$

Общее время полета от старта до фокусировки будет выражаться как

$$t = t_1 + |t_2| = \frac{1}{\sqrt{2E_u}} \ln(1+4E_u)\,. \qquad (28)$$

Пусть $p$ – координата точки прилета частиц. Поскольку сила вдоль оси $v$ не действует, то в этом направлении будет просто дрейф. Тогда

$$p = \dot{v}t = \frac{\dot{v}}{\sqrt{2E_u}} \ln(1+4E_u)\,. \qquad (29)$$

Используя соотношения (24), выразим $E_u$ и $\dot{v}$ через полную энергию влетающей частицы и тогда получим следующее выражение:

$$p = \mathrm{ctg}\alpha \cdot \ln(1+4E\sin^2\alpha)\,. \qquad (30)$$

По определению дисперсия по энергии следует выражению

$$D_E = \frac{\partial p}{\partial E} E\,. \qquad (31)$$

После вычисления производной $\frac{\partial p}{\partial E}$ дисперсия выражается как

$$D_E = \frac{2E \cdot \sin 2\alpha}{1+4E\sin^2\alpha}. \qquad (32)$$

Таким образом, в работе излагается эффективный метод конструирования электрических полей, которые могут найти применение в энергоанализаторах. В основе метода лежит преобразование исходного поля и траекторий заряженных частиц к конформным координатам. Данная возможность иллюстрируется рядом примеров трансформации электростатического поля Корсунского посредством функций комплексного переменного. Установлено, что конформное преобразование $\omega = \ln z$ для поля Корсунского дает новый вид потенциала (20), который обладает помимо фокусирующего свойства, еще и диспергирующим, поскольку вычисленная энергетическая дисперсия $D_E$ отлична от нуля. Это обстоятельство открывает дальнейший путь для исследования применимости полученного поля в энергоанализирующих устройствах корпускулярной оптики.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Голиков, Ю.К.** Обратные задачи теории электростатических энергоанализаторов [Текст] / Ю.К. Голиков, К.Г. Уткин, Д.В. Григорьев // ЖТФ.– 1999.– Т. 69.–№ 9.– С. 128–131.

2. **Голиков, Ю.К.** Расчет элементов электростатических электронно-оптических систем [Текст]: Учеб. пос. / Ю.К. Голиков, К.Г. Уткин, В.В. Чепарухин. – Л.: Изд-во ЛПИ, 1984. – 79 с.

3. **Голиков, Ю.К.** Конформно-инвариантные фокусирующие системы [Текст] / Ю.К. Голиков // Труды ЛПИ № 345. Физическая электроника. – Л.: Изд-во ЛПИ, 1975. – С. 82–84.

4. **Лаврентьев, М.А.** Методы теории функций комплексного переменного [Текст] / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат.– М.: Физматгиз, 1958.– 688 с.

5. **Уиттекер, Э.Т.** Аналитическая динамика [Текст] / Э.Т. Уиттекер.– М.: Едиториал УРСС, 2004.– 504 с.

6. **Голиков, Ю.К.** Теория синтеза электростатических энергоанализаторов [Текст] / Ю.К. Голиков, Н.К. Краснова.– СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010.– 409 с.

УДК 535.36: 534.29

*Ю.М. Мокрушин*

# ВЛИЯНИЕ НЕЛИНЕЙНОСТИ АКУСТООПТИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДУЛЯТОРЕ ИЗ ПАРАТЕЛЛУРИТА НА ФОРМИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

В работах [1, 2] было получено общее решение интегрального уравнения для поля в (+1)-м дифракционном порядке на выходной апертуре акустооптического модулятора (АОМ), а также выражение для средней по времени интенсивности света в сигнале изображения при его модуляции по гармоническому закону в приближении малой эффективности дифракции. Особенностью работы АОМ при формировании телевизионного изображения в системе с импульсным лазером является существенная нелинейность его амплитудной передаточной характеристики, приводящая к уменьшению рабочего динамического диапазона системы и искажению светового сигнала при больших эффективностях дифракции.

Цель настоящей работы – теоретическое исследование нелинейных искажений, возникающих в световом сигнале изображения строки в зависимости от амплитуды ультразвукового сигнала и параметров акустооптического взаимодействия.

**Приближение третьего порядка взаимодействия**

Для оценки влияния нелинейности процесса дифракции света на ультразвуке на формирование сигнала изображения строки при нахождении дифрагированного поля учтем третий порядок взаимодействия. Полагаем, что амплитуда входного ультразвукового сигнала изменяется по гармоническому закону:

$$A(\mathbf{r}) = A_0\left[1 + m_0\cos\left(2\pi f_0 \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{v}}\right)\right], \qquad (1)$$

где $A_0$, $m_0$, $f_0$ – амплитуда, глубина и частота модуляции; $\mathbf{v}$ – вектор скорости; $\mathbf{r}$ – направление распространения ультразвукового возмущения в среде. С учетом амплитуды (1) воспользуемся выражением из работы [1, формула (66)] для поля на выходной апертуре акустооптического модулятора. Как было показано в работе [2], в приближении первого порядка взаимодействия, контраст практически не зависит от углов $\alpha$. Будем считать фокусное расстояние входной цилиндрической линзы $F_1$ достаточно большим. В этом случае зависимостью амплитуд и фаз спектральных составляющих дифрагированного поля от угла $\alpha$ можно пренебречь. Аналогично подходу, использованному в работе [2], для каждой декартовой составляющей поля найдем мгновенное распределение интенсивности света в плоскости экрана по координате $x_1$. Суммируем вклады от всех составляющих поля, а также производим усреднение по времени (см. выражения (35), (36) из работы [2]); таким образом найдем среднее по времени распределение интенсивности света в строке на экране:

$$I_1(x_1) = \bar{\Gamma}_0\,\chi_0^2\left\{C_0 + 2\sum_{n=1}^{6} e^{-\left(\frac{\pi n f_0 \tau_0}{2\sqrt{\ln 2}}\right)^2} \times \right.$$
$$\left. \times\left[C_{n1}\cos\left(\frac{2\pi n f_0 x_1}{v}\right) + C_{n1}\sin\left(\frac{2\pi n f_0 x_1}{v}\right)\right]\right\}, \qquad (2)$$

где

$$C_0 = \sum_{k=1}^{2}\sum_{l=-3}^{3}(A_{lk}^2 + B_{lk}^2); \qquad (3)$$

$$C_{n1} = \sum_{k=1}^{2}\sum_{l=-3}^{3}\sum_{m=-3}^{3}(A_{lk}A_{mk} + B_{lk}B_{mk})\times \times\delta(l-m-n); \qquad (4)$$

$$C_{n2} = \sum_{k=1}^{2}\sum_{l=-3}^{3}\sum_{m=-3}^{3}(A_{lk}B_{mk} - B_{lk}A_{mk})\times \times\delta(l-m-n); \qquad (5)$$

$$\begin{aligned} A_{l1} &= \cos\varphi(\theta_l)D_l(\theta_l) - \rho(\theta_l)\sin\varphi(\theta_l)H_l(\theta_l);\\ B_{l1} &= \cos\varphi(\theta_l)H_l(\theta_l) + \rho(\theta_l)\sin\varphi(\theta_l)D_l(\theta_l);\\ A_{l2} &= \sin\varphi(\theta_l)D_l(\theta_l) + \rho(\theta_l)\cos\varphi(\theta_l)H_l(\theta_l);\\ B_{l2} &= \sin\varphi(\theta_l)H_l(\theta_l) - \rho(\theta_l)\cos\varphi(\theta_l)D_l(\theta_l); \end{aligned} \qquad (6)$$

$\delta(k)$ – дельта-функция,

$$\left(D_l = \mathrm{Re}(\bar{S}_l),\ H_l = \mathrm{Im}(\bar{S}_l)\right);$$

$$\bar{S}_0 = K_{12}(\theta_0^{(1)},\theta_0^{(0)}) - \frac{\chi_0^2}{8}\{S(0,0,0) + + \frac{m_0^2}{4}\left[S(0,0,\pm1) + S(0,\pm1,\pm1) + S(0,\pm1,0)\right]\}; \qquad (7)$$

$$\bar{S}_{\pm1} = \frac{m_0}{2}\Big\{K_{12}(\theta_{\pm1}^{(1)},\theta_0^{(0)})\,\Upsilon(\beta_{\pm1,0}^{(1)}) - \frac{\chi_0^2}{8}\times \times\Big[S(\pm1,\pm1,\pm1) + S(\pm1,\pm1,0) + S(\pm1,0,0) + + \frac{m_0^2}{4}\Big[S(\pm1,0,\pm1) + S(\pm1,0,\mp1) + + S(\pm1,\pm2,\pm1)\Big]\Big]\Big\}; \qquad (8)$$

$$\bar{S}_{\pm2} = \frac{\chi_0^2}{8}\frac{m_0^2}{4}\left[S(\pm2,\pm2,\pm1) + S(\pm2,\pm1,\pm1) + + S(\pm2,\pm1,0)\right]; \qquad (9)$$

$$\bar{S}_{\pm3} = \frac{\chi_0^2}{8}\frac{m_0^3}{8}S(\pm3,\pm2,\pm1); \qquad (10)$$

$$K_{12}(\theta_{m+1},\theta_m) = \frac{1}{\sqrt{2}(1+\rho_{m+1}^2)}\times \times e^{-i\mathrm{arctg}\left[\frac{(\rho_{m+1}+\rho_m)}{1+\rho_{m+1}\rho_m}\mathrm{tg}(\varphi_m+\varphi_{m+1})\right]}\times \times\Big[(\rho_{m+1}+\rho_m)^2 + (1+\rho_{m+1}\rho_m)^2 + +(1-\rho_{m+1}^2)(1-\rho_m^2)\cos2(\varphi_m+\varphi_{m+1})\Big]^{1/2}; \qquad (11)$$

$$K_{21}(\theta_{m+1},\theta_m) = K_{12}^*(\theta_{m+1},\theta_m); \qquad (12)$$

$$S(p,m,n) = \Upsilon(\beta_{pm}^{(3)})\Upsilon(\beta_{mn}^{(2)})\Upsilon(\beta_{n0}^{(1)})\times \times K_{12}(\theta_p^{(3)},\theta_m^{(2)})K_{21}(\theta_m^{(2)},\theta_n^{(1)})K_{12}(\theta_n^{(1)},\theta_0^{(0)}); \qquad (13)$$

$$\bar{\Gamma}_0 = \frac{c\,E_0^2\tau_0\,a_0^2}{16\sqrt{\pi\ln2}\lambda_0\,\mathrm{M}_1'\mathrm{M}_2'T\,F_1}, \qquad (14)$$

где

$$\chi_0 = \frac{\pi A_0\,\xi^0 n_0^3\,L(p_{11}-p_{12})}{2\lambda_0} \qquad (15)$$

– индекс модуляции; $n$ =1–6; $l$, $m$ = –3, –2, ..., +3; $\xi^0$ – нормированная деформация среды; $(p_{11}-p_{12})$ – фотоупругие постоянные кристалла парателлурита ($TeO_2$); $L$ – ширина пьезопреобразователя; $E_0$ – напряженность электрического поля световой волны в воздухе; $\tau_0$ – длительность светового импульса; $a_0$ – радиус падающего на линзу светового пучка; $F_1$ – фокусное расстояние входной линзы; $\rho_m, \rho_{m+1}$ – эллиптичности падающей и дифрагированной световых волн.

Из выражения (2) видно, что при учете третьего порядка взаимодействия, помимо компонент $C_{11}$ и $C_{12}$, определяющих модуляцию с основной частотой $f_0$, в сигнале изображения будут присутствовать составляющие с более высокими гармониками (вплоть до шестой входного сигнала), приводящие к его искажению. Для численной оценки степени искажения введем коэффициент $\eta_{нел}$, характеризующий усредненное за период основной частоты среднеквадратичное отклонение интенсивности в сигнале изображения от составляющей с частотой первой гармоники $f_0$:

$$\eta_{\text{нел}} = \frac{\sqrt{\frac{1}{x_0}\int_0^{x_0}\left[I_1(x_1) - I_1(x_1)\big|_{n=1}\right]^2 dx_1}}{\left|I_1(x_1)\right|_{n=1}} = \frac{\sqrt{\sum_{n=2}^{6} e^{-(\varphi_0 n)^2}\left(C_{n1}^2 + C_{n2}^2\right)}}{\sqrt{2}e^{-(\varphi_0)^2}\sqrt{C_{11}^2 + C_{12}^2}}, \quad (16)$$

где $\varphi_0 = \dfrac{\pi f_0 \tau_0}{2\sqrt{\ln 2}}$, $x_0 = \dfrac{v}{f_0}$.

Коэффициент $\eta_{\text{нел}}$ был рассчитан для различных значений $\chi_0$, частот $f_0$ и длительностей светового импульса $\tau_0$. На рис. 1 представлены зависимости $\eta_{\text{нел}}$ от $\chi_0$ для различных модулирующих частот $f_0$. Расчеты производились при $m_0 = 1$, $\lambda_0 = 510{,}6$ нм, $f = 80$ МГц, $L = 4$ мм. Из графиков видно, что нелинейные искажения гармонического сигнала в изображении при увеличении индекса модуляции различны для разных модулирующих частот $f_0$. При увеличении индекса модуляции $\chi_0$, начиная с некоторого граничного значения, которое увеличивается с увеличением частоты $f_0$, нелинейные искажения в сигнале изображения резко возрастают. На низких частотах модуляции эти искажения особенно велики. Увеличение длительности светового импульса приводит к некоторому снижению уровня нелинейных искажений с одновременным уменьшением контраста в изображении. На рис. 2 показано частотное поведение функций передачи контраста *M*, *N* при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$:

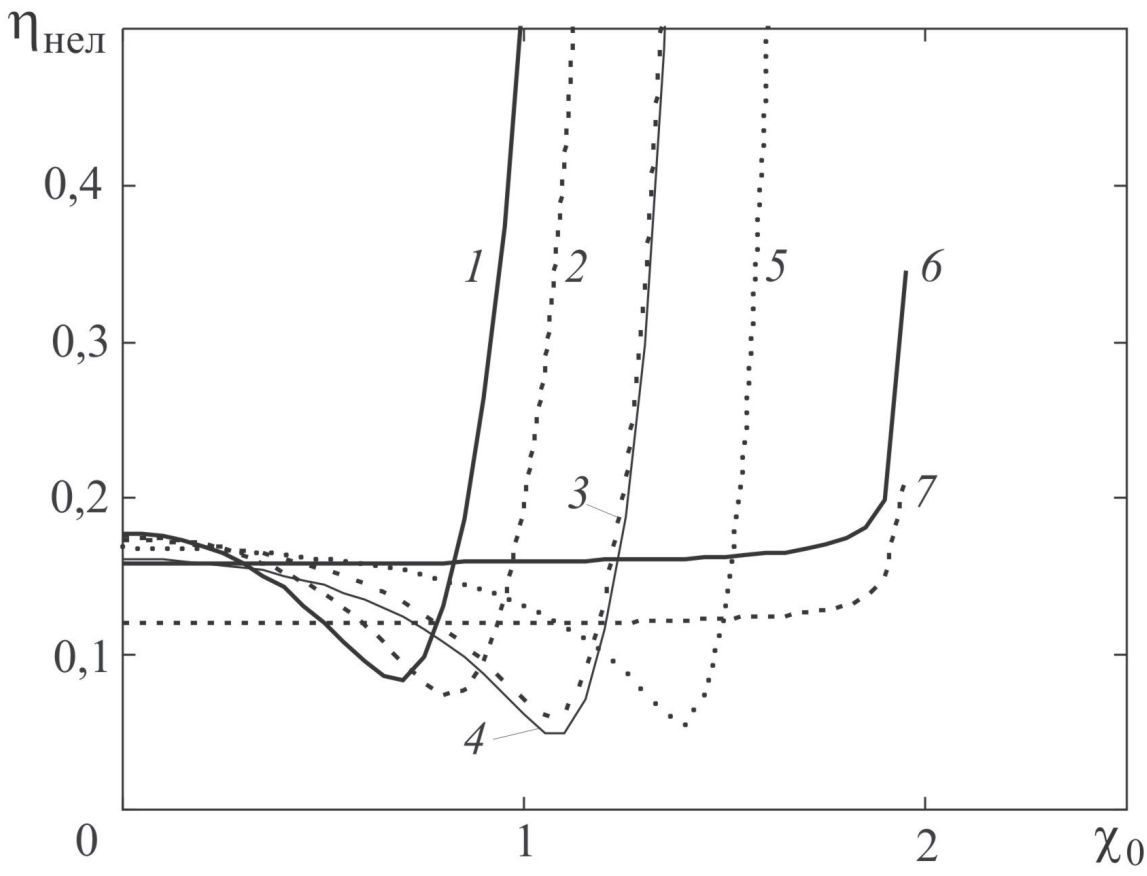



Рис. 1. Зависимость коэффициента нелинейных искажений от индекса модуляции для различных частот модуляции $f_0$, МГц ($\tau_0$ = 10 нс): 0,5 (*1*), 3 (*2*), 5 (*3*), 7 (*5*), 10 (*6*); ($\tau_0$ = 30 нс): 5 (*4*), 10 (*7*) МГц

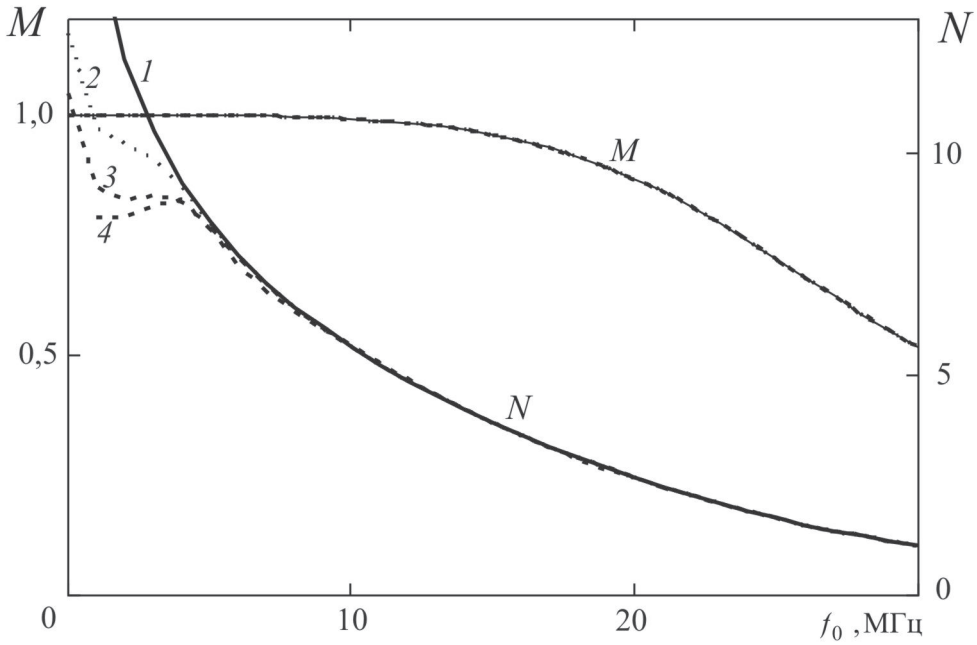



Рис. 2. Частотная зависимость функций передачи контраста при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$ : 0,01 (*1*); 0,2 (*2*); 0,4 (*3*); 0,8 (*4*)

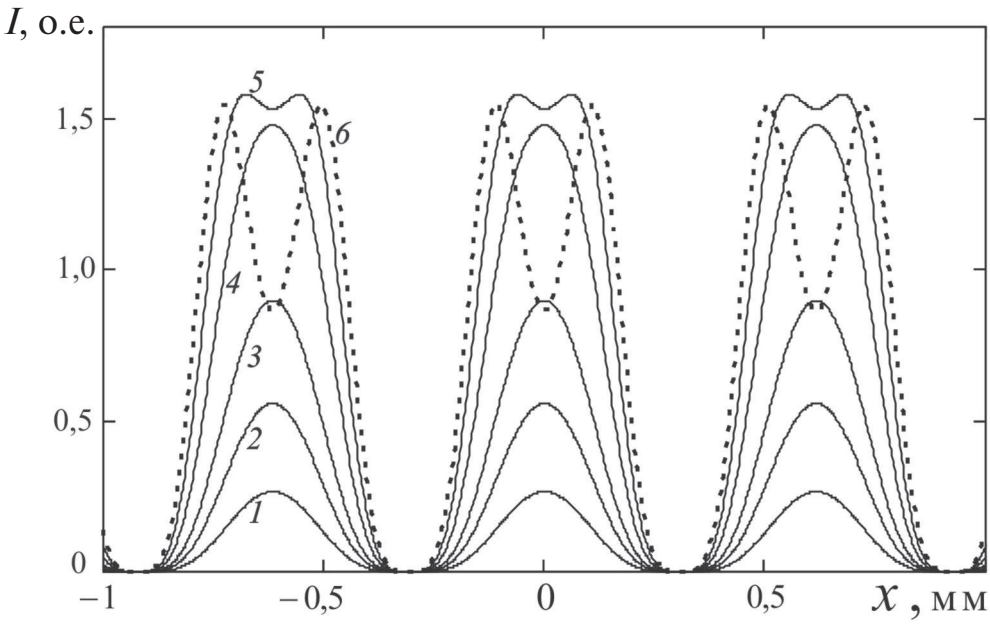



Рис. 3. Зависимость изменения амплитуды и формы гармонического сигнала в изображении на частоте модуляции $f_0 = 1$ МГц при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$ : 0,2 (*1*); 0,3 (*2*); 0,4 (*3*); 0,6 (*4*); 0,8 (*5*); 1,0 (*6*)

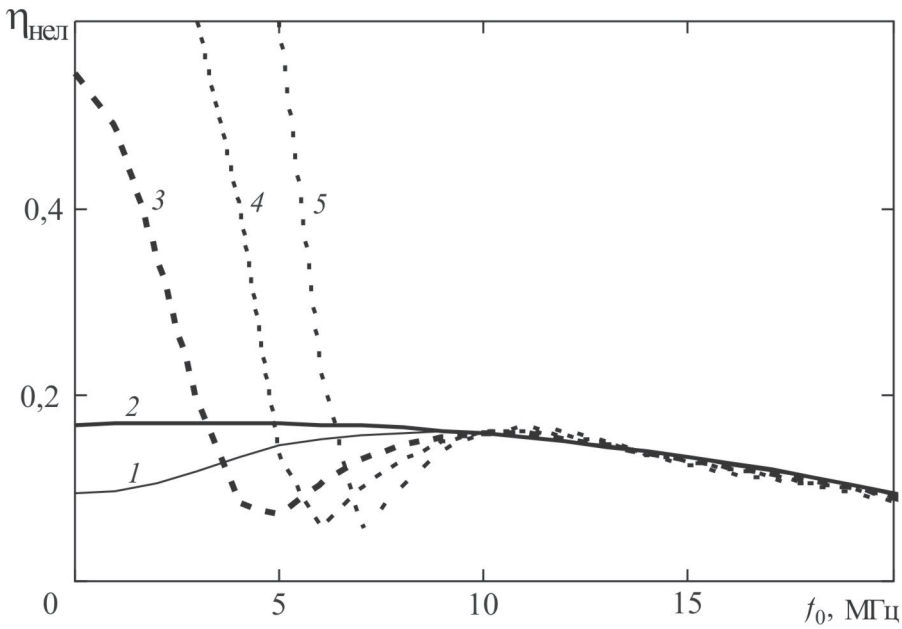



Рис. 4. Зависимость коэффициента нелинейных искажений от частоты при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$: 0,2 (*1*); 0,6 (*2*); 1,0 (*3*); 1,2 (*4*); 1,4 (*5*)

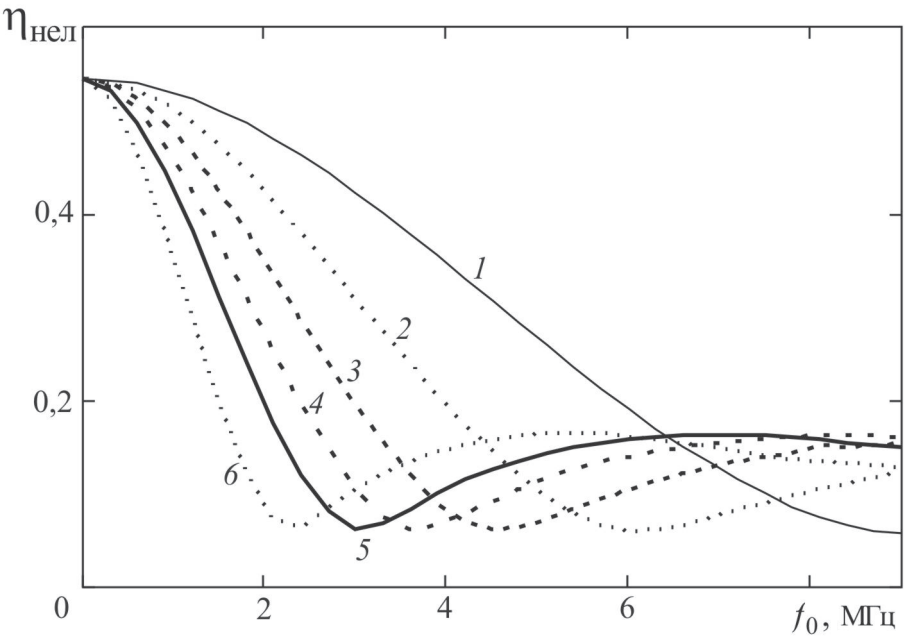



Рис. 5. Зависимости коэффициента нелинейных искажений от частоты при фиксированном значении индекса модуляции $\chi_0 = 1$ и разных длинах $L$, мм: 2 (*1*); 3 (*2*); 4 (*3*); 5 (*4*); 6 (*5*); 8 (*6*)

$$M(f_0) = \frac{I_{\max}(f_0) - I_{\min}(f_0)}{I_{\max}(f_0) + I_{\min}(f_0)}; \qquad (17)$$

$$N(f_0) = \ln \frac{I_{\max}(f_0)}{I_{\min}(f_0)}, \qquad (18)$$

где $I_{\max}$, $I_{\min}$ – абсолютные значения максимума и минимума интенсивности в сигнале изображения.

Из графиков видно, что частотно-контрастная характеристика системы при изменении индекса модуляции $\chi_0$ практически не изменяется, в то время как число возможных градаций яркости на низких частотах $N_{\text{град}} = 50N(f_0)$ уменьшается. Приведенные на рис. 2 числовые данные позволяют вычислить теоретическое значение числа градаций яркости. При частотах модуляции 0,2–0,5 МГц и $\chi_0 = 0{,}6–0{,}8$ $N_{\text{град}} \cong 400–500$.

На рис. 3 показано изменение амплитуды и формы гармонического сигнала изображения на частоте модуляции $f_0 = 1$ МГц ($f = 80$ МГц, $\tau_0 = 10$ нс, $L = 4$ мм) при увеличении индекса модуляции. На этих графиках по координате $x$ отложено расстояние в метрах ($M_1 = 1$), а по координате $y$ – функция $I(x) = I_1(x) \big/ \bar{\Gamma}_0$ в соответствии с выражением (2).

На рис. 4 представлены графики зависимости $\eta_{\text{нел}}$ от частоты $f_0$, построенные для разных индексов модуляции $\chi_0$ при фиксированных значениях $L = 4$ мм, $\tau_0 = 10$ нс, $f = 80$ МГц. Видно, что с увеличением индекса модуляции нелинейные искажения захватывают все большую область модулирующих частот.

Одним из способов уменьшения этих искажений является увеличение длины акустооптического взаимодействия $L$. На рис. 5 представлены рассчитанные зависимости $\eta_{\text{нел}}$ от частоты при фиксированном значении индекса модуляции $\chi_0 = 1$ и разных длинах $L$.

Приведенные графики показывают, что для уменьшения нелинейных искажений необходимо стремиться к увеличению длины акустооптического взаимодействия. Длину $L$ нужно выбирать максимально возможной для заданной полосы рабочих частот, не ухудшая при этом существенно контраст в изображении.

На рис. 6 представлены расчетные зависимости

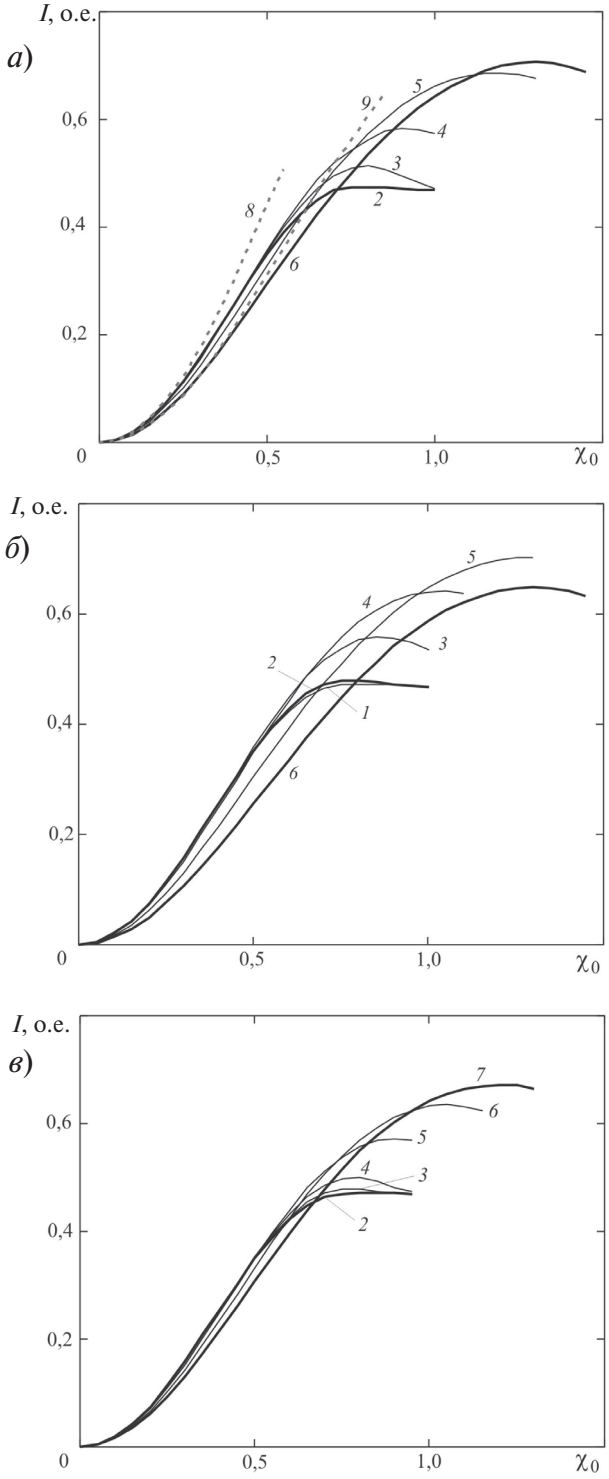



Рис. 6. Зависимости эффективности дифракции в изображении $I(\chi_0)$ при различных значениях $L$, мм: 4 (*а*), 6 (*б*), 2 (*в*); $f_0$, МГц: 0,5 (*1*), 1 (*2*), 3 (*3*), 5 (*4*), 10 (*5*), 15 (*6*), 20 (*7*).
Базовый набор параметров: $\lambda_0 = 510{,}6$ нм; $f = 80$ МГц; $\tau_0 = 10$ нс. Кривые *8* и *9* соответствуют случаю малой эффективности дифракции при $f_0 = 1$ и 15 МГц

$$I(\chi_0) = \frac{I_{\max}^{+1}}{I_{\max}^{+1} + I_{\min}^{0}}$$

от индекса модуляции, которые определяют эффективность дифракции в максимумах сигнала изображения для гармонического сигнала с частотой $f_0$. В этих зависимостях $I_{\max}^{+1}, I_{\min}^{0}$ – средние по времени интенсивности света в максимуме и минимуме сигнала изображения для (+1)-го и 0-го дифракционных порядков, причем величина $I_{\max}^{+1}$ рассчитывалась в приближении 3-го порядка взаимодействия и соответствует выражению (2), а $I_{\min}^{0}$ – в приближении 4-го порядка взаимодействия. Данные зависимости можно назвать амплитудными передаточными характеристиками системы формирования изображения строки. Расчеты $I(\chi_0)$ производились для $\lambda_0 = 510{,}6$ нм, $f = 80$ МГц, $m_0 = 1$, $\tau_0 = 10$ нс при различных частотах $f_0$ и длинах $L$.

**Границы применимости приближения первого порядка взаимодействия.** Расчеты показывают, что зависимости $I(\chi_0)$ для выбранной несущей частоты ультразвука $f$ практически не изменяются при изменении частоты модуляции $f_0$ от 0,1 до 1 МГц. Они также слабо зависят от длительности светового импульса при его изменении от 5 до 40 нс. При дальнейшем увеличении частоты модуляции при фиксированных значениях $L$ и $\tau_0$ кривые для разных $f_0$ начинают существенно отличаться друг от друга. При малых значениях индексов $\chi_0$ зависимости $I(\chi_0)$ изменяются по квадратичному закону, что соответствует ранее рассмотренному приближению малой эффективности дифракции. В качестве критерия различия двух графиков при малых индексах модуляции можно выбрать величину отклонения

$$\Delta I = \frac{I_{01} - I_1}{I_1} = 0{,}05\ (5\ \%),$$

где $I_{01}$, $I_1$ – эффективности дифракции, рассчитанные в приближении первого и третьего порядков взаимодействия. Затем нужно найти $\chi_{0\text{гр}}$ и $I_1(\chi_{0\text{гр}})$, соответствующие этим условиям.

Результаты такого сравнения приведены в табл. 1 и отражают границы применимости приближения малой эффективности дифракции при изменении частоты модуляции $f_0$ и длины акустооптического взаимодействия $L$. На основании этих результатов можно сделать вывод о том, что приближение малой эффективности дифракции ограничено сверху уровнем эффективности 0,10–0,17 и индексами модуляции $\chi_{0\text{гр}}$ от 0,2 для $f_0 = 1$ МГц до 0,35 для $f_0 = 15$ МГц. При дальнейшем увеличении частотного диапазона индекс модуляции, соответствующий приближению малой эффективности дифракции, немного увеличивается.

Таблица 1

**Расчетные значения $\chi_{0\text{гр}}$ и эффективности дифракции $I^{(1)}(\chi_{0\text{гр}})$, соответствующие величине отклонения $\Delta I_1 = 5\ \%$**

| $f_0$, МГц | $\chi_{0\text{гр}}$ | | | $I^{(1)}$, о.е. | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $L = 2$ мм | $L = 4$ мм | $L = 6$ мм | $L = 2$ мм | $L = 4$ мм | $L = 6$ мм |
| 1 | 0,20 | 0,20 | 0,20 | 0,075 | 0,075 | 0,075 |
| 3 | 0,20 | 0,23 | 0,26 | 0,075 | 0,100 | 0,124 |
| 5 | 0,21 | 0,27 | 0,30 | 0,080 | 0,130 | 0,150 |
| 10 | 0,26 | 0,33 | 0,35 | 0,120 | 0,167 | 0,166 |
| 15 | 0,30 | 0,35 | 0,36 | 0,140 | 0,160 | 0,135 |

**Границы применимости приближения третьего порядка взаимодействия.** Для того чтобы определить границы применимости указанного приближения при вычислении картины распределения света в изображении, необходимо провести сравнение амплитудных передаточных характеристик системы, полученных с учетом третьего и пятого порядков взаимодействия. В приближении четвертого и пятого порядков взаимодействия расчет поля производится согласно диаграмме рассеяния, представленной на рис. 7.

На рис. 8 в качестве примера представлены результаты расчетов эффективности дифракции в изображении $I(\chi_0)$, аналогично приведенному на рис. 6, но $I_{\max}^{+1}$ рассчитывалось для третьего и пятого порядков взаимодействия, а $I_{\min}^{0}$ – для четвертого.

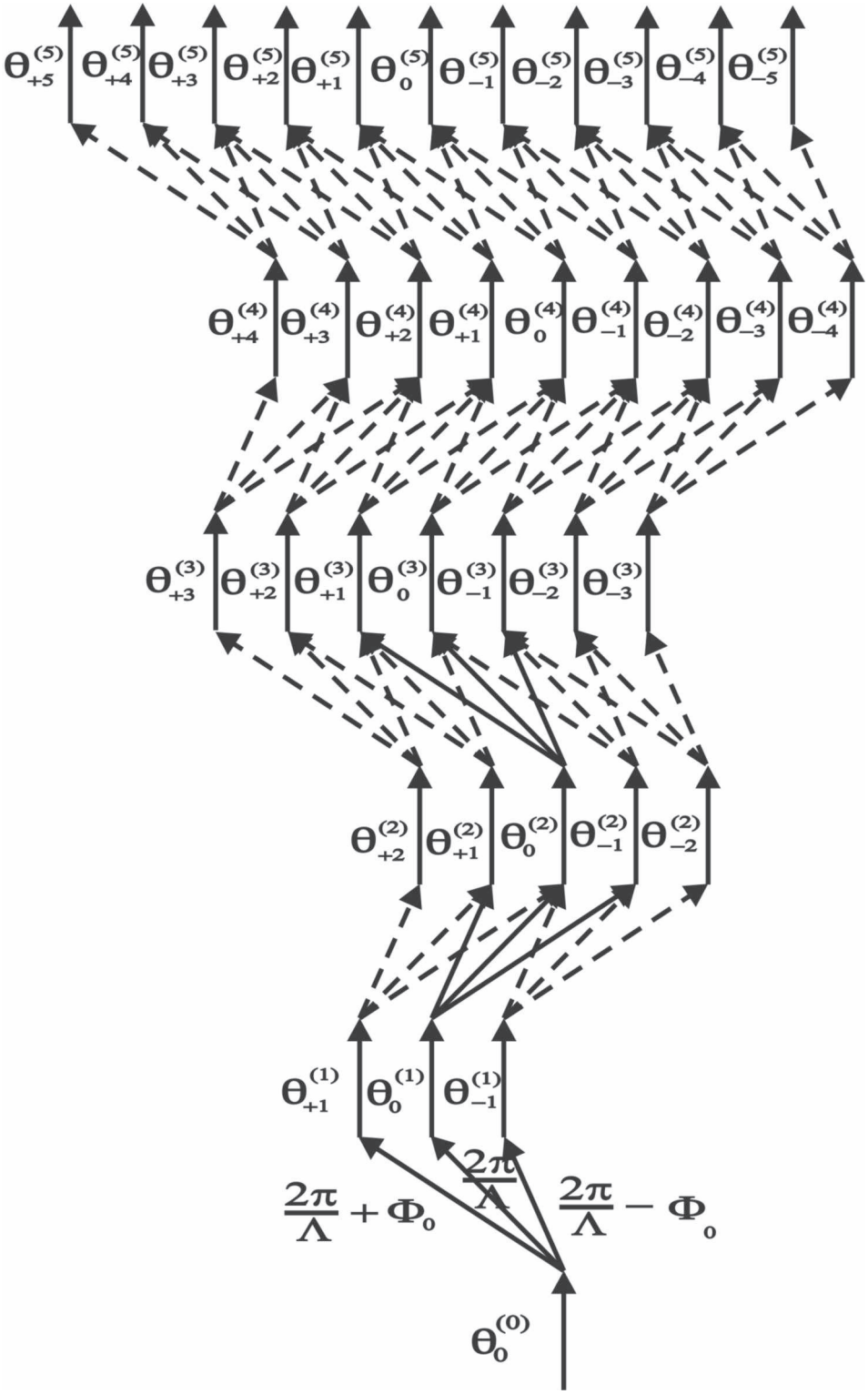



Рис. 7. Диаграмма рассеяния при дифракции света в (+1)-й порядок в приближении 5-го порядка взаимодействия

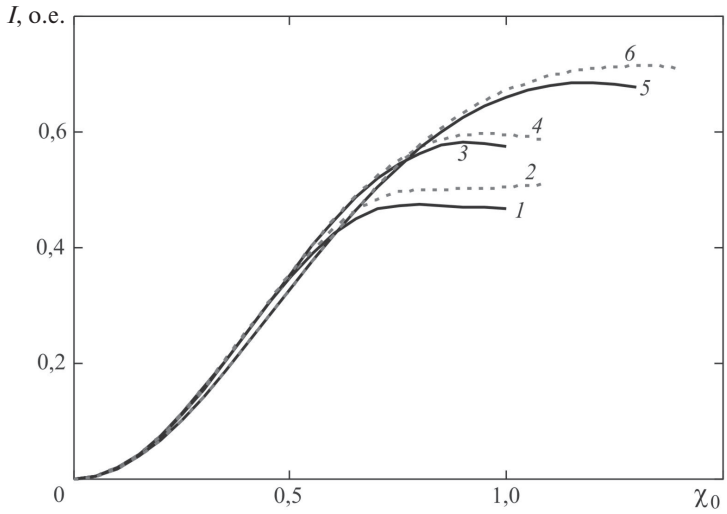



Рис. 8. Зависимость эффективности дифракции в изображении $I(\chi_0)$ в третьем (кривые *1*, *3*, *5*) и пятом (*2*, *4*, *6*) порядках взаимодействия при $L$ =4 мм; частота модуляции $f_0$, МГц: 1 (*1*, *2*); 5 (*3*, *4*); 10 (*5*, *6*)

Расчеты $I(\chi_0)$ производились для $\lambda_0 = 0{,}5106$ мкм, $f = 80$ МГц, $m_0 = 1$, $\tau_0 = 10$ нс при различных частотах $f_0$ и длинах $L$ мм. Задавая допустимую величину отклонения при больших индексах модуляции $\Delta I \cong 2$ % между кривыми в третьем и пятом порядках взаимодействия, можно определить граничные значения индекса модуляции $\chi_{0гр}$ и соответствующую этому индексу величину $I_3(\chi_{0гр})$, в пределах которых можно ограничиваться приближением третьего порядка взаимодействия. Результаты вычислений приведены в табл. 2.

На рис. 9 представлены результаты расчетов зависимости эффективности дифракции в максимуме сигнала изображения

$$I(f_0) = \frac{I_{max}^{+1}}{I_{max}^{+1} + I_{min}^{0}}$$

Таблица 2

**Расчетные значения $\chi_{0гр}$ и эффективности дифракции $I^{(3)}(\chi_{0гр})$, соответствующие величине отклонения $\Delta I_2 = 2$ %**

| $f_0$, МГц | $\chi_{0гр}$ | | | $I^{(3)}$, о.е. | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $L$ = 2 мм | $L$ = 4 мм | $L$ = 6 мм | $L$ = 2 мм | $L$ = 4 мм | $L$ = 6 мм |
| 1 | 0,60 | 0,64 | 0,65 | 0,43 | 0,46 | 0,46 |
| 3 | 0,64 | 0,70 | 0,75 | 0,46 | 0,50 | 0,54 |
| 5 | 0,65 | 0,80 | 0,95 | 0,47 | 0,57 | 0,64 |
| 10 | 0,80 | 1,05 | 1,10 | 0,56 | 0,68 | 0,67 |
| 15 | 0,95 | 1,17 | 1,15 | 0,63 | 0,69 | 0,62 |

Примечание. $\Delta I_1 = \left(I^{(5)} - I^{(3)}\right) / I^{(3)}$, где $I^{(3)}$, $I^{(5)}$ – эффективности дифракции в приближениях третьего и пятого порядков взаимодействия.

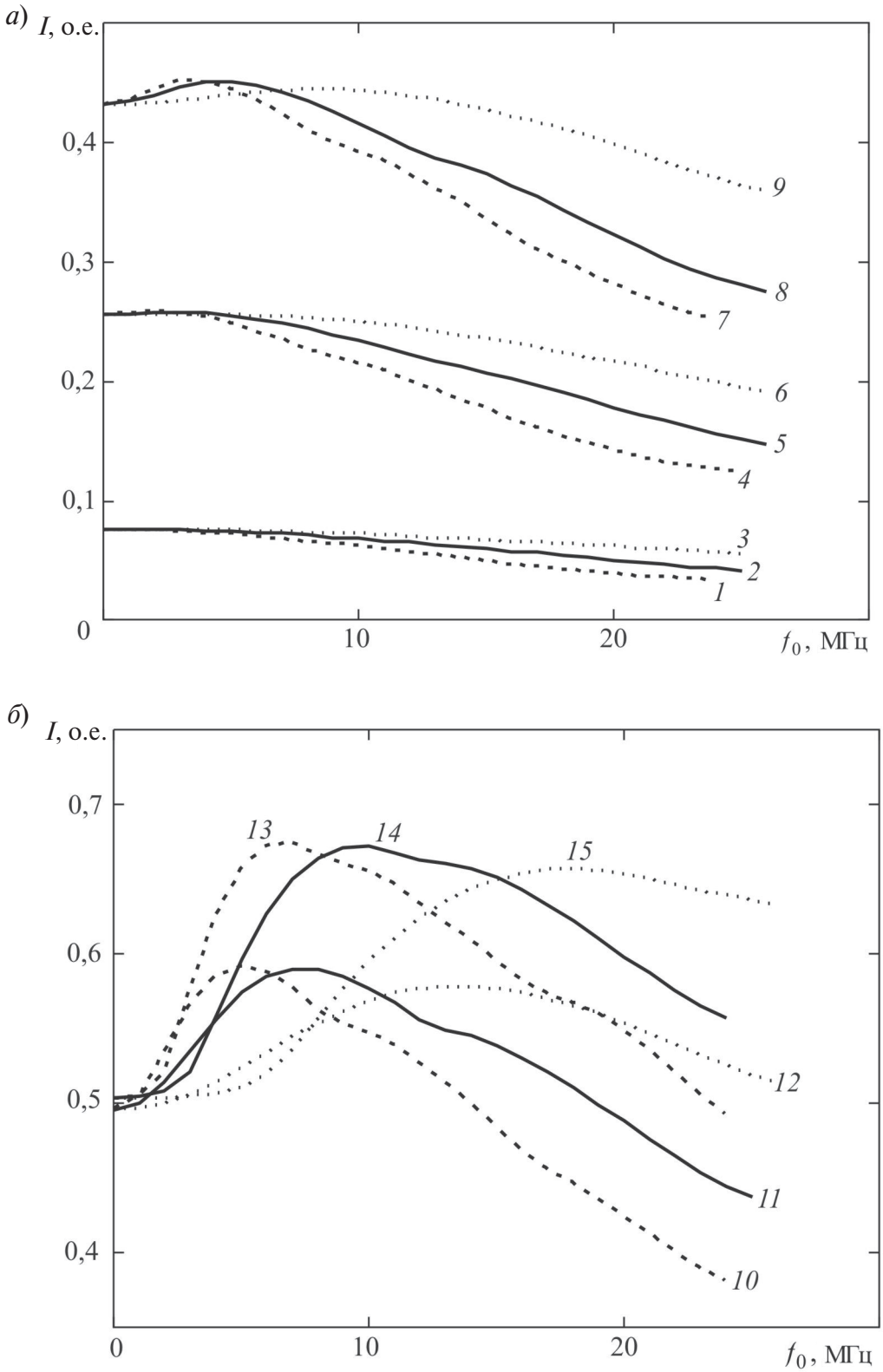



Рис. 9. Зависимости эффективности дифракции в изображении $I(f_0)$ в приближении пятого порядка взаимодействия при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$ и при $L$ = 2, 4, 6 мм: $\chi_0$ = 0,2 (кривые *1–3*); 0,4 (*4–6*); 0,6 (*7–9*); 0,8 (*10–12*); 1,0 (*13–15*)

при различных значениях индекса модуляции $\chi_0$ и длины акустооптического взаимодействия $L$. Величина $I_{\max}^{+1}$ рассчитывалась в приближении пятого порядка взаимодействия, а $I_{\min}^{0}$ – в приближении четвертого. Графики на рисунках построены для значений $\chi_0$ от 0,2 до 1,0. Приведенные на этих рисунках зависимости можно рассматривать как амплитудно-частотные характеристики акустооптической системы формирования изображения с импульсным лазером и АОМ из парателлурита.

**Основные результаты и их обсуждение**

Анализируя выражения (2) и графики на рис. 1–9 в совокупности с представленными ранее в работах [1, 2] зависимостями, можно сделать вывод о том, что степень искажения гармонического сигнала в изображении, которое формируется в результате дифракции света на звуке в АОМ из кристалла парателлурита, зависит от условий ориентации спектральных составляющих дифрагированного светового поля относительно центра полосы акустооптического взаимодействия. При центральной настройке (брэгговские условия взаимодействия выполнены для центральной спектральной составляющей амплитудно-модулированного сигнала) для малых частот модуляции боковые спектральные составляющие расположены близко к несущей частоте ультразвука. Для них легче выполняются условия для повторной дифракции и, следовательно, для появления боковых спектральных составляющих на кратных частотах модуляции. При этом форма гармонического сигнала изображения искажается, она приближается к прямоугольной. Степень искажения сигнала при фиксированной несущей частоте ультразвука определяется длиной акустооптического взаимодействия $L$. При искажении изображения сигнала рост интенсивности в максимуме резко уменьшается, так как энергия светового поля эффективно перекачивается в дифракционные порядки с кратными частотами модуляции. Для более высоких частот $f_0$ спектральные составляющие в дифрагированном световом поле, соответствующие повторной дифракции, имеют существенно меньшую амплитуду, чем на низких, из-за ограничения полосы акустооптического взаимодействия. В них при дифракции перекачивается меньший процент энергии светового поля. Форма сигнала искажается в меньшей степени, и наблюдается рост интенсивности света в максимуме сигнала изображения при увеличении амплитуды ультразвукового сигнала. При дальнейшем увеличении частоты $f_0$ уменьшение $I(f_0)$ связано с конечностью полосы акустооптического взаимодействия, при этом перекачка энергии в эти спектральные составляющие уменьшается, что приводит к уменьшению контраста в изображении и (в конечном итоге) к полной потере информации о модуляции ультразвукового сигнала. В этом случае изображение на экране представляет собой равномерную световую засветку с интенсивностью, соответствующей амплитуде несущей частоты сигнала.

Итак, в настоящей работе рассмотрена дифракция света на ультразвуковой волне при ее амплитудной модуляции одной частотой. При модуляции несущей частоты ультразвука входным сигналом со сложным спектром рассмотрение нелинейных искажений в сигнале изображения при больших амплитудах ультразвука существенно усложняется. Световые поля в результате дифракции на звуке в приближении первого порядка взаимодействия будут содержать составляющие, сдвинутые по частоте в соответствии со спектром модулирующего сигнала. В результате повторной дифракции для каждой частотной составляющей появляются кратные частоты в соответствии с порядком акустооптического взаимодействия, амплитуды которых нелинейно зависят от индекса модуляции. Далее в плоскости изображения все поля складываются и образуют картину распределения интенсивности, в которой за счет перемножения полей возникают дополнительные гармоники для основных частот спектра, а также комбинационные составляющие. Возрастание интенсивности света в комбинационных спектральных составляющих более высокого порядка, чем первый, будет определяться процессами повторной дифракции и происходить одновременно с перекачкой энергии в спектральные составляющие с кратными гармониками модулирующих частот входного сигнала. Поэтому значения $\chi_0$, полученные в результате расчетов для одной модулирующей частоты и для значения индекса модуляции, начиная с которого нелинейные искажения в сигнале изо-

бражения резко возрастают, будут справедливы и при сигнале со сложным спектром. Для получения небольших искажений в сигнале изображения необходимо, по-видимому, чтобы индексы модуляции для всех спектральных составляющих входного модулирующего сигнала не превышали допустимую величину $\chi_0$ для своей частоты.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Мокрушин, Ю.М.** Дифракция света на звуке вблизи оптической оси гиротропного кристалла [Текст] / Ю.М. Мокрушин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2011. – № 2(122). – С. 93–105.

2. **Мокрушин, Ю.М.** Формирование изображения строки в акустооптической системе с импульсным источником когерентного света [Текст] / Ю.М. Мокрушин // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2011. – № 3(129). – С. 99–109.

УДК 669.018:620.4

*Т.В. Прохорова, Т.Р. Степанова*

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛЗУЧЕСТИ И РАЗРУШЕНИЯ ЖАРОПРОЧНОЙ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ Р91

Высокохромистые стали, содержащие от 9 до 12% хрома, отмечены как наиболее перспективные материалы для проектируемых энергоустановок с повышенными параметрами пара. Для оценки ресурса элементов высокотемпературного оборудования используют экспериментальные данные по длительной прочности и пластичности, которые экстраполируют на расчетный срок службы. С этими оценками связано интенсивное развитие в последние годы механики повреждаемости сплошной среды.

Феноменологической основой указанного раздела науки является концепция уравнения механического состояния со «структурными» параметрами состояния (параметрами повреждаемости) [1], которая отображает временную зависимость деформации ползучести и сопутствующих процессов, таких как упрочнение/возврат и повреждаемость. Известно, что для определения констант уравнения механического состояния используются экспериментальные данные, полученные при более высоких напряжениях, чем эксплуатационные. С другой стороны, из материаловедения известно, что степенной закон ползучести действует только в определенном интервале напряжений и может переходить в линейную зависимость скорости ползучести от напряжений, если преобладают диффузионные механизмы ползучести в области низких напряжений. Кроме того, согласно литературным данным [2–5], применяемые жаропрочные стали могут переходить к линейной ползучести при уровне напряжений, соответствующем условиям эксплуатации. Таким образом, определяющая модель должна охватывать широкий интервал напряжений, соответствующий и степенному, и линейному законам ползучести (рис. 1, *а*).

Цель работы – создание феноменологической модели, описывающей процессы ползучести и разрушения жаропрочной 9 %-й хромистой стали 10Х9CrMoV-9-1 (Р91) при температуре 625 °С в широком интервале напряжений, для экстраполяции результатов лабораторных испытаний на расчетный ресурс реального энергетического оборудования.

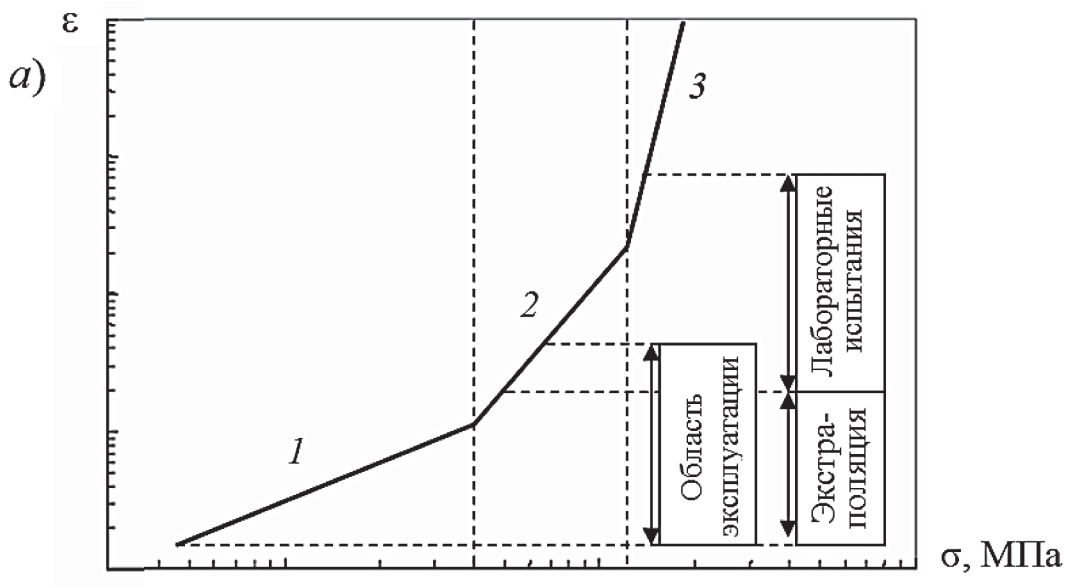
Зависимости скорости установившейся ползучести от напряжений 9–12 %-х хромистых сталей хорошо описываются суммой линейной и степенной функций [4, 5]:

$$\dot{\varepsilon} = A\sigma^m + C\sigma ,$$

где $\sigma$ – напряжение; $\dot{\varepsilon}$ – скорость деформации ползучести; $A$, $C$, $m$ – константы материала.

При различном уровне напряжений (скорости деформации) доминирует один из механизмов ползучести, в переходной области (напряжения, близкие к $\sigma_{кр}$) действуют оба механизма [4, 5, 7, 8] (рис. 1, *б*, линия *4*). В работах [4, 5, 7] отмечено, что часто используемая зависимость скорости ползучести от напряжений в форме гиперболического синуса [6] является консервативной в переходном интервале напряжений.

В данной работе для описания скорости ползучести при одноосном растяжении с постоянной нагрузкой выбран степенной закон с учетом смены механизма деформации и накопления поврежденности:



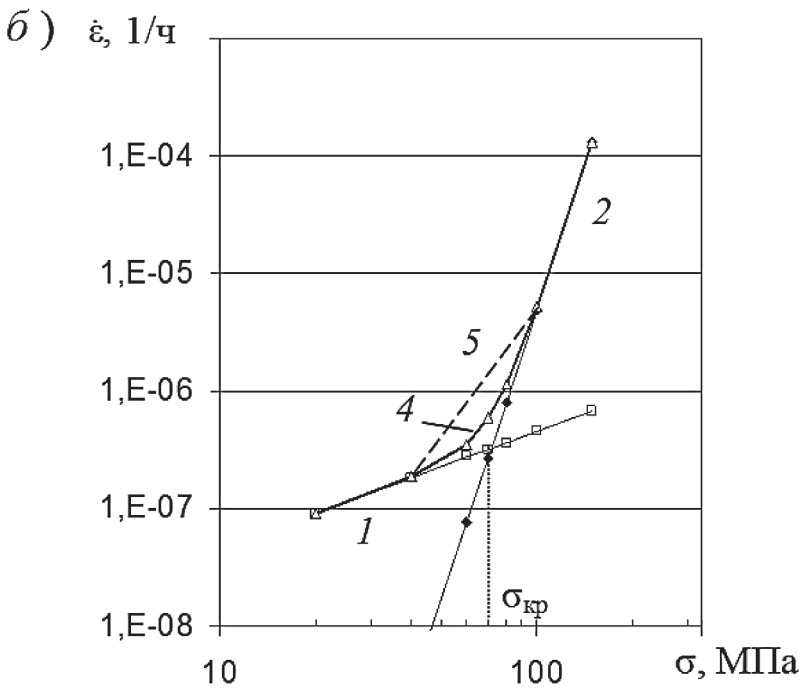




Рис. 1. Зависимости скорости деформации установившейся ползучести ( $\dot{\varepsilon}$ ) от напряжения в виде схемы (*а*) и аппроксимация степенными функциями (*б*); *а* – сталь, содержащая 9–12% Cr [3]; *б* – сталь 10Х9CrMoV-9-1 (P91) при 625°С [4].

На кривых выделены участки, относящиеся к ползучести разной природы: *1* – диффузионная, *2* – дислокационная (обе подчиняются степенному закону); *3* – дислокационная по экспоненциальному закону; *4* – суммарная зависимость прямых *1* и *2*; *5* – аппроксимация кривой *4* степенной функцией

$$\dot{\varepsilon} = A'\sigma^m \varepsilon^{-k}, \text{ если } \varepsilon < \varepsilon_{1-2}; \quad (1)$$

$$\dot{\varepsilon} = A\sigma^m, \text{ если } \varepsilon_{2-3} \geq \varepsilon \geq \varepsilon_{1-2}; \quad (2)$$

$$\dot{\varepsilon} = A\left(\frac{\sigma}{1-\omega}\right)^m, \text{ если } \varepsilon \geq \varepsilon_{2-3}; \quad (3)$$

$$A' = A(\varepsilon_{1-2})^k,$$

где $\varepsilon_{1-2}$ – деформация перехода от первой стадии к установившейся ползучести; $\varepsilon_{2-3}$ – деформация перехода от установившейся ползучести к третьей стадии; *A, k, m* – константы, определяемые по экспериментальной зависимости скорости ползучести от деформации (рис. 2, *а*) с учетом зависимости показателя ползучести *m* от уровня напряжений (см. рис. 1, *б*). Значения констант приведены в таблице.

**Константы в уравнениях (1) – (5) для стали Р91 при *T* = 625 °С**

| σ, МПа | *A* | *A*' | *m* | $\varepsilon_{1\text{-}2}\times10^{-3}$ | *B* | *n* |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | (МПа)$^{-m}$/ч | | | | | |
| ≥101 | 1,177E–25 | 2,424E–30 | 9,868 | 4,54 | 1,388E–22 | 8,681 |
| 53–101 | 1,874E–16 | (3,863E–21)–<br>–(1,366E–21) | 5,283 | Линейная интерполяция | 3,049E–11 | 3,096 |
| ≤53 | 4,550E–9 | 1,346E–14 | 1,000 | 2,70 | 4,004E–7 | 1,000 |

Примечание: для всех уравнений показатель степени *k* равен –2.

Классический вид уравнения развития поврежденности имеет вид

$$\dot{\omega} = B\frac{\sigma^n}{(1-\omega)^{n+q}}, \quad (4)$$

где ω – параметр повреждаемости; *n*, *q* – константы.

Обработка кривых ползучести стали Р91 при σ = 90 – 120 МПа с помощью уравнения Леметра [1]

$$(1-\omega)=(1-t/t_f)^{1/(n+q+1)},$$

где *t* – время, $t_f$ – время до разрушения, показала, что $n + q \approx m$.

Определим зависимость скорости повреждаемости от скорости деформации ползучести, разделив уравнение (4) на (3):

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{B}{A}\sigma^{n-m}\frac{d\varepsilon}{dt}, \text{ или } \omega = \frac{B}{A}\sigma^{n-m}\varepsilon. \quad (5)$$

Дополнительно для описания параметра повреждаемости ω по экспериментальным кривым ползучести, в соответствии с уравнением (3) была использована экспоненциальная функция (рис. 2, *б*):

$$(1-\omega)^m = A\sigma^m / \dot{\varepsilon}_{\text{эксп}} = a\exp(-b\varepsilon),$$

где $\dot{\varepsilon}_{\text{эксп}}$ – скорость ползучести, определяемая из эксперимента; *a* и *b* – параметры материала, зависящие от напряжений, которые были определены методом регрессионного анализа по аналогии с θ-концепцией (уравнение Вильшиа – Эванса) [1].

Как и в указанной концепции, параметры *a* и *b* имеют экспоненциальную зависимость от напряжений (при постоянной температуре):

$$\begin{cases} \ln a = 1{,}968 - 0{,}0097\sigma & \text{при } \sigma \geq 53 \text{ МПа}, \\ a = 4{,}281 & \text{при } \sigma < 53 \text{ МПа}; \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} \ln b = 5{,}462 - 0{,}0125\sigma & \text{при } \sigma \geq 53 \text{ МПа}, \\ b = 141{,}25 & \text{при } \sigma < 53 \text{ МПа}. \end{cases} \quad (7)$$

Следовательно,

$$\omega(\varepsilon) = 1 - \left(a\exp(-b\varepsilon)\right)^{\frac{1}{m}}. \quad (8)$$

Дифференцируя равенство (8), получаем выражение для скорости развития поврежденности в экспоненциальном виде:

$$\frac{d\omega}{d\varepsilon} = \frac{a^{\frac{1}{m}}b}{m}\exp\left(-\frac{b\varepsilon}{m}\right), \text{ или}$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{a^{\frac{1}{m}}b}{m}\exp\left(-\frac{b\varepsilon}{m}\right)\frac{d\varepsilon}{dt}. \quad (9)$$

В модели используется ряд параметров, полученных из эксперимента:

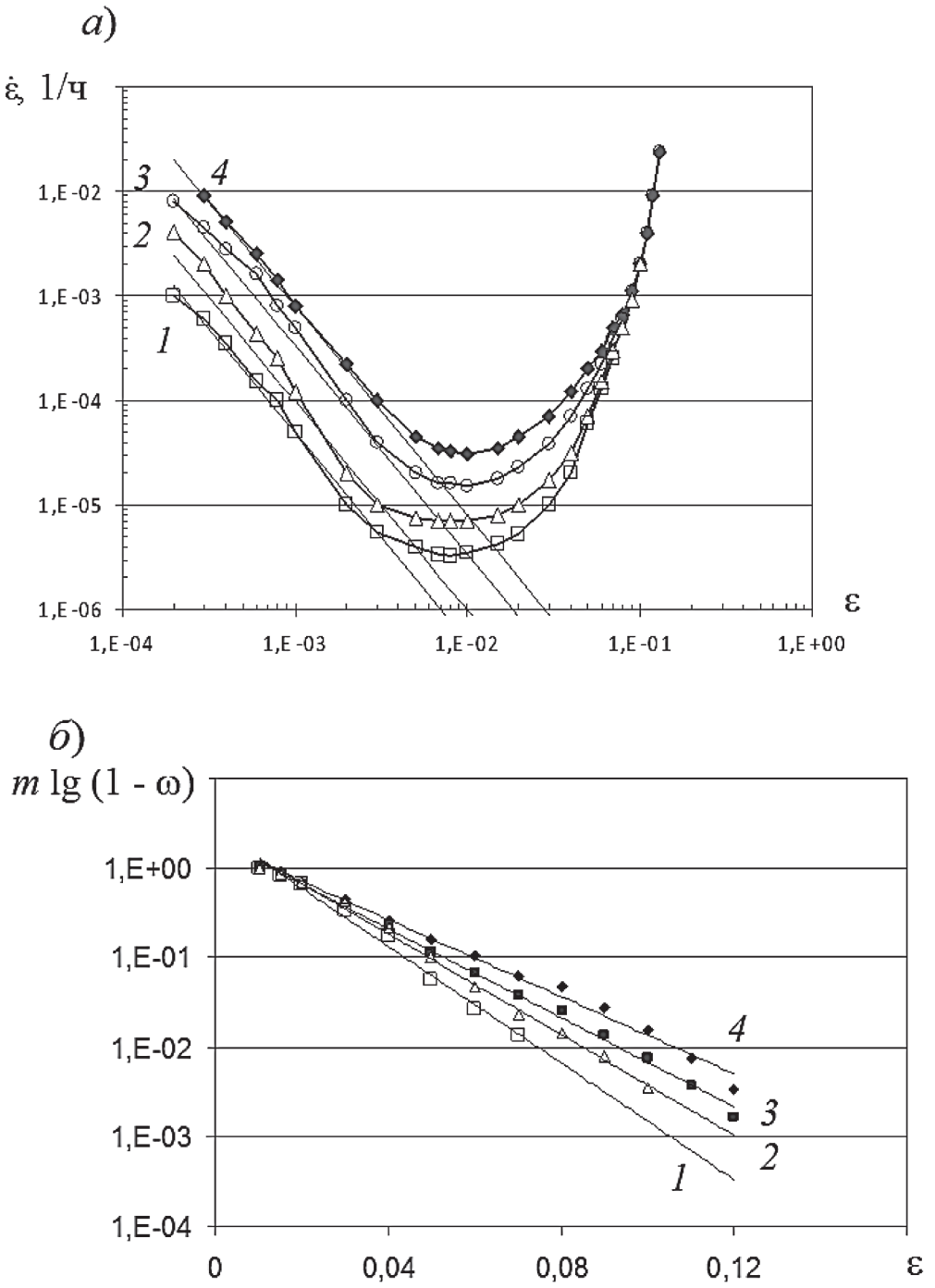



Рис. 2. Экспериментальные зависимости: скорости ползучести (*а*) [4], а также логарифма отношения расчетной скорости ползучести к фактической от деформации ползучести; сталь Р91 при 625°С.
Напряжения σ, МПа: 90 (*1*), 100 (*2*), 110 (*3*), 120 (*4*)

переход от первой стадии ползучести к установившейся происходит при значении деформации $\varepsilon_{1-2}$, имеющей постоянное значение (в режиме степенной ползучести $\varepsilon_{1-2} = 4{,}54\cdot10^{-3}$; при линейной зависимости скорости ползучести от напряжений $\varepsilon_{1-2} = 2{,}70\cdot10^{-3}$ [9]), в переходной области напряжений деформация $\varepsilon_{1-2}$ вычисляется линейной интерполяцией;

на первой стадии ползучести значение показателя степени $k$ при деформации принято одинаковым во всем интервале напряжений;

за начало третьей стадии ползучести принято достижение деформацией ползучести значения 1 % для всего диапазона напряжений (см. рис. 2, *а*);

в области низких напряжений (линейная зависимость скорости ползучести от напряжений) параметры $a$ и $b$ в уравнении (4) не зависят от напряжений;

длительная пластичность при напряжениях $\sigma$ свыше 110 МПа находится на уровне пластичности при кратковременных испытаниях и составляет 14 %, при напряжениях ниже 53 МПа длительная пластичность принята равной 2 %, в переходной области напряжений деформация разрушения находится линейной интерполяцией.

Следует отметить, что переходная область зависимости скорости ползучести от напряжений аппроксимирована степенной зависимостью с показателем степени приблизительно 5 (см. рис. 1, *б*, линия *5*), что дает консервативную оценку.

Деформация ползучести на первой стадии определяется интегрированием уравнения (1):

$$\varepsilon(t) = \left(A'\sigma^m(k+1)t\right)^{\frac{1}{k+1}}. \qquad (10)$$

Следовательно, время окончания первой стадии ползучести равно:

$$t_{1-2} = (\varepsilon_{1-2})^{k+1} / \{A'\sigma^m(k+1)\}. \quad (11)$$

В соответствии с экспериментальными данными (см. рис. 2, *а*) условно принимаем во всем интервале напряжений $\varepsilon_{2-3} = 0{,}01$. Следует отметить, что со снижением напряжений деформация $\varepsilon_{2-3}$ имеет тенденцию к уменьшению, но в рамках данной работы этот вопрос не исследовался.

Длительность второй стадии ползучести в соответствии с уравнением (2) следует выражению

$$t_{2-3} - t_{1-2} = \frac{\varepsilon_{2-3} - \varepsilon_{1-2}}{A\sigma^m}. \qquad (12)$$

Для определения длительности третьей стадии ползучести подставляем в уравнение (3) равенства (5) для степенной функции или (9) для экспоненциальной и выполняем интегрирование с разделением переменных:
для степенной функции –

$$\int_{\varepsilon_{2-3}}^{\varepsilon_f} \left(1 - \frac{B}{A}\sigma^{n-m}\varepsilon\right)^m d\varepsilon = \int_{t_{2-3}}^{t_f} A\sigma^m dt;$$

$$t_f - t_{2-3} = \frac{1 - \left[1 - \frac{B}{A}\sigma^{n-m}(\varepsilon_f - \varepsilon_{2-3})\right]^{m+1}}{(m+1)B\sigma^n}; \quad (13)$$

для экспоненциальной функции

$$\int_{\varepsilon_{2-3}}^{\varepsilon_f} a\exp(-b\varepsilon)d\varepsilon = \int_{t_{2-3}}^{t_f} A\sigma^m dt;$$

$$\frac{a}{b}\left[\exp(-b\varepsilon_{2-3}) - \exp(-b\varepsilon_f)\right] = A\sigma^m(t_f - t_{2-3});$$

тогда

$$t_f - t_{2-3} = \\ = \frac{a}{b}\left[\exp(-b\varepsilon_{2-3}) - \exp(-b\varepsilon_f)\right] \Big/ (A\sigma^m). \qquad (14)$$

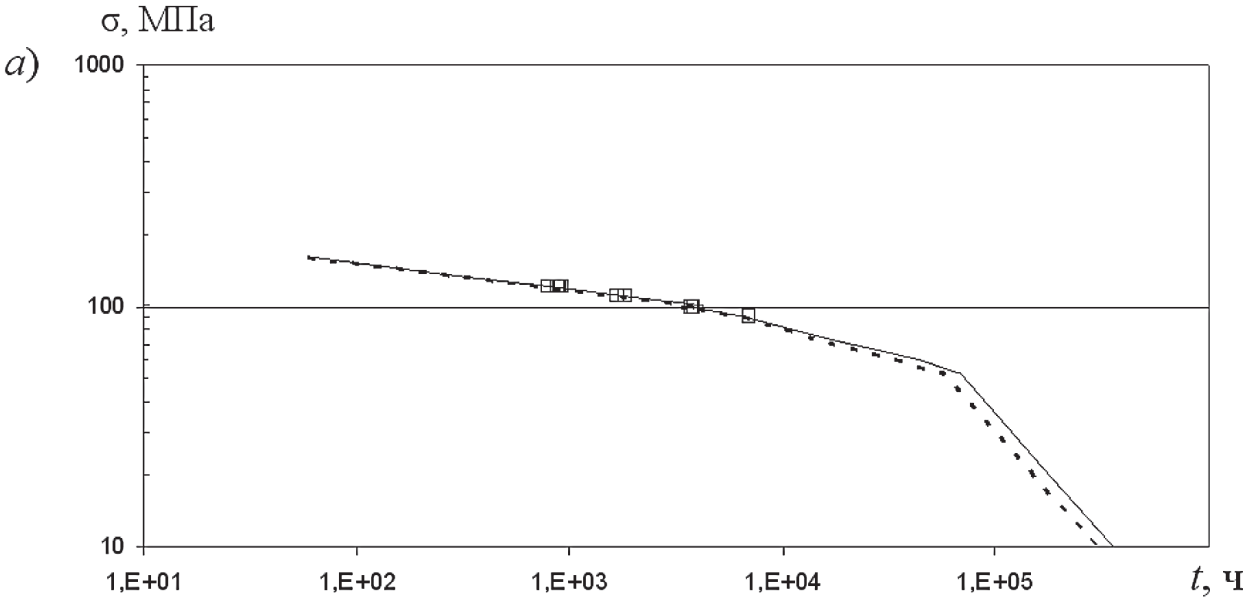
Время до разрушения определяется суммой длительностей трех стадий ползучести:
в степенной форме

$$t_f = \frac{1 - \left[1 - \frac{B}{A}\sigma^{n-m}(\varepsilon_f - \varepsilon_{2-3})\right]^{m+1}}{(m+1)B\sigma^n} + \\ + \frac{\varepsilon_{2-3} - \varepsilon_{1-2}}{A\sigma^m} + t_{1-2}; \qquad (15)$$

в экспоненциальной форме

$$t_f = \frac{a}{b}\frac{\left[\exp(-b\varepsilon_{2-3}) - \exp(-b\varepsilon_f)\right]}{A\sigma^m} + \\ + \frac{\varepsilon_{2-3} - \varepsilon_{1-2}}{A\sigma^m} + t_{1-2}. \qquad (16)$$

Построенные с использованием полученных аналитических выражений кривые ползучести и длительная прочность имеют хорошее согласование с экспериментальными данными



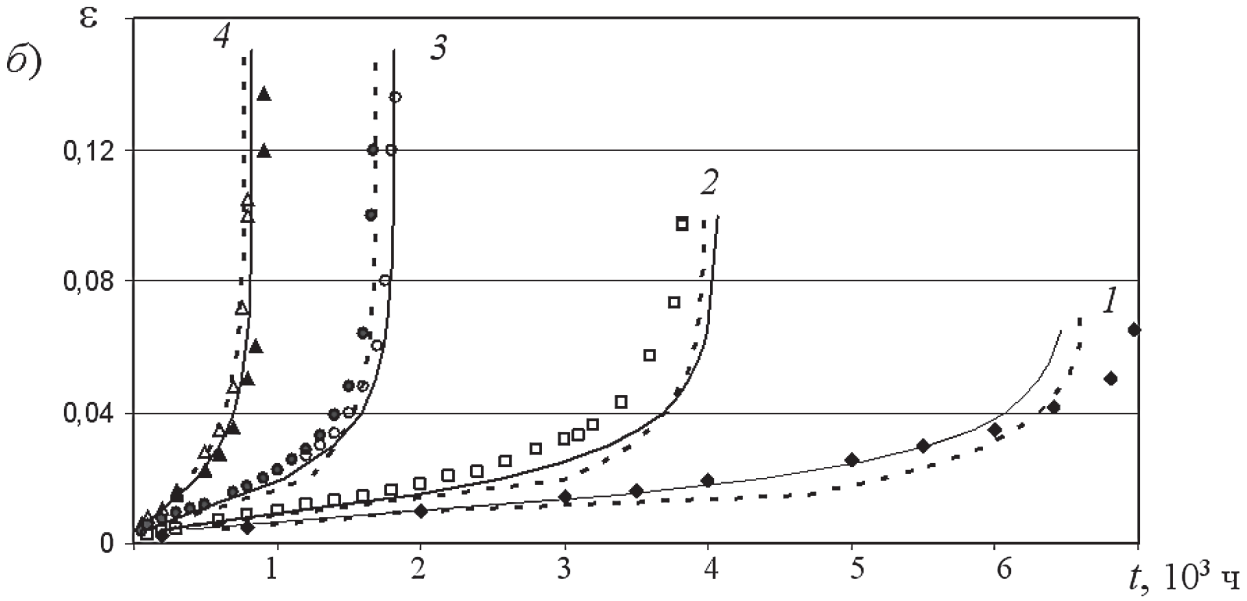




Рис. 3. Сравнение экспериментальных (символы) и расчетных (линии) данных для стали P91 при $T = 625$ °C; кривые длительной прочности (*а*) и ползучести (*б*);
расчеты по зависимости $\omega = f(\varepsilon)$ в экспоненциальной форме (сплошная линия) и степенной (пунктирная).
Напряжения σ, МПа: 90 (*1*), 100 (*2*), 110 (*3*), 120 (*4*)

(рис. 3). Степенная аппроксимация функции поврежденности дает более консервативное значение длительной прочности (рис. 3, *а*). Кривые ползучести, полученные с помощью функции поврежденности в экспоненциальной форме, лучше согласуются с экспериментальными данными (рис. 3, *б*).

Таким образом, предложен новый метод идентификации известной модели процесса ползучести Ю.Н. Работнова [10], основанный на прямом использовании экспериментальных данных стандартных испытаний для определения функции роста поврежденности. Уравнения, определяющие зависимость скорости развития поврежденности от накопленной деформации ползучести и уровня напряжений, могут быть использованы для численного моделирования процессов ползучести при переменных напряжениях.

Анализ полученных аналитических формул показывает, что на первом этапе ползучести ведущим механизмом накопления неупругой деформации является термофлуктуация, которая к моменту разрушения переходит в процесс, аналогичный наблюдаемому на кривых напряжение – деформация (рост нагрузки за счет уменьшения сечения). Это позволяет расширить температурный интервал экспериментальных кривых ползучести вблизи $0{,}5T_{пл}$ жаропрочной стали 10XCrMoVNb-9-1 (P91), учитывая в определяющих уравнениях множитель $\exp(-Q/RT)$. Следует отметить, что предложенная модель может использоваться в интервале температур 550–650 °C с соответствующей корректировкой констант определяющих уравнений и напряжений перехода к линейной зависимости скорости деформации ползучести от напряжений. Для более низких температур на вязкопластическую деформацию оказывает влияние динамическое деформационное старение [4]. Для более высоких температур, во-первых, изменяется фазовый состав стали (фаза Лавеса не образуется в 9–12 % хромистых сталях при температурах свыше 700 °*C*), во-вторых, так как матрица локально обеднена легирующими элементами вблизи частиц карбидов $M_{23}C_6$ и фазы Лавеса, может локально происходить аустенитное превращение $\alpha \rightarrow \gamma$, приводящее к сильным изменениям свойств ползучести [4].

Подход, предложенный в данной статье, позволяет выполнить инженерную оценку длительной прочности при эксплуатационном уровне напряжений по данным лабораторных испытаний.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Петреня, Ю.К.** Физико-механические основы континуальной механики повреждаемости [Текст] / Ю.К. Петреня. – СПб: АООТ «НПО ЦКТИ», 1997. – С. 1–147.

2. **Чадек, Й.** Ползучесть металлических материалов [Текст] / Й. Чадек. – М.: Мир, 1987. – С. 1–304.

3. **Dimmler, G.** Extrapolation of short-term creep rupture data – The potential risk of over-estimation [Text] / G. Dimmler, P. Weinert, H. Cerjak // IJPVP. – 2008. – Vol. 85. – P. 55–62.

4. **Gaffard, V.** Experimental study and modelling of high-temperature creep flow and damage behaviour of 9Cr1Mo-NbV steel weldments [Text] / V. Gaffard. – PhD thesis. – 2004. – P. 1–324.

5. **Gorash, Y.** Development of a creep-damage model for non-isothermal long-term strength analysis of high-temperature components operating in a wide stress range [Text] / Y. Gorash. – PhD thesis. – 2008. – P. 1–108.

6. **Hayhurst, D.R.** CDM mechanisms-based modeling of tertiary creep: ability to predict the life of engineering components [Text] / D.R. Hayhurst // Arch. Mech. – 2005. – Vol. 57. – № 2–3. – P. 103–132.

7. **Kloc, L.** Transition from power-law to viscous creep behaviour of P-91 type heat-resistant steel [Text] / L. Kloc, V. Sklenička // Mater. Sci. & Eng. – 1997. – Vol. A234–A236. – P. 962 – 965.

8. **Прохорова, Т.В.** Длительная прочность однородных и разнородных сварных соединений жаропрочных сталей с мягкой прослойкой [Текст] / Т.В. Прохорова, А.А. Ланин // Матер. II Междунар. Уральской научн.-практ. конф. «Обеспечение надежности теплоэнергетического оборудования в условиях длительной эксплуатации». Челябинск. – 2010. – С. 130–136.

9. **Kloc, L.** On the residual creep life assessment based on macroscopic constitutive rules [Text] / L. Kloc, V. Sklenička, K.Kuchařová // R.K. Penny (ed.): Asset Management of Aged Plant and Materials: Assessment Methods. Proc. of the CAPE 2003 conf. – 2003. – P. 235–244.

10. **Работнов, Ю.Н.** Ползучесть элементов конструкций [Текст] / Ю.Н. Работнов. – М.: Наука, 1966. – С. 1–752.

УДК 666.11.01

*Т.В. Бочарова., Н.О. Тагильцева,*
*Д.С. Сысоев, А.Г. Васильева*

# ВЛИЯНИЕ ИОНООБМЕННОЙ ОБРАБОТКИ И ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ НА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФОСФАТНЫХ СТЕКОЛ, АКТИВИРОВАННЫХ ЕВРОПИЕМ

В связи с возросшими требованиями, предъявляемыми, в частности, к средствам телекоммуникаций, возникает необходимость расширения номенклатуры стекол, применяемых для градиентной оптики и разработки температурных режимов ионообменных процессов.

Большая часть из используемых в настоящее время стекол, подвергаемых ионообменной обработке, являются высокотемпературными, что приводит к большому рассеянию сигнала, поэтому целесообразен поиск составов, в которых возможен процесс протекания процесса ионообменной диффузии при низких температурах.

К таким составам можно отнести, например, стекла борофосфатных систем, которые наряду с относительно низкой температурой синтеза позволяют получать градиентные элементы с перепадом показателя преломления ($\Delta n = 130 \cdot 10^{-4}$).

Несомненный интерес представляет использование такого уникального свойства фосфатных стекол, как возможность содержания большой концентрации ионов-активаторов (например ионов редкоземельных элементов), при этом в образцах не наблюдается концентрационного тушения [1].

Поскольку такие ионы как $Er^{3+}$, $Pr^{3+}$ и $Dy^{3+}$, введенные в стекло, позволяют получить устойчивую генерацию, такая система может быть с успехом использована в качестве оптических усилителей.

Таким образом, представляет интерес создание в одном элементе генерирующей и усиливающей среды на основе фосфатных стекол, активированных редкоземельными ионами.

В силу того, что основой каркаса фосфатного стекла являются длинные цепи, составленные из тетраэдров $[PO_4]$ (в отличие от жесткого каркаса силикатных стекол), в фосфатных стеклах имеется возможность с помощью ионного обмена управлять спектроскопическими свойствами ионов активатора через влияние на их локальное окружение.

Цель работы – установить влияние ионного обмена на локальное окружение иона активатора (европия), изменение окружения надежно проявляется в спектроскопических свойствах стекол. Оценить изменения структуры стекла целесообразно по спектрам наведенного оптического поглощения гамма-облученных стекол. Изучение радиационно наведенных дефектов в стекле – это структурно чувствительный метод, дающий дополнительную информацию о влиянии ионообменной диффузии на структуру стекол, поэтому исследованные образцы были подвергнуты облучению гамма-квантами до дозы $10^6$ Р.

### Методика эксперимента

Анализ литературных данных позволил оптимизировать составы фосфатных стекол, пригодных для изучения влияния на спектроскопические свойства ионов РЗЭ. Кроме того, выявлены режимы их ионообменной обработки в расплаве солей и дозы облучения. Составы и режимы обработки представлены в табл. 1.

В качестве модельного было выбрано стекло состава № 2 (см. табл. 1). Были синтезированы стекла переменного щелочного состава:

$$x\mathrm{Li_2O}\cdot(40-x)\mathrm{Na_2O}\cdot 35\mathrm{Ba_2O_3}\cdot 25\mathrm{P_2O_5},$$

где $x = 0; 5; 10; 15$.

Синтез осуществлялся в корундовых тиглях при $T = 1000$ °С в течение 2 часов. Отжиг осуществлялся в муфельной печи при $T = 380$ °С. Активатор вводился в стекла через оксид европия $Eu_2O_3$.

Из синтезированных образцов были изготовлены плоскопараллельные пластины толщиной 1 мм, отполированные с двух сторон, и кубики со стороной 8 мм, отполированные со всех сторон.

Таблица 1

**Литературные данные по некоторым составам фосфатных стекол, подвергнутых ионообменной обработке**

| № | Состав стекла | Ионообменная обработка | | | | | Литературный источник |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | Режим | | | Результат | | |
| | | Состав расплава | $T$, °C | $t$, ч | Глубина слоя, мм | $\Delta n \cdot 10^{-4}$ | |
| 1. | $15Li_2O \cdot 15Na_2O \cdot 40B_2O_3 \cdot 30P_2O_5$ | $NaNO_3$ | 468 | 5 | 0,6 | 85 | [2] |
| | | | 483 | 3 | 0,7 | 85 | |
| | | $LiNO_3$ | 468 | 4 | 0,4–0,5 | 45 | |
| | | $NaNO_3$ | 479 | 8 | 0,91 | –90 | [3] |
| | | $LiNO_3$–$Li_2SO_4$ | 453 | 8 | 0,59 | 85 | |
| 2. | $15Li_2O \cdot 25Na_2O \cdot 35B_2O_3 \cdot 25P_2O_5$ | $NaNO_3$ | 390 | 14 | 0,3 | –45 | |
| 3. | $20Li_2O \cdot 20Na_2O \cdot 30Al_2O_3 \cdot 30P_2O_5$ | | 430 | 1,5 | 0,2 | 130 | [5] |
| 4. | $20K_2O \cdot 20Na_2O \cdot 30Al_2O_3 \cdot 30P_2O_5$ | $KNO_3$ | 505 | 2 | 0,2 | 120 | |

Обозначения: $T$, $t$ – температура и время проведения ионного обмена; $\Delta n$ – перепад показателя преломления.

Составы синтезированных и исследованных стекол, а также их некоторые физико-химические свойства приведены в табл. 2.

Таблица 2

**Составы и свойства исследованных стекол системы $xLi_2O \cdot (40 - x)Na_2O \cdot 35B_2O_3 \cdot 25P_2O_5$**

| № образца | $x$, мол. % | Плотность, г/см$^3$ | Температура кристаллизации, °C |
|---|---|---|---|
| 1 | 15 | 2,5679 | 500 |
| 2 | 10 | 2,4929 | 570 |
| 3 | 5 | 2,4905 | 565 |
| 4 | 0 | 2,4842 | 560 |
| 5 | 15 | 2,4896 | 540 |
| 6 | 10 | 2,4923 | 490 |
| 7 | 5 | 2,4993 | 550 |
| 8 | 0 | 2,5059 | 560 |

Примечания.

1. Концентрация $Eu_2O_3$ (активатор) в образцах № 5–8 составляла 0,5 мол.% (сверх 100 %).

2. Температура стеклования $T_g$ для всех образцов составляла 380 °C.

Образцы, отполированные для проведения ионообменной обработки, закрепляли в обоймы из нержавеющей стали, затем обоймы с образцами прогревали до температуры 390 °C, после чего их опускали в расплав. Ионообменную обработку, сопровождаемую перемешиванием расплава, проводили в корундовых тиглях в лабораторной печи в течение 10 ч. Контроль температуры осуществляли термопарой, погруженной в расплав; точность поддержания температуры ± 2 °C.

Спектры оптического поглощения (до и после проведения ионообменной обработки) регистрировались на спектрофотометре SPECORD 40 в области длин волн 200–1100 нм при комнатной температуре (образцы в виде плоскопараллельных пластинок).

Спектры люминесценции активированных стекол снимались при комнатной температуре на приборе СДЛ-1 (образцы в виде кубиков). В качестве источника возбуждающего света использовалась ртутная лампа, для выделения полосы возбуждения использовался монохроматор МДР-12. Разделение возбуждающего света и люминесценции от образцов проводилось

посредством фильтров. В качестве фотоприемника использовался фотоумножитель ФЭУ-37. Сигнал от него через усилительное устройство поступал на ЭВМ. Измерения спектров проводились при комнатной температуре в диапазоне от 400 до 700 нм.

### Влияние ионообменной обработки на спектроскопические свойства

Итак, специально подобранный концентрационный ряд по составу фосфатных стекол позволяет проследить спектроскопические свойства стекол при постепенном увеличении содержания ионов натрия вместо ионов лития (при снижении значения *x*). С помощью проведения процесса ионного обмена происходит непосредственное замещение ионов $Li^+$ на $Na^+$ вследствие низкотемпературной диффузии.

На рис. 1 приведены спектры оптического поглощения активированных стекол до и после ионообменной обработки. Видно, что при замещении ионов $Li^+$ на $Na^+$ край полосы поглощения сдвигается в длинноволновую часть спектра. Такое изменение целесообразно связать с увеличением содержания ионов активатора $Eu^{2+}$, максимум полосы поглощения которых составляет примерно 308 нм.

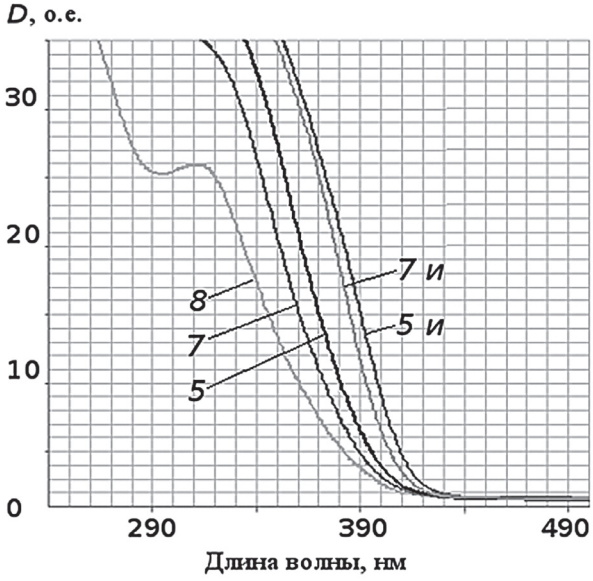



Рис. 1. Результаты ионообменной обработки активированных фосфатных стекол по их спектрам оптического поглощения; *5*, *7*, *8* – образцы перед обработкой; *5*и, *7*и, *8*и – после обработки.
Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2

На этом же рисунке приведены спектры ионнообмененных образцов составов 5 и 7 (см. табл. 2.). Видно, что в результате ионного обмена изменения в спектре наблюдаются в области 310 нм.

На рис. 2 приведены спектры люминесценции как исходных синтезированных, так и затем ионообмененных стекол. Видно, что по мере замещения ионов лития ионами натрия в составе синтезированных стекол наблюдается уширение и смещение в низкоэнергетическую область спектра полосы люминесценции ионов $Eu^{2+}$. Это можно объяснить тем, что сила поля катиона-модификатора (щелочные ионы) падает при переходе от лития к натрию, и, следовательно, ионы натрия в меньшей степени «оттягивают» электронную плотность тетраэдра $[PO_4]$; при этом увеличивается проникновение *s*- и *p*-электронов кислорода в электронную оболочку европия, что приводит к ослаблению связи атома европия с его дальними электронами и увеличению спектроскопического расщепления, что проявляется экспериментально в сдвиге полосы от ионов $Eu^{3+}$ ($^5D_0$–$^7F_0$) и $Eu^{2+}$ в низкоэнергетическую сторону при замене модификатора лития на натрий.

Возможность изменения углов между структурными элементами в стеклообразной матрице без существенных энергетических потерь обуславливается, в основном, увеличением неоднородности щелочного состава; вследствие этого уменьшение степени ковалентности связей ведет к расширению диапазона структурных из-

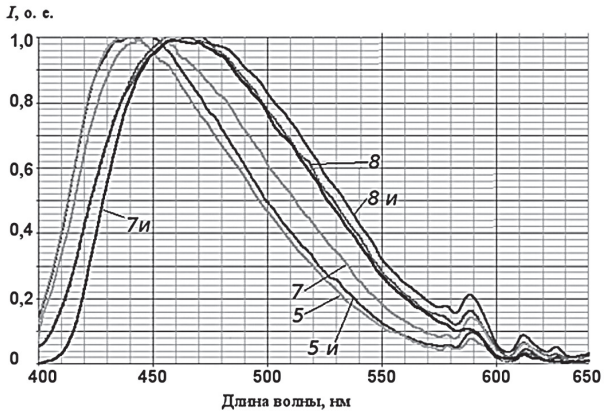



Рис. 2. Спектры люминесценции ионов активатора $Eu^{2+}$ в стеклах до (*5*, *7*, *8*) и после (*5*и, *7*и, *8*и) ионообменной обработки.
Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2

менений в стекле и увеличению неоднородного уширения спектральных линий. Этим объясняется увеличение полуширин линий оптического поглощения и люминесценции ионов $Eu^{3+}$ ($^5D_0$–$^7F_0$) при замене ионов-модификаторов лития на натрий.

Из полученных спектров видно, что при замещении лития натрием в составах синтезированных стекол соотношение концентраций $Eu^{2+}$ /$Eu^{3+}$ изменяется в сторону уменьшения концентрации $Eu^{2+}$. Это можно объяснить влиянием разрыва двойной связи немостикового кислорода в тетраэдре [$PO_4$] на ион европия. Присутствие иона с большей силой поля катиона (лития) вблизи тетраэдра приводит к поляризации последнего и, следовательно, разрыву двойной связи и восстановлению европия.

В результате проведения ионообменной диффузии из расплава соли $NaNO_3$ при замещении ионов лития из стекла на ионы натрия из расплава наблюдается, наоборот, изменение соотношения концентраций $Eu^{2+}$ /$Eu^{3+}$ в сторону увеличения концентрации $Eu^{2+}$. Это объясняется тем, что в результате ионного обмена ион натрия, более крупный, чем ион лития, создает сжимающее напряжение, которое действует на электронную оболочку европия, облегчая тем самым его переход в двухвалентное состояние.

### Влияние ионизирующего излучения на спектроскопические свойства

Представляло интерес сравнить влияние ионизирующего излучения на спектроскопические характеристики исходных синтезированных и затем ионообмененных стекол. С целью изучения радиационных дефектов, создаваемых в стеклах переменного щелочного состава под действием ионизирующего излучения, образцы стекол были подвергнуты облучению γ-квантами до дозы $10^6$ Р.

Спектр оптического поглощения образца № 1 (см. табл. 2) после облучения представляет собой совокупность полос наведенного поглощения, характерную для фосфатного стекла, и является суперпозицией, по крайней мере, трех полос поглощения. Традиционно полосы поглощения с максимумом в области приблизительно 500 нм связываются с дырочными центрами – ион-радикалами $PO_4^{2-}$, более коротковолновая полоса поглощения, которая на спектрах не просматривается и маскируется УФ-краем поглощения спектра, может быть приписана электронным центрам – ион-радикалам $PO_3^{2-}$.

Спектры, приведенные на рис. 3, представляют собой разность кривых оптического поглощения облученных и необлученных образцов одного и того же состава. Видно, что при замещении ионов лития на ионы натрия в составах стекол, число радиационных дефектов, связанных с дырочными центрами $PO_4^{2-}$, практически не изменяется или слабо растет. Традиционно полоса в районе 480–550 нм связывается с собственными радиационными дырочными центрами окраски $PO_4^{2-}$, в то время как за полосу в области 350–450 нм отвечают центры окраски $PO_3^{2-}$как дырочной, так и электронной природы, причем положение полосы зависит от силы поля катиона-модификатора.

Аналогичные спектры для образцов активированных стекол № 5–8 (рис. 4) несколько отличаются от приведенных на рис. 3 появлением новых полос в коротковолновой области и слабым ростом интенсивности полосы, связанной с радиационными дефектами $PO_4^{2-}$ .

Поскольку в ряду составов образцов стекол № 5–8 при замещении ионов лития на ионы натрия в синтезированных стеклах, не подвергнутых ионной обработке, концентрация ионов $Eu^{2+}$ уменьшается за счет перехода в трех-

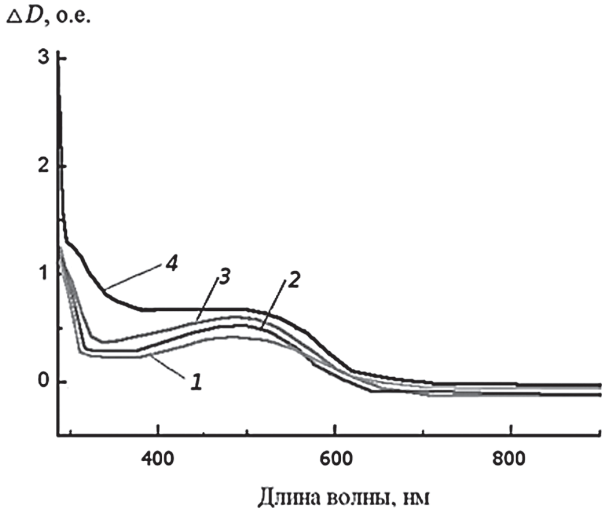



Рис. 3. Влияние щелочного состава исследованного ряда неактивированных стекол на спектры наведенного оптического поглощения.
Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2

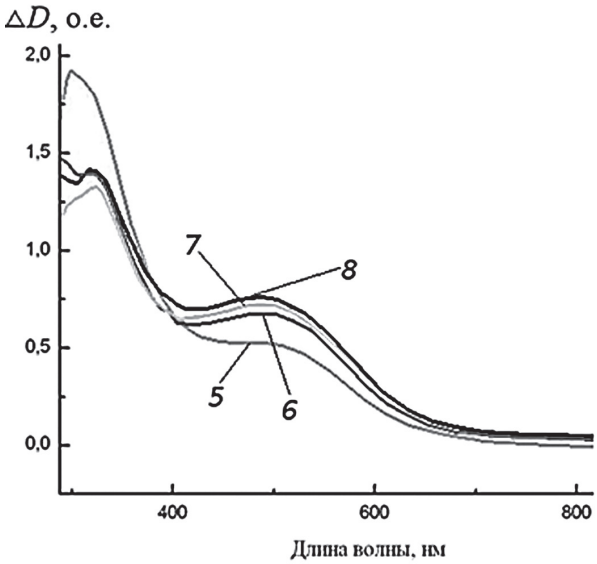



Рис. 4. Спектры наведенного оптического поглощения фосфатных стекол, активированных европием. Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2

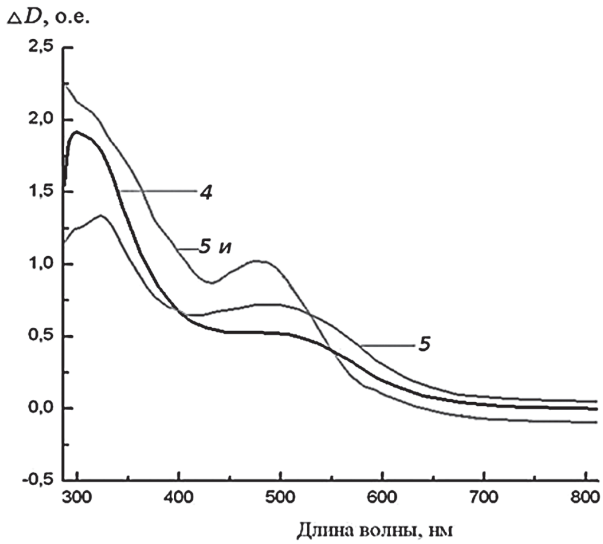



Рис. 5. Спектры наведенного оптического поглощения образцов, прошедших (*5*и) и не прошедших (*4*, *5*) ионообменную обработку. Номера кривых соответствуют номерам образцов в табл. 2

валентное состояние, конкуренция за захват дырки между ионом европия и радиационным дефектом $PO_4^{2-}$ должна ослабевать; при этом число дефектов данного типа должно возрастать, что и наблюдается в эксперименте.

Конкурирующие радиационно-химические реакции проходят по следующим схемам:

$$Eu^{2+} + h \rightarrow Eu^{(2+)+};$$

$$PO_4^{3-} + h \rightarrow PO_4^{2-},$$

где $h$ – дырки, образующиеся при гамма-облучении.

Нельзя пренебрегать и возможностью других радиационно-химических реакций:

$$Eu^{3+} + e \rightarrow Eu^{2+};$$

$$PO_3^{-} + e \rightarrow PO_3^{2-},$$

где $e$ – высокоэнергетичные электроны, образованные на физической стадии гамма-облучения.

Спектры наведенного оптического поглощения ионообмененных стекол (рис. 5) существенно отличаются от приведенных на рис. 4. Видно, что в спектре ионообмененного гамма-облученного стекла полоса поглощения, связанная с дырочными центрами $PO_4^{2-}$, сдвинута в коротковолновую область спектра относительно спектра облученного стекла, не прошедшего обработки ионным обменом. Поскольку, как указано выше, ионный обмен сопровождается восстановлением ионов европия до состояния $Eu^{2+}$, то можно ожидать, что при облучении возникает конкуренция за захват дырок между ионами $Eu^{2+}$ и дырочными радиационными центрами $PO_4^{2-}$ (см. схему реакций), следовательно, концентрация указанных центров в ионообмененном стекле должна быть меньше, при этом концентрация электронных центров $PO_3^{2-}$ может даже возрасти, что подтверждается экспериментом.

Итак, в настоящей работе исследованы спектры необлученных стекол переменного состава $xLi_2O{\cdot}(40-x)Na_2O{\cdot}35B_2O_3{\cdot}25P_2O_5$, неактивированных и активированных европием (0,5 мол.% $Eu_2O_3$). Показано, что при замещении лития на натрий в составах синтезированных стекол соотношение концентраций $Eu^{2+}/Eu^{3+}$ изменяется в сторону уменьшения концентрации $Eu^{2+}$.

Установлено, что в результате проведения ионообменной диффузии из расплава соли $NaNO_3$ при замещении ионов лития из стекла на ионы натрия из расплава наблюдается изменение соотношения концентраций $Eu^{2+}/Eu^{3+}$ в сторону увеличения концентрации $Eu^{2+}$.

Установлено, что при замещении лития на натрий в составах синтезированных стекол концентрация дырочных радиационных дефектов $PO_4^{2-}$ после гамма-облучения слабо растет.

В результате проведения ионообменной диффузии из расплава соли $NaNO_3$ при замещении ионов лития из неактивированного стекла на ионы натрия из расплава наблюдается рост концентрации радиационных дефектов (дырочных $PO_4^{2-}$ и электронных $PO_3^{2-}$) вследствие роста числа напряженных связей – P – O – P –.

Проведение ионообменной обработки активированного стекла в расплаве соли $NaNO_3$ приводит к замещению ионов лития стекла на ионы натрия, что сопровождается восстановлением ионов европия до состояния $Eu^{2+}$, обеспечивающим уменьшение концентрации дырочных радиационных дефектов $PO_4^{2-}$ вследствие участия ионов $Eu^{2+}$ в конкуренции за захват дырок с предшественниками дефектов $PO_4^{2-}$.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Карапетян, Г.О.** Люминесценция стекол с редкоземельными активаторами [Текст] / Г.О. Карапетян // Известия АН СССР. – Сер. физич. – 1963. – Т. 27. – С. 799–802.

2. **Лившиц, В.Я.** Щелочнобороофосфатные стекла как основа для И.О. изменения показателя преломления [Текст] / В.Я. Лившиц, Е.А. Марчук, Н.К. Мокин // Физика и химия стекла. – 1989. – Т. 15. – № 4. – С. 616–619.

3. **Лившиц, В.Я.** Модули упругости, показатель преломления и его изменения при ионном обмене в расплавах солей для щелочно-фосфатных стекол [Текст] / В.Я. Лившиц, Н.К. Мокин, М.Г. Поталицин // Физика и химия стекла. – 1992. – Т. 18. – № 3. – С. 104–110.

4. **Карапетян, Г.О.** Эффект сегрегации ативаторов в фосфатных стеклах [Текст] / Г.О. Карапетян, Г.Т. Петровский, Н.В. Ремизов, Р.Г. Хоренян // Доклады АН СССР. – 1988. – Т. 301. – № 1. – С. 84–88.

5. **Евстропьев, С.К.** Состояние ионов железа в силикатных стеклах при ионном обмене $Na^+_{ст}$–$K^+_{распл}$ по данным ЭПР спектроскопии [Текст] / С.К. Евстропьев, И.Х. Исаев, Н.В. Никоноров, Ш.К. Салимов // Физика и химия стекла. – 1980. – Т. 6. – С. 895–899.

УДК 771.534.2:771.534.13

*В.А. Закревский, Н.Т. Сударь*

# РАБОТОСПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ

В последние годы интенсивно развивается органическая электроника. На основе тонких слоев низко- и высокомолекулярных (полимерных) органических материалов уже созданы и используются в технике полевые транзисторы и органические светодиоды (OLEDs – Organic Light Emitting Diodes), которые находят применение при создании дисплеев для различных мобильных устройств. Достоинствами таких дисплеев являются относительно простая технологии изготовления, сравнительно невысокая стоимость, гибкость. Считается, что со временем они могут заменить жидкокристаллические дисплеи и плазменные панели большой площади. Особое внимание стало уделяться и использованию OLEDs в качестве источников света, например в Европе с 2008 года реализуется проект OLED100.EU, в задачи которого входит разработка OLED-панелей размером 100×100 см с эффективностью 100 лм/Вт, себестоимостью 100 евро/м$^2$ и временем жизни 100 тыс. ч [1]. Тем не менее, несмотря на целый ряд преимуществ перед обычными полупроводниковыми светодиодами, в частности высокое контрастное отношение и яркость, широкого применения OLEDs еще не получили.

Основной причиной этого является недостаточно высокая долговечность таких приборов. Для их успешного коммерческого внедрения необходимо добиться увеличения срока службы до $10^5$ ч в условиях высокого уровня яркости $10^2$–$10^3$ кд/м$^2$ [2]. Таким образом, оценка предельно возможного времени жизни OLEDs представляется весьма актуальной задачей. Ее решение позволит трезво оценить перспективы использования OLEDs в технике.

Излучение света OLEDs происходит вследствие рекомбинации инжектируемых из электродов электронов и дырок [3]. Инжекция дырок обусловлена переходом электронов с высших заполненных молекулярных орбиталей органических молекул на свободные состояния в аноде. Микроскопическая теория, позволяющая оценить скорость таких переходов (в широком диапазоне изменения температуры и напряженности электрического поля) с учетом реальной формы и высоты бартера, а также роли процессов, протекающих с поглощением фононов, опубликована в работе [4]. В результате переходов электронов на анод в органическом материале образуются положительные молекулярные ионы (катион-радикалы), которые и следует рассматривать как дырки. Движение дырок представляет собой цепочку окислительно-восстановительных реакций, т. е.

$$\dot{M}_1^+ + \dot{M}_2 \rightarrow M_1 + \dot{M}_2^+,$$

где $\dot{M}_1^+$, $\dot{M}_2^+$ – молекулярные ионы (точки означают наличие неспаренных электронов), $M_1$, $M_2$ – нейтральные молекулы [5].

Считается, что основной причиной деградации OLEDs является воздействие на органические соединения кислорода и воды [6, 7]. Действительно, ограничение влияния этих факторов приводит к существенному возрастанию долговечности этих светодиодов, но полностью подавить процессы деградации не удается. Она начинается в локальных областях этих светодиодов, где напряженность электрического поля и плотность тока первоначально превосходят средние значения [6]. Такой процесс может ускоряться под действием тепла, выделяемого при протекании тока через светодиод. Здесь следует отметить, что высокая яркость свечения OLEDs достигается только при пропускании через него тока большой плотности, достигающей величины ~100 мА/см$^2$ [8, 9].

По нашему мнению, имеется еще одна причина сравнительно быстрой деградации OLEDs, обусловленная природой носителей в органических материалах, а именно тем, что носителями положительного заряда (дырками) в органических материалах являются положительные молекулярные ионы. В связи с этим следует прежде всего отметить, что в ионизированных молекулах (молекулярных ионах) заметно уменьшена энергия разрыва межатомных химических связей $D^+$, по сравнению с энергией разрыва связей $D$ в неповрежденных нейтральных молекулах ($D^+ < D$) [10, 11]. Например, энергия диссоциации связи C–C в ионе этана составляет $D^+$=1,9 эВ, в то время как в нейтральной молекуле энергия $D$ = 3,6 эВ [10]. Для полиэтилентерефталата, по данным работы [12], значение $D^+$ составляет около 1,2 эВ.

В OLEDs используются тонкие слои органических материалов (~100 нм). Поэтому уже при приложении к ним напряжения в несколько вольт среднее значение напряженности электрического поля достигает величины ~$10^6$ В/см. В локальных областях полимера, например вблизи микроострий на поверхности электродов, напряженность электрического поля может превышать среднее значение. В сильных электрических полях на единичные заряды действуют силы, сравнимые с силами межатомного взаимодействия. В таком поле потенциальные кривые межатомного взаимодействия в молекулярных ионах изменяются, причем глубины потенциальных ям, т. е. энергии разрыва связей $D_F^+$ уменьшаются [11, 13]. Отметим, что явление распада молекулярных ионов в сильном электрическом поле ярко проявляется при изучении молекул методом полевой масс-спектрометрии [11]. В работе [14] с этих позиций предложено рассматривать процесс старения полимерных диэлектриков в электрическом поле.

Согласно данным работы [11], энергия разрыва связей в положительных ионах с увеличением напряженности поля уменьшается приблизительно по линейному закону, т.е.

$$D_F^+ \approx D^+ - el_0qF,$$

где $e$ – заряд электрона, $F$ – средняя напряженность электрического поля, $q$ – коэффициент

усиления поля ($qF$ – локальная напряженность поля), $l_0$ – активационная длина (на основании данных работы [11] ее величину можно оценить в 0,15–0,20 нм).

Следовательно, для константы скорости термоактивационного распада межатомных связей в положительных молекулярных ионах справедливо выражение

$$k = \tau_0^{-1} \exp\left(-\frac{D^+ - el_0qF}{k_\text{B}T}\right), \qquad (1)$$

где $\tau_0 \approx 10^{-13}$ с, $k_\text{B}$ – постоянная Больцмана, $T$ – температура.

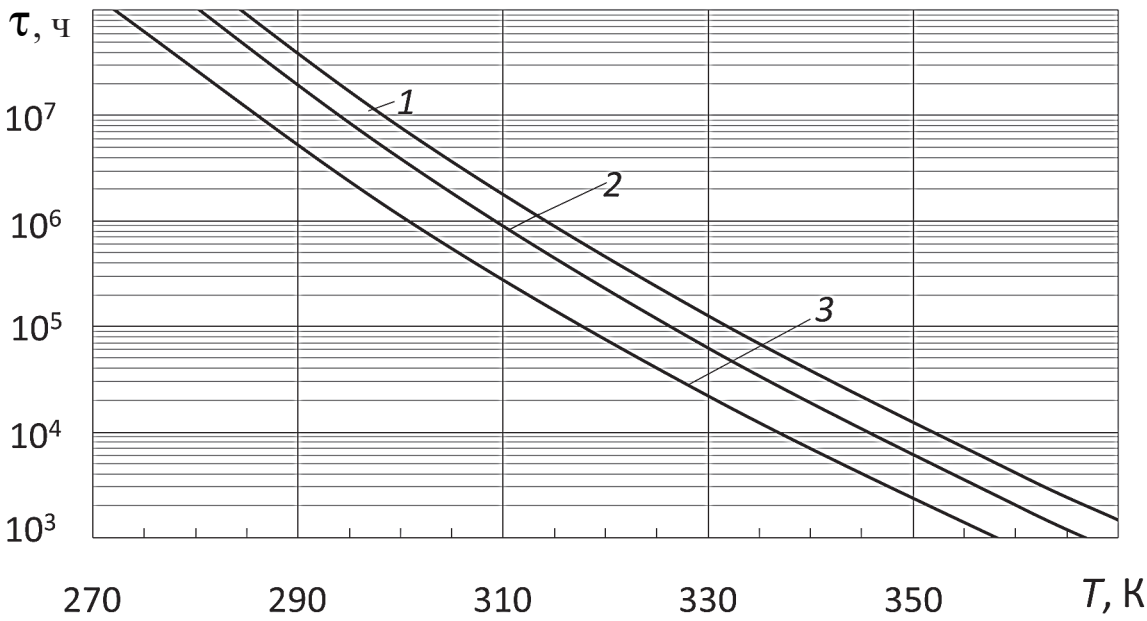
Теперь можно оценить долговечность OLEDs, приняв, что время их жизни определяется скоростью распада молекул (точнее молекулярных ионов). Положим, что долговечность OLEDs равна времени, в течение которого разрушается 10 % всех молекул в объеме транспортного слоя.

Концентрация положительных ионов (дырок) $n = j/e\mu F$, если $j$ – плотность тока, $\mu$ – подвижность дырок. Число разрывов в единице объема в единицу времени равно $kn$ и, следовательно, $\tau = 0{,}1N/kn$, где $N$ – концентрация молекул. В результате для расчета долговечности $\tau$ имеем формулу

$$\tau = \frac{0{,}1Ne\tau_0\mu F}{j}\exp\left(\frac{D^+ - el_0qF}{k_\text{B}T}\right). \qquad (2)$$

Интересно отметить, что данное время жизни пропорционально подвижности дырок. Увеличение долговечности с ростом подвижности обусловлено снижением концентрации ионов (при той же плотности тока).

Воспользовавшись соотношением (2), оценим изменение долговечности с ростом температуры. Зададимся значениями $N = 10^{21}$ см$^{-3}$, $\mu = 10^{-5}$ см$^2$/(В·с), $F = 10^6$ В/см и $q = 5$. Плотность тока $j$ и энергию диссоциации ионов $D^+$ будем считать варьируемыми параметрами. Рассматриваемые зависимости представлены на рисунке. Видно, что при $j = 30$ мА/см$^2$ и $D^+ = 1{,}2$ эВ (кривая *1*) долговечность более $10^5$ ч реализуется при температурах не выше 320 К. К снижению долговечности приводит не только увеличение температуры, но и плотности тока через OLEDs. При $j = 60$ мА/см$^2$ и $T = 320$ К (кривая *2*) $\tau \approx 4\cdot10^4$ ч. Если при этом материал нагреется до 330 К, то долговечность не превысит $1\cdot10^4$ часа. На величину долговечности существенное влияние оказывает прочность химических связей в ионах. Снижение значение $D^+$ до 1,15 эВ (кривая *3*) приводит к уменьшению $\tau$ почти на порядок.




Расчетная зависимость долговечности OLEDs от температуры при различных значениях плотности тока и энергии диссоциации молекулярных ионов:
$j = 30$ мА/см$^2$ и $D^+ = 1{,}2$ эВ (*1*); $j = 60$ мА/см$^2$ и $D^+ = 1{,}2$ эВ (*2*); $j = 30$ мА/см$^2$ и $D^+ = 1{,}15$ эВ (*3*)

Проведенные оценки позволяют сделать вывод о том, что инициируемый электрическим полем распад органических молекул, при ограничении разогрева материала до температуры не выше 330 – 340 K, позволяет получить приемлемую (с коммерческой точки зрения) долговечность OLEDs. Однако данные оценки определяют ее предельно достижимую величину. Поэтому в связи с обсуждаемой проблемой работоспособности OLEDs необходимо остановиться еще на ряде моментов.

Образующиеся при инжекции зарядов из анода положительные молекулярные ионы (катион-радикалы) склонны к распаду. Электрическое поле, как показано выше, ускоряет эту реакцию. Распад происходит по схеме

$$\dot{M}_1^+ \rightarrow M_2^+ + \dot{R},$$

т. е. с образованием нового молекулярного иона и свободного радикала – нейтрального осколка молекулы, обладающего неспаренным электроном. Ионы инициируют ионно-молекулярные реакции, вступая во взаимодействие с соседними молекулами. В результате также могут образовываться свободные радикалы, например по схеме

$$R_1H^{+\bullet} + RH \rightarrow \dot{R}_1 + RH_2^+,$$

где RH – молекула углеводорода, $R_1H^{+\bullet}$ – катион-радикал [15].

Свободные радикалы из-за наличия у них неспаренных электронов обладают высокой реакционной способностью. Вступая во взаимодействие с соседними молекулами, они инициируют протекание свободнорадикальных реакций, часто имеющих цепной характер.

В результате протекания свободнорадикальных и ионно-молекулярных реакций происходит глубокое изменение химической структуры молекул, т. е. деградация органического материала. Поэтому время жизни соответствующих приборов будет снижено по сравнению со временем, определяемым формулой (2).

Наконец, последнее. Свечение OLEDs является рекомбинационным. При рекомбинации зарядов в конденсированных органических соединениях выделяется энергия 4,5 – 7,5 эВ [16]. Основная часть энергии рекомбинации зарядов рассеивается безызлучательно. Она расходуется на возбуждение молекул. Поэтому при рекомбинации зарядов (электронов и дырок) становится возможным (если энергия возбуждения превосходит энергию разрыва связи) распад молекул по схеме

$$\dot{M}^+ + e \rightarrow M^* \rightarrow \dot{R}_1 + \dot{R}_2,$$

где $M^*$ – возбужденная молекула; $\dot{R}_1$ и $\dot{R}_2$ – свободные радикалы, образующиеся в результате диссоциации связи в возбужденной молекуле.

Таким образом, следует заключить, что под воздействием химически активных частиц, образующихся в органических материалах при приложении электрического поля, за сравнительно короткое время происходит существенное изменение свойств органических материалов. С этой точки зрения получение достаточно долговечных органических светодиодов представляется трудновыполнимой задачей. Трудности, стоящие на пути ее решения, имеют принципиальный характер. Они обусловлены природой носителей положительного заряда в органических материалах, а также тем, что при разрыве ковалентных химических связей образуются химически чрезвычайно активные свободные радикалы, обладающие неспаренными электронами, инициирующими цепь химических превращений, вызывающих деградацию органических материалов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Стахарный, С.А** Перспективы органических светодиодов в системах освещения [Текст] / С.А. Стахарный // Современная светотехника. – 2010. – № 3. – С. 23–30.

2. **Майская, В.** Органические светодиоды – новые звезды малых экранов [Текст] / В. Майская // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. – 2005. – № 8. – С. 10–14.

3. **Ванников, А.В.** Органические полимерные светоизлучащие устройства [Текст] / А.В. Ванников // Российский химический журнал. – 2001. – Т. 45. – № 5–6. – С. 41–50.

4. **Аверкиев, Н.С.** Инжекция дырок в органические молекулярные тела [Текст] / Н.С. Аверкиев, В.А. Закревский, И.В. Рожанский, Н.Т. Сударь // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51. – Вып. 5. – С. 862–868.

5. **Stolka, M.** Hole transport in solid solutions of a diamine in polycarbonate [Text] / M. Stolka, J.F. Yanus, D.M. Pai // J. Phys. Chem. – 1984. – Vol. 88. – No. 20. – P. 4707–4714.

6. **Burrows, P.E.** Reliability and degradation of organic light emitting devices [Text] / P.E. Burrows, V. Bulovic, S.R. Forrest [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1994. – Vol. 65. – No. 23. – P. 2922–2924.

7. **Fehse, K.** Lifetime of organic light emitting diodes on polymer anodes [Text] / K. Fehse, R. Meerheim, K. Walzer [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2008. – Vol. 93. – No. 8. – P. 083303.

8. **Silvestre, G.C.M.** Light degradation and voltage drift in polymer light-emitting diodes [Text] / G.C.M. Silvestre, M.T. Johnson, A. Giraldob [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2001. – Vol. 78. – No 11. – P. 1619–1621.

9. **Chung-Chin Hsiao**. High-efficiency polymer light-emitting diodes based on poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylene vinylene] with plasma-polymerized $CHF_3$-modified indium tin oxide as an anode [Text] / Chung-Chin Hsiao, Chih-Hao Chang, Tzu-Hao Jen [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2001. – Vol. 78. – No. 11. – P. 1619–1621.

10. **Джонстон, Р.** Руководство по масс-спектрометрии для химиков-органиков [Текст] / Р. Джонстон. – М.: Мир, 1975. – 152 с.

11. **Король, Э.Н.** Физические основы полевой масс-спектроскопии [Текст] / Э.Н. Король, В.В. Лобанов, В.А. Назаренко, В.А. Покровский. – Киев: Наукова думка, 1985. – 313 с.

12. **Бережанский, В.Б.** Исследование старения полимерных диэлектриков в постоянном электрическом поле в условиях подавления частичных разрядов [Текст] / В.Б. Бережанский, В.М. Быков, В.В. Городов [и др.] // Электричество. – 1987. – № 7. – С. 14–18.

13. **Hiskes, J.R**. Dissociation of molecular ions by electric and magnetic fields [Text] / J.R. Hiskes // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 122. – No. 4. – P. 1207–1217.

14. **Zakrevskii, V.A.** Mechanism of electrical degradation and breakdown of insulting polymers [Text] / V.A. Zakrevskii, N.T. Sudar, A. Zaopo [et al.] // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 15. – No. 4. – P. 2135–2139.

15. **Нестеров, С.В.** Особенности образования и реакций макрорадикалов в γ-облученном сополимере этилена с ацетиленом [Текст] / С.В. Нестеров, В.И. Фельдман, Г.П. Белов // Высокомолек. соед. – 2004. – Т. 44А. – № 9. – С. 1498–1505.

16. **Алфимов, М.В.** Возбужденные триплетные состояния молекул в радиационной химии (обзор) [Текст] / М.В. Алфимов // Химия высоких энергий. – 1972. – Т. 6. – № 1. – С. 3–21.

УДК 577.3

*Е.Д. Руденко, А.В. Сабанцев, А.В. Швецов, А.В. Илатовский, Д.Б. Червякова, М.Ю. Григорьев, М.Г. Петухов*

# АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ РАСТЯЖЕНИЯ КОРОТКИХ ФРАГМЕНТОВ ДВУХНИТЕВЫХ ДНК

Структура и свойства ДНК, одного из важнейших соединений живых клеток, изучались в различных условиях с помощью многих теоретических и экспериментальных методов, начиная с 1953 года, когда была открыта структура двойной спирали ДНК. В 1992 году уже проводились первые работы, в которых наблюдали процесс растягивания индивидуальных молекул ДНК, присоединенных к шарику размером порядка нескольких микрометров, под действием магнитных и гидродинамических сил [1]. В 1996 году в группе Лавери было проведено молекулярное моделирование этого процесса *in silico* [2].

Сложные молекулярные механизмы сжатия и растяжения двунитевой ДНК (днДНК) играют огромную роль во многих фундаментальных биологических процессах живой клетки. Например, днДНК растягивается при связывании с различными белками, участвующими в процессах гомологической рекомбинации и репарации ДНК у бактерий и эукариот (белки RecA, Rad51) [4]. Понимание молекулярных механизмов растяжения днДНК и построение молекулярных моделей в различной степени растянутых форм днДНК необходимо для изучения возможных способов связывания ДНК, например с такими белками, как TIP49A/TIP49B человека.

В последние годы усовершенствования техники манипуляций с индивидуальными молекулами сделали возможными эксперименты по изгибу и растяжению отдельных молекул днДНК с использованием внешних сил и крутящих моментов наноуровня. Развитие вычислительных методов молекулярного моделирования и молекулярной динамики, а также неуклонно возрастающая производительность современных компьютеров уже сейчас сделали возможным реалистичное моделирование динамики растяжения днДНК под воздействием внешних сил в водном окружении.

В данной работе нами были разработаны алгоритмы и программное обеспечение для растягивания ДНК произвольной последовательности и структуры с помощью ICM-Pro – пакета программ для молекулярного моделирования биомакромолекул и исследованы различия структурных переходов в днДНК при растяжении за различные (либо 3′, либо 5′) концы.

### Методы исследования *in silico*

Для молекулярного моделирования процессов конформационных переходов в двунитевой ДНК (днДНК) в качестве стартовой конформации использовались полноатомные модели ДНК в классической конформации *B*-формы. Моделирование процессов растяжения проводилось с помощью ICM-Pro, коммерчески доступного пакета программ для молекулярного моделирования биомакромолекул [5].

На языке программирования, встроенном в пакет программ ICM-Pro, был создан набор программных модулей для решения следующих задач:

создания полноатомных моделей пространственных структур днДНК произвольной длины и последовательности *in silico*;

растяжения полноатомных моделей днДНК за концы 5′, 3′или их произвольные комбинации;

определения структурных параметров спиральных конформаций днДНК.

Создание полноатомных моделей пространственных структур днДНК производилось с использованием существующей в пакете программ ICM-Pro библиотеки стандартных нуклеотидных остатков. Разработанный нами программный модуль позляет определять произвольные значения для таких параметров, как длина последовательности и соотношение нуклеотидных пар аденин-тимин и гуанин- цитозин (далее GC-состав), или использовать определенные нуклеотидные последовательности.

Численные эксперименты проводились с днДНК случайной нуклеотидной последовательности различной длины от 15 до 35 нуклеотидных пар. Выбор длины определялся во-первых, необходимостью учета всех основных взаимодействий днДНК в классической *B*-форме; во-вторых, возможностью исследования изменений структуры днДНК на концах и в середине двойной спирали и в-третьих обеспечения разумной длительности расчета процессов растяжения днДНК.

В расчетах использовались последовательности днДНК с равным соотношением нуклеотидных пар (GC-состав равен 0,5). Для расчета координат оси двойной спирали ДНК был использован алгоритм HELANAL [6], который был реализован на языке программирования, встроенном в пакет программ ICM-Pro.

Молекулярное моделирование проводилось в силовом поле MMFF [7], с использованием коммерческого пакета программ ICM-Pro [5]. Все атомы молекулы были учтены в модели в явном виде. Во время вычислений и минимизации энергии парциальные заряды атомов, длины связей и валентные углы были фиксированы и равны стандартным величинам. При вычислении энергии учитывались Ван-дер-Ваальсовы, электростатические, торсионные потенциалы стандартных углов вращения и присутствие водородных связей. Во избежание необходимости обновления списка взаимодействующих пар атомов во всех вычислениях использовался полный список невалентных взаимодействий исследуемой молекулярной системы. Энергия взаимодействия ДНК с водой, рассчитываемая на основе площади поверхности, доступной растворителю, вычислялась методами непрерывной модели гидратации, встроенными в пакет программ ICM-PRO.

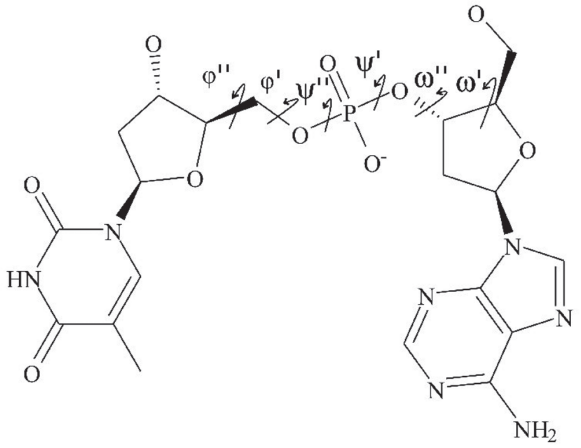



Рис. 1. Схематическое изображение фрагмента полимерной цепи ДНК с указанием стандартных углов ее вращения

Растяжение *in silico* проводилось посредством приложения к атомам на концах ДНК некоторой заданной силы (эмпирический параболический потенциал), параллельной оси двойной спирали ДНК, и последующей минимизации энергии молекулы. Силы растяжения задавались в диапазоне от 1 до 10 пН.

Процессы растяжения днДНК *in silico* анализировались по изменению стандартных углов вращения нуклеотидных остатков в различных положениях вдоль последовательности ДНК.

**Результаты и их обсуждение**

В ходе проведения компьютерных экспериментов по растягиванию днДНК различных длин и последовательностей были получены промежуточные конформации днДНК, растянутые за концы 3′ и 5′ с силами от 1 до 10 пН, и зависимости изменения стандартных торсионных углов ω'', ψ', ψ'', φ' и φ'' нуклеотидных остатков днДНК от величины растяжения днДНК.

Ниже приведены типичные результаты, полученные при растягивании днДНК, состоящей

из двух цепей с нуклеотидными последовательностями

TACAGGCACGCCGTGTGAGTAGCGTTATAT

одной цепи и

ATGTCCGTGCGGCACACTCATCGCAATATA

другой, считая от конца 5′к концу 3′и от 3′к 5′, соответственно (всего 30 нуклеотидных пар). При этом использована стандартная номенклатура однобуквенных названий нуклеотидных остатков: A – аденин, T – тимин, C – цитозин, G – гуанин.

При растяжении с постоянной силой в диапазоне 1 – 10 пН днДНК имеет наибольшие деформации на концах двойной спирали; деформации постепенно уменьшаются для нуклеотидных остатков, расположенных ближе к центру спирали. Характерные зависимости изменения торсионных углов от величины деформации ДНК для крайнего и центрального нуклеотидных остатков при растяжении днДНК за концы 3′и концы 5′с постоянной силой 10 пН приведены на рис. 2.

Видно, что хотя во всех случаях угол φ" в результате растяжения ДНК увеличивается, характер этого увеличения существенно различен. При растяжении днДНК за концы 3′для угла φ" при концевом остатке имеется выраженное падение его значения, тогда как тот же угол при центральном остатке монотонно растет за исключением конечного числа точек. Диапазоны изменения углов также отличаются: для растяжения за концы 3′конечное изменение угла φ" для крайнего остатка даже меньше, чем для центрального и составляет всего около 2 град, в то время как при растяжении за концы 5′диапазон изменения этого угла на центральном остатке существенно меньше. Основное же различие зависимостей на рис. 2, *А* при растяжении ДНК за концы 3′и 5′состоит в различных диапазонах растяжения при одинаковой приложенной силе.

Сама направленность зависимости торсионного угла φ' от величины растяжения ДНК (рис. 2, *Б*) имеет различный характер: угол φ' монотонно растет при растяжении за концы 5′у концевого остатка и при растяжении за концы 3′ у центрального. В то время как при растяжении за концы 3′ угол φ' у концевого остатка сначала растет, а потом падает, как и при растяжении за концы 5′для центрального остатка.

Диапазоны изменения угла φ' при различных остатках и механизмах растяжения ДНК также отличаются: для растяжения за концы 3′ конечное изменение угла для крайнего остатка меньше, чем для центрального, а при растяжении за 5′– наоборот. Так же, как и в предыдущем случае, основное различие зависимостей углов φ' при различных нуклеотидных остатках от растяжения за концы 3′и 5′ состоит в различных диапазонах растяжения днДНК при одинаковой приложенной силе. И если сравнивать диапазоны изменения угла при растяжениях 3′ и 5′, то видно, что при небольшой его степени днДНК углы изменяются в сходных диапазонах примерно на 2 град, а основные, существенные изменения происходят уже при сильном растяжении структуры (более, чем до 160 %), что для такой силы можно увидеть лишь при растяжении за концы 3′.

На рис. 2, *В* направленность изменения значения угла различна: значение для концевого остатка при растяжении за концы 3′ растет, а при растяжении за концы 5′– падает. При этом диапазоны этих изменений почти одинаковы, несмотря на то, что в первом случае днДНК были растянуты до 180 %, а во втором – лишь до 115 %. Для центрального же остатка при растяжении за концы 3′ угол ψ" растет почти до растяжения в 150 %, а начинает падать более чем на 1 град при растяжении уже более 180 %. При растяжении за концы 5′угол ψ" растет только до растяжения приблизительно в 10 %, а потом лишь падает. При этом, хотя диапазон его изменения при растяжении за концы 3′в целом больше, но при растяжении менее 15 % этот угол растет быстрее при растяжении днДНК за концы 5′.

Для растяжения в диапазоне до 115 % лишь при растяжении за концы 3′днДНК для концевого остатка и при растяжении за концы 5′для центрального присутствует очень небольшое увеличение угла ψ' (рис. 2, *Г*), а в остальных случаях данный угол уменьшается, причем при растяжении за конец 5′для концевого остатка – даже на 4 град. Далее при растяжении за концы 3′для центрального остатка значение указанного угла продолжает падать до конца растяжения, а для концевого начинает резко расти примерно после растяжения до 160 % (также примерно на 4 град). Диапазоны же его

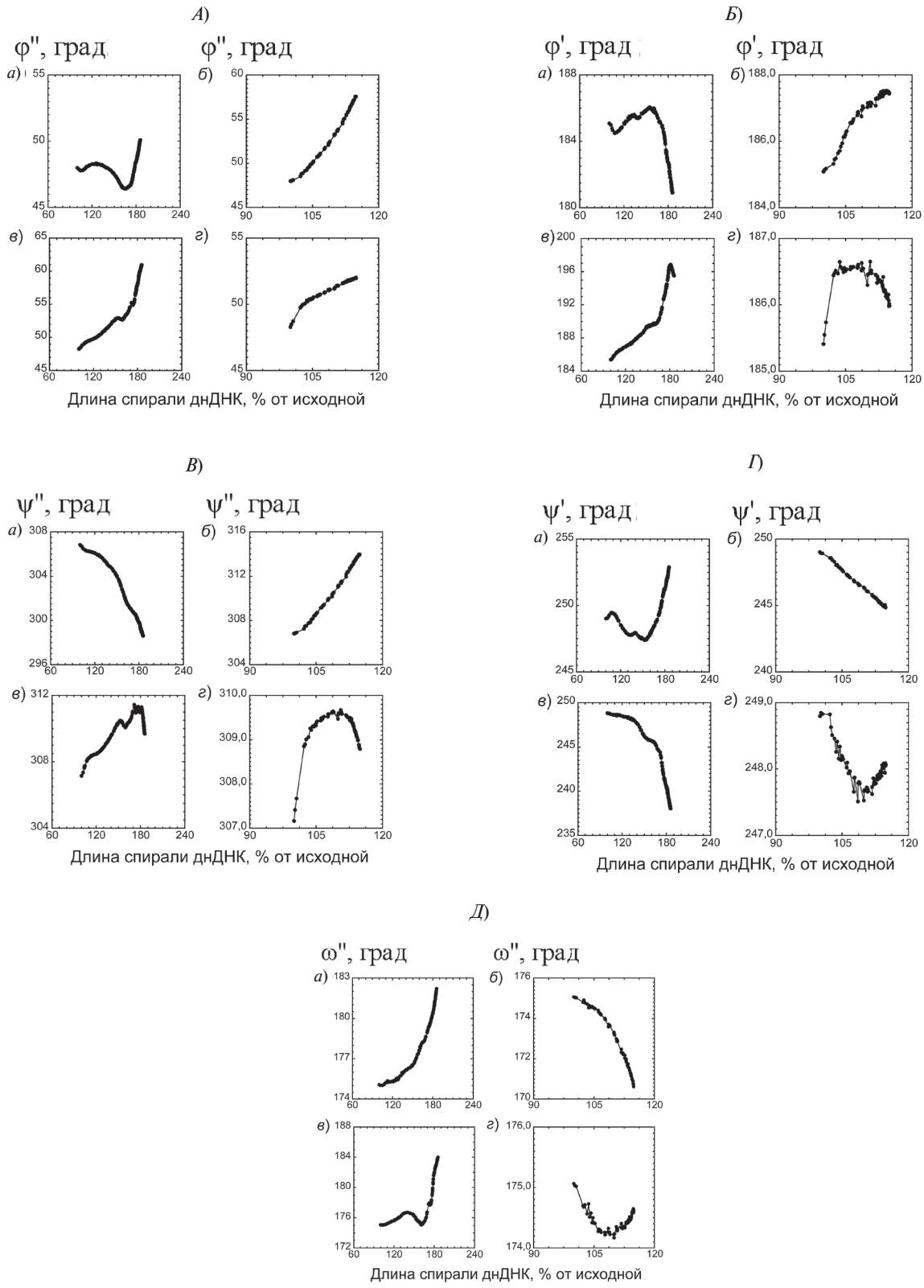



Рис. 2. Зависимости торсионных углов φ″(*А*), φ′(*Б*), ψ″(*В*), ψ′(*Г*), ω″(*Д*) (см. рис. 1) от степени растяжения днДНК за концы 3′(*а*, *в*) или 5′(*б*, *г*) для ее разных нуклеотидных остатков: одного из концевых (*а*, *б*) и центрального (*в*,*г*)

изменения различаются аналогично: для растяжения за концы 3′ большее изменение происходит в угле ψ' при центральном остатке, а при растяжении за концы 5′ – в этом угле при концевом нуклеотидном остатке.

На рис. 2, *Д* при растяжении за 3′ значение угла ω" растет, но если при концевом остатке этот угол увеличивается в процессе всего растяжения, то при центральном остатке значение этого угла сначала достигает минимума при растяжении около 160 %, а уже затем начинается его резкий рост. При растяжении за концы 5′ значение угла в начале процесса падает, но при концевом остатке угол ω" уменьшается вплоть до конца растяжения, тогда как при центральном остатке в конце растяжения его значение опять растет. Диапазоны же изменения угла ω", как и во всех предыдущих случаях, шире для растяжения за концы 3′, причем при данном рассмотрении они примерно одинаковы для центрального и концевого остатков, а при растяжении за концы 5′ – меньше (из них наименьший диапазон изменения угла наблюдается при центральном остатке). Характерно, что как для концевого, так и для центрального остатков, наблюдается различное изменение угла ω" в начале процесса: при растяжении за концы 3′ оно растет, а при растяжении за 5′ – падает.

Интересно отметить, что зависимости изменения угла ω" при растяжении днДНК за различные концы отличаются не только формой, но и (что более важно), своей направленностью. При растяжении молекулы за концы 3′ значение угла ω" падает, а при растяжении за 5′ – нарастает. Кроме того, из представленных данных можно заключить, что днДНК имеет разные пределы пластической деформации при растяжении за различные концы. Так, если осуществлять растяжение с постоянной силой 10 пН за концы 5′, то днДНК растягивается в пределах 15 %, в то время как при растяжении за концы 3′ с той же силой она оказывается способной растянуться более, чем до 185 % от начальной длины. Интересно, что полученные нами зависимости величин стандартных торсионных углов от степени растяжения днДНК с некоторой погрешностью совпадают, причем для обеих нитей ДНК двойной спирали, но различаются при изменении точки приложения внешней силы. Хотя эта разница в значениях углов и невелика, все же (как и было показано выше) для некоторых углов имеет место другая направленность зависимости. Таким образом, наши вычислительные эксперименты подтверждают, что молекулярные механизмы растяжения *B*-формы днДНК, растягиваемой за 3′-концы, значительно отличаются от механизмов растяжения за концы

Рис. 3. Пространственные структуры днДНК, растянутые за концы 3′(*а*) и 5′(*б*)

5′ днДНК; это совпадает с полученными ранее экспериментальными и теоретическими данными [2, 8].Следует отметить, что при растяжении за концы 3′ двуспиральная структура молекулы днДНК быстро разрушается даже в результате приложения сравнительно небольшой силы в 10 пН (рис. 3, *а*). Так, для приведенной выше нуклеотидной последовательности модель днДНК была растянута почти в два раза за концы 3′ с суммарной силой в 10 пН.

При этом классические водородные связи между основаниями нуклеотидных остатков комплементарных цепей ДНК разрушаются, начиная с концевых остатков, на обоих концах молекулы ДНК. Даже такой сравнительно небольшой силы достаточно, чтобы оторвать друг от друга концевые участки цепей днДНК и полностью вытянуть концы 3′ вдоль вектора прилагаемой силы.

Напротив, при растяжении за концы 5′ молекула днДНК имеет существенно большую жесткость, а ее структура деформируется по всей длине спирали более равномерно. При этом пары оснований наклоняются относительно оси спирали, но в отличие от предыдущего случая для растяжения за концы 5′ в молекуле не разрушаются уотсон-криковские пары и двунитевая структура спирали ДНК (рис. 3, *б*). Модель днДНК для приведенной выше нуклеотидной последовательности при растяжении за концы 5′ с суммарной силой в 10 пН растянулась в пределах 20 %.

В этом случае молекула днДНК растягивается на существенно меньшую длину. Однако искажения геометрии классической *B*-формы ДНК наиболее выражены в концевых участках днДНК и постепенно убывают к центру молекулы.

Известно, что изменения в конформации днДНК могут быть произведены приложением к ней силы и/или крутящего момента *in vivo* с помощью некоторых белков [8] или *in vitro* на экспериментальных установках магнитного или лазерного пинцета [9]. Кроме того, свободная ДНК может существовать в нескольких весьма различных структурных формах, в зависимости от нуклеотидной последовательности и внешних условий [1]. Несмотря на то, что днДНК достаточно конформационно стабильна, почти все ее известные пространственные структуры довольно нерегулярны и часто сильно деформированы по сравнению с соответствующими идеальными формами двойной спирали ДНК. Такие деформации могут быть приписаны специфическим последовательностям пар оснований, силам «упаковки» кристаллов, связанным белкам и т. п., что говорит о значительной подвижности днДНК при внешнем возмущении. При этом в живой клетке молекула днДНК плотно упакована в хромосомах и вынуждена быть изогнутой, скрученной и растянутой многочисленными белками нуклеосом, ответственными за регулирование жизненно важных процессов клетки. Известны данные [3], согласно которым структура сильно растянутой ДНК играет важную роль в функционировании белков, которые, взаимодействуя с днДНК, вызывают изменение длины этой молекулы.

Механизмы растяжения коротких фрагментов днДНК теоретически исследовались в работах группы Ричарда Лавери [2]. Было показано, что промежуточные структуры днДНК, растянутые за концы 5′ и за 3′, сильно отличаются друг от друга. Однако причины этого явления исследованы не были. Авторы только предполагают, что вследствие наклона пар оснований в *B*-форме ДНК относительно основной цепи молекулы структура сильно растянутой молекулы ДНК зависит от выбора концов этой молекулы, к которым приложена сила. Так, растяжение днДНК за два конца 5′ должно увеличить наклон пар оснований, а за концы 3′ – уменьшить.

Результаты других авторов не согласуются с этим предположением [3]. Было экспериментально показано, что сильно растянутые состояния днДНК действительно имеют различные механические свойства, что соответствует различным промежуточным структурам днДНК. Так, для растяжения за концы 3′ по сравнению с растяжением за концы 5′, наблюдались следующие различия [10]:

силы, под действием которых половина молекул в ансамбле произвела завершенный переход к однонитевой ДНК, лежат в различных диапазонах (для исследованных днДНК фага λ это 141 ± 3 и 122 ± 4 пН, соответственно);

кривая зависимости растяжения от приложенной силы для сильно растянутой днДНК имеет заметное различие в наклонах оснований относительно центральной оси двойной спирали;

наблюдается различное положение гистерезиса на графиках зависимости растяжения от приложенной силы в растворах с высокими концентрациями соли;

молекулы, растянутые за концы 3′ и 5′, показывают различные изменения в гистерезисе при взаимодействии молекулы днДНК с бета-циклодекстрином (молекулой, формирующей стабильные комплексы с повернутыми парами оснований) и глиоксалем (молекула, стабильно связывающаяся с неспаренными основаниями).

В указанной работе в процессе эксперимента постоянная сила была приложена к концам ДНК бактериофага λ (приблизительно 48000 нуклеотидных пар). Полученные данные хорошо согласуются с соответствующими структурами, предсказанными в теоретических работах А. Лебрен и Р. Лавери [2]. Результаты этих авторов доказывают, что ДНК, сильно растянутая за концы 3′, имеет другую жесткость по сравнению с растяжением за концы5′; из этого следует, что данным состояниям соответствуют разные структуры. В работе были предложены две причины этого явления:

1. Структура днДНК, сильно растянутой за концы 5′, имеет больший интервал звеньев основной цепи, чем структура, растянутая за концы 3′;

2. В такой структуре днДНК, растянутой за концы 5′, имеется значительный поворот оснований, что не наблюдается при растяжении днДНК за концы 3′.

Однако особенности структуры днДНК, которые ответственны за вышеупомянутые эффекты, до сих пор не были выяснены в силу большого количества независимых степеней свободы рассматриваемой молекулы и набора различных физических факторов, влияющих на ее подвижность под действием внешних сил. Молекулярное моделирование и молекулярная динамика – подходы, которые могу прояснить детали молекулярных механизмов растяжения днДНК под действием внешних сил.

Проведенный ранее конформационный анализ коротких фрагментов ДНК показал, что независимость вращений вокруг пяти связей основной цепи соседних остатков ДНК обеспечивается периодическим расположением пентозных колец. Поэтому конформации каждой повторяющейся единицы от одного атома $C'_4$ до другого независимы и необходимо рассматривать лишь стерические возможности совместного изменения пяти стандартных торсионных углов основной цепи ДНК в пределах одного нуклеотидного остатка [11].

Согласно анализу разрешенных состояний торсионных углов, рассмотренных в указанной работе, взаимодействия второго порядка, например определяющие расстояние между $C'_3$ и $C'_5$, вносят дополнительные ограничения в диапазоны значений торсионных углов, а значения угла ω" еще и зависят (в некоторой степени) от значений угла ω'. Таким образом, большая часть пространственных конфигураций оказывается стерически запрещенной.

В данной работе нами показано, что при растяжении за концы 5′ и 3′ в днДНК имеется координированное вращение стандартных углов основной цепи соседних остатков. При этом направления изменений углов зависят от точки приложения внешних сил, а разрывы уотсон-криковского спаривания оснований возникают, когда те или иные углы вращения в основной цепи ДНК оказываются в стерически запрещенных областях.

Итак, в данной работе был создан программный инструмент, позволяющий проводить молекулярное моделирование процесса растяжения днДНК, исследуемой в таких экспериментальных установках, как лазерная ловушка и магнитный пинцет. Созданный нами программный инструмент позволяет создавать полноатомные модели пространственных структур днДНК произвольной длины и последовательности *in silico*, произвольно фиксировать любые элементы структуры ДНК и минимизировать конформационную энергию в стандартном силовом поле ECEPP/3, прилагать физические силы произвольной величины к различным участкам структуры днДНК (3′-, 5′-концы и любые их комбинации) и растягивать днДНК в режиме постоянной силы.

Полученные результаты показали, что эластичность днДНК зависит от точки приложения растягивающих сил. Показано что молекулярные механизмы растяжения *B*-формы днДНК, растягиваемой за 3′-концы, значительно отличаются от механизмов растяжения за 5′-концы.

При этом искажения геометрии классической *B*-формы ДНК наиболее выражены в концевых участках днДНК и постепенно убывают к центру молекулы.

Работа выполнена с использованием научного оборудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ФГБОУ ВПО СПбГПУ». Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации (Государственные контракты № 02.740.11.5223 и №11.519.11.2002, грант 2.2.1.14663) и грантом РАН по программе «Физика элементарных частиц», подпрограмма «Нейтронная физика», направление «Исследование структуры, динамики и необычных свойств материи с помощью рассеяния нейтронов».

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ritort, F.** Single-molecule experiments in biological physics: methods and applications [Text] / F. Ritort // J. Phys. Condens. Matter. – 2006. – Vol. 18. – № 32. – P. R531–583.

2. **Lebrun, A.** Modelling extreme stretching of DNA [Text] / A. Lebrun, R. Lavery // Nucleic Acids Res. – 1996. – Vol. 24. – № 12. – P. 2260–2267.

3. **Danilowicz, C.** The structure of DNA overstretched from the 5′5′ ends differs from the structure of DNA overstretched from the 3′3′ ends [Text] / C. Danilowicz, C. Limouse, K. Hatch, [et al.] // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2009. – Vol. 106. – № 32. – P. 13196–13201.

4. **Зенгер, В.** Принципы структурной организации нуклеиновых кислот [Текст] / В. Зенгер; пер. с англ. Л.В. Малинина. – М.: Мир, 1987. – 584 с.

5. **Abagyan, R.** Biased probability Monte Carlo conformational searches and electrostatic calculations for peptides and proteins [Text] / R. Abagyan, M. Totrov // J. Mol. Biol. – 1994. – Vol. 235. – № 3. – P. 983–1002.

6. **Bansal, M.** HELANAL: A program to characterize helix geometry in proteins [Text] / M. Bansal, S. Kumar, R. Velavan // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2000. – Vol. 17. – № 5. – P. 811–819.

7. **Halgren, T.A.** MMFF VI. MMFF94s option for energy minimization studies [Text] / T.A. Halgren // Journal of Chemical Theory and Computation. – 1999. – № 20. – P. 720–729.

8. **Mazur, A.K.** Modelling DNA dynamics under steady deforming forces and torques [Text] / A.K. Mazur // Journal of Chemical Theory and Computational. – 2009. – Vol. 5. – P. 2149–2157.

9. **Smith, S.B.** Direct mechanical measurements of the elasticity of single DNA molecules by using magnetic beads [Text] / S.B. Smith, L. Finzi, C. Bustamante // Science. – 1992. – Vol. 258. – № 5085. – P. 1122–1126.

10. **Fu, H.** Transition dynamics and selection of the distinct *S*-DNA and strand unpeeling modes of double helix overstretching [Text] / H. Fu, H. Chen, X. Zhang, Y. Qu, [et al.] // Nucleic Acids Res. –2011. –Vol. 39.– № 8. – P. 3473–3481.

11. **Кантор, Ч.** Биофизическая химия [Текст]: в 3 т. Т. 1. /Ч. Кантор, П. Шиммел; пер. с англ. А.В. Вологодского. – М.: Мир, 1972. – 323 с.

УДК 617.7

*С.В. Шухаев, Е.Д. Федорович, Ю.Е. Карякин, В.В. Кораблев*

# ВЯЗКОУПРУГИЕ БИОПОЛИМЕРЫ: ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ В ОФТАЛЬМОЛОГИИ

В СПбГПУ совместно с Санкт-Петербургским филиалом ФГУ МНТК «Микрохирургия глаза» имени академика С.Н. Федорова проводится работа над проектом «Моделирование гидродинамики и теплообмена в полостях глаза» с целью создания математических моделей течения крови и водянистой влаги в сосудах, полостях и микрокапиллярных структурах глаза, а также разработки рекомендаций для практикующих врачей по выбору стратегии хирургических вмешательств, направленных на компенсацию нарушений внутриглазной гидродинамики, приводящих к патологиям (глаукома, катаракта).

Для решения поставленной задачи необходимо знать свойства материалов (в частности вязкоупругих полимеров), используемых в современной офтальмологии.

Вязкоупругие биополимеры относят к группе гелей – веществ, обладающих типичными свойствами неньютоновских жидкостей – высокой и переменной вязкостью, а также эластичностью. Благодаря этим свойствам вязкоупругие полимеры нашли широкое применение в современной хирургии распространенного заболевания глаза – катаракты. Введением таких полимеров в переднюю камеру глаза во время операции замены хрусталика на искусственный обеспечивается минимизация возможных повреждений эндотелия роговицы и сохранение форм и объемов внутриглазных полостей в их естественном состоянии.

В современной офтальмологии реализуются разнообразные и многочисленные методы диагностики и лечения, направленные на снижение внутриглазного давления при глаукоме и на улучшение питания тканей хрусталика при катаракте. Однако разработка эффективных стратегий хирургических вмешательств затруднена недостатком сведений о локальных физических характеристиках внутриглазных систем (давления, скорости, температуры сред). В этих условиях математическое моделирование процессов течения и фильтрации сред позволило бы получить сведения, необходимые офтальмологам для разработок необходимого инструментария, выбора зоны хирургического вмешательства и ее размеров, а также для анализа результатов лечения.

Цель настоящей статьи – описание физико-механических свойств вязкоупругих биополимеров, применяемых при лечении катаракты, рассмотрение особенностей течения биополимеров в каналах медицинского инструментария, а также описание технологий хирургических вмешательств при лечении катаракты. Результатом такого исследования может быть совершенствование средств и технологий офтальмологии, а также создание исходных данных для математического и физического моделирования течений вязкоупругих биополимеров.

### Классификация и характеристики вязкоупругих полимеров

Различные вязкоупругие биополимеры, применяемые в офтальмохирургии, объединяют общим названием – вискоэластики (ВЭ). Это вещества, вязкость которых выше $10^5$ сантистоксов. По составу это высокомолекулярные соединения – полисахариды, растворенные в воде. Свойства ВЭ определяются длиной цепочки молекул, входящих в структуру биополимера, его молекулярной массой и концентрацией раствора. Известны три соединения, из которых состоят используемые в медицинской практике ВЭ: гиалуронат натрия, хондроитин сульфат натрия и гидроксипропилметилцеллюлоза (ГПМЦ). Из них первые два являются естественными соединениями, существующими в тканях организма человека. Третье – ГПМЦ не содержится в тканях человека и животных, но присутствует в значительных концентрациях в древесине и хлопке. Все коммерчески доступные в настоящее время ВЭ синтезируются на основе этих трех соединений. Различие между ними состоит лишь в комбинировании концентраций составляющих. Ниже перечисляются физико-механические характеристики ВЭ, важные при рассмотрении их использования в офтальмохирургии.

*Эластичность* – способность некоторого объема геля возвращаться к своей исходной форме после внешнего силового воздействия на него.

*Вязкость* – способность частиц геля сопротивляться перемещению, определяемая внутренним трением между частицами.

*Псевдопластичность* – способность геля под внешним силовым воздействием переходить из состояния с большей вязкостью в состояние с меньшей (в более жидкое состояние), например, при приведении жидкости в движение. Количественно псевдопластичность может быть оценена как разность между вязкостью жидкости в состоянии покоя и вязкостью движущейся среды.

*Поверхностное натяжение* – стремление вещества, находящегося в какой-либо фазе агрегатного состояния (в данном случае – в жидкой фазе), уменьшить избыток своей потенциальной энергии на границе раздела с другой фазой. От величины поверхностного натяжения зависит угол контакта капли жидкости на твердой поверхности (краевой угол смачивания) в условиях равновесия жидкой, твердой и газовой (обычно воздушной) фаз.

В целях удобства применения в офтальмологии разработана специальная классификация вискоэластиков; они разделены на две группы: когезивных и дисперсивных.

Когезивные ВЭ характеризуются высокой вязкостью, длинной молекулярной цепочкой, большой молекулярной массой, высоким уровнем псевдопластичности и высоким поверхностным натяжением; следовательно, высоким уровнем внутреннего сцепления частиц между собой (когезией).

Дисперсивные ВЭ – характеризуются сравнительно низкой вязкостью и высокой адгезией к окружающим тканям (сцеплением с ними), малой молекулярной массой, низкой псевдопластичностью и низким поверхностным натяжением.

### Технология хирургического вмешательства при лечении катаракты

Оба класса ВЭ нашли широкое применение в современной хирургии катаракты. Это заболевание выражается в помутнении вещества хрусталика глаза (рис. 1). Единственный радикальный метод лечения катаракты – это операция по удалению (экстракции) замутнен-

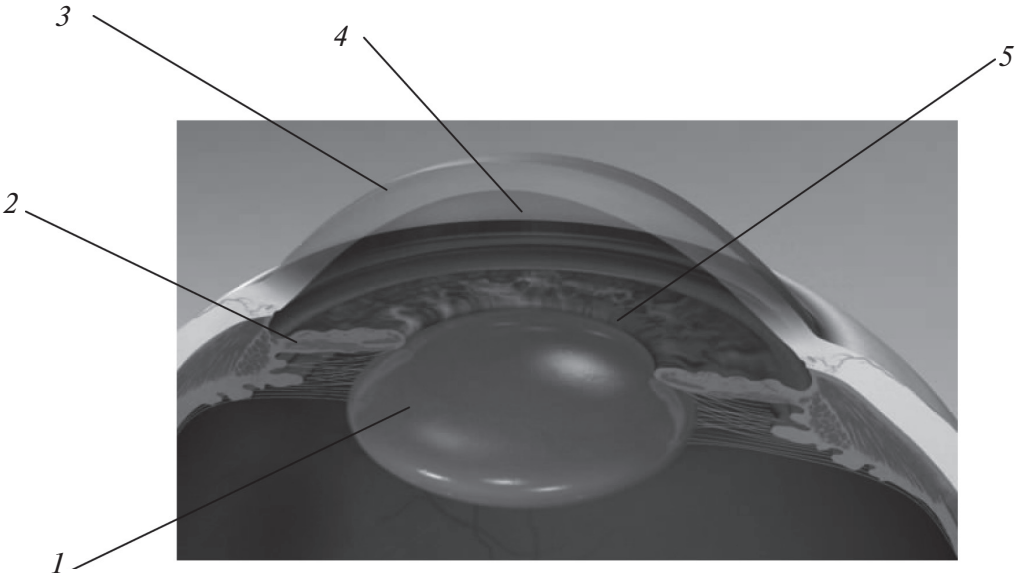



Рис. 1. Передняя часть глаза:
*1* – хрусталик, *2* – радужка, *3* – роговица, *4* – передняя камера, *5* – зрачок

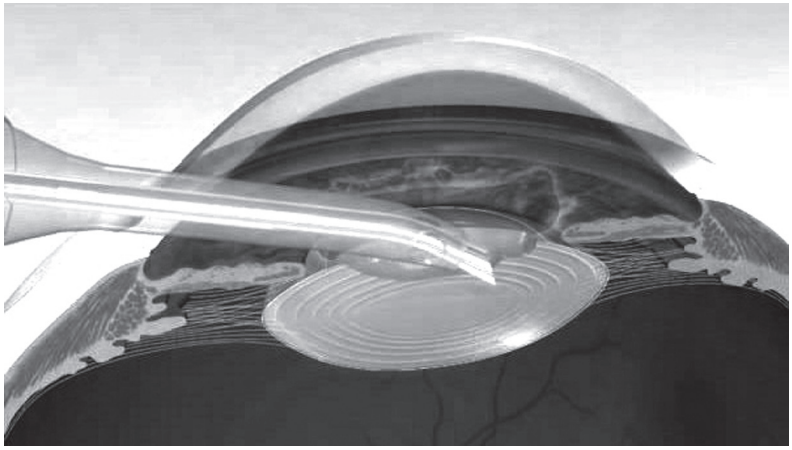


Рис. 2. Дробление вещества хрусталика с помощью ультразвукового наконечника

ного хрусталика и его замена на искусственный (ИОЛ – интраокулярная линза). Операцией выбора в настоящее время является так называемая факоэмульсификация катаракты. Ее суть состоит в механическом дроблении вещества хрусталика под ультразвуковым воздействием с последующим удалением (аспирацией) его по частям (рис. 2). Удаление производят через небольшой (длиной 1,8 – 2,7 мм) разрез в роговице. При этом последующего наложения швов не требуется.

Процесс дробления и аспирации вещества происходит в так называемой передней камере глаза *4* (см. рис. 1) – в пространстве, ограниченном с одной стороны внутренней поверхностью роговицы *3* (эндотелием роговицы), а с другой – радужкой *2* и хрусталиком *1*.

**Применение вискоэластиков при хирургии катаракты**

Все вышеупомянутые структуры глаза подвергаются во время операции механическому воздействию, вызывающему их травматизацию, а ее необходимо свести к минимуму. В этих целях и используются вискоэластики. Их основные функции во время факоэмульсификации состоят в следующем:

поддержание (сохранение) необходимого объема передней камеры;

обволакивание гелем и соответствующая защита окружающих тканей;

обеспечение комфортного для хирурга проведения всех манипуляций.

Вискоэластик вводится в переднюю камеру глаза в начале операции и удаляется путем вакуумирования в ее конце.

В ходе операции происходит постепенное вымывание ВЭ из глаза водянистой влагой, заполняющей глаз, и ирригационным физиологическим раствором. Поэтому хирург должен периодически вводить ВЭ. Если в передней камере даже на очень небольшое время не останется защиты в виде ВЭ, то под действием вышеупомянутого ирригационного потока, движений хирургического инструмента, перемещения частей удаляемого хрусталика, а также ультразвука может произойти значительное повреждение окружающих структур и прежде всего эндотелия роговицы.

Хирург должен обладать информацией о скорости (расходе), с которой ВЭ данного вида вымывается из передней камеры глаза. В этом случае он может определить момент, когда необходимо заполнить камеру свежей порцией «защитника» внутриглазных структур – вискоэластика. Это весьма важно для предотвращения серьезного послеоперационного осложнения – эндотелиальной дистрофии роговицы, механизм возникновения которой заключается в следующем.

Эндотелий роговицы представляет собой клеточный монослой, выстилающий ее внутреннюю поверхность. Он не обладает свойством регенерации (восстановления при повреждениях) [1]. Более того, с возрастом у человека происходит постепенное снижение количества эндотелиальных клеток. У здоровых взрослых людей плотность эндотелиальных клеток (ПЭК) колеблется от 2500 до 3000 клеток на один квадратный миллиметр поверхности роговицы. Это количество составляет достаточный запас до минимально необходимого (400 – 700 кл./мм$^2$) для обеспечения прозрачности роговицы. Эндотелий выполняет очень важную функцию: он препятствует проникновению (фильтрации) водянистой влаги из передней камеры во внутренние слои роговицы и возникновению ее отека.

Если величина ПЭК ниже критического значения, то развивается отечная стадия эндотелиальной дистрофии роговицы – она мутнеет. В этой ситуации единственный метод лечения – это операция по замене замутненной роговицы на прозрачную донорскую (кератопластика).

Кроме послеоперационных осложнений, офтальмологи сталкиваются также с проблемой сохранения нормальных функций эндотелия при лечении той группы пациентов, у которых по различным причинам ПЭК оказывается значительно ниже возрастной нормы. В этих случаях при выполнении факоэмульсификации от хирурга требуется еще более щадящая по отношению к эндотелию техника, чем при операциях, когда ПЭК находится в пределах возрастной нормы.

В среднем потеря эндотелиальных клеток после факоэмульсификации составляет 5 – 10 % [2, 3]. Однако при так называемых осложненных катарактах с плотным ядром, наличием подвывиха хрусталика (нарушением целостности его связочного аппарата), узким зрачком, потеря клеток может быть весьма значительной (до 80 %). Однако современное медицинское

оборудование, качество расходных материалов и инструментария, а также мастерство хирургов позволяют выполнить описанные выше операции в любых, даже самых сложных случаях. Далеко не последнюю роль здесь играет правильное использование вискоэластиков. Для офтальмохирурга крайне важен подбор оптимального по своим свойствам ВЭ для защиты эндотелия в ходе всей операции. Правильно подобранный ВЭ сохраняется в передней камере в течение наиболее длительного промежутка времени, устойчиво покрывает эндотелий и надежно защищает его от всех повреждающих факторов.

**Проблемы изучения свойств вискоэластиков**

Возникает вопрос: каким образом современная физика и механика полимеров могут помочь медицине при лечении катаракт, чтобы в своих действиях хирург опирался не только на свой опыт и интуицию, но и на знание количественных характеристик и свойств ВЭ; знание, которое бы позволяло осуществлять их оптимальный выбор и правильное использование.

Ниже мы попытаемся сформулировать проблемы, связанные с изучением свойств и течений ВЭ в каналах инструментария и во внутриглазных полостях, которые могут быть решены с помощью средств и методов математического моделирования и физического эксперимента.

Зарубежные и отечественные фирмы – поставщики ВЭ приводят в документации на их поставки значения некоторых физических свойств, таких как плотность, вязкость, коэффициент поверхностного натяжения. Обычно фактически в этих документах указываются только нижние и верхние значения этих характеристик, соответствующие широкому диапазону их изменения в зависимости от температуры, колебаний концентраций растворов, условий контакта с поверхностями каналов инструментария (зондов, игл и т. п.) и скоростями перемещения частиц ВЭ. Многие характеристики поставляемых ВЭ требуют детального уточнения. Такое знание необходимо как для врача, определяющего стратегию хирургического вмешательства, так и для исследователя, создающего математические модели, описывающие течения ВЭ. Точность характеристик ВЭ позволяет поставить и решить задачу о численном моделировании течений ВЭ в каналах медицинского инструментария и во внутриглазных полостях (передняя камера). Количественные характеристики свойств ВЭ входят в виде постоянных или переменных коэффициентов в уравнения сплошности и движения, а также в соотношения для сил инерции, трения и поверхностного натяжения; они позволяют замкнуть систему этих уравнений (замыкающие соотношения).

Основной путь определения физических свойств ВЭ – экспериментальный. При этом вязкость и плотность должны определяться в температурном диапазоне, соответствующем условиям применения ВЭ (в емкостях хранения, в каналах зондов, в полостях «живого» глаза). Упругие свойства (эластичность) и краевой угол смачивания должны исследоваться оптическими методами также в необходимом температурном диапазоне. Поскольку величина вязкости в состоянии покоя и при движении ВЭ различна (зависит от скорости сдвига), ее измерения должны производиться при разных скоростях течения.

На разных стадиях операции по удалению катаракты могут использоваться ВЭ с различными свойствами. Так, в начале и в конце вмешательства целесообразно использовать ВЭ когезивного класса (см. выше), когда необходимо в максимальной степени обеспечить сохранение формы внутриглазных полостей за счет высокой эластичности и внутреннего сцепления (когезии) молекул ВЭ. А в момент дробления и аспирации вещества хрусталика, когда главным требованием к качеству операции становится минимальная степень повреждения эндотелиальных клеток роговицы, необходимо использовать ВЭ дисперсивного класса, обладающих хорошими защитными свойствами. К тому же приходится учитывать, что стоимости различных ВЭ отличаются между собой в десятки и сотни раз. Некоторые из них приходится закупать по импорту, а другие, например синтезируемые отечественной промышленностью из древесной целлюлозы, весьма дешевы. Поскольку ВЭ служат во время операции расходным материалом (вводятся и выводятся хирургом, вымываются ирригационными потоками), необходимо минимизировать расход более дорогих препаратов.

**Вопросы моделирования течений вискоэластиков**

Течение ВЭ в каналах медицинского инструментария является напорным, т. е. осуществляется под действием гидростатического напора. При этом ирригационный раствор поступает из сосуда, расположенного над операционным полем, а вискоэластик вводится в глаз под напором из одноразового шприца.

На рис. 3 показана струя геля, вытекающего из наконечника зонда, вводимого в глаз. Течение в передней камере глаза, вскрытой при введении зонда и находящейся при атмосферном давлении, – безнапорное.

При отсосе (вакуумировании) ВЭ из передней камеры течение ВЭ происходит в обратном направлении. Исходя из известных размеров (длин, поперечных сечений, объемов) каналов и полостей с течением ВЭ, их физических свойств в данных условиях, можно расчетным путем определить массовую скорость (расход) ВЭ и, тем самым найти время заполнения или опорожнения передней камеры глаза – важную для хирурга характеристику операционного процесса.

Методами математического моделирования процессов движения неньютоновских жидкостей, основанными на решении системы дифференциальных уравнений неразрывности и движения, могут быть в принципе рассчитаны нестационарные поля давлений и скоростей ВЭ как в каналах медицинского инструментария, так и во внутриглазных полостях (передняя камера). Задача эта исключительно сложная. Помимо сложной геометрии систем, для которых должен производиться расчет, нужно учитывать особенности физико-механических характеристик омываемых поверхностей и стенок каналов (эластичность; пульсации давления, связанные с внутренними биоритмами кровеносной и других систем организма; поверхностные свойства структур, выстилающих изнутри эти каналы и полости; возможности биохимических реакций, приводящих к изменению структуры и свойств ВЭ и т. п.). Далеко не все эти характеристики известны с достаточной точностью. Поэтому адекватность модели реальности и результаты моделирования должны быть проверены (верифицированы) путем сравнения расчетных, опытных (включая эксперименты на животных) и наблюдаемых в клинике интегральных характеристик течения: расходов ВЭ, продолжительности заполнения (опорожнения) полостей.

Исследование движений вязкоупругих сред, как правило, основывается на одной из двух реологических моделей [4–6].

Первая (модель Фойхта), основана на наложении упругого и вязкого напряжений

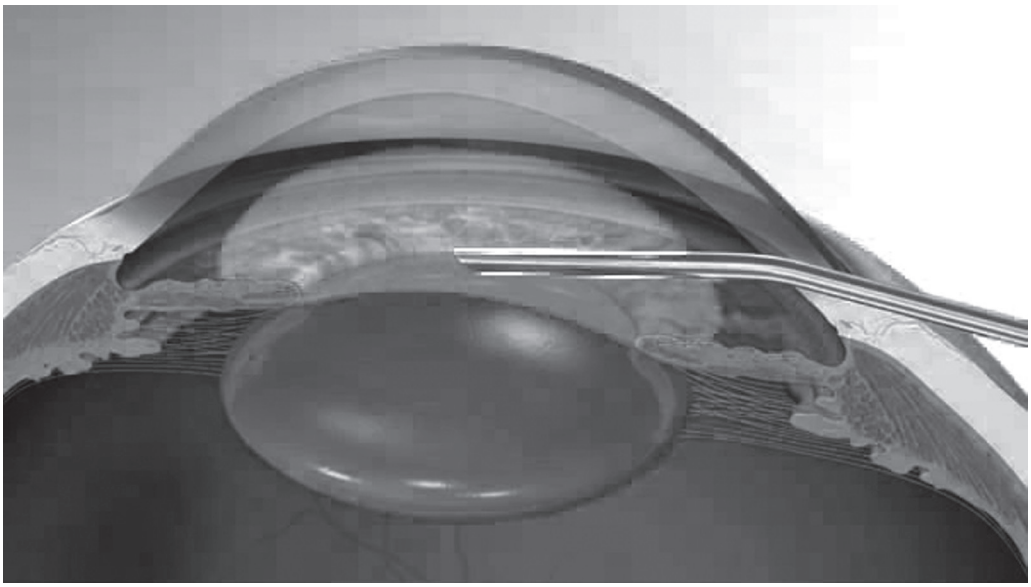


Рис. 3. Введение геля в глаз из наконечника зонда

$$\tau = G\varepsilon + \mu\dot{\varepsilon}\,, \qquad (1)$$

где $G$ – модуль сдвига, $\varepsilon$ – деформация сдвига, $\dot{\varepsilon} = du/dy$ – скорость сдвига (точка над буквой – производная по времени), $\mu$ – динамический коэффициент вязкости.

При записи выражения (1) предполагалось, что имеет место плоское сдвиговое течение.

Другая модель (модель Максвелла), основана на наложении скоростей упругой и вязкой деформаций:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{\mu}\,. \qquad (2)$$

Каждая из этих моделей описывает среду, вообще говоря, с различными физико-механическими свойствами.

Если положить в модели (1) $\tau = \tau_0 = \text{const}$, то интегрируя это уравнение по времени, можно получить выражение

$$\varepsilon = \frac{\tau_0}{G}\left[1 - \exp(-\frac{Gt}{\mu}\right], \qquad (3)$$

означающее запаздывание при росте времени $t$ установления упругой деформации [4]. Вычисляя по формуле (3) скорость сдвига $\dot{\varepsilon}$, получим, что при $t \to \infty$ эта скорость при действии постоянной нагрузки $\tau_0$ быстро стремится к нулю, т. е. среда не обладает свойствами беспредельной текучести.

С другой стороны, из уравнения (2) следует, что среда Максвелла при действии постоянной нагрузки $(\tau = \tau_0, \dot{\tau} = 0)$ будет течь с постоянной скоростью сдвига $\dot{\varepsilon} = \tau_0/\mu$.

В дальнейшем, выбрав на основании экспериментальных исследований физико-механических свойств ту или иную модель вязкоупругой среды и используя так называемое уравнение динамики жидкости в напряжениях [4], можно получить уравнения движения вязкоупругих полимеров в каналах медицинского инструментария. Для замыкания постановки задачи следует также использовать уравнение неразрывности несжимаемой жидкости и соответствующие граничные и начальные условия.

Необходимое для хирургической практики и численного моделирования изучение в лабораторных условиях температурных и иных зависимостей вязкости и плотности ВЭ, которое может проводиться с использованием известной аппаратуры (вискозиметров, пиксометров), является сравнительно более простой задачей.

Таким образом, проблемы изучения физико-механических свойств вискоэластиков применительно к их использованию при проведении хирургических операций, связанных с введением и выводом ВЭ из передней камеры глаза являются комплексными. Они возникают как следствие накопления опыта офтальмохирургии при лечении катаракты путем замены хрусталика на искусственный, и в том числе при наличии осложняющих обстоятельств, например, при дефиците клеток внутреннего слоя роговицы (эндотелия).

Путь детального количественного изучения гидродинамики трактов течения ВЭ (как вне глаза, т. е. в каналах медицинской аппаратуры, так и во внутриглазных полостях) перспективен, поскольку он может дополнить и усовершенствовать технологию хирургического вмешательства, основанную в настоящее время на эмпирическом подборе инструментария, практическом опыте и интуиции хирурга.

Сформулированными в статье путями изучения физико-механических характеристик течения и свойств ВЭ может быть разработана методика математического моделирования течений ВЭ как типично неньютоновских жидкостей, в сочетании с лабораторными исследованиями их свойств (вязкости, плотности, упругости, смачивающих свойств).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Schultz, G.** Growth factors and corneal endothelial cells: III. Stimulation of adult human corneal endothelial cell mitosis *in vitro* by defined mitogenic agents [Текст] / G. Schultz, L. Cipolla, A. Whitehouse [et al.] // Cornea. – 1992. – Vol. 11. – № 1. – P. 20–27.

2. **Walkow, T.** Endothelial cell loss after phacoemulsification: relation to preoperative and intraoperative parameters [Текст] / T. Walkow, N. Anders, S. Klebe // Cataract Refract Surg. – 2000. – Vol. 26. – № 5. – P. 727–732.

3. **Xie, L.X.** Cataract extraction in eyes with Fuchs' endothelial dystrophy in China [Текст] / L.X. Xie, Y.S. Huang, A.M. Chiu [et al.] // Chin. Med. J. – 2005. – Vol. 118. – № 13. – P. 1127–1130.

4. **Лойцянский, Л.Г.** Механика жидкости и газа [Текст] / Л.Г. Лойцянский. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1987. – 840 с.

5. **Ферри, Дж.** Вязкоупругие свойства полимеров [Текст] / Дж. Ферри. – М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1963. – 535 с.

6. **Чан Дей Хан.** Реология в процессах переработки полимеров [Текст] / Чан Дей Хан. – М.: Изд-во «Химия», 1979. – 368 с.

УДК 539.193/194; 544.163.2

*Т.П. Степанова, М.М.Глаздовская, В.М.Капралова*

# ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ МЕЗОГЕНСОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИМЕРА

Исследование ориентационной диэлектрической поляризации полярных низкомолекулярных веществ в растворах во внешних ориентирующих электрических полях показало, что использование нелинейного диэлектрического эффекта позволяет получать уникальную информацию о взаимодействиях в растворах таких веществ, в том числе в растворах мезогенсодержащих соединений, проявляющих в концентрированных растворах и в массе жидкокристаллические (ЖК) свойства [1–5].

Ранее метод наложения внешнего ориентирующего постоянного электрического поля на растворы ЖК полимеров с мезогенными фрагментами либо в боковой, либо в основной цепях был использован для исследования релаксации дипольной поляризации [6–8]. В работе [8] было показано, что применение метода нелинейного диэлектрического эффекта дает дополнительную информацию о молекулярной подвижности в ЖК полимерах. Например, в отсутствие поля метод выявляет диэлектрически неактивный процесс релаксации дипольной поляризации, что обусловлено увеличением статистического веса более полярных конформеров мезогенных фрагментов макромолекулы в присутствии поля. Также одно из достоинств указанного метода – его особенная чувствительность к изменению статистического веса полярных конформеров молекул с внутренним вращением парциальных дипольных моментов или к наличию ассоциации разной природы.

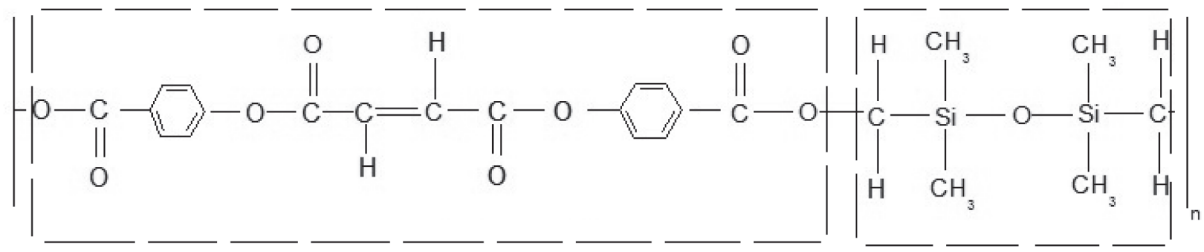
Цель настоящей работы – установить характер влияния внешнего ориентирующего электрического поля на дипольный момент и конформацию ЖК полимера линейного строения в разбавленном растворе.

Объектами изучения статической диэлектрической поляризации были выбраны линейный ЖК полиэфир полипентаметилен-2,4-(2,2,4,4-тетраметил)-силил-3-оксифумароил-*бис*-4-оксибензонат (ПФУБ-Si) (рис. 1,*а*) и его низкомолекулярный аналог – дидецилфумароил-*бис*-4-оксибензоат (ФУБ-10) (рис. 1,*б*).

Дипольные моменты определяли на основе измерения концентрационных зависимостей диэлектрической проницаемости и удельных объемов растворов в толуоле с экстраполяцией к бесконечному разбавлению в интервале температур 20–80 °С. Диэлектрическую проницаемость растворов измеряли в стеклянной ячейке-бюксе с жесткой системой платиновых пластин-электродов [10] на звуковом мосте «Tesla BM-484».

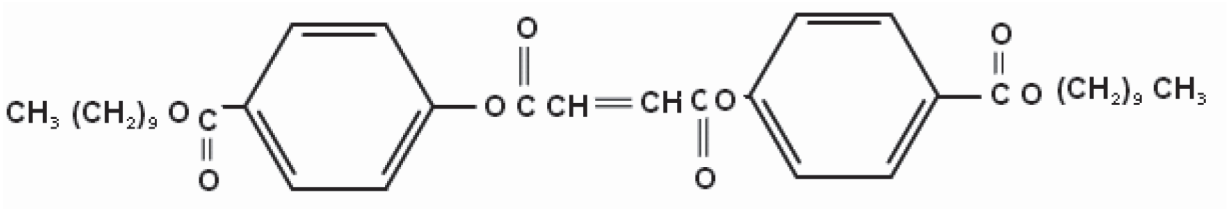
При измерении диэлектрической проницаемости во внешнем постоянном электрическом поле растворы исследуемого вещества находились под действием поля в течение всего времени измерения температурной зависимости электрической емкости ячейки с жидкостью. Ячейку соединяли последовательно с блокирующим конденсатором в цепь измеряющей аппаратуры стандартным способом. Напряжен-

*а*)



A B

*б*)



*в*)

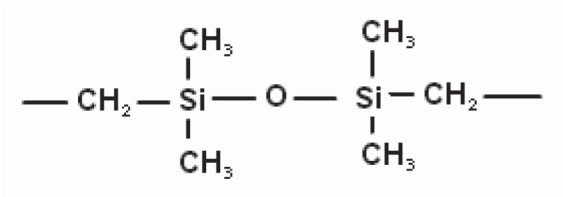


Рис. 1. Структурные формулы исследованных веществ: *а* – полимер ПФУБ-Si (А – мезогенный фрагмент, В – гибкая развязка); *б* – низкомолекулярный аналог ФУБ-10; *в* – гексаметилдисилоксан (аналог развязки)

ность внешнего ориентирущего электрического поля в конденсаторе $E = 10^4$ В/см задавали источником постоянного напряжения ВВС-1; эта величина на несколько порядков меньше пробивного значения (порядка $10^{8-9}$ В/см) для использованных растворителей и растворов.

Удельные объемы растворов определяли в капиллярном пикнометре-дилатометре.

Дипольные моменты рассчитывали по формуле Дебая с экстраполяцией к бесконечному разбавлению по методу Кумлера [11]:

$$\mu = 0{,}0128\left\{\left(P_{2\infty} - R_D\right)T\right\}^{1/2}; \qquad (1)$$

$$P_{2\infty} = \frac{3\alpha}{(\varepsilon_0 + 2)^2} v_0 M + (v_0 + \beta)\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 2} M, \qquad (2)$$

где $\mu$ – дипольный момент, $P_{2\infty}$, $\varepsilon_0$, $v_0$ – мольная ориентационная поляризация, диэлектрическая проницаемость и удельный объем при бесконечном разбавлении; параметры

$$\alpha = \left(\frac{\Delta\varepsilon}{\Delta w_2}\right)_{w_2=0}, \ \beta = \left(\frac{\Delta v}{\Delta w_2}\right)_{w_2=0}$$

определяются из зависимостей диэлектрической проницаемости и удельного объема от весовой концентрации $w_2$ вещества в растворе; $M$ – молекулярная масса; $R_D$ – мольная рефракция, которую рассчитывали как сумму рефракций связей [12].

При исследовании низкомолекулярных соединений расчет по формулам (1), (2) дает непосредственно величину молекулярного дипольного момента $\mu_0$ данного соединения в неполярном растворителе. Для полимеров величина дипольного момента $\mu_{эф}$, как известно

[13], определяется также условиями корреляции движения полярных групп в полимерной цепи, включающими заторможенность внутреннего вращения мономерных звеньев. Вектор дипольного момента полимерной молекулы следует рассматривать как векторную сумму дипольных моментов составляющих макромолекулу сегментов (мономерного звена, мезогенного фрагмента, спейсера) $\boldsymbol{\mu}_i$:

$$\mathbf{M} = \sum_i \boldsymbol{\mu}_i . \qquad (3)$$

При расчете среднего дипольного момента $\mu_{эф}$ макромолекулы на мономерное звено внутримолекулярные взаимодействия учитываются с помощью параметра корреляции $g$:

$$\mu_{эф}^2 = \left\langle M^2 \right\rangle / n = \mu_0^2 g, \qquad (4)$$

где $n$ – средняя степень полимеризации, $g$ – параметр корреляции Кирквуда.

Таким образом, если соотнести величины дипольных моментов полимеров и их мономеров или низкомолекулярных структурных аналогов через корреляционный параметр

$$g = \frac{\mu_{эф}^2}{\mu_0^2}, \qquad (5)$$

то можно получить информацию о характере близкодействия в макромолекуле (ее конформации). Обычно $g < 1$, что свидетельствует о корреляции в ориентации соседних диполей, обусловленной заторможенностью внутреннего вращения в полимерной цепи. Корреляция в ориентации полярных групп определяется структурой мономерного звена (химическое строение, изомерия, полярность) и цепи (стереорегулярность, чередование звеньев в случае сополимеров и т. п.).

Нелинейный диэлектрический эффект состоит в нелинейной зависимости электрической поляризации системы (жидкости, раствора) от напряженности электрического поля $E$ и определяется из измерений диэлектрической проницаемости раствора под действием сильного электрического поля, приложенного к конденсатору с раствором:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_E - \varepsilon , \qquad (6)$$

где $\varepsilon_E$, $\varepsilon$ – величины диэлектрической проницаемости раствора с приложенным к конденсатору полем $E$ и в его отсутствие ($E = 0$), соответственно.

Изменение диэлектрической проницаемости пропорционально квадрату напряженности поля [14]:

$$\Delta\varepsilon = -\frac{4\pi N \mu^4}{45 k^3 T^3} \cdot \frac{(\varepsilon+2)^4}{81} E^2 , \qquad (7)$$

где $N$, $k$, $T$ – число Авогадро, постоянная Больцмана и абсолютная температура соответственно.

Это уменьшение значения ε происходит из-за того, что при высоких напряженностях поля вклад постоянных диполей в поляризацию возрастает в меньшей степени, чем линейно. При некотором значении напряженности поля наступает явление, называемое электрическим насыщением.

Для растворов в условиях бесконечного разбавления в работах [15–17] были получены выражения, позволяющие определять молекулярные дипольные моменты и факторы корреляции через экспериментальные значения макроскопических параметров растворов и растворителя, например

$$\alpha_E = \left[ \frac{\delta}{\delta x_2} \left( \frac{\Delta\varepsilon}{E^2} \right) \right]_{x_2=0} . \qquad (8)$$

Параметр $\alpha_E$ представляет собой наклон зависимости $\left( \frac{\Delta\varepsilon}{E^2} \right)_{x_2=0}$ от концентрации $x_2$ раствора при экстраполяции к нулевой концентрации ($x_2 \to 0$).

Температурные зависимости электрической емкости конденсатора с растворами ФУБ-10 в толуоле различной концентрации при наложении электрического поля и без поля совпадают для каждой из измеренных концентраций во всем изученном интервале температур 20 – 80 °С. Это означает, что приложенное поле не оказывает влияния на величину дипольного момента ФУБ-10 в пределах погрешности измерений электрической емкости. Величина дипольного момента μ изменяется от величины 3,05 Д при 20 °С до 3,3 Д при 80 °С [9]. Молекула ФУБ-10 (см. рис.1) содержит четыре сложноэфирные группы с дипольным моментом 1,8 Д. При условии свободного внутреннего вращения этих парциаль-

ных дипольных моментов в молекуле ФУБ-10 дипольный момент молекулы составляет $\mu_0 = (4m^2)^{1/2} = 3{,}6$ Д. По формуле $g = \mu^2/\mu_0^2$ можно оценить корреляцию в ориентациях диполей групп –COO– в молекуле ФУБ-10. Фактор корреляции $g$ увеличивается от 0,72 при 20 °С до 0,84 при 90 °С, причем коэффициент зависимости $g$ от температуры претерпевает изменение в области 50 °С. В работе [9] показано, что увеличение фактора корреляции с температурой обусловлено ростом статистического веса более полярных *гош*- и *цис*-конформеров молекул ФУБ-10.

На рис. 2 приведены температурные зависимости электрической емкости ячейки с растворами ПФУБ-Si в толуоле в отсутствие электрического поля и при его наложении. Видно, что эти зависимости различаются, причем во втором случае в интервале температур 40–50 °С наблюдается изменение температурного коэффициента. На рис. 3 представлены концентрационные зависимости емкости ячейки

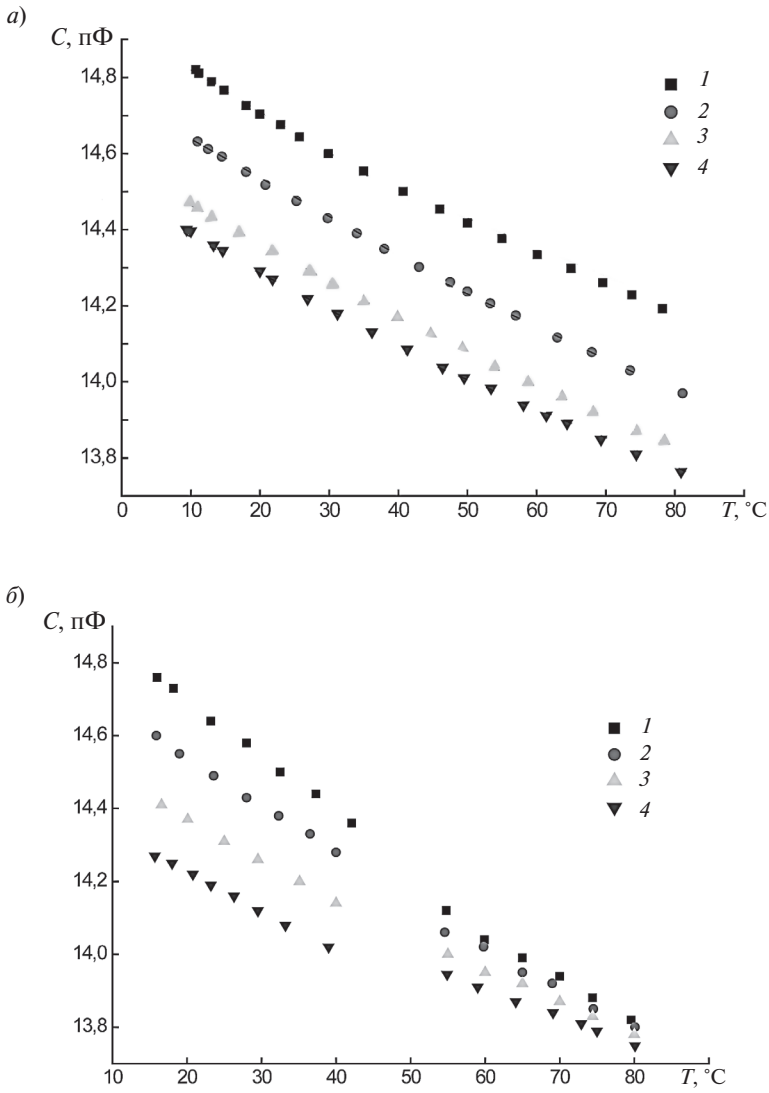



Рис. 2. Температурные зависимости электрической емкости конденсатора, заполненного растворами ПФУБ-Si в толуоле в отсутствие внешнего поля (*а*) и во внешнем электрическом поле $E = 10$ кВ/см (*б*) при концентрациях 1,1 (*1*); 1,8 (*2*); 3,7 (*3*); 5,8 (*4*) масс.%

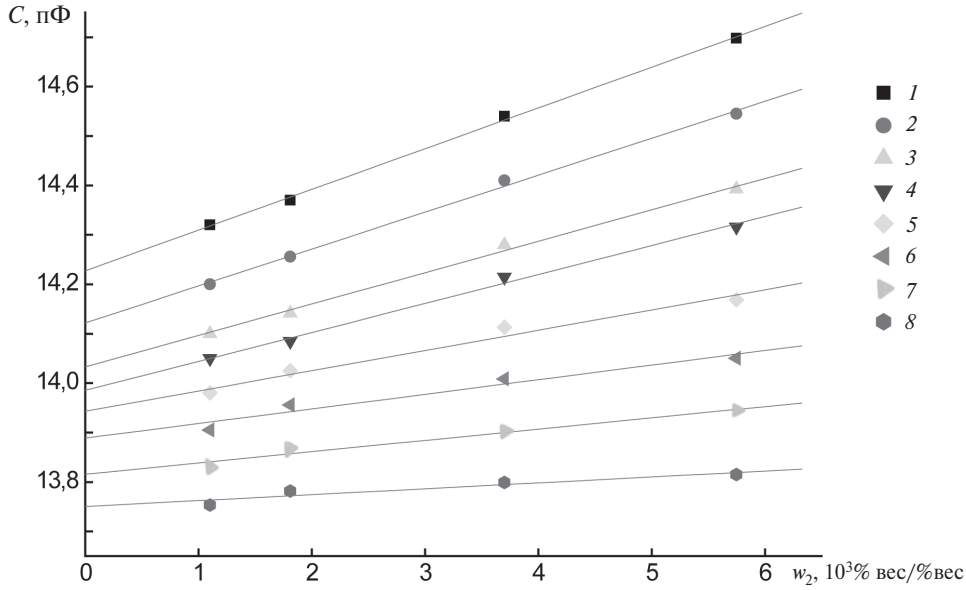



Рис. 3. Концентрационные зависимости электрической емкости конденсатора, заполненного растворами ПФУБ-Si в толуоле, во внешнем электрическом поле $E = 10$ кВ/см при температуре $T$ °С: 20 (*1*); 30 (*2*); 40 (*3*); 45 (*4*); 50 (*5*); 60 (*6*); 70 (*7*); 80 (*8*)

с раствором, которые имеют линейный характер в исследованной области концентраций во всем интервале температур 20 – 80 °С, как и для ПФУБ-Si при отсутствии внешнего поля [9]. Экстраполяция зависимостей $C$ от $w_2$ к бесконечному разбавлению позволяет определить инкременты диэлектрической проницаемости

$$\Delta\varepsilon = \frac{C_{12} - C_1}{C_0};\ C_{12} = \varepsilon_{12}C_0 + C_{пар};\ C_1 = \varepsilon_1 C + C_{пар},$$

где $C_0$ – геометрическая электрическая емкость ячейки, $C_{пар}$ – постоянная дополнительная емкость (индекс 1 относится к растворителю, 12 – к раствору).

Кроме того, экстраполяция дает возможность рассчитать по формулам (1), (2) значения ориентационной поляризации $(p_{AB})_{уд}$ полимера ПФУБ-Si. При этом следует рассматривать макромолекулу полиэфира как регулярный сополимер типа АВ, состоящий из двух полярных компонентов: анизодиаметричного мезогенного фрагмента А и гибкой силоксановой развязки В (см. рис.1, *а*). Величина дипольного момента развязки В не зависит от внутримолекулярного вращения и может быть оценена из экспериментальных данных для гексаметилдисилоксана (см. рис.1, *в*). Значение дипольного момента этого соединения составляет $\mu_B = 0{,}78$ Д [18]; из этой величины можно рассчитать удельную ориентационную поляризацию $(p_B)_{уд}$. Используя экспериментальные значения удельной ориентационной поляризации мономерного звена $(p_{AB})_{уд}$, мы получили значения удельной и молярной ориентационной поляризации мезогенного фрагмента $(p_A)_{уд}$ и $(P_A)_M$ (см. таблицу), а из них – дипольный момент $\mu_A^2$ мезогенного фрагмента А и его параметр корреляции $g_A$ в макромолекуле ПФУБ-Si.

На рис. 4,*а* представлены температурные зависимости дипольных моментов низкомолекулярного аналога ФУБ-10 (*3*), ПФУБ-Si (*2*) при $E = 0$ и ПФУБ-Si (*1*) при $E = 10$ кВ/см. Видно, что зависимости *2* и *3* симбатны, т. е. возрастание с температурой дипольного момента ПФУБ-Si определяется, как и для ФУБ-10, увеличением статистического веса полярных конформеров в мезогенном фрагменте с ростом температуры. Изменение температурного коэффициента дипольного момента полимера при ~50 °С отражает внутримакромолекулярный конформационный переход. Из рис. 4, *б* видно, что значения фактора корреляции $g_A$ мезогенного фрагмента в изолированной цепи

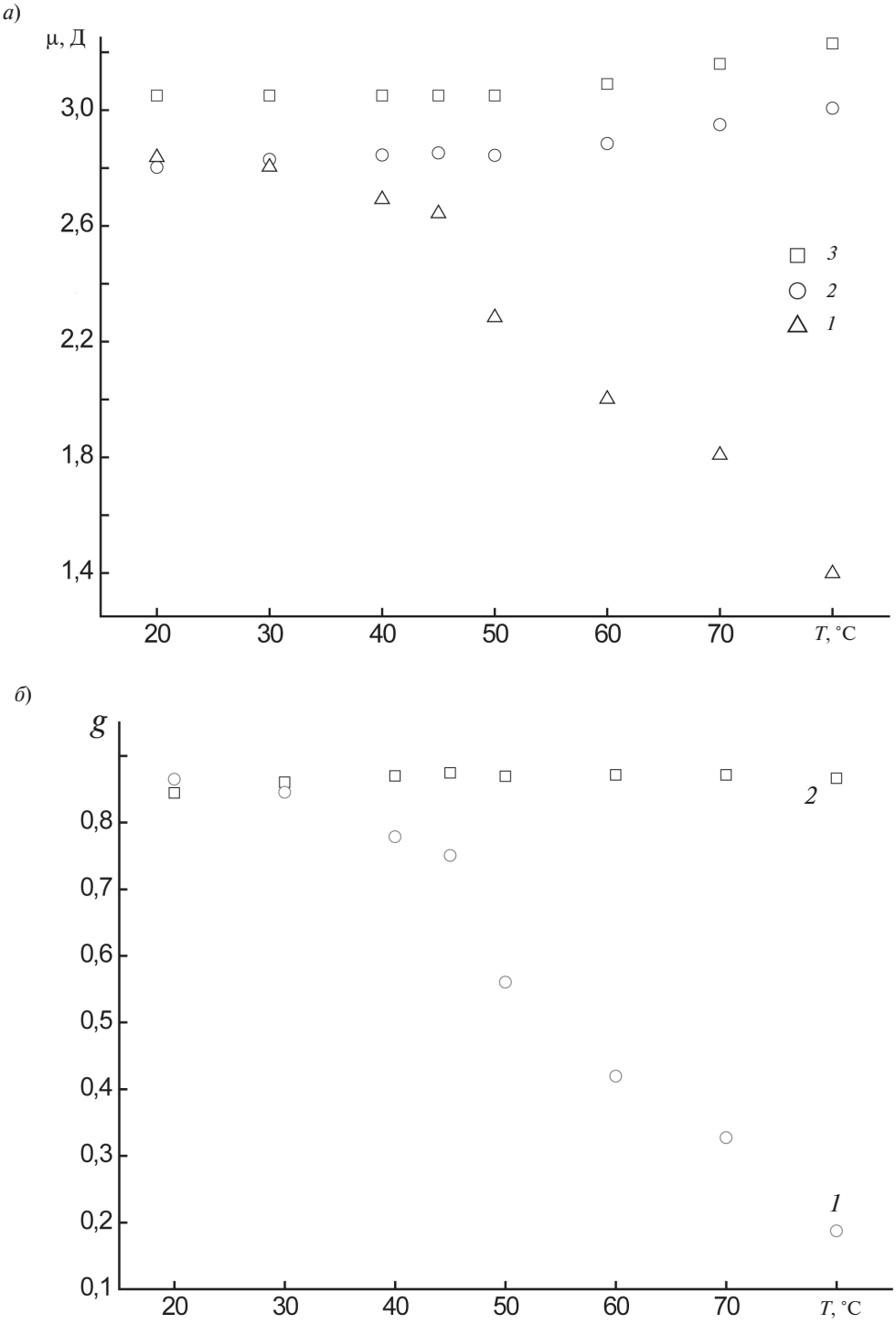



Рис. 4. Температурные зависимости дипольного момента (*а*) и коэффициента корреляции (*б*) мезогенного фрагмента А во внешнем электрическом поле $E = 10$ кВ/см (*1*) и в его отсутствие (*2*); *3* – зависимость для дипольного момента ФУБ-10 при $E = 0$

**Температурная зависимость диэлектрической поляризации мезогенного фрагмента А в полиэфире ПФУБ-Si (АВ) (раствор в толуоле, $E$ = 10 кВ/см)**

| $T$, °C | $\varepsilon_0$, экстр | $v_o$, см³/г | $\alpha$ | $-\beta$ | $(p_{AB})_{уд}$ | $(p_B)_{уд}$ | $(p_A)_{уд}$ | $(P_A)_M$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | см³ | | | |
| 20 | 2,384 | 1,1533 | 1,74 | 0,300 | 0,58226 | 0,33825 | 0,70628 | 250,023 |
| 30 | 2,362 | 1,1660 | 1,58 | 0,287 | 0,56420 | 0,33595 | 0,68021 | 240,794 |
| 40 | 2,343 | 1,1790 | 1,34 | 0,273 | 0,53145 | 0,33380 | 0,63191 | 223,696 |
| 45 | 2,333 | 1,1855 | 1,24 | 0,265 | 0,51750 | 0,33278 | 0,61140 | 216,436 |
| 50 | 2,324 | 1,1922 | 0,86 | 0,260 | 0,45071 | 0,33178 | 0,51117 | 180,954 |
| 60 | 2,313 | 1,2060 | 0,62 | 0,280 | 0,40307 | 0,32989 | 0,44027 | 155,856 |
| 70 | 2,297 | 1,2200 | 0,48 | 0,296 | 0,37385 | 0,32810 | 0,39710 | 140,573 |
| 80 | 2,284 | 1,2365 | 0,25 | 0,313 | 0,32773 | 0,32641 | 0,32839 | 116,250 |

Для расчета использованы следующие данные: для ПФУБ-Si (АВ) $M_A$ = 354; $M_B$ = 180; $M_{AB}$ = 534; $(R_D)_A$ = 82,454; $(R_D)_B$ = 48,616; $(R_D)_{AB}$ = 131,07; для аналога спейсера В гексаметилдисилоксана $\mu_{AB}$ = 0,78 Д; $M$ = 182; $R_D$ = 48,888

близки к единице, т. е. заторможенность внутреннего вращения в изолированной макромолекуле ПФУБ-Si мала. Это, по-видимому, и способствует ориентационному упорядочению мезогенных фрагментов в ПФУБ-Si с образованием ЖК-фазы.

Температурная зависимость дипольного момента мезогенного фрагмента А полимера ПФУБ-Si в условиях внешнего электрического поля $E$ = 10 кВ/см (кривая *1*, рис. 4, *а*) значительно отличается от зависимостей *2* и *3*: дипольный момент $\mu_A$ резко падает с повышением температуры от значения 2,84 Д при 20 °С до значения 1,4 Д при 80 °С. В окрестности температуры около 50 °С наблюдается скачок температурного коэффициента дипольного момента. В этой же области температур имеет место разрыв монотонности и в температурном ходе диэлектрической проницаемости растворов ПФУБ-Si (см. рис. 2, *б*). Фактор корреляции в ориентации дипольных моментов фрагмента А в полимерной цепи $g_A$ (рис. 4, *б*) при наложении внешнего ориентирующего электрического поля уменьшается от значения 0,87 при 20 °С до значения 0,2 при 80 °С, что указывает на усиление корреляции в ориентациях полярных мезогенных фрагментов в макромолекуле. По-видимому, в цепи возникает ассоциирование мезогенных фрагментов в виде «шпильки» с компенсированием дипольных моментов фрагментов А. Таким образом, рис. 4 демонстрирует, что постоянная дополнительная поляризация ЖК полимера ПФУБ-Si, вносимая полем, выявляет в сильной степени наличие внутримакромолекулярного конформационного перехода на температурной зависимости дипольного момента полимера, слабо выраженного при отсутствии внешнего электрического поля.

Нелинейный диэлектрический эффект определяется значением $\Delta\varepsilon/E^2$ и характером зависимостей этой величины от концентрации раствора $x_2$, а также наклона $\alpha_E\big|_{x_2=0}$ от температуры, причем $\alpha_E$ определяется выражением (8), а $\Delta\varepsilon$ – формулой (6). Указанные зависимости приведены на рис. 5 в температурной области выше конформационного перехода. Видно, что величина $\Delta\varepsilon/E^2$ имеет отрицательное значение в полном соответствии с теорией нелинейного диэлектрического эффекта. Зависимость $\Delta\varepsilon$ / $E^2$ от концентрации $x_2$ имеет монотонный характер и экстраполируется при бесконечном разбавлении к нулю, так как диэлектрическая проницаемость растворителя не зависит от внешнего поля. Дифференцирование этой зависимости позволяет оценить параметр $|\alpha_E|$, пропорциональный величине $\mu^4$, которая непосредственно показывает изменение среднего дипольного момента в направлении

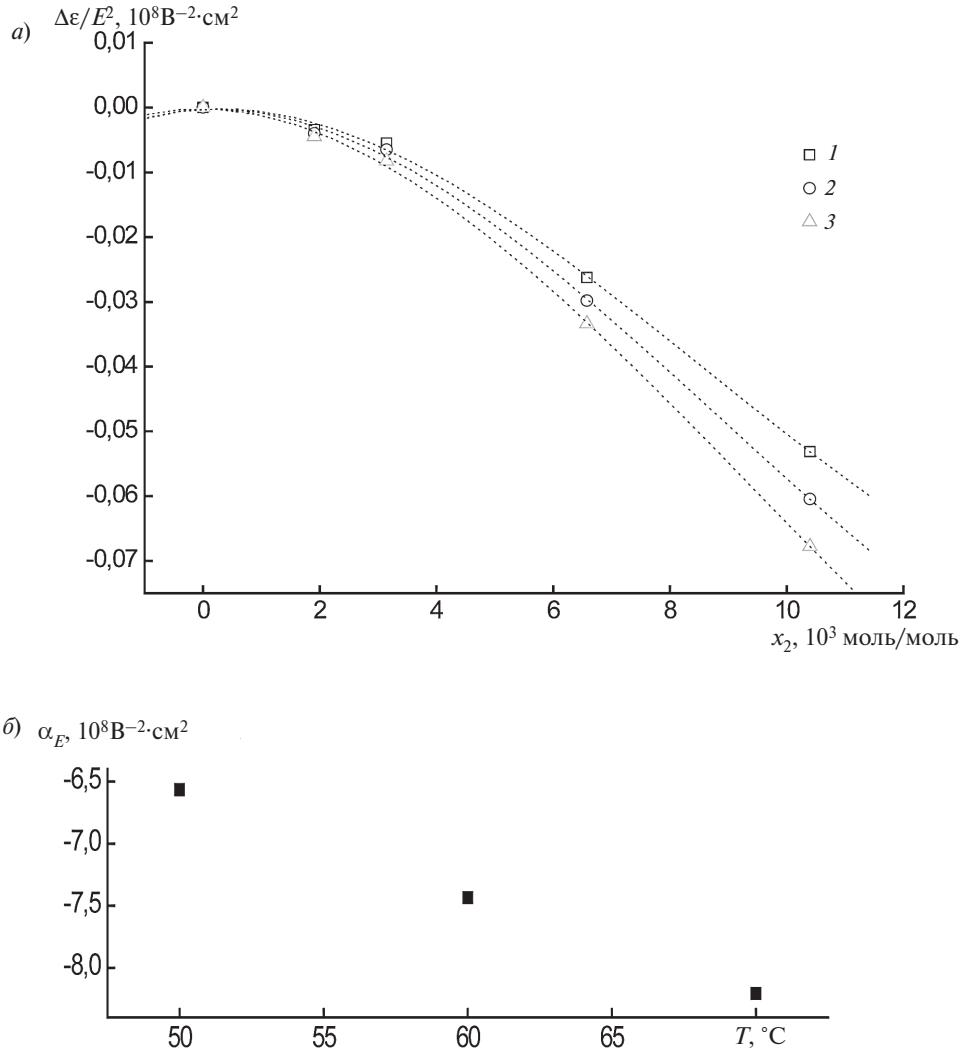



Рис. 5. Поведение параметров нелинейного диэлектрического эффекта при $E = 10$ кВ/см для растворов ПФУБ-Si в толуоле в зависимости от концентрации при трех значениях температуры (*а*) и от температуры (*б*).
Температура $T$, °C: 50(*1*), 60(*2*), 70 (*3*); параметр $\alpha_E$ найден по формуле (8)

внешнего поля и определяет величину нелинейного диэлектрического эффекта (см. формулу (7)). На рис. 5, *б* приведена температурная зависимость параметра $\alpha_E$ в интервале 50 – 70 °C.

Таким образом, постоянное электрическое поле оказывает весьма сильное влияние на дипольный момент и конформацию мезогенсодержащего линейного полимера. Наблюдается инверсия знака величины изменения эффективного дипольного момента полимера с температурой, и проявляется внутримолекулярный конформационный переход, приводящий к частичной компенсации дипольных моментов мезогенных фрагментов макромолекул. Для объяснения описанных эффектов необходимо дальнейшее систематическое исследование влияния электрического поля на дипольный момент и конформацию ЖК-полимеров и их низкомолекулярных аналогов различного строения.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Jadzyn, J**. Dielectric polarization of 2-pyrrolidinone-benzene solutions [Text] /J. Jadzyn, J. Małecki, C. Jadzyn // Journ. of Phys. Chem.–1972.–Vol. 82.–No. 19.–P. 2128–2130.

2. **Małecki, J.** Study of self-association of 2-methyl-2-butanol based on non-linear dielectric effect [Text] / J. Małecki // Chem. Phys. Lett.–1998.–Vol. 297.–P. 29–37.

3. **Dutkiewich, M.** Dielectric study of dipolar association in dilute solutions of nitrobenzene [Text] / M. Dutkiewich, B. Szurkowski, T. Hilczer // Chem. Phys. Lett. –1982. – Vol. 94.–No. 5. – P. 532 –533.

4. **Małecki, J.** Non-linear dielectric behavior and chemical equilibria in liquids [Text] / J. Małecki// Electrochimica Acta. – 1998.–Vol. 33.– No. 9. –P. 1235 –1241.

5. **Malecki, J.** Dielectric studies of molecular interactions in benzene solutions of 4-heptyl-4′-nitro-biphelyl [Text] / J. Małecki, J. Nowak// Journ. of Mol. Liq. – 2006. –Vol.129. – P. 164–168.

6. **Borisova**, **T.I.** Influence of the external oriented (electric or mechanic) fields on the dielectric relaxation in L.C. side-chain polymers [Text]/T.I. Borisova, L.L. Burstein, T.P. Stepanova, N.A. Nikonorova. // Intern. J. Polym. Mater. –1993. – Vol. 22. – No. 1–4. – P. 103 –112.

7. **Borisova, T.I.** Peculiarities of molecular dynamics in segmented polyesters. Effect of external oriented fields (electric or magnetic) [Text]/ T.I. Borisova, T.P. Stepanova, E.R. Gasilova [et al.] // SPS`97; 'Surfaces and Interfaces in Polymers and Composites'. Lausanne, June 1st to 6th 1997. Proc. – 1997. – P. 173–174.

8. **Степанова, Т.П.** Влияние внешнего ориентирующего электрического поля на диэлектрическую релаксацию сегментированных полиэфиров в разбавленном растворе [Текст] / Т.П. Степанова, А.Н. Погребная, В.М. Капралова, С.С. Скороходов // Высокомолек. соед. А. – 2007. – Т. 49. – № 2. – С. 321 – 328.

9. **Степанова, Т.П.** Дипольный момент и взаимная ориентация мезогенных фрагментов в линейном жидкокристаллическом полиэфире в растворе [Текст] / Т.П. Степанова, А.А. Меркурьева, В.В.Зуев [и др.] // Высокомолек.соед. А. – 1992. – Т. 34. – № 10. – С. 31 – 44.

10. **А.с. № 1023233 (СССР).** Т.П. Степанова, Л.Л. Бурштейн.

11. **Halverstadt, J.** Solvent polarization error and its elimination in calculating dipole moments [Text]/ J. Halverstadt, W. Kumler // J. Amer. Chem. Soc. –1942. –Vol. 64. –No. 12. – P. 2988–2992.

12. **Иоффе, Б.В.** Рефрактометрические методы химии [Текст]: 3-е изд., перераб. / Б.В. Иоффе.–Л.: Химия, 1983. –352 с.

13. **Бирштейн, Т.М.** Конформации макромолекул [Текст]/ Т.М. Бирштейн, О.Б. Птицын. – М.: Наука, 1964. –390 с.

14. **Böttcher, C.J.F.** Theory of electric polarization [Text]: 2d ed. – Vol. 1. Dielectric in static fields/ C.J.F. Böttcher. – Amsterdam: Elsevier, 1973. –377 p.

15. **Małecki, J.** Investigation of tautomeric $A—H\cdots B \leftrightarrow A^{-}\cdots H—B^{+}$ equilibrium by linear and non-linear dielectric polarization [Text]/ J. Małecki // J. Chem. Soc. Trans. –1976. –Vol. 72. – P. 1214 – 1218.

16. **Nowak, J.** Dielectric study of the rotational equilibria of succinonitrile [Text]/ J. Nowak, J. Małecki // J.C.S. Faraday II. –1980.–Vol. 76. – P. 197 –204.

17. **Piekara, A.** New experiments on dielectric saturation in polar liquids [Text]/ A. Piekara, A. Chełkowski// J. Chem. Phys. –1956. – Vol. 25. – No. 4. – P. 794 –795.

18. **Осипов, С.А.** Справочник по дипольным моментам [Текст]/С.А. Осипов, В.И. Минкин, А.Д. Гаршевский. – М.: Высшая школа, 1971. –416 с.

УДК 539.1.06

*Д.О. Спирин, А.Я.Бердников, С.И. Марков, А.С. Сафонов*

# ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРА ДИСКРИМИНАЦИИ В МЕТОДЕ ДУАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ

Метод дуальных энергий в интроскопии основан на использовании двух спектров тормозного излучения ускоренных электронов для идентификации химического состава инспектируемых объектов [1]. Распознавание материалов становится возможным вследствие разной степени поглощения гамма-квантов с разными энергиями в материалах с различными эффективными атомными номерами. Точность распознавания существенно ограничивается, во-первых, непрерывным характером спектра тормозного излучения, во-вторых, неоднородностью инспектируемого объекта.

Целью работы является оценка дискриминационного эффекта метода дуальных энергий и выяснение способов оптимизации для усиления указанного эффекта.

Для исследования крупногабаритных и (или) объектов с большим весом и плотностью применяются ускорители электронов с энергиями до 10 МэВ. Такая граница обеспечивает условия, исключающие наведенную активность исследуемого объекта. Нижняя же граница энергетического диапазона обусловлена проникающей способностью тормозного излучения и составляет для выбранного типа объектов не менее 4 МэВ.

Типичный инспектируемый объект является гетерогенным по своей структуре (грузовой контейнер, автомобиль, промышленные изделия), поэтому при использовании метода дуальных энергий существует возможность определить лишь некоторое эффективное значение атомного номера $Z_{eff}$. Таким образом, задача сводится не к распознаванию отдельных материалов (химических элементов), а к дискриминации целых групп материалов по эффективному атомному номеру. Например, для задач таможенного контроля удовлетворительным будет разделение на следующие четыре группы:

легкие материалы ( $Z_{eff} = 5$);

материалы со средним значением атомного номера ( $Z_{eff} = 13$);

неорганические материалы ( $Z_{eff} = 26$);

тяжелые элементы ( $Z_{eff} = 82$).

Одна из главных проблем в дискриминации материалов по группам – это слабое различие в степени поглощения тормозного излучения с высокой и низкой энергиями. В рассматриваемом энергетическом диапазоне доминирующим взаимодействием гамма-квантов с веществом является комптоновское рассеяние. Массовые коэффициенты ослабления различных элементов $\mu \sim Z/A$, т. е. слабо зависят от $Z$. Также необходимо отметить, что любое практическое измерение сопровождается некоторым уровнем шума либо ошибкой; последняя неизбежно будет влиять на точность разделения материалов по группам, так как интроскопическое исследование базируется на определении радиоскопической прозрачности $T$ объекта. Данная величина есть отношение интенсивностей излучения, регистрируемых детектором при наличии и в отсутствие объекта:

$$T\left(E_0,t,Z\right)=\frac{I_{\text{н}}}{I_{\circ}};$$

$$I_{\text{н}}=\int_0^{E_0}\frac{dI}{dE_\gamma}\left(E_0,E_\gamma\right)\varepsilon\left(E_\gamma\right)\varphi\left(E_\gamma,Z_{\text{ф}},t_{\text{ф}}\right)\times$$
$$\times\exp\left(-\sigma\left(E_\gamma,Z\right)N_A/At\right)dE_\gamma; \qquad (1)$$

$$I_{\circ}=\int_0^{E_0}\frac{dI}{dE_\gamma}\left(E_0,E_\gamma\right)\varepsilon\left(E_\gamma\right)\varphi\left(E_\gamma,Z_{\text{ф}},t_{\text{ф}}\right)dE_\gamma,$$

где $dI/dE_\gamma\left(E_0,E_\gamma\right)$ – спектральная плотность интенсивности тормозного излучения по формуле Шиффа [2]; $\varepsilon\left(E_\gamma\right)$ – функция отклика детектора; $\varphi\left(E_\gamma,Z_{\text{ф}},t_{\text{ф}}\right)$ – функция, учитывающая ослабление спектра предварительным фильтром $Z_{\text{ф}}$ с толщиной $t_{\text{ф}}$; $\sigma\left(E_\gamma,Z\right)$ – полное сечение взаимодействия гамма-квантов, имеющих энергию $E_\gamma$, с веществом, атомный номер которого $Z$.

Распознавание групп материалов по значению $Z$ производится на основе измеренных значений логарифмов прозрачностей для обеих граничных энергий:

$$R\left(E_{01},E_{02},t,Z\right)=\frac{\ln T\left(E_{01},t,Z\right)}{\ln T\left(E_{02},t,Z\right)}. \qquad (2)$$

Рассмотрим отношение $R$ при граничных энергиях $E_{01}$ = 9,0 МэВ и $E_{02}$ = 4,5 МэВ как функцию массовой толщины $t$ для различных элементов (рис. 1). На графике рис. 1,*а* можно заметить, что однозначной зависимости не наблюдается и одному и тому же значению $R$ соответствует несколько элементов с разной массовой толщиной; это может привести к неоднозначности определения эффективного атомного номера. Данную неоднозначность дискриминации можно минимизировать или полностью устранить путем введения предварительной фильтрации спектра тормозного излучения, за счет установки на коллиматоре ускорителя пластины с большим значением атомного номера, поглощающей мягкую часть спектра. В качестве материала предварительного фильтра можно выбрать свинец, так как он обладает большим сечением фотопоглощения. Результат установки фильтра приведен на рис. 1,*б*. Видно, что после установки фильтра атомный номер неизвестного объекта может

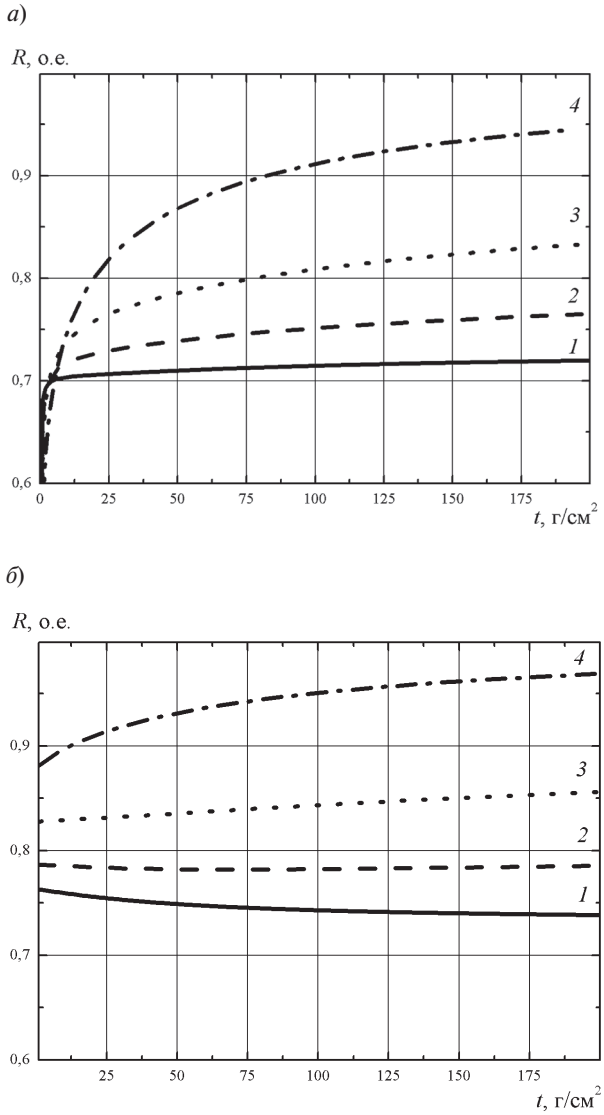



Рис. 1. Отношение $R$ (см. формулу (1)) при граничных значениях энергии $E_{01}$ = 9,0 МэВ и $E_{02}$ = 4,5 МэВ в зависимости от массовой толщины $t$ объекта для различных атомных номеров $Z$ элементов: углерода (*1*), алюминия (*2*), железа (*3*), свинца (*4*) без использования (*а*) фильтра мягкой части спектра тормозного излучения и с его использованием (*б*); свинцовый фильтр имеет массовую толщину $t_{\text{ф}}$ = 5 г/см²

быть однозначно определен (отнесен к одной из групп материалов) из экспериментально измеренных прозрачностей.

Выбор массовой толщины фильтра $t_{\text{ф}}$ для предварительной фильтрации спектра тормозного излучения сводится к задаче поиска оптимального соотношения между неоднозначностью определения $Z$ и ухудшением отноше-

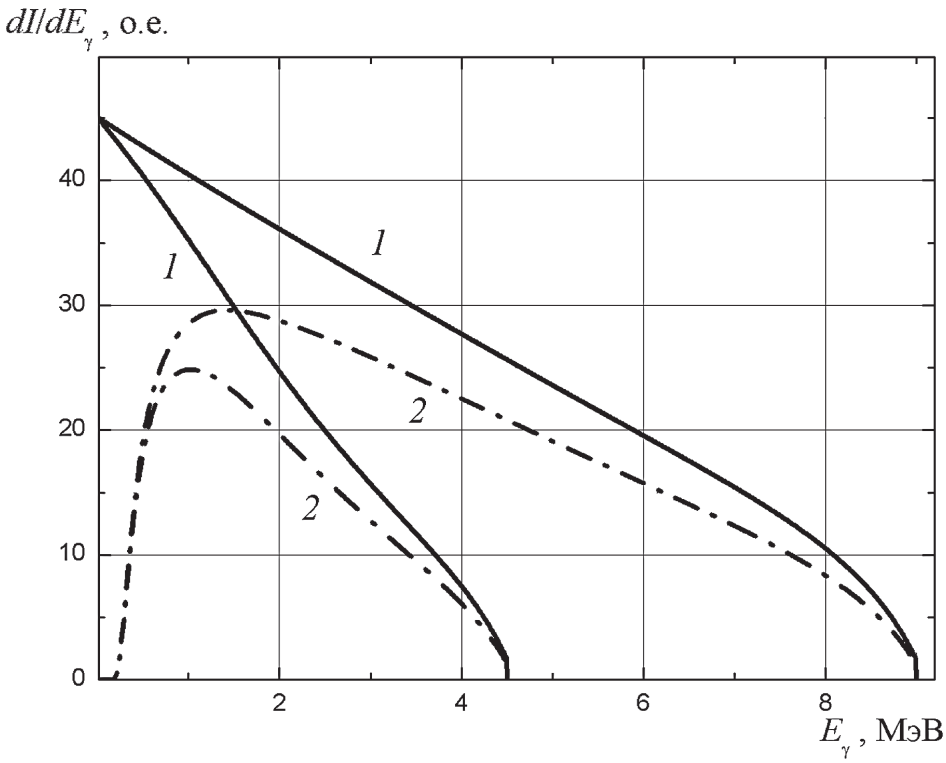



Рис. 2. Спектральная плотность интенсивности тормозного излучения при граничных значениях энергии $E_{01}$ и $E_{02}$ без использования (*1*) и с использованием (*2*) свинцового фильтра (см. рис. 1)

ния сигнал/шум. Снижение этого отношения происходит из-за уменьшения мощности дозы тормозного излучения за счет поглощения в материале фильтра. Изменение формы спектра тормозного излучения в результате установки свинцового фильтра с массовой толщиной $t_ф$= 5 г/см$^2$ приведено на рис. 2. Можно отметить, что в основном поглощается «мягкая» часть спектра.

Уменьшить неоднозначность в определении атомного номера можно также за счет выбора значения меньшей граничной энергии $E_{02}$. Следовательно, путем варьирования значений $t_ф$ и $E_{02}$ можно найти оптимальные параметры, при которых дискриминационный эффект станет наилучшим для всех групп материалов и во всем диапазоне массовых толщин.

Для оценки дискриминационного эффекта метода дуальных энергий между парой материалов с атомными номерами $Z_1$ и $Z_2$, относящихся к разным группам, введем следующую величину:

$$D\left(Z_1, Z_2, t, E_{02}, t_ф\right) = \left(1 - \frac{R\left(Z_1, t, E_{02}, t_ф\right)}{R\left(Z_2, t, E_{02}, t_ф\right)}\right) \cdot 100\%. \quad (3)$$

На рис. 3 приведена зависимость дискриминационного эффекта $D$ между железом ($Z_2$ = 26) и углеродом ($Z_1$= 6) от массовой толщины $t$ при толщине свинцового фильтра $t_ф$ = 5 г/см$^2$ для диапазона значений дуальной энергии $E_{02}$ = 4 – 7 МэВ и фиксированном значении $E_{01}$ = 9 МэВ. Следует отметить увеличение дискриминационного эффекта с уменьшением значения дуальной энергии $E_{02}$, но необходимо учесть, что снижение энергии приводит к ослаблению сигнала в детекторах. Кроме того, дискриминационный эффект слабо увеличивается с ростом массовой толщины в силу того, что спектр прошедшего сквозь объект излучения делается более жестким и приближается по форме к монохромному. Но (как уже отмечалось) данный эффект будет незначитель-

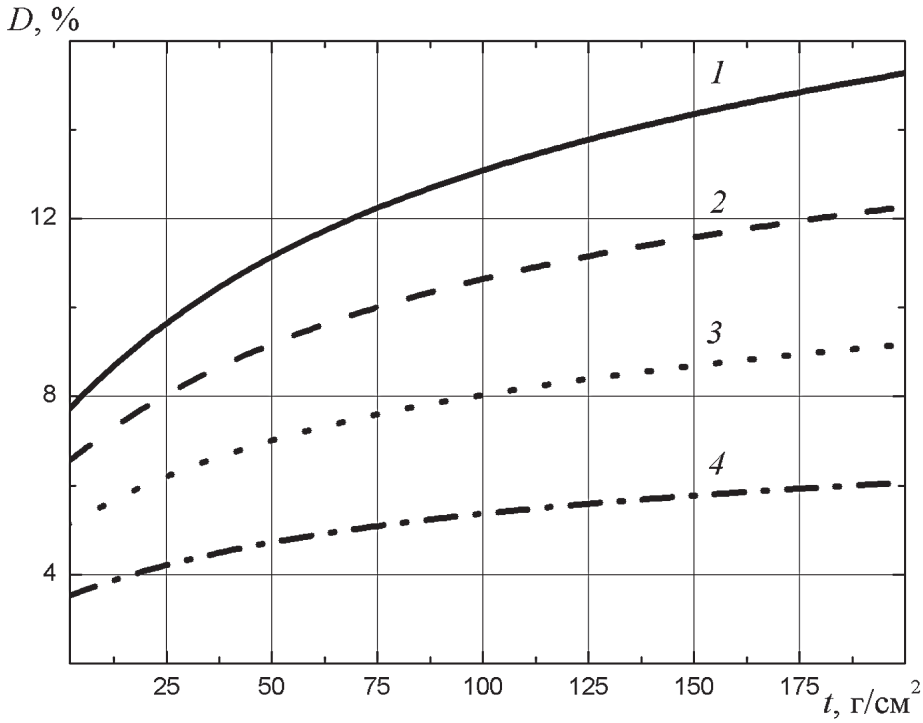



Рис. 3. Зависимость дискриминационного эффекта между железом ($Z_2 = 26$) и углеродом ($Z_1 = 6$) от массовой толщины объекта для различных диапазонов дуальной энергии при фиксированном значении $E_{01} = 9{,}0$ МэВ; значения $E_{02}$, МэВ: 4,0 (*1*); 5,0 (*2*); 6,0 (*3*); 7,0 (*4*). Толщина свинцового фильтра $t_ф = 5$ г/см$^2$

ным в силу уменьшения дозовой нагрузки на детекторы и, следовательно, увеличению шума в результате поглощения в материале объекта.

Таким образом, применение фильтра приводит к двум разнонаправленным тенденциям: увеличению дискриминационного эффекта и снижению отношения сигнал/шум.

Результаты расчетов показали, что оптимальное значение массовой толщины свинцового фильтра должно быть не меньше 4 г/см$^2$, а значение дуальной энергии – находиться в пределах 4,0 – 5,0 МэВ (рис. 4).

Приведенные выше результаты были получены с помощью формул (2), (3) без учета ошибок эксперимента. Для получения однозначного ответа относительно оптимальных значений параметров была проведена компьютерная симуляция с использованием программного пакета GEANT4 [3]. Данный пакет позволяет моделировать процессы взаимодействия излучения с веществом и создавать полномасштабную геометрическую модель экспериментальной установки.

Для анализа величин, полученных при компьютерном моделировании эксперимента, введем вероятностную меру эффективности дискриминации материалов. Нашей целью является разделение только четырех основных групп материалов. При таких условиях эффективность дискриминации может быть охарактеризована как вероятность принятия решения, что данное экспериментальное измерение принадлежит одной из четырех групп материалов. Запишем такую вероятность по Байесовской формуле для оценки апостериорной вероятности [4] в виде

$$P(g_i \mid R) = \frac{p(R \mid g_i) P(g_i)}{p(R)}; \qquad p(R) = \sum_{i=1}^{4} p(R \mid g_i) P(g_i), \tag{4}$$

где $P(g_i \mid R)$ – апостериорная вероятность распознать материал как субстанцию одной из групп для экспериментального измерения $R$.

Априорные вероятности $P(g_i)$ для всех групп можно считать равными. Из эксперимента следу-

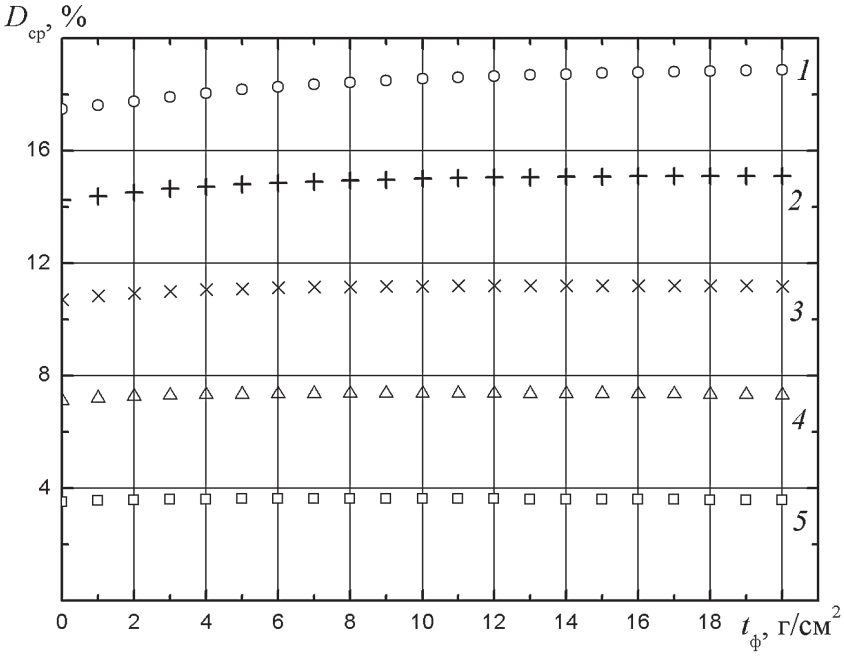



Рис. 4. Зависимость усредненного дискриминационного эффекта между железом и углеродом от массовой толщины свинцового фильтра $t_ф$ для различных диапазонов дуальной энергии при фиксированном значении $E_{01}$ = 9,0 МэВ; значения $E_{02}$, МэВ: 4,0 (*1*); 5,0 (*2*); 6,0 (*3*); 7,0 (*4*); 8,0 (*5*)

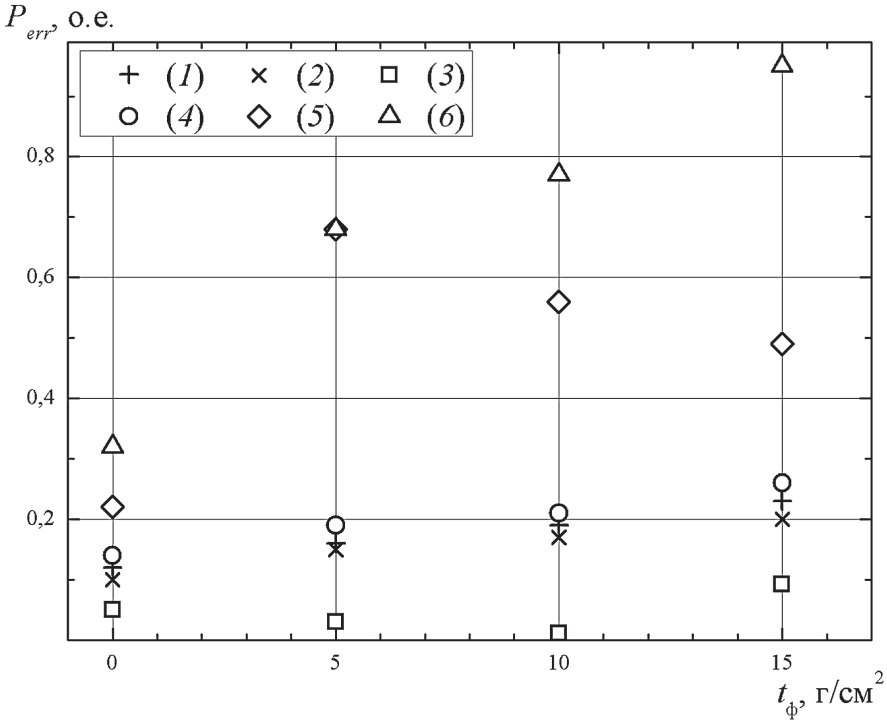



Рис. 5. Зависимость вероятности ошибки (усредненная по всем толщинам исследуемого объекта) от массовой толщины свинцового фильтра $t_ф$ для различных диапазонов дуальной энергии при фиксированном значении $E_{01}$ = 9,0 МэВ; значения $E_{02}$, МэВ: 4,0 (*1*); 4,5 (*2*); 5,0 (*3*); 5,5 (*4*); 6,0 (*5*); 6,5 (*6*)

ет [1], что условные распределения вероятности каждой из групп $p(R|g_i)$ являются нормально распределенными. Вероятность ошибки по всем возможным измерениям можно оценить как

$$P_{err} = 1 - \sum_{i=1}^{4} \int_R p(R|g_i) P(g_i) dR. \qquad (5)$$

Проведенное моделирование позволило оценить $P_{err}$ для всей совокупности значений толщины фильтра и величины дуальной энергии в зависимости от массовой толщины исследуемого объекта. В качестве примера на рис. 5 приведена зависимость $P_{err}$ (усредненная по всем толщинам исследуемого объекта) от толщины фильтра для разных значений дуальной энергии.

Из проведенного анализа можно сделать вывод, что дискриминационный эффект будет наилучшим для всех групп материалов и во всем диапазоне массовых толщин при толщине свинцового фильтра $t_ф$ = 10 г/см$^2$ и значении дуальной энергии $E_{02}$ = 5 МэВ (при фиксированном значении $E_{01}$ = 9 МэВ).

Следует отметить, что при моделировании с учетом экспериментальных ошибок мы получили значение толщины фильтра в два раза большее, чем при вычислении по аналитическим формулам. Значение же дуальной энергии $E_{02}$ несколько больше половинного значения номинальной энергии $E_{01}$. Этот результат можно объяснить тем, что ошибка измерения величины $R$ определяется ошибкой измерения прозрачности при дуальной энергии. При больших же толщинах исследуемого объекта малое значение дуальной энергии уже не приводит к улучшению результата распознавания просто за счет того, что малая доля испущенных гамма-квантов проникает сквозь объект и регистрируется детектором.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. **Спирин, Д.О.** Принципы интроскопии крупногабаритных грузов [Текст] / Д.О. Спирин, Я.А Бердников, Ю.Н. Гавриш // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2010. –№ 2(98). – С. 120–127.

2. **Shiff, L.I.** Energy-angle distribution of thin target bremsstrahlung [Text] / L.I. Shiff // Phys. Rev. – 1951. – Vol. 83. – № 2. – P. 252–253.

3. **Geant4.** Geant4 User's Guide [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://geant4.web.cern.ch.

4. **Aksoy, S**. Bayesian decision theory [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.cs.bilkent.edu.tr/~saksoy/courses/.

УДК 539.171.11, 539.125.4

*Ф.Ф. Павлов*

# ПОВЕДЕНИЕ ИНВАРИАНТНЫХ АМПЛИТУД НУКЛОН-НУКЛОННОГО РАССЕЯНИЯ

В данной работе строится разложение амплитуды упругого нуклон-нуклонного рассеяния (*NN*-рассеяния) по фермиевским вариантам, и для каждого варианта взаимодействия (скалярного $S = I \otimes I$, псевдоскалярного $P = \gamma^5 \otimes \gamma^5$, векторного $V = \gamma_\mu \otimes \gamma^\mu$, аксиально-векторного $A = \gamma_5\gamma_\mu \otimes \gamma_5\gamma^\mu$ и тензорного $T = \sigma_{\mu\nu} \otimes \sigma^{\mu\nu}$) вычисляется полная система спиральных амплитуд. Далее устанавливается связь с другими известными представлениями спиновых амплитуд *NN*-рассеяния, и с использованием базы данных SAID изучаются

глобальные свойства инвариантных амплитуд как функции энергии и переданного импульса.

### Экспериментальные данные по нуклон-нуклонному рассеянию: статус и перспективы

Прецизионные измерения *NN*-рассеяния являются одной из главных задач на всех протонных ускорителях мира. Исследования *NN*-взаимодействия проводятся на встречных пучках и ускорителях высокой энергии в крупнейших международных центрах физики высоких энергий. На сегодняшний день существует обширная экспериментальная информация. Особо богатые данные для энергии до 1 ГэВ были получены на протонном синхротроне Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова (Россия), в институте Пауля Шеера (Швейцария), в национальной лаборатории «Триумф» (Канада), в Лос-Аламосской национальной лаборатории (США). При энергиях в несколько гигаэлектрон-вольт основной вклад в изучение *NN*-рассеяния дали опыты на ускорителе «Сатурн II» в национальной лаборатории (Сакле, Франция). Эти данные позволили провести фазовый анализ протон-протонного рассеяния (*pp*-рассеяния) для лабораторных энергий до 2,5 ГэВ и для нейтрон-протонного рассеяния (*np*-рассеяния) – до энергий 1,3 ГэВ. Фазовый анализ систематически проводится Р. Арндтом и его сотрудниками, которые создали базу данных SAID [1], позволяющую вычислить полный набор спиновых амплитуд *pp*-рассеяния и *np*-рассеяния в этих областях энергии [2, 3].

### Инвариантное разложение амплитуды *NN*-рассеяния

Вычисление амплитуды *NN*-рассеяния требует ее представления в виде релятивистски-инвариантного разложения по фермиевским вариантам [4, 5]:

$$F = F_1 \cdot S + F_2 \cdot P + F_3 \cdot V + \\ + F_4 \cdot A + F_5 \cdot T, \tag{1}$$

где скалярный вариант –

$$S = \left[\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right) I u\left(p,\lambda_1\right)\right] \times \\ \times \left[\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right) I u\left(q,\lambda_2\right)\right]; \tag{2}$$

псевдоскалярный вариант –

$$P = \left[\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right)\gamma_5 u\left(p,\lambda_1\right)\right] \times \\ \times \left[\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right)\gamma_5 u\left(q,\lambda_2\right)\right]; \tag{3}$$

векторный вариант –

$$V = \left[\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right)\gamma_\mu u\left(p,\lambda_1\right)\right] \times \\ \times \left[\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right)\gamma^\mu u\left(q,\lambda_2\right)\right]; \tag{4}$$

аксиально-векторный вариант –

$$A = \left[\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right)\gamma_5\gamma_\mu u\left(p,\lambda_1\right)\right] \times \\ \times \left[\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right)\gamma_5\gamma^\mu u\left(q,\lambda_2\right)\right]; \tag{5}$$

тензорный вариант –

$$T = \left[\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right)\sigma_{\mu\nu} u\left(p,\lambda_1\right)\right] \times \\ \times \left[\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right)\sigma^{\mu\nu} u\left(q,\lambda_2\right)\right]; \tag{6}$$

здесь $I$ – единичная 4-матрица; $\gamma_\mu$ – 4-матрицы Дирака; $\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$; $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}\left(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu\right)$; $u\left(p,\lambda_1\right)$, $u\left(q,\lambda_2\right)$ – биспинорные амплитуды начальных, а $\bar{u}\left(p',\lambda_1'\right)$, $\bar{u}\left(q',\lambda_2'\right)$ – конечных частиц.

Коэффициенты $F_k$ ($k$ = 1, 2, ... , 5) называются инвариантными амплитудами, которые зависят от мандельстамовских инвариантов: квадрата полной энергии сталкивающихся частиц

$$W^2 = \left(p_\mu + q_\mu\right)^2$$

и квадрата переданного импульса

$$t = \left(p_\mu - p_\mu'\right)^2.$$

В случае упругого рассеяния в системе центра инерции сталкивающихся частиц ($\mathbf{p} = -\mathbf{q}$) для инвариантов $W^2$ и $t$ получаются более простые формулы, выраженные через кинетическую энергию $T_{lab}$ одного из нуклонов в лабораторной системе отсчета:

$$W^2 = 2m(T_{lab} + 2m); \tag{7}$$

$$t = -\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}'\right)^2 = \\ = -2\mathbf{p}^2\left(1 - \cos\theta\right) = -\mathbf{q}^2; \tag{8}$$

$$q = |\mathbf{q}| = \sqrt{2mT_{lab}}\,\sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \qquad (9)$$

$$p = |\mathbf{p}| = \frac{1}{2}\sqrt{W^2 - 4m^2} = \sqrt{\frac{mT_{lab}}{2}}, \qquad (10)$$

где $\theta$ – угол рассеяния; $m$ – массы всех частиц.

Зависимость данных коэффициентов $F_k$ от $W^2$ и $t$ малоизвестна и вызывает оправданный интерес. В данной работе будет исследована зависимость инвариантных амплитуд $F_k$ от кинетической энергии $T_{lab}$ в диапазоне от 800 до 2500 МэВ и от переданного импульса $q$ при $q$ = = 0, 100, 200, 500 МэВ/с.

### База данных SAID

База данных SAID (Scattering Analysis Interactive Dial), разработанная Р. Арндтом, И. Страковским и др. в систематической форме проводит результаты фазового анализа, а точнее, фитирование фазовых сдвигов упругого *NN*-рассеяния, основанного на 12838 экспериментальных данных по *pp*-рассеянию и 10918 – по *np*-рассеянию [6]. База данных представляет из себя программу, работающую в диалоговом режиме, которая может рассчитывать различные характеристики *NN*-рассеяния, полученные из экспериментально наблюдаемых величин, в том числе она расчитывает *pp*- и *pn*-амплитуды в разных представлениях. Однако на сегодняшний день указанная база данных охватывает не все области энергий. В настоящей работе для *pp*-рассеяния кинетическая энергия в лабораторной системе координат для налетающего нуклона будет ограничена до 2500 МэВ. Данные на SAID были расширены благодаря измерениям поляризационных характеристик *pp*-рассеяния группой Сакле на ускорителе «Сатурн II» в Национальной лаборатории «Сатурн» и измерении дифференциальных сечений для *pp*-рассеяния коллаборацией EDDA на ускорителе COSY [3]. В частности, группа Сакле провела фазовый анализ на основе экспериментальных данных по упругому *pp*-рассеянию до 2700 МэВ и упругому *np*-рассеянию до 1100 МэВ [7]. При достигнутых точностях экспериментальных данных удается фитировать только конечное число парциальных волн.

### Нуклон-нуклонные амплитуды

Существует много представлений амплитуд *NN*-рассеяния. Общее требование к ним состоит в том, чтобы они подчинялись необходимым условиям инвариантности (обращение времени, пространственная инверсия, симметрия относительно пространственных вращений). Часто используемыми на практике *NN*-амплитудами являются следующие:

Джакоба–Вика (спиральные) [8, 9];

Сакле (введены Д. Быстрицким и Ф. Легаром) [10, 11];

Норио Хошизаки [12];

введенные Л. Вольфенштейном [13];

обменные [14];

синглет-триплетные [15];

поперечные [16].

Рассмотрим спиральные амплитуды Джакоба–Вика в системе центра инерции (СЦИ). Спиральность, или проекция спина на направление импульса, в отличие от проекции спина на произвольную ось в пространстве, не меняется при вращении. При столкновении частиц в СЦИ одна частица обладает импульсом $\mathbf{p}$ и спиральностью $\lambda_1$ относительно направления $\mathbf{n}$, другая – импульсом $\mathbf{q} = -\mathbf{p}$ и спиральностью $\lambda_2$ относительно направления $-\mathbf{n}$ $\left(\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|\right)$. Кратко напомним основные свойства симметрии спиральных состояний двух нуклонов при упругом рассеянии [8, 10, 11, 17]:

инвариантность по отношению к инверсии –

$$\left\langle \lambda_1'\lambda_2' \middle| F \middle| \lambda_1\lambda_2 \right\rangle = \left\langle -\lambda_1' - \lambda_2' \middle| F \middle| -\lambda_1 - \lambda_2 \right\rangle; \qquad (11)$$

инвариантность по отношению к обращению времени –

$$\left\langle \lambda_1'\lambda_2' \middle| F \middle| \lambda_1\lambda_2 \right\rangle = \left\langle \lambda_1\lambda_2 \middle| F \middle| \lambda_1'\lambda_2' \right\rangle; \qquad (12)$$

симметрия по отношению к сохранению момента –

$$\left\langle \lambda_1'\lambda_2' \middle| F \middle| \lambda_1\lambda_2 \right\rangle = \left\langle \lambda_1'\lambda_2' \middle| F \middle| \lambda_2\lambda_1 \right\rangle. \qquad (13)$$

Таким образом, на основании этих свойств можно построить пять независимых спиральных амплитуд:

$$\varphi_1 = \left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2} \middle| F \middle| +\frac{1}{2}+\frac{1}{2} \right\rangle = \left\langle -\frac{1}{2}-\frac{1}{2} \middle| F \middle| -\frac{1}{2}-\frac{1}{2} \right\rangle; \qquad (14)$$

$$\varphi_2 = \left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ = \left\langle -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle; \tag{15}$$

$$\varphi_3 = \left\langle +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ = \left\langle -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle; \tag{16}$$

$$\varphi_4 = \left\langle +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle = \\ = \left\langle -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle; \tag{17}$$

$$\begin{aligned} \varphi_5 &= \left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= \left\langle -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= \left\langle -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= \left\langle -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= -\left\langle -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= -\left\langle +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= -\left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= -\left\langle +\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle| F \middle| -\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle . \end{aligned} \tag{18}$$

Для рассеяния на угол $\theta = 0$ амплитуды с изменением спиральности обращаютя в нуль:

$$\varphi_4(0) = \varphi_5(0) = 0 .$$

Полное и дифференциальное сечения с использованием спиральных амплитуд следуют выражениям

$$\sigma_{tot} = \frac{2\pi}{p}\operatorname{Im}\left[\varphi_1(0)+\varphi_3(0)\right]; \tag{19}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2}\Big[|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 + |\varphi_3|^2 + \\ + |\varphi_4|^2 + 4|\varphi_5|^2\Big], \tag{20}$$

где $p$ — импульс нуклона в системе центра инерции.

В качестве основных амплитуд в базе данных SAID используются так называемые амплитуды Арндта [18], которые связаны со спиральными следующими формулами:

$$H_1 = \frac{p}{2}(\varphi_1 - \varphi_2);$$

$$H_2 = \frac{p}{2}(\varphi_3 + \varphi_4);$$

$$H_3 = \frac{p}{2}(\varphi_3 - \varphi_4);$$

$$H_4 = -p\varphi_5;$$

$$H_5 = \frac{p}{2}(\varphi_1 + \varphi_2). \tag{21}$$

Дифференциальное сечение с использованием амплитуд Арндта выражается как

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{p^2}\Big[|H_1|^2 + |H_2|^2 + |H_3|^2 + \\ + 2|H_4|^2 + |H_5|^2\Big]. \tag{22}$$

**Переход от амплитуд Арндта и спиральных к инвариантным амплитудам**

Будем пользоваться спиральными амплитудами [8, 9]

$$\varphi(\lambda_1', \lambda_2'; \lambda_1, \lambda_2) = \langle \lambda_1'\lambda_2' | F | \lambda_1\lambda_2 \rangle \tag{23}$$

и спиральными дираковскими спинорами в СЦИ:

$$u(p,\lambda_1) = \frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix} E+m \\ 2p\lambda_1 \end{pmatrix}\chi_{\lambda_1} = \\ = \frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix} E+m \\ 2p\lambda_1 \end{pmatrix}|\lambda_1\rangle; \tag{24}$$

$$u(p,\lambda_1') = \frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix} E+m \\ 2p\lambda_1' \end{pmatrix}\exp\left(-i\sigma_y \theta/2\right)\chi_{\lambda_1'} = \\ = \frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix} E+m \\ 2p\lambda_1' \end{pmatrix}|\lambda_1'\rangle; \tag{25}$$

$$u(p,\lambda_2)=\frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix}E+m\\2p\lambda_2\end{pmatrix}\chi_{-\lambda_2}=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix}E+m\\2p\lambda_2\end{pmatrix}|\lambda_2\rangle; \quad (26)$$

$$u(p,\lambda_2')=\frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix}E+m\\2p\lambda_2'\end{pmatrix}\times$$
$$\times\exp\left(-i\sigma_y\,\theta/2\right)\chi_{-\lambda_1'}= \quad (27)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{E+m}}\begin{pmatrix}E+m\\2p\lambda_2'\end{pmatrix}|\lambda_2'\rangle.$$

Здесь импульс **p** направлен по оси $z$, импульс рассеянной частицы лежит в плоскости $(x, z)$. Спинор $\chi_\lambda$ есть собственная функция оператора $\sigma_z$:

$$\frac{1}{2}\sigma_z\chi_\lambda=\lambda\chi_\lambda.$$

Массы всех нуклонов равны $m$, энергия одного из нуклонов в СЦИ следует выражению:

$$E=\frac{1}{2}W=\sqrt{\frac{m(T_{lab}+2m)}{2}};$$

модуль импульса одного из нуклонов в СЦИ выражает как

$$p=|\mathbf{p}|=\sqrt{E^2-m^2}=$$
$$=\frac{1}{2}\sqrt{W^2-4m^2}=\sqrt{\frac{mT_{lab}}{2}}.$$

Амплитуды $\varphi_i$ (см. формулы (14) – (18)) после соответствующего разложения по фермиевским вариантам выглядят с использованием спиноров (24) – (27) в следующем виде:

$$\varphi_1=2m^2(1+z)F_1+$$
$$+\left[2E^2(1+z)+2p^2(3-z)\right]F_3+$$
$$+\left[2p^2(1+z)+2E^2(3-z)\right]F_4+$$
$$+4m^2(3-z)F_5; \quad (28)$$

$$\varphi_2=-2E^2(1-z)F_1-2p^2(1-z)F_2-$$
$$-2m^2(1-z)F_3-2m^2(3+z)F_4-$$
$$-\left[4E^2(3+z)+4p^2(3+z)\right]F_5; \quad (29)$$

$$\varphi_3=2m^2(1+z)F_1+$$
$$+\left[2E^2(1+z)+2p^2(1+z)\right]F_3-$$
$$-\left[2p^2(1+z)+2E^2(1+z)\right]F_4-$$
$$-4m^2(1+z)F_5; \quad (30)$$

$$\varphi_4=2E^2(1-z)F_1-2p^2(1-z)F_2+$$
$$+2m^2(1-z)F_3-2m^2(1-z)F_4-$$
$$-4m^2(1-z)F_5; \quad (31)$$

$$\varphi_5=-2EmsF_1-2EmsF_3+$$
$$+2EmsF_4+4EmsF_5, \quad (32)$$

где $z=\cos\theta$, $s=\sin\theta$.

Решая эту систему уравнений, мы находим явный вид инвариантных амплитуд. Элементарное, хотя и довольно громоздкое вычисление, приводит к явному виду инвариантных амплитуд $F_k$, выраженных через спиральные амплитуды $\varphi_k$:

$$F_1=-\frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_1-\frac{E^2+p^2}{32E^2p^2}\varphi_2+$$
$$+\frac{-2E^2(3+z)+m^2(1+z)}{32E^2p^2(1+z)}\varphi_3+$$
$$+\frac{E^2+p^2}{32E^2p^2}\varphi_4+\frac{-E^2(3+z)+2m^2}{8Ep^2ms}\varphi_5; \quad (33)$$

$$F_2=-\frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_1-\frac{E^2+p^2}{32E^2p^2}\varphi_2+$$
$$+\frac{-2E^2(3+z)+m^2(1+z)}{32E^2p^2(1+z)}\varphi_3+$$
$$+\frac{-2E^2(7+z)-m^2(1-z)}{32E^2p^2(1-z)}\varphi_4+$$
$$+\frac{-E^2(3+z)-2m^2}{8Ep^2ms}\varphi_5; \quad (34)$$

$$F_3 = \frac{E^2+p^2}{32E^2p^2}\varphi_1 + \frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_2 + \frac{4E^2+m^2(1+z)}{32E^2p^2(1+z)}\varphi_3 - \frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_4 + \frac{m(1+z)}{8Ep^2s}\varphi_5; \quad (35)$$

$$F_4 = \frac{E^2+p^2}{32E^2p^2}\varphi_1 + \frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_2 + \frac{-4E^2+m^2(1+z)}{32E^2p^2(1+z)}\varphi_3 - \frac{m^2}{32E^2p^2}\varphi_4 - \frac{m(1-z)}{8Ep^2s}\varphi_5; \quad (36)$$

$$F_5 = -\frac{m^2}{64E^2p^2}\varphi_1 - \frac{E^2+p^2}{64E^2p^2}\varphi_2 + \frac{2E^2(1-z)+m^2(1+z)}{64E^2p^2(1+z)}\varphi_3 + \frac{E^2+p^2}{64E^2p^2}\varphi_4 + \frac{E(1-z)}{16p^2ms}\varphi_5. \quad (37)$$

Далее приводится связь между инвариантными амплитудами $F_k$ и амплитудами Арндта $H_k$:

$$F_1 = \frac{1}{p}\left(\frac{1}{16E^2}H_1 - \frac{1}{8p^2(1+z)}H_2 + \left(-\frac{1}{16E^2} - \frac{3+z}{16p^2(1+z)}\right)H_3 + \frac{E^2(3+z)-2m^2}{8Ep^2ms}H_4 - \frac{1}{16p^2}H_5\right); \quad (38)$$

$$F_2 = \frac{1}{p}\left(\frac{1}{16E^2}H_1 - \frac{3z+5}{8p^2(1-z)(1+z)}H_2 + \left(-\frac{1}{16E^2} + \frac{7+z}{16p^2(1-z)} - \frac{1}{8p^2(1+z)}\right)H_3 + \frac{E^2(3+z)+2m^2}{8Ep^2ms}H_4 - \frac{1}{16p^2}H_5\right); \quad (39)$$

$$F_3 = \frac{1}{p}\left(\frac{1}{16E^2}H_1 + \frac{1}{8p^2(1+z)}H_2 + \left(-\frac{1}{16E^2} + \frac{3+z}{16p^2(1+z)}\right)H_3 - \frac{m(1+z)}{8Ep^2s}H_4 + \frac{1}{16p^2}H_5\right); \quad (40)$$

$$F_4 = \frac{1}{p}\left(\frac{1}{16E^2}H_1 - \frac{1}{8p^2(1+z)}H_2 + \left(-\frac{1}{16E^2} - \frac{1-z}{16p^2(1+z)}\right)H_3 + \frac{m(1-z)}{8Ep^2s}H_4 + \frac{1}{16p^2}H_5\right); \quad (41)$$

$$F_5 = \frac{1}{p}\left(-\frac{1}{32E^2}H_1 - \frac{1}{16p^2(1+Z)}H_2 + \left(-\frac{m^2}{32E^2p^2} + \frac{z}{16p^2(1+z)}\right)H_3 + \frac{E(1-z)}{16p^2ms}H_4 + \frac{1}{32p^2}H_5\right). \quad (42)$$

Напомним, что база данных SAID как раз рассчитывает амплитуды Арндта $H_k$ из экспериментально наблюдаемых величин.

**Результаты и их обсуждение**

Приведем зависимость инвариантных амплитуд от энергии и переданного импульса. Амплитуды $F_k$ входят в инвариантную амплитуду рассеяния с неодинаковыми кинематическими множителями. Напомним, что полное сечение *pp*-рассеяния равно приблизительно 47 мбарн (мбн) при энергии 800 МэВ. Согласно оптической теореме, при $t = 0$ $\operatorname{Im} F = j\sigma_{tot}$, где $j = 2Ep$. Если взять амплитуду

$$\varphi_1 = \left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle| F \middle| +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right\rangle,$$

то при $t = 0$ скалярная амплитуда входит в выражение (28) с кинематическим множителем

$4m^2$, а векторная и аксиальная амплитуды – с кинематическими множителями

$$4\left(E^2+p^2\right)=4m\left(T_{lab}+m\right).$$

Для тензорного варианта старшим по энергетической зависимости является вклад в амплитуду

$$\varphi_2=\left\langle +\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\middle|F\middle|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle,$$

куда $F_5$ входит в формулу (29) с кинематическим множителем

$$16\left(E^2+p^2\right)=16m\left(T_{lab}+m\right).$$

Вклад псевдоскалярного варианта в амплитуду с переворотом спина входит с кинематическим множителем

$$2p^2\left(1-\cos\theta\right)=q^2.$$

Тогда, чтобы затем сравнить все инвариантные амплитуды в едином масштабе, сопоставимом с $\sigma_{tot}$, приведем результаты в следующем виде:

$$f_S=F_1\left(W^2,t\right)\frac{4m^2}{j}; \qquad (43)$$

$$f_P=F_2\left(W^2,t\right)\frac{q^2}{j}; \qquad (44)$$

$$f_V=F_3\left(W^2,t\right)\frac{4m\left(T_{lab}+m\right)}{j}; \qquad (45)$$

$$f_A=F_4\left(W^2,t\right)\frac{4m\left(T_{lab}+m\right)}{j}; \qquad (46)$$

$$f_T=F_5\left(W^2,t\right)\frac{16m\left(T_{lab}+m\right)}{j}; \qquad (47)$$

для переданных импульсов $q$ = 0, 100, 200, 500 МэВ/$c$.

На рис. 1 приводится полученная нами зависимость усредненного по поляризациям разложения полного сечения $\sigma_{tot}$ $pp$-рассеяния по вкладам всех возможных вариантов от кинетической энергии при значении переданного импульса $q$ = 0 МэВ/$c$. Видно, что вклад $P$-варианта при $t$ = 0 обращается в нуль. Главными при промежуточных энергиях являются вклады $S$- и $V$- вариантов, причем с ростом энергии вклад $S$ - варианта становится важнее. Это понимание роли различных вариантов представляется существенным для последующей оценки возможных внемассовых эффектов. На рис. 2 – 6 приводятся зависимости вещественных и мнимых частей инвариантных амплитуд (43) – (47) для каждого варианта от кинетической энергии и переданного импульса. Видно, что в области умеренных переданных импульсов иерархия инвариантных амплитуд сохраняется; инвариантные амплитуды, соответствующие $S$- и $V$- вкладам, остаются главными; инвариантные амплитуды, соответствующие $P$-вкладу, остаются малыми; инвариантные амплитуды, соответствующие $A$- и $T$- вкладам, проявляют наиболее быструю зависимость от переданного импульса и меняют знак с ростом $q$.

Работа основана на обширной базе данных, полученных в результате экспериментов по упругому протон-протонному рассеянию, которые позволили провести фазовый анализ, а точнее, фитирование фазовых сдвигов упругого нуклон-нуклонного рассеяния, и позволили вычислить полный набор спиновых амплитуд протон-протонного и нейтрон-протонного рассеяния. В аналитическом виде представлена связь инвариантных амплитуд со спиральными амплитудами упругого нуклон-нуклонного рассеяния, исследовано поведение инвариантных амплитуд в зависимости от мандельстамовских

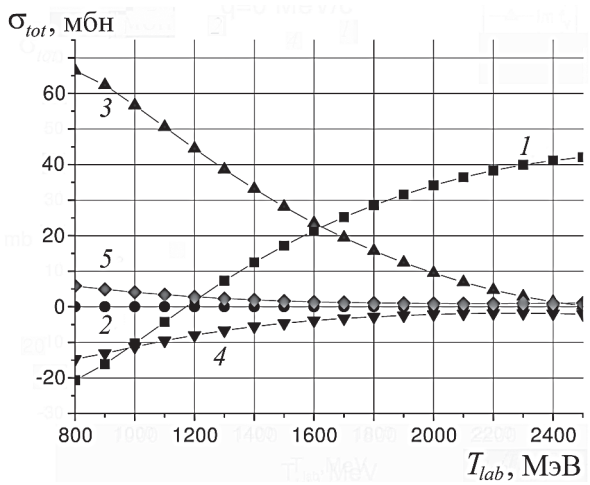



Рис. 1. Зависимость усредненного по поляризациям разложения полного сечения $pp$-рассеяния $\sigma_{tot}$ по вкладам $S$- (*1*), $P$- (*2*), $V$- (*3*), $A$- (*4*) и $T$- (*5*) вариантов от кинетической энергии при значении переданного импульса $q$ = 0 МэВ/$c$

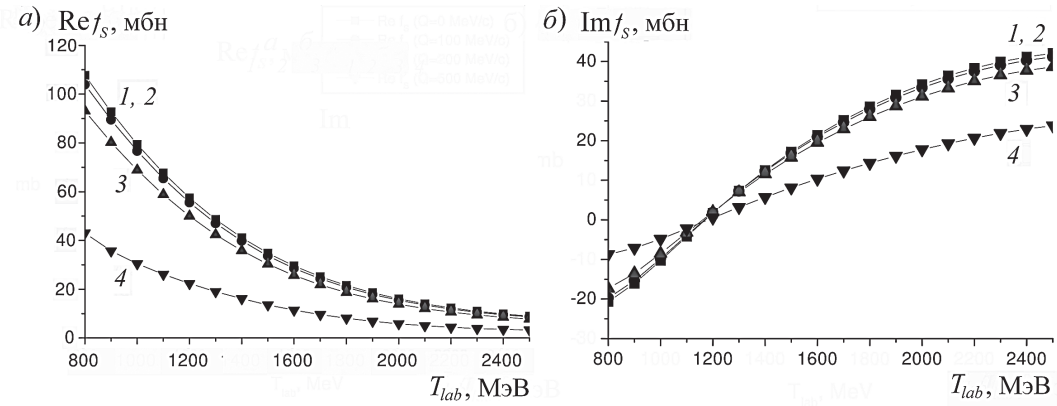



Рис. 2. Энергетические зависимости вещественной (*а*) и мнимой (*б*) частей инвариантной амплитуды $f_S$, соответствующей скалярному варианту, при различных значениях переданного импульса $q$, МэВ/$c$: 0 (*1*), 100 (*2*), 200 (*3*), 500 (*4*)

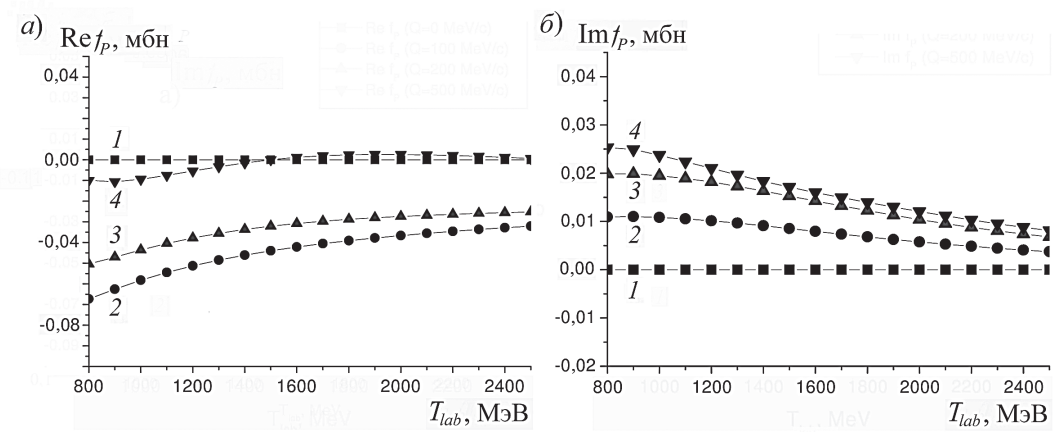



Рис. 3. Энергетические зависимости вещественной (*а*) и мнимой (*б*) частей инвариантной амплитуды $f_P$, соответствующей псевдоскалярному варианту, при различных значениях переданного импульса $q$, МэВ/$c$: 0 (*1*), 100 (*2*), 200 (*3*), 500 (*4*)

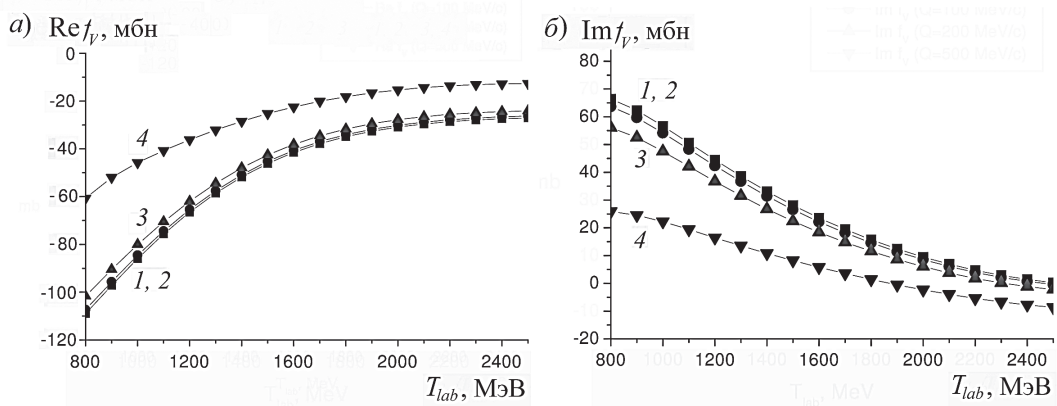



Рис. 4. Энергетические зависимости вещественной (*а*) и мнимой (*б*) частей инвариантной амплитуды $f_V$, соответствующей векторному варианту, при различных значениях переданного импульса $q$, МэВ/$c$: 0 (*1*), 100 (*2*), 200 (*3*), 500 (*4*)

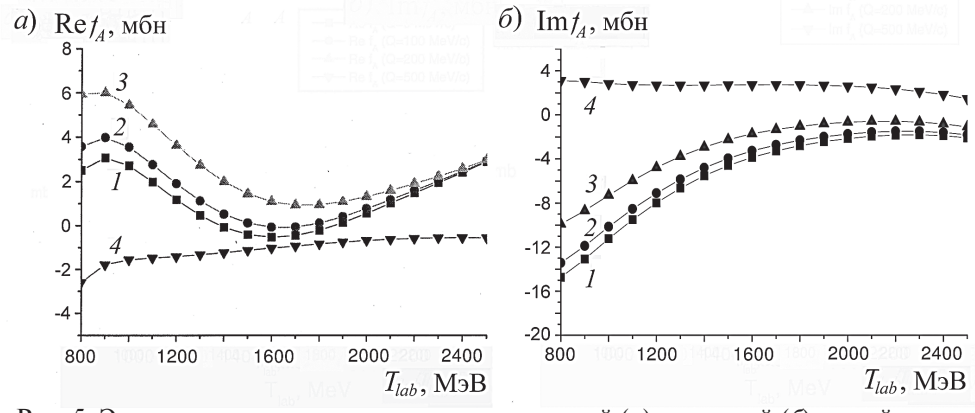



Рис. 5. Энергетические зависимости вещественной (*а*) и мнимой (*б*) частей инвариантной амплитуды $f_A$, соответствующей аксиально-векторному варианту, при различных значениях переданного импульса $q$, МэВ/*c*: 0 (*1*), 100 (*2*), 200 (*3*), 500 (*4*)

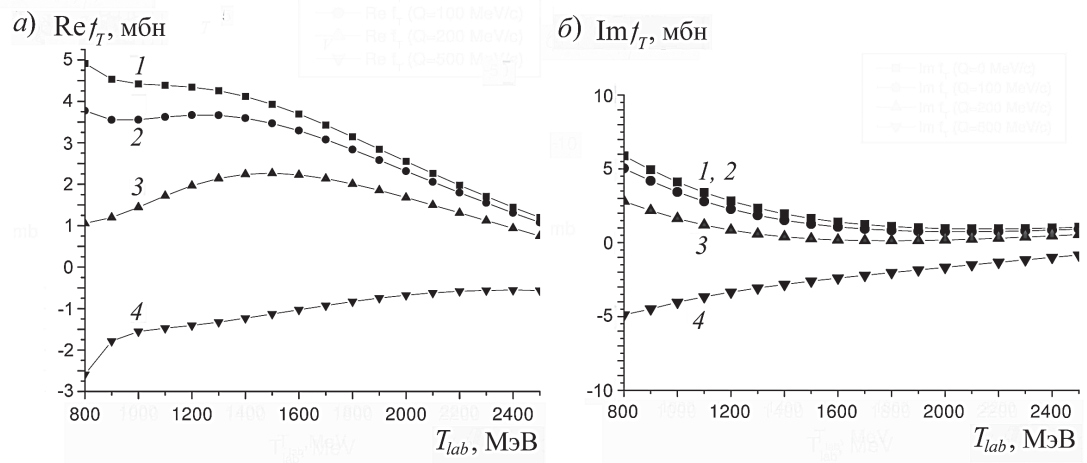



Рис. 6. Энергетические зависимости вещественной (*а*) и мнимой (*б*) частей инвариантной амплитуды $f_T$, соответствующей тензорному варианту, при различных значениях переданного импульса $q$, МэВ/*c*: 0 (*1*), 100 (*2*), 200 (*3*), 500 (*4*)

инвариантов: квадрата полной энергии сталкивающихся частиц и квадрата переданного импульса. В дальнейшем полученные результаты можно применить к релятивистскому вычислению амплитуды однократного рассеяния протона на протоне в дейтроне, амплитуды многократного рассеяния в нейтрон-дейтронном рассеянии и дейтрон-дейтронном рассеянии, анализу роли релятивистских эффектов при извлечении спиновой структуры нейтрон-протонного рассеяния из экспериментальных данных по протон-дейтронному и дейтрон-дейтронному рассеянию, а также описанию других реакций с участием дейтронов.

В заключение автор выражает глубокую благодарность доктору физико-математических наук, профессору Н.Н. Николаеву, сотруднику Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН и Института ядерной физики г. Юлих (Германия), за ценные идеи и обсуждения, стимулировавшие появление данной работы; кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудкика Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН С.И. Манаенкову за критические замечания и полезные обсуждения, а также за тщательную проверку всех вычислений; профессору И.И. Страковскому, сотруднику Института ядерных исследований физического факультета Университета Дж. Вашингтона (г. Вашингтон, США), за предоставление фортрановского кода базы данных SAID для вычисления спиральных амплитуд; доктору технических наук, профессору С.Н. Колгатину, сотруднику СПбГПУ за поддержку и ценные замечания.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. Центр анализа данных Института ядерных исследований физического факультета Университета Дж. Вашингтона [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://gwdac.phys.gwu.edu.

2. **Arndt, R.A.** Nucleon-nucleon elastic scattering analysis to 2.5 GeV [Text] / R.A. Arndt, Chang Heon Oh, I.I. Strakovsky [et al.] // Phys. Rev. C. – 1997. –Vol. 56. – P. 3005–3013.

3. **Arndt, R.A.** Nucleon-nucleon elastic scattering to 3 GeV [Text] / R.A. Arndt, I.I. Strakovsky, R.L. Workman // Phys. Rev. C. – 2000. –Vol. 62. – P. 034005.

4. **Берестецкий, В.Б.** Квантовая электродинамика [Текст] / В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – М.: Наука, 1989. – С. 313.

5. **Волков, Д.В.** Полюса Редже в амплитудах нуклон-нуклонного и нуклон-антинуклонного рассеяния [Текст] / Д.В. Волков, В.Н. Грибов // ЖЭТФ. – 1963. –Т. 44. – С. 1068–1077.

6. **Arndt, R.A.** Nucleon-nucleon partial-wave analysis to 1 GeV [Text] / R.A. Arndt, L.D. Roper, R.A. Bryan [et al.] // Phys. Rev. D. – 1983. –Vol. 28. – P. 97–122.

7. **Altmeier, M.** Excitation functions of the analyzing power in *pp* scattering from 0.45 to 2.5 GeV [Text] / M. Altmeier, F. Bauer, J. Bisplinghoff [et al.] (EDDA Collaboration) // Phys. Rev. Lett. – 2000. –Vol. 85. – P. 1819–1822.

8. **Jacob, M.** On the general theory of collisions for particles with spin [Text] / M. Jacob, G.C. Wick // Ann. Phys. – 1959. –Vol. 7. – P. 404–428.

9. **Goldberger, M.L.** Theory of low-energy nucleon-nucleon scattering [Text] / M.L. Goldberger, M.T. Grisaru, S.W. MacDowell [et al.] // Phys. Rev. – 1960. –Vol. 120. – P. 2250–2276.

10. **Bystricky, J.** Formalism of nucleon-nucleon elastic scattering experiments [Text] / J. Bystricky, F. Lehar and P. Winternitz // Journal de Physique. – 1978. – Vol. 39. – P. 1–32.

11. **Bystricky, J.** Direct reconstruction of *pp* elastic scattering amplitudes and phase shift analyses at fixed energies from 1.80 to 2.70 GeV [Text] / J. Bystricky, C. Lechanoine-LeLuc, F. Lehar // The European Physical Journal C. – 1998. – Vol. 4. – P. 607–621.

12. **Hoshizaki, N.** Appendix. Formalism of nucleon-nucleon scattering [Text] / N. Hoshizaki // Prog. Theor. Phys. – 1968. –Vol. 42. – P. 107–159.

13. **Wolfenstein, L.** Polarization of fast nucleons [Text] / L. Wolfenstein // Annual Review of Nuclear Science. – 1956. –Vol. 6. – P. 43–76.

14. **Halzen, F.** Exchange mechanism of proton-proton scattering and the trend of polarized-beam cross-sections at intermediate energies [Text] / Francis Halzen, G.H. Thomas // Phys. Rev. D. – 1974. –Vol. 10. – P. 344–347.

15. **Stapp, H.P.** Phase-shift analysis of 310-Mev proton-proton scattering experiments [Text] / H.P. Stapp, T.J. Ypsilantis, N. Metropolis // Phys. Rev. – 1957. –Vol. 105. – P. 302–310.

16. **Kotanski, A.** Diagonalization of helicity-crossing matrices [Text] / A. Kotanski // Acta Phys.Pol. – 1966. – Vol. 29. – P. 699–711.

17. **Erkelenz, K.** Momentum space calculations and helicity formalism in nuclear physics [Text] / K. Erkelenz, R. Alzetta, K. Holinde // Nuclear Physics A. – 1971. – Vol. 176, – Iss. 2. – P. 413–432.

18. **Arndt, R.A.** Nucleon-nucleon partial-wave analysis to 1 GeV [Text] / R.A. Arndt, L.D. Roper, R.A. Bryan [et al.] // Phys. Rev. D. – 1983. –Vol. 28. – P. 97–122.


УДК 539.125.17; 539.126.17

*Я.А. Бердников, А.Е. Иванов, В.Т. Ким, В.А. Мурзин*

# ОБРАЗОВАНИЕ АДРОНОВ В ЛЕПТОН-ЯДЕРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

Адронизация кварков и глюонов в адроны является наиболее интересной частью непертурбативной квантовой хромодинамики (КХД). Использование ядер в качестве мишеней позволяет обнаружить важные особенности пространственно-временной картины адронизации, такие как длина формирования адронов и энергетические потери (см. обзоры [1, 2]).

Понимание процесса распространения кварка в ядерной среде важно для однозначной интерпретации данных по столкновению ультрарелятивистских тяжелых ионов, так же

как и по столкновению протонов с ядрами и лептонов с ядрами при высоких энергиях.

Для упрощения интерпретации наблюдаемых эффектов вначале рассмотрим рождение адронов в рассеянии лептонов на ядрах. Для случая глубоконеупругого рассеяния лептонов на ядрах можно выделить три этапа адронизации. Первый представляет собой распространение кварка в ядерной среде, выбитого в результате жесткого рассеяния. На этом этапе кварк является точечным и поэтому практически не взаимодействует со средой (эффект Ландау – Померанчука – Мигдала в КХД) [3–5].

На втором этапе формируется предадрон (цветовой диполь или конституентный кварк) [6–8]. При этом сечение взаимодействия такого предадрона меньше, чем адрона. На третьем этапе формируется конечный адрон. В зависимости от длины формирования процесс адронизации может протекать за пределами ядра на любой стадии.

Цель работы – рассчитать эти эффекты для случая лептон-ядерных соударений в рамках разработки Монте-Карло-генератора. Генератор HARDPING (Hard Probe Interaction Generator) основан на популярном генераторе Монте-Карло PYTHIA [9] и HIJING [10].

Первая версия генератора HARDPING описывала экспериментальные данные по реакции Дрелл – Яна на ядрах достаточно хорошо [11, 12]. Она включала в себя эффекты, относящиеся к взаимодействию налетающего адрона и его конституентов в ядерной среде до жесткого рассеяния для случая рождения лептонных пар на ядрах.

Вторая версия того же генератора описывает рождение адронов в лептон-ядерных взаимодействиях. Она включает в себя эффекты, связанные с длиной формирования, энергетическими потерями и многократными мягкими перерассеяниями. При использовании экспериментальных данных коллабораций HERMES [13] и EMC [14] по лептон-ядерному рассеянию и данных HARDPING становится возможным изучение различных стадий процесса адронизации.

Экспериментальные данные по полуинклюзивному рождению адронов в лептон-ядерных взаимодействиях обычно приводятся в виде отношений множественности частиц на ядре-мишени $A$ к множественности на дейтоне $D$ как функция $z$ и $\nu$ [13, 14]:

$$R_M^h(z_h) = \left(\frac{1}{N_A^{DIS}}\frac{dN_A^h}{dz}\right)\cdot\left(\frac{1}{N_D^{DIS}}\frac{dN_D^h}{dz}\right)^{-1};$$

$$R_M^h(\nu) = \left(\frac{1}{N_A^{DIS}}\frac{dN_A^h}{d\nu}\right)\cdot\left(\frac{1}{N_D^{DIS}}\frac{dN_D^h}{d\nu}\right)^{-1},$$

где $z$ – доля импульса виртуального фотона, забранная адроном, $\nu$ – переданная энергия; $N_A^h$, $N_D^h$ – число адронов, образовавшихся в результате глубоконеупругих рассеяний лептонов на ядрах $A$ и $D$, соответственно; $N_A^{DIS}$, $N_D^{DIS}$ – число глубоконеупругих рассеяний лептонов на ядрах $A$ и $D$ соответственно;

В отсутствие ядерных эффектов отношение $R_M^h$ должно быть равно единице, и экспериментальные данные показывают, что это так в случае высоких значений $\nu$ [13].

### Длина формирования адрона

Из теоретических и экспериментальных работ по изучению адрон-ядерных соударений при высоких энергиях установлено, что адроны образуются не в момент столкновения, а по истечении некоторого промежутка времени – формирования [1].

В лундовской струнной модели фрагментации адроны образуются на некотором расстоянии от точки соударения – длине формирования

$$l_h = l_p + \frac{z_h \nu}{k}.$$

На первой стадии выбитый кварк проходит длину $l_p$, после чего формируется предадронное состояние [12, 13]. Оно зависит от энергии $\nu$, переданной кварку, параметра натяжения струны $k$ и доли энергии $z_h$ виртуального фотона, унесенной образовавшимся адроном. Из закона сохранения энергии следует, что если адрон рожден с большим значением $z_h$, то кварк не мог испытать большие потери энергии за счет излучения. В этом случае длина формирования бесцветного состояния будет короткой [1 – 8]. Длина формирования предадрона вычисляется аналитически в рамках лундовской струнной модели фрагментации.

Если предположить, что предадрон может быть сформирован непосредственно из выбитого кварка и антикварка, образовавшегося в

результате разрыва струны, то длину формирования предадрона можно вычислить согласно распределению $P$ в соответствии с лундовской моделью [9]:

$$P(y;z,L)=\frac{zL}{y-zL}\left[\frac{y}{(y+zL)(1-z)}\right]^{C}\times$$

$$\times\left(\delta\left[y-(1-z)L\right]+\frac{1+C}{y-zL}\Theta\left[(1-z)L-y\right]\right)\Theta[y],$$

где $y$ – длина формирования; параметр $L$ – отношение энергии виртуального фотона к натяжению струны $k$; параметр $C = 0{,}3$.

Тогда можно вычислить среднюю длину формирования адрона $l_p$, которая может быть отождествлена с длиной формирования предадрона:

$$\langle l_p\rangle=\int P(y;z,L)\,y\,dy.$$

Вычисления приводят это выражение к следующему виду [12]:

$$\langle l_p\rangle=\left[1+\frac{1+C}{2+C}\frac{1-z}{z^{2+C}}F_1\left(2+C,2+C,3+C,\frac{z-1}{z}\right)\right]\times$$
$$\times(1-z)zL,$$

где $F_1$ – это гипергеометрическая функция Гаусса.

После длины формирования $l_p$ образуется конституентный кварк (цветовой диполь), который может взаимодействовать с внутриядерными нуклонами через предадронное сечение взаимодействия (или неупругое кварк-нуклонное сечение взаимодействия). На конечном этапе формируется наблюдаемый адрон.

### Многократные мягкие перерассеяния

Образовавшиеся кварки и адроны могут испытывать мягкие соударения с внутриядерными нуклонами (с малой величиной передачи импульса ($|t| \le 1$ ГэВ)), что ведет к уширению распределения по поперечному импульсу.

Увеличение поперечного импульса кварка, распространяющегося через ядро, представляет собой достаточно сложный процесс, вовлекающий в себя рассеяние кварка, которое сопровождается испусканием глюонов. Этот процесс включает мягкие перерассеяния и не может быть вычислен пертурбативно.

Распределение $G_p^n(\mathbf{k}_t)$ кварков по поперечному импульсу после прохождения через ядерную материю может быть записано в следующем виде [11, 12, 15]:

$$G_p^n(\mathbf{k}_t)=\int\prod_{i=1}^{n}f_p(\mathbf{p}_{ti})\cdot\delta\left(\mathbf{k}_t-\sum_{i=1}^{n}\mathbf{p}_{ti}\right)d^2p_{ti},$$

где $n$ – число мягких перерассеяний, которые испытал выбитый кварк при прохождении через ядерную материю толщиной $T(\mathbf{b}, z)$ с прицельным параметром $\mathbf{b}$; $T(\mathbf{b}, z)$ нормировано на число возможных взаимодействий для образовавшихся адронов ($A - 1$) т. е.

$$T(\mathbf{b},z)=(A-1)\int_{z}^{+\infty}\rho\left(\mathbf{b}^*,z'\right)dz',$$

где $\rho(\mathbf{b}, z')$ – ядерная плотность; $f_p\left(\mathbf{p}^*_{ti}\right)$ – дифференциальное кварк-нуклонное сечение взаимодействия, нормированное на единицу;

$$f_p(\mathbf{p}_{ti})=\frac{1}{\sigma}\frac{d^2\sigma}{dp_{ti}^2}.$$

Распределение кварков по поперечному импульсу после одного рассеяния $f_p\left(\mathbf{p}^*_{ti}\right)$ может быть записано в следующем виде [11, 12, 15]:

$$f_p(\mathbf{p}_{ti})=\frac{B^2}{2\pi}e^{Bp_{ti}},$$

где $B=2/\langle k_p\rangle$ ($\langle k_p\rangle$ – среднее значение поперечного импульса кварка).

Вероятность испытать кварку $n$ мягких перерассеяний может быть записана как [15]

$$P_n=\frac{1}{n!}\left[\sigma T(\mathbf{b},z)\right]^n e^{\sigma T\left(\mathbf{b}^*,z\right)},$$

где $\sigma$ – неупругое кварк-нуклонное сечение.

### Результаты и их обсуждение

Эффекты, связанные с адронизацией и многократными мягкими перерассеяниями, были реализованы в Монте-Карло-генераторе HARDPING 2.0. Проведено моделирование лептон-ядерных столкновений. Полученные результаты сравнивались с данными, полученными коллаборацией HERMES [13] (рис. 1, 2).

Представленные результаты моделирования показывают хорошее согласие модели HARDPING с экспериментальными данными колла-

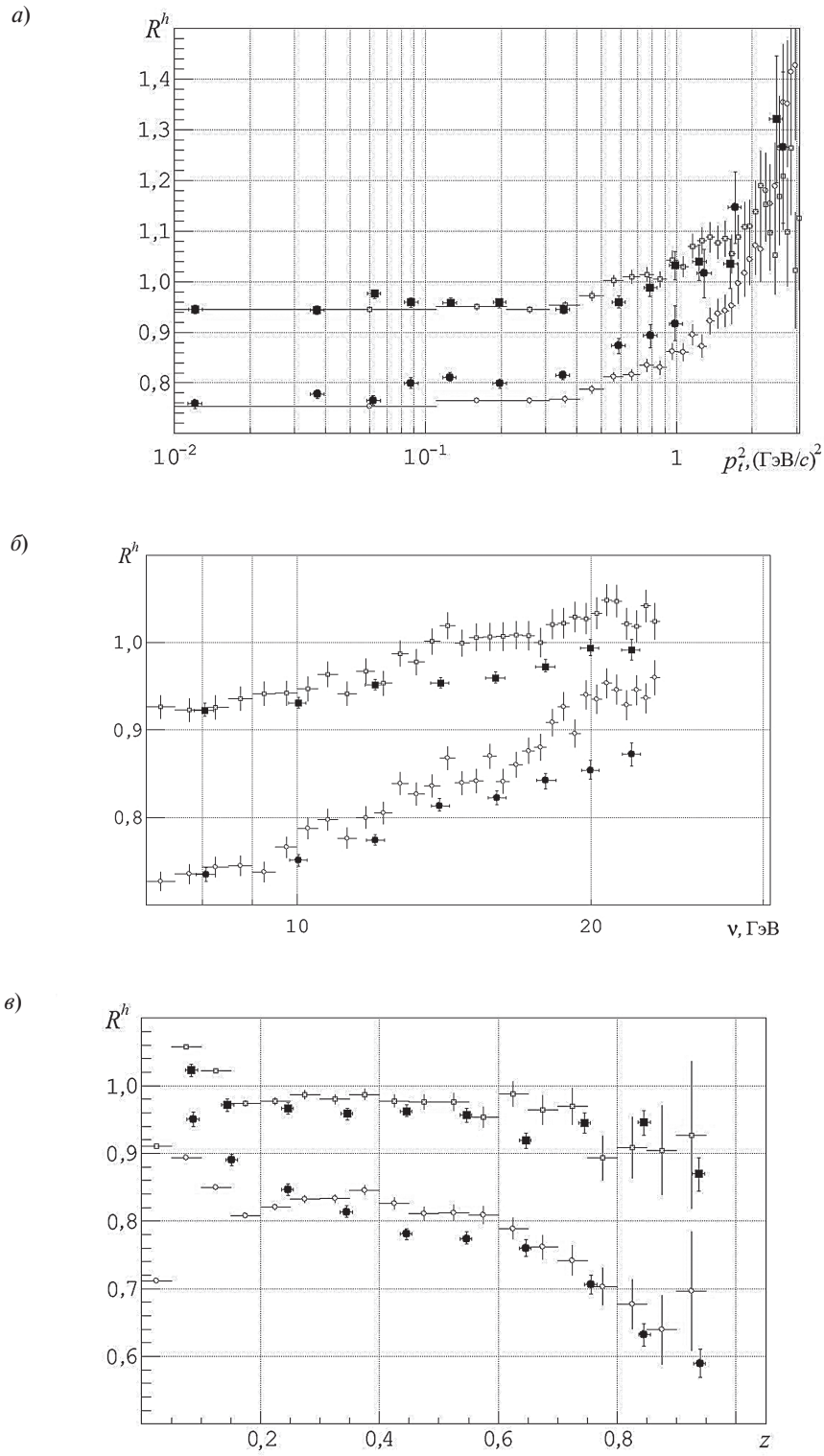



Рис. 1. Отношение множественностей заряженных адронов для азотной и дейтонной (темные и светлые квадратные маркеры), а также криптонной и дейтонной (темные и светлые круглые маркеры) мишеней как функция квадрата поперечного импульса (*а*), энергии (*б*) и доли импульса (*г*) виртуального фотона
Приведены данные HERMES [13] (черные маркеры) и моделирования HARDPING (светлые маркеры)

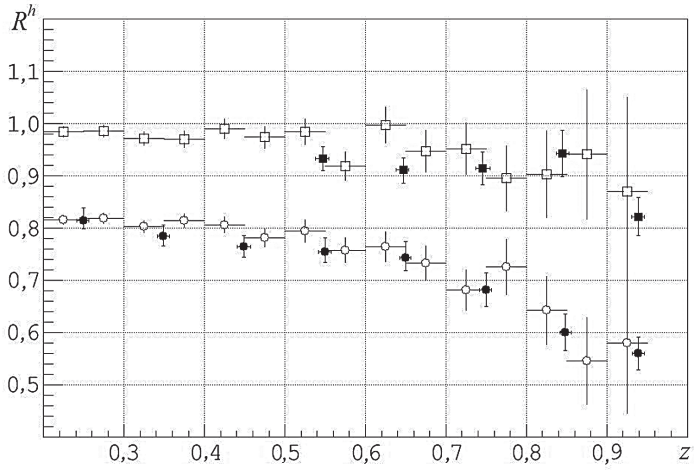



Рис. 2. Отношение множественностей $\pi^+$-мезонов для азотной и дейтонной (темные и светлые квадратные маркеры), а также для криптонной и дейтонной (темные и светлые круглые маркеры) мишеней как функция доли импульса $z$, переданного фотоном адрону при энергии позитронов 27,6 ГэВ.
Приведены данные HERMES [13] (черные маркеры) и моделирования HARDPING (светлые маркеры)

борации HERMES. Сравнение с экспериментальными данными позволило зафиксировать некоторые параметры модели, например кварк-нуклонное сечение взаимодействия ($\sigma = 13$ мбн) и натяжение струны ($k = 2$ ГэВ/фм).

Итак, создана модель Монте-Карло HARDPING 2.0 жестких лептон-ядерных столкновений, в которую включены эффекты, связанные с длиной формирования и многократными мягкими перерассеяниями. Разработанный генератор HARDPING 2.0 позволяет моделировать глубоконеупругие лептон-ядерные столкновения. Это позволило зафиксировать параметры модели и перейти к созданию следующей версии генератора HARDPING, которая даст возможность моделировать жесткие адрон-ядерные соударения.

Данная работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы; контракт № 02.740.11.0572 и грантом РФ NS-3383.2010.2.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kopeliovich, B.Z.** Nuclear hadronization: Within or without? [Текст] / B.Z. Kopeliovich, J. Nemchik, E. Predazzi, A. Hayashigaki // Nucl. Phys. – 2004. – Vol. A740. – P. 211–244.

2. **Baier, R.** Energy loss in perturbative QCD [Текст] / R. Baier, D. Schiff, B.G. Zakharov // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. – 2000. – Vol. 50. – P. 37–85.

3. **Baier, R.** Radiative energy loss of high energy quarks and gluons in a finite volume quark-gluon plasma [Текст] / R. Baier, Y.L. Dokshitzer, A.H. Mueller, [et al.] // Nucl. Phys. – 1997. – Vol. B484. – P. 265–271.

4. **Levin, E.M.** Froissart boundary for deep inelastic structure function [Текст] / E.M. Levin // Phys. Lett. – 1996. – Vol. B380. – P. 399–416.

5. **Gyulassy, M.** The role of jet quenching in the anti-p greater than or equal to pi- anomaly at RHIC [Текст] / M. Gyulassy, P. Levai, I. Vitev // Nucl. Phys. – 2001. – Vol. B594. – P. 371–384.

6. **Accardi, A** Hadron production in deep inelastic lepton-nucleus scattering [Текст] / A. Accardi, V. Muccifora, H.J. Pirner // Nucl. Phys. – 2003. – Vol. A720. – P. 131–157.

7. **Accardi, A.** Atomic mass dependence of hadron production in deep inelastic scattering on nuclei [Текст] / A. Accardi, D. Grunewald, V. Muccifora, H.J. Pirner // Nucl. Phys. – 2005. – Vol. A761. – P. 67–96.

8. **Domdey, S.** Transverse momentum broadening in semi-inclusive DIS on nuclei [Текст] / S. Domdey,

D. Grunewald, B.Z. Kopeliovich, H.J. Pirner // Nucl. Phys. – 2009. – Vol. A825. – P. 3–19.

9. **Sjostrand, T.** Pythia 6.4 physics and manual [Текст] / T. Sjostrand, S. Mrenna, P. Skands // J. High Energy Phys. – 2006. – Vol. 05. – P. 026–47.

10. **Gyulassy, M.** HIJING 1.0: A Monte Carlo program for parton and particle production in high-energy hadronic and nuclear collisions [Текст] / M.Gyulassy, X.N. Wang // Comput. Phys. Commun. – 1994. – Vol. 83. – P. 307–319.

11. **Berdnikov, Ya.A.** Initial state nuclear effects in proton-nucleus collisions [Текст] / Ya.A. Berdnikov, V.T. Kim, V.F. Kosmach, [et al.] // Eur. Phys. J. – 2005. – Vol. A26. – P. 179–183.

12. **Бердников, Я.А.** Ядерные эффекты при образовании лептонных пар в адрон-ядерных соударениях [Текст] / Я.А. Бердников, М.Е. Завацкий, В.Т. Ким [и др.] // Ядерная физика. – 2006. – Т. 69. – С. 467–481.

13. **Airapetian, A.** Quark fragmentation to $\pi^{+/-}$, $\pi^0$, $K^{+/-}$, $p$, $p$ in nuclear environment [Текст] / A. Airapetian, N. Akopov, V. Amarian [et al.] // Phys. Lett. – 2003. – Vol. B577. – P. 37–44.

14. **Ashman, J** Comparison of forward hadrons produced in muon interactions on nuclear targets and deuterium [Текст] / EMC Coll., J. Ashman [et al.] // Z. Phys. – 1991. – Vol. C52. – P. 1–11.

15. **Ефремов, А.В.** Природа ЕМС эффекта [Текст] / А.В. Ефремов, В.Т. Ким, Г.И. Лыкасов // Ядерная физика. – 1986. – Т. 44. – С. 241–249.

УДК 517.9

*Т.А. Шемякина*

# ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ВАРИАНТОВ СИСТЕМЫ ФРАНКЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА

Математические модели многих физических процессов описываются системой Ф.И. Франкля, представляющей собой систему двух квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y} - P(x,y,u(x,y),v(x,y))\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial x} = 0; \\ \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x} \pm Q(x,y,u(x,y),v(x,y))\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial y} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

при этом $P(x,y,u(x,y),v(x,y)) \geq p_0 > 0$, $Q(x,y,u(x,y),v(x,y)) \geq q_0 > 0$ ($p_0, q_0$ – константы).

При определенных условиях такая система описывает стационарное безвихревое течение газа в дозвуковых, сверхзвуковых и трансзвуковых областях [1]. Известная система Коши – Римана является частным случаем системы Франкля. Частные варианты системы Франкля встречаются в теории переноса нейтронов, теории термоупругости и тому подобных.

Изучению условий разрешимости задачи Коши для эллиптических уравнений посвящена обширная литература. Впервые устойчивость плоской задачи Коши в классе ограниченных функций доказал Т. Карлеман [2]. Для линейных эллиптических уравнений задача Коши рассматривалась в работах М.М. Лаврентьева [3], Е.М. Ландиса [4]; в них получены условия существования классического решения в классе ограниченных функций. Однако для системы Франкля, т. е. системы квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка в эллиптическом случае, задача Коши мало изучена. Кроме того, в большинстве случаев определение границ интервала разрешимости и нахождение решения в исходных переменных является трудноразрешимой задачей. В рамках метода дополнительного аргумента [5] в работах [6–9] удалось преодолеть эти трудности и определить условия локального существования ограниченного решения системы Франкля в эллиптическом случае.

Данная работа посвящена дальнейшему исследованию системы Франкля в эллиптическом случае – установлению требований к начальным условиям для разрешимости в явном виде задачи Коши.

### Постановка задачи

Рассмотрим систему Франкля (1) двух квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка в эллиптическом случае [8, 9]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y} - P(v(x,y))\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial x} = 0; \\ \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x} + Q(v(x,y))\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial y} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

где $P(v(x,y)) \geq p_0 > 0$, $Q(v(x,y)) \geq q_0 > 0$, $p_0, q_0$ – константы.

Поставим для системы уравнений (2) задачу Коши:

$$u(x,0)=\varphi(x),\quad v(x,0)=\psi(x). \qquad (3)$$

Решение задачи (2), (3) будем исследовать в области

$$\Omega=\{(x,y):-\infty<x<+\infty,\quad 0\le y\le Y,\quad Y>0\}.$$

Рассмотрим несколько вариантов системы Франкля. Но сначала исследуем пример Адамара методом дополнительного аргумента.

**Задача 1 (пример Адамара)**

Исследуем задачу Коши (2), (3) в следующем виде:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y}-\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial x}=0;\\ \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x}+\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial y}=0,\end{cases} \qquad (4)$$

при $P(v(x,y))=1;\ Q(v(x,y))=1$.

Определим для системы дифференциальных уравнений (4) условия Коши (3), где начальные функции представляются в виде

$$\varphi(x)=0;\ \psi(x)=-\frac{\cos kx}{k^2}.$$

Сначала исходная задача (4), (3) сводится к характеристической форме для функции $w(x,y)=u(x,y)+iv(x,y)$:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial w(x,y)}{\partial y}+i\dfrac{\partial w(x,y)}{\partial x}=0;\\ w(x,0)=u(x,0)+iv(x,0)=i\psi(x)=\\ \qquad =-i\dfrac{\cos kx}{k^2}=w_0(x).\end{cases}$$

Далее для нее, согласно методу дополнительного аргумента, запишем расширенную характеристическую систему:

$$\begin{cases}\dfrac{d\eta(x,y,s)}{ds}=i,\quad \eta(x,y,y)=x;\\ \dfrac{dw_1(x,y,s)}{ds}=0,\quad w_1(x,y,0)=w_0(\eta(x,y,0)).\end{cases}$$

Интегрируя последнюю систему дифференциальных уравнений, получим:

$$\begin{cases}\eta(x,y,s)=x-i(y-s),\ \eta(x,y,0)=x-iy;\\ w_1(x,y,s)=w_0(\eta(x,y,0))=-i\dfrac{\cos k(x-iy)}{k^2}=\\ =-i\{\exp(ikx+ky)+\exp(-ikx-ky)\}=\\ =\dfrac{\sin kx\cdot \mathrm{sh}ky}{k^2}+i\left(-\dfrac{\cos kx\cdot \mathrm{ch}ky}{k^2}\right).\end{cases}$$

В соответствии с доказанными теоремами из работ [6–9], решением задачи Коши (4), (3) будут функции

$$u(x,y)=\mathrm{Re}\,w_1(x,y,s)\big|_{s=y}=\frac{\sin kx\cdot \mathrm{sh}ky}{k^2};$$

$$v(x,y)=\mathrm{Im}\,w_1(x,y,s)\big|_{s=y}=-\frac{\cos kx\cdot \mathrm{sh}ky}{k^2}.$$

При данных начальных функциях решение будет существовать на любом ограниченном интервале по переменной $x$ в области $\Omega$, а при значениях $x\to\infty$ решение будет стремиться к бесконечности.

Рассмотрим задачу Коши (4), (3) с другими начальными данными:

$$\varphi(x)=0;\ \psi(x)=\frac{\exp\{-kx\}}{k^2};\ \ x\in[0,\infty);$$

тогда интегральная система уравнений примет следующий вид:

$$\begin{cases}\eta(x,y,s)=x-i(y-s),\ \eta(x,y,0)=x-iy;\\ w_1(x,y,s)=w_0(\eta(x,y,0))=i\dfrac{\exp(-kx+iky)}{k^2}=\\ =\dfrac{\exp(-kx)\sin ky}{k^2}+i\left[-\dfrac{\exp(-kx)\cos ky}{k^2}\right].\end{cases}$$

Решением задачи Коши (4), (3) будут функции

$$u(x,y)=\mathrm{Re}\,w_1(x,y,s)\big|_{s=y}=\frac{\exp(-kx)\sin ky}{k^2};$$

$$v(x,y)=\mathrm{Im}\,w_1(x,y,s)\big|_{s=y}=-\frac{\exp(-kx)\cos ky}{k^2},$$

при любом $x\in[0,\infty)$, а при значениях переменной $x\to\infty$ это решение стремится к нулю.

Этот пример показывает, что полученное решение изучаемой системы дифференциальных уравнений выражается через начальные функции $\varphi,\psi$. Свойства решений и условия

существования зависят от условий, накладываемых на эти начальные функции.

**Задача 2**

Вариант задачи Коши (2), (3) представлен следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y} - v^{-1}(x,y)\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial x} = 0; \\ \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x} + v^{-1}(x,y)\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial y} = 0; \end{cases} \qquad (5)$$

при этом

$$P(v(x,y)) = v^{-1} \geq p_0 > 0;$$

$$Q(v(x,y)) = v^{-1} \geq p_0 > 0;$$

($p_0$ – константа) с заданными начальными условиями Коши (3).

Преобразуем задачу (5), (3), сделав замену переменных:

$$\omega(x,y) = \ln v(x,y); \;\; v(x,y) = \exp\{\omega R(x,y)\};$$

$$\omega(x,0) = \ln v(x,0) = \ln \psi(x) = \omega_0(x);$$

где

$$\omega R(x,y) = \operatorname{Re}\omega(x,y), \quad \omega I(x,y) = \operatorname{Im}\omega(x,y);$$

тогда имеем следующую задачу относительно функций $u(x,y), \omega(x,y)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y} - \dfrac{\partial \omega(x,y)}{\partial x} = 0; \\ \dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x} + \dfrac{\partial \omega(x,y)}{\partial y} = 0; \end{cases} \qquad (6)$$

$$u(x,0) = \varphi(x); \;\; \omega(x,0) = \omega_0(x). \qquad (7)$$

Задачу Коши (6), (7) приведем к характеристической форме для функции $w(x,y) = ( \; , \; ) \quad ( \; , \; ) = u(x,y) + i\omega(x,y)$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial w(x,y)}{\partial y} + i\dfrac{\partial w(x,y)}{\partial x} = 0; \\ w(x,0) = u(x,0) + i\omega(x,0) = \\ = \varphi(x) + i\omega_0(x) = w_0(x). \end{cases}$$

Применяя метод дополнительного аргумента, запишем расширенную характеристическую систему:

$$\begin{cases} \dfrac{d\eta(x,y,s)}{ds} = i, \quad \eta(x,y,y) = x; \\ \dfrac{dw_1(x,y,s)}{ds} = 0, \\ w_1(x,y,0) = w_0(\eta(x,y,0)). \end{cases}$$

Последнюю систему дифференциальных уравнений интегрируем и получаем:

$$\begin{cases} \eta(x,y,s) = x - i(y-s), \\ \eta(x,y,0) = x - iy; \\ w_1(x,y,s) = w_0(\eta(x,y,0)) = \\ = w_0(x-iy) = \varphi(x-iy) + i\omega_0(x-iy). \end{cases}$$

Согласно результатам работ [6–9], решением задачи Коши (6), (7) будут функции:

$$u(x,y) = \operatorname{Re} w_1(x,y,s)\big|_{s=y} = w_1 R(x,y,y);$$

$$\omega(x,y) = \operatorname{Im} w_1(x,y,s)\big|_{s=y} = w_1 I(x,y,y).$$

Определим $w_1 R(x,y,s)$, $w_1 I(x,y,s)$, если функции $\varphi(x-iy)$, $\omega_0(x-iy)$ можно представить в виде

$$\varphi(x-iy) = \varphi R(x,y) + i\varphi I(x,y);$$

$$\omega_0(x-iy) = \ln\psi(x-iy) = \omega_0 R(x,y) + i\omega_0 I(x,y).$$

Тогда имеем:

$$\begin{aligned} w_1(x,y,s) &= \varphi(x-iy) + i\omega_0(x-iy) = \\ &= [\varphi R(x,y) - \omega_0 I(x,y)] + \\ &+ i[\varphi I(x,y) + \omega_0 R(x,y)]. \end{aligned}$$

Решением задачи Коши (6), (7) будут функции:

$$u(x,y) = \varphi R(x,y) - \omega_0 I(x,y);$$

$$\omega(x,y) = \varphi I(x,y) + \omega_0 R(x,y).$$

Вернемся к исходной функции $v(x,y)$:

$$v(x,y) = \exp\{\omega R(x,y)\} = \exp\{\varphi I(x,y) + \omega_0 R(x,y)\}.$$

Решением задачи Коши (5), (3) будут функции

$$u(x,y) = \operatorname{Re}\varphi(x-iy) - \operatorname{Im}\ln\psi(x-iy);$$

$$v(x,y) = \exp\{\operatorname{Im}\varphi(x-iy) + \operatorname{Re}\ln\psi(x-iy)\}.$$

Учитывая многозначность логарифмической функции в комплексной плоскости и

предполагая, что функцию $\psi(x-iy)$ можно представить в виде

$$\psi(x-iy)=\psi R(x,y)+i\psi I(x,y),$$

решение задачи Коши (5), (3) можно записать в другом виде. Введем новые переменные:

$$\rho(x,y)=\left\{\psi R^2(x,y)+\psi I^2(x,y)\right\}^{1/2};$$

$$\alpha(x,y)=\operatorname{arctg}\left(\frac{\psi I(x,y)}{\psi R(x,y)}\right);$$

тогда имеем:

$$\psi(x-iy)=\rho(x,y)\exp\{i\alpha(x,y\};$$

$$\ln\psi(x-iy)=\ln\rho(x,y)+i\alpha(x,y);$$

$$\begin{aligned}w_1(x,y,s)&=\varphi(x-iy)+i\omega_0(x-iy)=\\&=\varphi R(x,y)+i\varphi I(x,y)+\\&+i[\ln\rho(x,y)+i\alpha(x,y)]=\\&=[\varphi R(x,y)-\alpha(x,y)]+\\&+i[\varphi I(x,y)+\ln\rho(x,y)].\end{aligned}$$

Решение задачи Коши (6), (7) примет вид:

$$u(x,y)=\varphi R(x,y)-\alpha(x,y);$$

$$\omega(x,y)=\varphi I(x,y)+\ln\rho(x,y).$$

Вернемся к исходной функции $v(x,y)$:

$$\begin{aligned}v(x,y)&=\exp\{\omega R(x,y)\}=\\&=\exp\{\varphi I(x,y)+\ln\rho(x,y)\};\end{aligned}$$

$$v(x,y)=\rho(x,y)\exp\{\varphi I(x,y)\}.$$

Решением задачи Коши (5), (3) будут функции:

$$\begin{aligned}u(x,y)&=\operatorname{Re}\varphi(x-iy)-\\&-\operatorname{arctg}\left(\frac{\operatorname{Im}\psi(x-iy)}{\operatorname{Re}\psi(x-iy)}\right);\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}v(x,y)&=\{(\operatorname{Re}\psi(x-iy))^2+\\&+(\operatorname{Im}\psi(x-iy))^2\}^{1/2}\exp\{\operatorname{Im}\varphi(x-iy)\}.\end{aligned}$$

Для существования решения задачи Коши (5), (3) на начальные функции $\varphi(x),\psi(x)$ накладываем требование: они должны быть продолжены в комплексную плоскость, т. е. быть аналитическими, а функция $\psi(x)>0$.

**Задача 3**

Другой вариант задачи Коши (2), (3) представлен в следующем виде:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u(x,y)}{\partial y}-\dfrac{1}{v(x,y)}\left[1-\dfrac{v^2(x,y)}{2a_0^2}\right]\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial x}=0;\\[2ex]\dfrac{\partial u(x,y)}{\partial x}+\dfrac{1}{v(x,y)}\left[1-\dfrac{v^2(x,y)}{2a_0^2}\right]\dfrac{\partial v(x,y)}{\partial y}=0.\end{cases}\qquad(8)$$

при

$$\begin{aligned}&P(v(x,y))=Q(v(x,y))=\\&=v^{-1}\left(1-\frac{v^2}{2a_0^2}\right)\geq p_0>0;\end{aligned}$$

$$0<\frac{v(x,y)}{2^{1/2}a_0}<p_1<1;$$

($p_0,p_1,\ a_0,\ k^2=0,25a_0^{-2}$ – константы) с заданными начальными условиями Коши (3).

Преобразуем задачу (8), (3), сделав замену переменных:

$$\begin{aligned}\omega(x,y)&=\ln\frac{v(x,y)}{2a_0}-\left[\frac{v(x,y)}{2a_0}\right]^2=\\&=\ln(kv)-(kv)^2;\end{aligned}$$

$$\omega(x,0)=\ln(k\psi(x))-(k\psi(x))^2=\omega_0(x),$$

где $v(x,y)$ – решение уравнения

$$\ln\left[kv(x,y)\right]-\left[kv(x,y)\right]^2=\omega(x,y);\qquad(9)$$

тогда имеем задачу (6), (7) относительно функций $u(x,y),\omega(x,y)$.

Функции $u(x,y),\omega(x,y)$ найдены в задаче 2:

$$u(x,y)=\varphi R(x,y)-\omega_0 I(x,y);$$

$$\omega(x,y)=\varphi I(x,y)+\omega_0 R(x,y),$$

при условии, что начальные функции $\varphi(x-iy)$, $\omega_0(x-iy)$ можно представить в виде

$$\varphi(x-iy)=\varphi R(x,y)+i\varphi I(x,y);$$

$$\begin{aligned}\omega_0(x-iy)&=\ln\left[k\psi(x-iy)\right]-\left[k\psi(x-iy)\right]^2=\\&=\omega_0 R(x,y)+i\omega_0 I(x,y).\end{aligned}$$

Вернемся к функции $v(x,y)$ – решению уравнения (9). Данное уравнение решается аналитически с помощью специальной функции – $W$-функции Ламберта [10, 11]. Напомним ее определение [11]:

*Действительная $W$-функция Ламберта для действительного переменного $z$ определяется как решение функционального уравнения:*

$$W(z)\exp\big(W(z)\big)=z.$$

Другое определение: *$W$-функция Ламберта есть функция, обратная к функции $W=z\exp z$.*

$W$-функция Ламберта определена в интервале $(-e^{-1},\infty)$, где принимает значения из интервала $(-\infty,+\infty)$. Для отрицательных значений переменной $z$ функция двузначная. Точка с координатой $(-e^{-1},-1)$ делит график функции на две ветви: верхнюю $W_0(z)$, называемую основной, и нижнюю $W_{-1}(z)$, имеющую точку перегиба $(-2e^{-2},-2)$ и вертикальную асимптоту при значении $z=0$. В точке с координатами $(-e^{-1},-1)$ обе ветви имеют вертикальную касательную.

Перепишем уравнение (9) в виде

$$\ln\big(kv(x,y)\big)+\ln\exp\{-(kv(x,y))^2\}=\omega(x,y);$$

$$0,5\ln[(kv(x,y))^2\exp\{-2(kv(x,y))^2\}]=\omega(x,y);$$

$$\{-2(kv)^2\}\exp\{-2(kv)^2\}=-2\exp(2\omega).$$

Введем обозначения

$$z:=-2\exp\{2\omega(x,y)\};$$

$$W(z):=-2(kv(x,y))^2$$

и получим функциональное уравнение

$$W(z)\exp\{W(z)\}=z.$$

Решением последнего уравнения будет $W$-функция Ламберта:

$$[-2(kv(x,y))^2]=W\left\{-2\exp\left[2\omega(x,y)\right]\right\};$$

$$-0,5a_0^{-2}v^2(x,y)=W\left\{-2\exp\left[2\omega(x,y)\right]\right\},$$

$$v(x,y)=\left[-2a_0^2W\left\{-2\exp\left[2\omega(x,y)\right]\right\}\right]^{1/2}.$$

Решением задачи Коши (8), (3) будут функции:

$$u(x,y)=\operatorname{Re}\varphi(x-iy)-$$
$$-\operatorname{Im}[\ln k\psi(x-iy)-(k\psi(x-iy))^2];$$

$$v(x,y)=\left[-2a_0^2W\left\{-2\exp\left[2\varphi I+2\omega_0R(x,y)\right]\right\}\right]^{1/2}=$$
$$=[-2a_0^2W(-2\exp\{2\operatorname{Im}\varphi(x-iy)+$$
$$+2\operatorname{Re}(\ln k\psi(x-iy)-k^2\psi^2(x-iy))\})]^{1/2}.$$

По условию задачи имеем:

$$0<\frac{v(x,y)}{2^{1/2}a_0}<p_1<1;$$

т. е. справедливо неравенство

$$0<-W(-2\exp\{2\omega(x,y)\})<p_1^2<1.$$

В этом случае областью определения $W$-функции Ламберта будет интервал, для которого выполняются соотношения:

$$-2\exp\{2\omega(x,y)\}\in(-e^{-1},0);$$

$$-\exp\{\ln 2+2\omega(x,y)\}\in(-e^{-1},0),$$

откуда следует, что

$$\ln 2+2\omega(x,y)<-1;$$

$$-\infty<\omega(x,y)<-0,5(1+\ln 2).$$

А поскольку мы получили, что

$$\omega(x,y)=\varphi I(x,y)+\omega_0R(x,y),$$

условия на начальные функции имеют вид

$$-\infty<\operatorname{Im}\varphi(x-iy)+\operatorname{Re}[\ln k\psi(x-iy)-$$
$$-(k\psi(x-iy)^2]<-0,5(1+\ln 2).$$

Аналогично задаче 2, решение задачи Коши (8), (3) можно записать в другом виде, учитывая обозначения переменных $\rho(x,y)$, $\alpha(x,y)$ и тригонометрические соотношения

$$\sin 2\alpha(x,y)=\frac{2\operatorname{Re}\psi(x-iy)\cdot\operatorname{Im}\psi(x-iy)}{\rho^2(x,y)};$$

$$\cos 2\alpha(x,y)=\frac{(\operatorname{Re}\psi(x-iy))^2-(\operatorname{Im}\psi(x-iy))^2}{\rho^2(x,y)};$$

тогда имеем:

$$\psi(x-iy)=\rho(x,y)\exp\{i\alpha(x,y\};$$

$$\omega_0(x-iy)=\ln[k\psi(x-iy)]-[k\psi(x-iy)]^2=$$
$$=\ln k\rho(x,y)+i\alpha(x,y)-k^2\rho^2(x,y)\exp\{2i\alpha(x,y)\}=$$
$$=\ln k\rho(x,y)+i\alpha(x,y)-k^2\rho^2(x,y)(\cos 2\alpha+$$
$$+i\sin 2\alpha)=[\ln k\rho-k^2\rho^2\cos 2\alpha]+$$
$$+i[\alpha-k^2\rho^2\sin 2\alpha].$$
$$w_1(x,y,s)=\varphi(x-iy)+i\omega_0(x-iy)=$$
$$=\varphi R(x,y)+i\varphi I(x,y)+i\{[\ln k\rho-k^2\rho^2\cos 2\alpha]+$$
$$+i[\alpha-k^2\rho^2\sin 2\alpha]\}=$$
$$=[\varphi R(x,y)-\alpha(x,y)+k^2\rho^2(x,y)\sin 2\alpha]+$$
$$+i[\varphi I(x,y)+\ln k\rho(x,y)-k^2\rho^2(x,y)\cos 2\alpha].$$

Решение задачи Коши (6), (7) примет вид:

$$u(x,y)=\varphi R(x,y)-\alpha(x,y)+k^2\rho^2(x,y)\sin 2\alpha=$$
$$=\operatorname{Re}\varphi(x-iy)-\operatorname{arctg}\frac{\operatorname{Im}\psi(x-iy)}{\operatorname{Re}\psi(x-iy)}+$$
$$+2k^2\operatorname{Re}\psi(x-iy)\cdot\operatorname{Im}\psi(x-iy);$$
$$\omega(x,y)=\varphi I(x,y)+\ln k\rho(x,y)-k^2\rho^2(x,y)\cos 2\alpha=$$
$$=\operatorname{Im}\varphi(x-iy)+0,5\ln[\operatorname{Re}^2\psi(x-iy)+$$
$$+\operatorname{Im}^2\psi(x-iy)]-\ln k-k^2[(\operatorname{Re}\psi(x-iy))^2-$$
$$-(\operatorname{Im}\psi(x-iy))^2].$$

Вернемся к функции $v(x,y)$ – решению уравнения (9):

$$v(x,y)=\{-2a_0^2W(-2\exp\{2\omega(x,y)\})\}^{1/2}.$$

Решением задачи Коши (8), (3) будут функции:

$$u(x,y)=\operatorname{Re}\varphi(x-iy)-\operatorname{arctg}\frac{\operatorname{Im}\psi(x-iy)}{\operatorname{Re}\psi(x-iy)}+$$
$$+2k^2\operatorname{Re}\psi(x-iy)\cdot\operatorname{Im}\psi(x-iy);$$
$$v(x,y)=[-2a_0^2W(-2k^2[\psi R^2(x-iy)+$$
$$+\psi I^2(x-iy)]\cdot\exp\{2\varphi I(x-iy)-$$
$$-2k^2[\psi R^2(x-iy)+\psi I^2(x-iy)]\})]^{1/2}.$$

Для существования решения задачи Коши (8), (3) накладываем требование на начальные функции $\varphi(x)$, $\psi(x)$, аналогичные требованию для существования решения задачи Коши (5), (3); эти функции должны быть продолжены в комплексную плоскость, то есть быть аналитическими, а функция $\psi(x)>0$.

Итак, в данной работе рассмотрены примеры, где получено точное аналитическое решение задачи Коши для эллиптических систем квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка. Решение представлено в явном виде и в исходных переменных, а также точно через начальные данные определены границы интервала разрешимости.

В рамках метода дополнительного аргумента удалось выявить качественные эффекты и свойства решений, определить условия существования классического решения. В частности, представление решения задачи с помощью функции Ламберта указало на условия, где возникают сложности в исследовании проблемы и перехода системы уравнений от эллиптического к гиперболическому виду.

Приведенные примеры важны для качественного исследования и численного тестирования более сложных систем уравнений. Сами примеры могут использоваться как тестовые для исследования алгоритмов численных решений прикладных задач.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Франкль, Ф.И.** Избранные труды по газовой динамике [Текст] / Ф.И. Франкль. – М.: Наука, 1973. – 712 с.

2. **Carleman, T.** Les fonctions quasi analytiques [Текст] / T. Carleman. – Paris: Gauthier-Villars, 1926. – 132 c

3. **Ландис, Е.М.** Некоторые вопросы качественной теории эллиптических и параболических уравнений [Текст] / Е.М. Ландис // Успехи математических наук. – 1959. – т. XIV. – Вып. 1. – № 85. – С. 21–86.

4. **Лаврентьев, М.М.** О задаче Коши для уравнения Лапласа [Текст] / М.М Лаврентьев // Изв. АН СССР. Сер. Матем. – 1956. – № 20. – С. 819–842.

5. **Alekseenko, S.N.** A basic scheme to investigate two first order quasi-linear partial differential equations [Текст] / S.N. Alekseenko // Analytical and Approximate Methods / H.-P. Blatt, R. Felix, L.G. Lelevkina, M. Sommer (Eds.) Intern. Conf. at the Kyrgyz-Russian-Slavic University. Bishkek – Aachen: Shaker Verlag, 2003. – P. 1–14.

6. **Алексеенко, С.Н.** Локальное существование ограниченного решения системы Франкля в эллиптическом случае [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина, В.С. Чезганов // Исслед. по интегро-дифф. уравнениям. – Бишкек: Илим, 2006. – Вып. 35. – С. 148–152.

7. **Алексеенко, С.Н.** Построение расширенной характеристической системы для системы Франкля в эллиптическом случае [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина, В.Б. Балакирева // Труды Средневолжского матем. об-ва: докл. III Междунар. науч. школы. Ульяновск, 2007. –Т. 9. – № 1. – С. 53–61.

8. **Алексеенко, С.Н.** Построение расширенной характеристической системы для идеального газа в эллиптическом случае [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина // Журнал Средневолжского математического общества. – 2009. – Т.11. – № 2. – С. 57–60.

9. **Алексеенко, С.Н.** Построение расширенной характеристической системы уравнений для частного случая системы Франкля эллиптического типа [Текст] / С.Н. Алексеенко, Т.А. Шемякина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2009. – № 3 (83). – С. 73 – 82.

10. **Corless, R.M.** On the Lambert W function [Текст] / R.M. Corless, G.H. Gonnet, D.E.J. Hare [et al.] //Adv. Comput. Math. – 1996. –Vol. 5. – P. 329–359.

11. **Дубинов, А.Е.** *W*-функция Ламберта и ее применение в математических задачах физики [Текст] / А.Е. Дубинов, И.Д. Дубинова, С.К. Сайков. – Саров: РФЯЦ– ВНИИЭФ, 2006. –169 с.

УДК 534

*С.В .Булович, В.В. Григорьев, С.Н. Исаков, Р.Л. Петров*

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПУЛЬСИРУЮЩЕГО ИСТЕЧЕНИЯ ГАЗА ИЗ РЕСИВЕРА

Нестационарное истечение газа из ресивера исследовалось экспериментально [1, 2] и теоретически [3, 5]. При этом, как правило, рассматривался закритический режим истечения, в той или иной степени моделирующий ситуацию разгерметизации сосуда. Известны технические устройства, например пульсационные охладители газа, где пульсирующее течение газа в тупиковом канале реализуется при помощи вращающегося золотника. Различные аспекты работы подобных устройств представлены в монографии [6]. Пульсирующий режим течения газа в трубах характерен для питающих линий поршневых машин, например, в системах резонансного наддува [7].

Существует несколько приемов создания пульсирующего потока газа. Это могут быть конструкции поршневого типа, вращающиеся золотники или быстрооткрывающиеся клапанные устройства. Привлекательным достоинством последних является возможность гибкого регулирования длительности и скважности импульса при умеренной частоте срабатывания клапана.

В настоящей статье исследуется нестационарное движение газа в виде свободной струи или течения в канале, возникающее вследствие работы быстродействующего клапанного устройства [8]. В качестве рабочей среды был использован воздух.

Экспериментальная установка допускала работу в двух вариантах. В первом пульсирующее истечение газа из ресивера объемом $25 \cdot 10^{-3}$ м$^3$ осуществлялось непосредственно в атмосферу. Во втором варианте к выходу запорного элемента была присоединена труба диаметром $D = 0{,}046$ м и длиной $L = 4{,}5$ м. В сечениях трубы $l_1$–$l_4$, составлявших 0,25; 2,22; 3,40 и 4,39 м, были установлены пьезоэлектрические датчики давления. Давление в ресивере контролировалось при помощи тензодатчика.

Начальные значения давления и температуры газа в ресивере составляли 0,2 МПа и 292 К соответственно. Значения тех же величин для области истечения газа – 0,1 МПа и 292 К.

Быстродействующий клапан схематично представлен на рис. 1. Клапан состоит из двух основных узлов: корпуса *1* (с седлом *2*) и направляющей *3* (с колпаком *4*). В «открытом» состоянии колпак клапана сдвинут по направляющей влево, в «закрытом» – прижат к седлу. При пневматическом управлении положение колпака клапана зависит от уровней давления под колпаком и на наружной его поверхности. Изменение давления в полости под колпаком происходит при помощи электромагнитного клапана *5*, который обеспечивает коммутацию полости под колпаком клапана с двумя пневматическими линиями. Одна из них – это линия высокого давления *6* (например, давление в ресивере), другая – линия низкого давления *7* (давление в области истечения газа). В настоящем исследовании клапан имел проходное сечение диаметром $d = 0{,}04$ м.

Быстродействие клапана зависит от ряда факторов: разности давлений на внутренней и

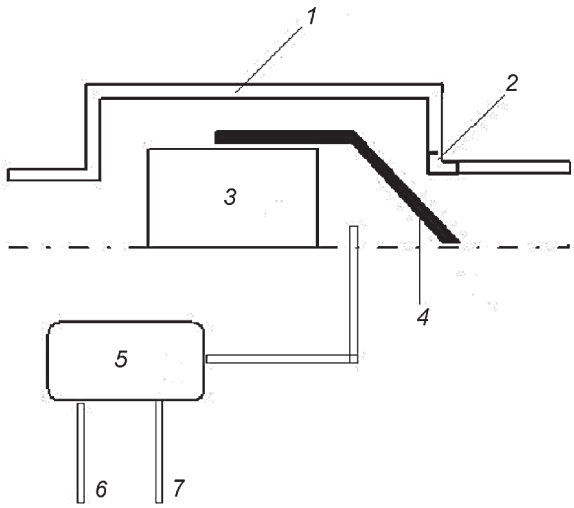



Рис. 1. Схема быстродействующего клапана и его системы управления:
*1* – корпус; *2* – его седло; *3* – направляющая; *4* – ее колпак; *5* – электромагнитный клапан; *6*, *7* – линии высокого и низкого давления

наружной поверхностях его колпака, пропускной способности электромагнитного клапана, технических зазоров между колпаком клапана и направляющей; причем быстродействие может изменяться в несколько раз. В частности, для умеренных избыточных давлений оно характеризуется временем открытия клапана менее 5 мс (по замерам непосредственного перемещения колпака клапана), что позволяет работать с частотой до 100 Гц.

Управление работой электромагнитного клапана осуществлялось при помощи блока цифро-аналогового преобразователя платы L-386 фирмы «L-Card». Регистрация сигналов производилась при помощи блока аналого-цифрового преобразователя той же платы.

Программа управления работой электромагнитного клапана позволяет создавать произвольные по длительности последовательности открытого и закрытого состояний запорного элемента. В проведенном исследовании влияния частоты срабатывания клапана на расход газа из ресивера была выбрана постоянная скважность импульсов, равная двум. При этом суммарное время открытого состояния клапана оставалось неизменным и равным 0,2 с (независимо от частоты), а общее время управления работой клапана составляло 0,4 с. В ряде опытов при работе установки во втором варианте время регистрации сигналов превышало значение 0,4 с, что позволило измерить свободные затухающие колебания газа как в системе ресивер-труба, так и в трубе, закрытой с одного торца запорным элементом. Для полуоткрытой трубы частота акустических колебаний составила около 18 Гц, что хорошо согласуется с оценкой по линейной теории. Для системы ресивера с присоединенной трубой, которая представляет собой резонатор Гельмгольца, частота оказалась равной примерно 2 Гц, что также соответствует характеристике системы в акустическом приближении. В последнем случае из-за неполного геометрического соответствия исследуемой системы резонатору Гельмгольца (горло резонатора не должно иметь большое удлинение, а в нашем случае оно составляло 100), на фоне низкочастотных колебаний видна гармоника собственных колебаний газа в трубе, открытой с двух торцов (~36 Гц).

В силу того, что время истечения газа из ресивера много меньше времени установления его теплового равновесия со стенками сосуда в ресивере, процесс истечения можно считать близким к адиабатическому и при обработке экспериментальных данных связывать давление и плотность газа в ресивере адиабатой Пуассона. По истечении времени релаксации (2–3 мин) температура газа в ресивере вновь уравнивалась с температурой окружающей среды, и в ресивере устанавливалось давление, соответствующее изотермическому процессу; это позволяло по измеренному давлению в ресивере и известной температуре рассчитывать плотность газа, пользуясь уравнением состояния в форме закона Менделеева–Клапейрона.

Заметим, что регистрация давления не только по значению на момент времени 0,4 с, но и по достижению газом термодинамического равновесия позволяла осуществлять дополнительный контроль массы газа в ресивере. Разность между значениями массы газа, оставшейся после эксперимента в ресивере, определенными двумя разными методами, составляла менее 3 %; разницу можно объяснить небольшой утечкой массы через уплотнения в магистрали напуска газа в ресивер за время релаксации.

Результаты исследования для обоих вариантов представлены на рис. 2. Экспериментальные точки и аппроксимирующие кривые показыва-

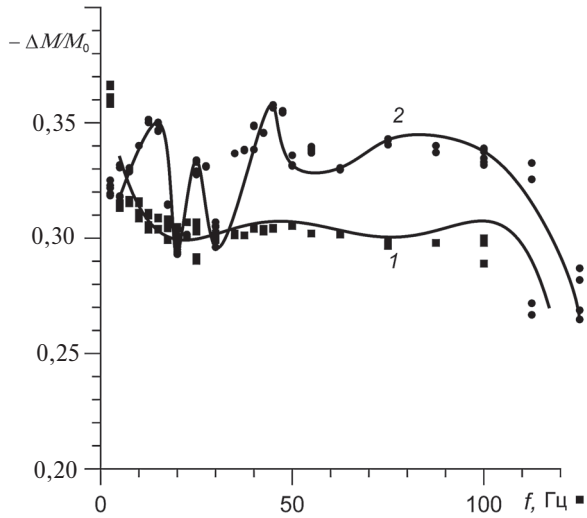



Рис. 2. Зависимости относительной массы газа, покинувшей ресивер, от частоты срабатывания клапана для первого (*1*) и второго (*2*) вариантов; символы – эксперимент, линии – аппроксимирующие кривые

ют зависимость вытекшей за 0,4 с из ресивера массы газа $\Delta M/M_0$ (по отношению к начальной массе $M_0$) от частоты работы клапана.

Приведенные на рис. 2 экспериментальные данные позволяют заключить следующее:

пульсирующее истечение газа из ресивера в первом варианте происходит при меньших значениях расхода газа, чем в квазистационарном (одиночном) открытии запорного элемента;

расход газа из ресивера в первом варианте слабо зависит от частоты срабатывания запорного элемента;

резкое снижение расхода при частоте свыше 100 Гц связано с нарушением функциональных возможностей клапана на высоких частотах;

присоединение к ресиверу трубы приводит к возникновению резонансных режимов истечения газа. Для рассматриваемого варианта геометрических характеристик ресивера и трубы увеличение (уменьшение) расхода истекающего газа составляет примерно 20 %. Отчетливо проявляющиеся максимумы расхода газа соответствуют частотам 15, 25 и 47,5 Гц. Минимумы обнаружены на частотах 20,0 и 27,5 Гц;

сопоставление кривых *1* и *2* позволяет заключить, что при пульсирующем истечении газа из ресивера присоединение трубы как правило, приводит к увеличению расхода; исключение составляют узкие интервалы частот около обнаруженных минимумов.

Далее приведем некоторые дополнительные соображения относительно наблюдаемых явлений.

В частности, обратим внимание на то, что при квазистационарном истечении газа присоединение трубы приводит к уменьшению расхода газа. Этот факт объясняется дополнительным гидравлическим сопротивлением трубы.

Увеличение расхода газа из ресивера при умеренных частотах (10—100 Гц) во втором варианте по отношению к первому связано с состоянием газа в окрестности запорного элемента. Выделим здесь два фактора. Во-первых, без присоединенной трубы течение в окрестности запорного элемента носит характер течения от точечного источника. Когда присоединяется труба, интенсивность возмущений в окрестности запорного элемента не зависит от расстояния до него. Волны сжатия и разрежения вместо сферических (первый вариант) становятся плоскими (второй вариант). Во-вторых, во втором варианте возникают интенсивные возмущения, отраженные от открытого конца трубы, что отсутствует в первом варианте. Возмущения могут приводить как к повышению, так и понижению давления в трубе по отношению к исходному (атмосферному) давлению на открытом конце трубы. Таким образом, в зависимости от уровня давления в трубе в окрестности запорного элемента на определенных частотах наблюдаются как максимумы, так и минимумы расхода газа.

Несоответствие наблюдаемых частот максимального и минимального расходов газа приведенным выше акустическим оценкам для элементов исследуемой системы (резонатора Гельмгольца, полуоткрытой и полностью открытой трубы) связано с двумя обстоятельствами. Главным из них является смена геометрических характеристик системы, приводящая к изменению типа граничного условия (открытие или закрытие запорного элемента). Другое существенное обстоятельство – это большая амплитуда газодинамических возмущений, что, очевидно, ограничивает применение моделей линейной акустики.

В заключение отметим два наиболее интересных, на наш взгляд, результата работы, связанные с выполненными исследованиями.

Первый результат – создание экспериментального комплекса с основным элементом – оригинальным быстродействующим клапаном большого проходного сечения. Комплекс позволяет создавать импульсные потоки газа с частотой до 100 Гц, в том числе и с переменной скважностью.

Второй результат – сравнение результатов исследования пульсирующего истечения газа из ресивера непосредственно в атмосферу и через подсоединенный к ресиверу канал показало, что волновые процессы в канале могут приводить к увеличению массового расхода в широком диапазоне частот, несмотря на влияние вязкости, уменьшающей массовый расход.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


1. **Дулов, В.Г.** Газодинамика процессов истечения [Текст] / В.Г. Дулов, Г.А. Лукьянов. – Новосибирск: Наука. Сиб. отд., 1984. – 232 с.

2. **Проджелхоф, Р.К.** Быстрое опорожнение цилиндрического сосуда с газом через сопло [Текст] / Р.К. Проджелхоф, Дж.А. Овчарек // Ракет. техника и космонавтика. – 1963. – № 9. – С. 209–210.

3. **Ашратов, Э.А.** Течения газа в соплах и струях [Текст] / Э.А. Ашратов, Т.Г. Волконская, Г.С. Росляков // Газоаэромеханика и космические исследования. – М.: Наука, 1985. – С. 116–136.

4. **Сидняев, Н.И.** Численное решение задачи об истечении газа из замкнутого объема в атмосферу [Текст] / Н.И. Сидняев // Письма в ЖТФ. – 2005. Т. 31. – Вып. 1. – С. 17–23.

5. **Архипов, В.А.** К гипотезе квазистационарности при истечении газа из ресивера [Текст] / В.А. Архипов, А.П. Березиков, В.Ф. Трофимов // Прикладная механика и техническая физика. – 2004. – Т. 45. – № 4. – С. 50–57.

6. **Архаров, А.М.** Криогенные системы [Текст]: в 2 т. Т. 1. Основы теории и расчета. Изд. 3-е. / А.М. Архаров, И.В. Марфенина, Е.И. Микулин.– М.: Машиностроение, 1996. – 576 с.

7. **Крайко, А.Н.** Математическое моделирование течения в волновом роторе и сравнение с экспериментальными данными [Текст] / А.Н. Крайко, Н.И. Тилляева // Аэромеханика и газовая динамика. – 2002. – № 1. – С. 36–49.

8. **Патент РФ № 2005249. Российская Федерация ПМК[7] F16K031/12.** Пусковой клапан для импульсных течений [Текст] / Исаков С.Н., Исаков И.Н.; заявитель и патентообладатель ТОО «Ista». – № 05035993; опубл. 30.12.1993, Бюл. № 47–48–3с.

*А.С. Зильберглейт, Е.В. Галактионов, А.Н. Златин, Э.А. Тропп*

# НИКОЛАЙ НИКОЛАЕВИЧ ЛЕБЕДЕВ (к столетию со дня рождения)

Николай Николаевич Лебедев (1911–1994) (Фотография предоставлена из фондов Историко-технического музея СПбГПУ)

Николай Николаевич Лебедев родился 1 мая 1911 года в семье сельских врачей на Украине. В детстве до 14 лет он получал домашнее образование, а в 1925 году он переехал в Ленинград к своим тетушкам по линии отца и поступил сразу в шестой класс средней школы. В 1928 году ему выдали аттестат зрелости и он поступил на физико-механический факультет Ленинградского политехнического института (ЛПИ), который окончил в 1932 году, получив квалификацию инженера-физика, как написано в дипломе, – «по отделению высоких напряжений». Его как дипломированного специалиста направили на работу в Ленинградский электрофизический институт («отпочковавшийся» от Физико-технического института) и одновременно пригласили на преподавательскую работу ассистентом на кафедру высшей математики ЛПИ, где он и проработал под руководством академика С.Н. Бернштейна до начала войны.

В 1941 году Н.Н. Лебедев ушел добровольцем в Красную Армию и прослужил большую часть войны (1942 – 1945) преподавателем в Чкаловском училище зенитной артиллерии (г. Чкалов – название г. Оренбурга в 1938 – 1957 гг.).

В ноябре 1945 года после демобилизации Николай Николаевич поступил на работу в Физико-технический институт АН СССР и одновременно вернулся к преподавательской работе в ЛПИ. И в научном, и в учебном заведениях он проработал практически до конца своей жизни (в отделе математической физики Физико-технического института и на кафедре математической физики политехнического).

Еще студентом, обладая необыкновенными математическими способностями, Николай Николаевич обратил на себя внимание преподавателя теоретической физики и теоретической механики, профессора Георгия Абрамовича Гринберга, ставшего впоследствии членом-корреспондентом АН СССР (1946 г.) и основателем кафедры математической физики ЛПИ. Любовь к математической физике связала этих ученых практически на всю жизнь.

Уже в 1938 году совместно с молодым доцентом кафедры теоретической физики ЛПИ (выпускником Ленинградского электротехнического института им. В.И. Ульянова (Ленина)) – Михаилом Иосифовичем Конторовичем Николай Николаевич открыл интегральное преобразование, которое стало впоследствии классическим для математической физики и получило название преобразования Конторовича – Лебедева. Обоснование и применение открытия к задачам математической физики

стало одной из основных составных частей докторской диссертации, защищенной им в 1951 году.

В составе кафедры теоретической физики образовалась группа математической физики, возглавляемая профессором Г.А. Гринбергом, в которой работал и Н.Н. Лебедев. Эта группа в послевоенное время стала основой отдельной кафедры математической физики (образована в 1946 г.). В 1947 году Николай Николаевич стал доцентом, а в 1954 году – профессором этой кафедры; заведующим кафедрой он был в период с 1952 по 1986 год (с небольшими перерывами).

Таким образом, Николай Николаевич проработал на кафедре математической физики Ленинградского политехнического института почти полвека, будучи многие годы заведующим кафедрой и бессменным лектором, обучившим несколько поколений (т. е. несколько тысяч!) физмеховцев, учившихся на механическом потоке факультета. Н.Н. Лебедева отличал незаурядный дар преподавательской деятельности; его лекционные курсы постоянно привлекали студентов ЛПИ и других слушателей своим содержанием и ясностью изложения материала. Еще в 1955 году вышел его «Сборник задач по математической физике» (в соавторстве с И.П. Скальской и Я.С. Уфляндом).

Область научных интересов Николая Николаевича Лебедева – математическая физика и ее приложения к различным областям физики и техники. Им опубликовано почти 70 работ, посвященных теории интегральных преобразований, теории специальных функций, задачам дифракции и распространения электромагнитных волн, а также другим проблемам математической физики. Книга Н.Н. Лебедева «Специальные функции и их приложения» (М.: Гос. изд-во техн.-теор. лит-ры, 1953) хотя и вышла как учебное пособие, но по сути является монографией; она получила широкое признание, переведена на несколько иностранных языков, до сих пор не утратила своей актуальности и используется учеными всего мира. Совсем не случайно в 2010 году вышло очередное издание книги (г. Санкт-Петербург, издательство «Лань»).

Память об этом исключительно одаренном ученом, специалисте мирового уровня и блестящем педагоге хранит Санкт-Петербургский политехнический университет и, в частности, физико-механический факультет и кафедра математической физики.

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

## КОНТАКТНЫЕ ДАННЫЕ

**АКСЕНОВ Евгений Тимофеевич** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 550-04-30
aksenov@acop.neva.ru

**АСТАПОВА Елена Степановна** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического материаловедения и лазерных технологий Амурского государственного университета.*
675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
(4162) 39-45-01
yastapova@mail.ru

**БАГРАЕВ Николай Таймуразович** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)292-73-15
bagraev@mail.ioffe.ru

**БАЙКО Денис Алексеевич** – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник межфакультетской научной лаборатории астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, научный сотрудник сектора теоретической астрофизики ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
(812)292-71-80
baiko@astro.ioffe.ru

**БЕРДНИКОВ Александр Ярославич** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

**БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович** – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
berdnikov@spbstu.ru

**БОЧАРОВА Татьяна Викторовна** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-76-21
levisor@mail.ru

**БРИЛИНСКАЯ Елена Станиславовна** – *аспирантка кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-77-90
lyalka-bes@rambler.ru

**БРОНВАЛЬД Юрий Алексеевич** – *студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-73-33
yuramel@gmail.com

**БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-66-21
bulovich@ista-pneumatics.ru

**БУРКОВСКИЙ Роман Георгиевич** – *кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-73-33
roman.burkovsky@gmail.com

**БЫКОВ Андрей Михайлович** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры космических исследований Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, заведующий лабораторией астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
8(812) 292-71-80
byk@astro.ioffe.ru

**ВАСИЛЬЕВ Геннадий Иванович** – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник межфакультетской научной лаборатории астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник лаборатории астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
(812)292-71-60
Gennady.Vasilyev@mail.ioffe.ru

**ВАСИЛЬЕВА Алена Геннадьевна** – *кандидат физико-математических наук, магистрант кафедры технологии стекла и общей технологии силикатов Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).*
190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26
(812)315-09-78
nattag@mail.ru

**ВАХРУШЕВ Сергей Борисович** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-73-33
s.vakhrushev@mail.ioffe.ru

**ГАЛАКТИОНОВ Евгений Валентинович** – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812)297-03-83
galakt.ammp@mail.ioffe.ru

**ГЛАЗДОВСКАЯ Марина Михайловна** – *выпускница радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-76-21
kapralova2006@yandex.ru

**ГРИГОРЬЕВ Василий Васильевич** – *старший электроник кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-66-21
aero@phmf.spbstu.ru

**ГРИГОРЬЕВ Михаил Юрьевич** – *Ph. D., заведующий лабораторией университета Поля Сабатье, г. Тулуза, Франция.*
31062 - Toulouse Cedex 9, Bâtiment IBCG 118, Route de Narbonne
+33 (0)5 61 33 59 19
Mikhail.Grigoriev@ibcg.biotoul.fr

**Е Цзо-Гуан (YE Zuo-Guang)** – *Ph.D., профессор, заведующий лабораторией, декан химического факультета Университета Саймона Фрейзера, Канада.*
8888 University Drive, Burnaby, B.C. Canada V5A 1S6
778-782-8064
zye@sfu.ru

**ЖГУТОВ Владимир Михайлович** – *кандидат технических наук, докторант кафедры технологии, организации и экономики строительства Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 535-79-92
abc_kitezht@mail.ru

**ЗАКРЕВСКИЙ Владимир Александрович** – *доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812) 292-7312
v.zakrevsky@mail.ioffe.ru

**ЗИЛЬБЕРГЛЕЙТ Александр Самуилович** – *доктор физико-математических наук, профессор Стэнфордского университета, США.*
CA 94305–4085, USA
8(812)297-03-83.
gleit@stanford.edu

**ЗЛАТИН Андрей Никитич** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-79-59
anzlat@yandex.ru

**ИВАНОВ Алексей Евгеньевич** – *аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
alexey.ivanov86@gmail.com

**ИВАНОВ Валерий Иванович** – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической механики Дальневосточного государственного университета путей сообщения.*
680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, 47
тел. (4212)40-73-76
ivanov@festu.khv.ru

**ИЛАТОВСКИЙ Андрей Владимирович** – *младший научный сотрудник отделения молекулярной и радиационной биофизики Петербургского института ядерной*

*физики им. Б. П. Константинова; младший научный сотрудник НИО физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
194021, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 9/2
(812) 297-31-41
andreyi@omrb.pnpi.spb.ru

**ИСАКОВ Сергей Николаевич** – *кандидат технических наук, старший научный сотрудник кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, генеральный директор НПП «Иста».*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-66-21
aero@phmf.spbstu.ru

**КАПРАЛОВА Виктория Маратовна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.29
(812)552-76-21
kapralova2006@yandex.ru

**КАРЯКИН Юрий Евгеньевич** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, директор центра «Техническая диагностика и надежность АЭС и ТЭС».*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 290-98-72
yu_kar@mail.ru

**КАФИДОВА Галина Александровна** – *аспирантка кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 550-04-30
gkafidova@gmail.com

**КИМ Виктор Тимофеевич** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
victor.t.kim@gmail.com

**КЛЯЧКИН Леонид Ефимович** - *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)292-73-15
klyachkin@mail.ioffe.ru

**КОВАЛЕВСКИЙ Дмитрий Валерьевич** – *кандидат физико-математических наук, руководитель группы Международного центра по окружающей среде и дистанционному зондированию им. Нансена, старший научный сотрудник лаборатории теории ядра и элементарных частиц отдела теоретической физики физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета.*
199034, г. Санкт-Петербург, В.О., 14-я линия, 7
(812)324-51-03
198504, г. Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Ульяновская ул. , 3
(812)428-45-15
dmitry.kovalevsky@niersc.spb.ru, d_v_kovalevsky@list.ru

**КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич** – *доктор технических наук, профессор кафедры физической электроники, научный руководитель экспертно-аналитического отдела по экспертизе комплексных международных проектов Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)297-20-88
korablev@ums.stu.neva.ru

**КОРСУН Мария Михайловна** – *кандидат технических наук, младший научный сотрудник кафедры прикладной математики Новосибирского государственного технического университета.*
630077, г. Новосибирск, ул. Костычева, 13
(383) 346-27-76
maria.korsun@gmail.com

**КРАСИЛЬЩИКОВ Александр Михайлович** – *кандидат физико-математических наук, заместитель заведующего межфакультетской научной лабораторией астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник лаборатории астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
(921)7467023
kra@astro.ioffe.ru

**КУЗИН Андрей Анатольевич** – *старший преподаватель кафедры теоретической механики Дальневосточного государственного университета путей сообщения.*
680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, 47
(4212)40-73-76
kuzin@festu.khv.ru

**ЛИВАШВИЛИ Альберт Ильич** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики Дальневосточного государственного университета путей сообщения.*
680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, 47
(4212)40-73-76
livbru@mail.ru

**МАЛЯРЕНКО Анна Михайловна** – *кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории атомной радиоспектроскопии Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812)292-73-15
malyarenko@mail.ioffe.ru

**МАРКОВ Сергей Иванович** – *доктор физико-математических наук, профессор, директор научно-производственного комплекса Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-74

**МИРОНОВ Владимир Олегович** – *аспирант кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая, ул., 29
(812)552-75-16
vladimir.mironov@ymail.com

**МОКРОВА Дарья Всеволодовна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
550-04-30
dashkeria@gmail.com

**МОКРУШИН Юрий Михайлович** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-63-14
yrmok@yandex.ru

**МОРОЗ Андрей Петрович** – *аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
andrey.p.moroz@gmail.com

**МУРЗИН Виктор Александрович** – *аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
victor.murzin@gmail.com

**НАКОЗИНА Алена Андреевна** – *студентка физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета.*
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9.
(812)428-44-05
nakozina_alena@inbox.ru

**ОСИПОВА Наталия Геннадьевна** – *студентка кафедры физики и математического моделирования в механике (ИМОП) Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195299, г. Санкт-Петербург, Гражданский пр., 125-2-90
(812)531-56-06
natalie_os@mail.ru

**ПАВЛОВ Владимир Владимирович** – *студент радиофизического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-16
vova-gt@yandex.ru

**ПАВЛОВ Георгий Георгиевич** – *кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией МФНЛ Астрофизики объектов с экстремальным энерговыделением Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, старший научный сотрудник, профессор Пенсильванского государственного университета, США.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
(812) 552-79-54
pavlov@astro.psu.edu

**ПАВЛОВ Федор Федорович** – *ассистент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-74
f.pavlov@tuexph.stu.neva.ru

**ПАСТОР Александр Александрович** – *кандидат физико-математических наук, доцент НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-98-09
pastor273@gmail.com

**ПЕТРОВ Виктор Михайлович** – *доктор физико-математических наук, профессор, декан радиофизического факультета, заведующий кафедрой квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 550-04-30
vikpetroff@mail.ru

**ПЕТРОВ Руслан Леонидович** – *кандидат технических наук, доцент кафедры гидроаэродинамики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-66-21
aero@phmf.spbstu.ru

**ПЕТУХОВ Михаил Геннадьевич** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, ведущий научный сотрудник отделения молекулярной и радиационной биофизики Санкт-Петербургского института ядерной физики РАН им. Б. П. Константинова.*

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 297-31-41
michael.petukhov@gmail.com

**ПРОХОРОВА Татьяна Владимировна** – *ведущий инженер ОАО «Научно-производственное объединение по исследованию и проектированию энергетического оборудования им. И.И. Ползунова».*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 24
(812) 717-23-79
tv.prokhorova@mail.ru

**РАДОМСКИЙ Виктор Сергеевич** – *аспирант Амурского государственного университета.*
675027, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
(4162) 39-45-01
vitek1715@yandex.ru

**РОМАНОВ Владимир Викторович** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-77-90
romanov@phmf.spbstu.ru

**РОЯК Михаил Эммануилович** – *доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики Новосибирского государственного технического университета.*
630007, г. Новосибирск, Каинская ул., 8б
(383) 346-27-76,
mikeroyak@gmail.com

**РУДЕНКО Егор Дмитриевич** – *студент физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09,
bghton@gmail.com

**САБАНЦЕВ Антон Владимирович** - *аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-98-09,
sabantsev.a.v@gmail.com

**САФОНОВ Алексей Сергеевич** – *студент физико-механического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
gantu@mail.ru

**СЕМЁНОВ Артем Семенович** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-63-03
Semenov.Artem@googlemail.com

**СЕРДОБИНЦЕВ Павел Юрьевич** – *кандидат физико-математические наук, старший научный сотрудник НОЦ «Нанобиотехнологии» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-98-09
serdobintsev@rambler.ru

**СЕРЕБРЯКОВ Александр Сергеевич** – *кандидат физико-математических наук, заместитель генерального директора по науке ЗАО «КОМИТА».*
197101, г. Санкт-Петербург, ул. Рентгена, 1
(812) 346-11-11.
alexs@comita.ru

**СПИРИН Денис Олегович** – *ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-75-31
ssdenis@mail.ru

**СТЕПАНОВА Тамара Павловна** – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН.*
199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр.В.О., 31
(812)328-85-35
t_stepanova@mail.ru

**СТЕПАНОВА Татьяна Рудольфовна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-77-90
trsban@mail.telix.ru

**СУДАРЬ Николай Тобисович** – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-7621
sudar53@mail.ru

**СЫСОЕВ Дмитрий Сергеевич** – *аспирант кафедры прикладной физики и оптики твердого тела Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)590-80-20
dssysoev@mail.ru

**ТАГИЛЬЦЕВА Наталья Олеговна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры технологии стекла и общей технологии силикатов Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).*
190013, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26
(812)315-09-78
nattag@mail.ru

**ТИМОФЕЕВ Николай Александрович** – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой оптики Санкт-Петербургского государственного университета.*
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9.
(812)428-44-05
niktimof@yandex.ru

**ТРОПП Эдуард Абрамович** – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Физико-технического института им А.Ф.Иоффе РАН.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
(812)297-03-83.
tropp@spbrc.nw.ru

**ФЕДОРОВИЧ Евгений Данилович** – *доктор технических наук, профессор кафедры компьютерных технологий и эксперимента в теплофизике Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 294-42-76
efed1@yandex.ru

**ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович** – *кандидат физико-математических наук, директор научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов», доцент кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-73-33
filimonov@rphf.spbstu.ru

**ФОТИАДИ Александр Эпаминондович** – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-73-33
fotiadi@rphf.spbstu.ru

**ХЕ Владимир Канчерович** – *аспирант, преподаватель кафедры физики Дальневосточного государственного университета путей сообщения.*
680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, 47
(4212)40-73-76
yangseong@mail.ru

**ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич** – *кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ПНИЛ инженерно-строительного факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812)552-98-09
khodorkovskii@mail.ru

**ХОЛУПЕНКО Евгений Евгеньевич** – *кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории астрофизики высоких энергий ФТИ им. А.Ф. Иоффе, научный сотрудник МНФЛ АОЭЭ Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
(812)292-71-80
eugene@astro.ioffe.ru

**ЧЕРВЯКОВА Дарья Борисовна** – *кандидат биологических наук, научный сотрудник отделения молекулярной и радиационной биофизики Петербургского института ядерной физики РАН им. Б.П. Константинова.*
188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ПИЯФ
(812) -297-31-41,
dashach066@mail.ru

**ШАЦКАЯ Людмила Александровна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики и физики нефтегазового производства Самарского государственного технического университета.*
443100 г. Самара, Молодогвардейская ул., 244
(846) 242-45-44
ludmilad@rambler.ru

**ШАЦКИЙ Александр Владимирович** – *кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры общей физики и физики нефтегазового производства Самарского государственного технического университета.*
443100, г. Самара, Молодогвардейская ул., 244
(846) 242-45-44
iskandar2003@mail.ru.

**ШВЕЦОВ Алексей Валерьевич** – *младший научный сотрудник отделения молекулярной и радиационной биофизики Петербургского института ядерной физики РАН им. Б. П. Константинова.*
188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова Роща, ПИЯФ
(813) 714-66-60
alexxy@omrb.pnpi.spb.ru

**ШЕМЯКИНА Татьяна Алексеевна** – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*
195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
(812) 552-67-50
sh_tat@mail.ru

**ШУХАЕВ Сергей Викторович** – *врач-офтальмохирург 2-го хирургического отделения Санкт-Петербургского филиала ФГУ МНТК «Микрохирургия глаза» имени академика С.Н. Федорова Росмедтехнологии.*
192283, г. Санкт-Петербург, ул. Ярослава Гашека, 21
(812) 771-16-16
Shukhaevsv@gmail.com

# АННОТАЦИИ

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Аксенов Е.Т., Кафидова Г.А., Мокрова Д.В., Петров В.М. КОНТРОЛЬ КОНЦЕНТРАЦИИ ГЛЮКОЗЫ В БИОТКАНЯХ МЕТОДОМ КОГЕРЕНТНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИМЕТРИИ.

В статье рассмотрена возможность регистрации динамики концентрации глюкозы в крови человека по параметрам поляризации обратнорассеянного излучения видимого диапазона. Изложены основные теоретические предпосылки и результаты предварительных экспериментов.

ГЛЮКОМЕТРИЯ. ПОЛЯРИМЕТРИЯ. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ СХЕМА. ДАТЧИК. ЛАЗЕР.

Баграев Н.Т., Брилинская Е.С, Клячкин Л.Е., Маляренко А.М., Романов В.В. ЭФФЕКТЫ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА И ДЕ ГААЗА – ВАН АЛЬФЕНА В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ.

Эффекты Шубникова – де Гааза (ШдГ) и де Гааза – Ван Альфена (дГВА), которые позволяют идентифицировать наличие размерного квантования энергии и момента в твердом теле, анализируются в рамках классического представления о формировании уровней Ландау в условиях продольного движения носителей в трехмерных и двумерных системах. Возможности методов на основе эффектов ШдГ и дГВА в качестве мощных инструментов для изучения процессов квантовой интерференции демонстрируются на примере исследований полупроводниковых наноструктур, размеры которых сравнимы с фермиевской длиной волны.

КВАНТОВАНИЕ ЛАНДАУ. ОСЦИЛЛЯЦИИ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА. ОСЦИЛЛЯЦИИ ДЕ ГААЗА – ВАН АЛЬФЕНА. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА. КВАНТОВАЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ.

Бердников Я.А., Иванов А.Е., Ким В.Т., Мурзин В.А. ОБРАЗОВАНИЕ АДРОНОВ В ЛЕПТОН-ЯДЕРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ.

Образование адронов в лептон-ядерных соударениях при высоких энергиях рассматривается в рамках создания Монте-Карло-генератора HARDPING (Hard Probe Interaction Generator). Исследуются такие эффекты, как длина формирования, энергетические потери и многократные перерассеяния образовавшихся адронов. Эти эффекты реализованы в настоящей версии HARDPING. Данные, полученные в эксперименте HERMES по рождению адронов в лептон-ядерных столкновениях, были описаны данной версией генератора HARDPING.

МОНТЕ-КАРЛО-ГЕНЕРАТОР. ДЛИНА ФОРМИРОВАНИЯ. ЛЕПТОН-ЯДЕРНОЕ РАССЕЯНИЕ. РОЖДЕНИЕ АДРОНОВ.

Бочарова Т.В., Тагильцева Н.О., Сысоев Д.С., Васильева А.Г. ВЛИЯНИЕ ИОНООБМЕННОЙ ОБРАБОТКИ И ГАММА-ОБЛУЧЕНИЯ НА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФОСФАТНЫХ СТЕКОЛ, АКТИВИРОВАННЫХ ЕВРОПИЕМ.

Спектроскопическое исследование борофосфатных стекол переменного щелочного состава, активированных европием, показало, что при замене лития на натрий в составе синтезированного стекла происходит изменение соотношения концентраций $Eu^{2+}/Eu^{3+}$ в сторону уменьшения концентрации ионов $Eu^{2+}$. Стекла переменного состава были подвергнуты ионообменной обработке, в результате которой в образцах наблюдалось изменение соотношения концентраций ионов $Eu^{2+}$ и ионов $Eu^{3+}$ в сторону увеличения концентрации ионов $Eu^{2+}$. Показано, что ионный обмен увеличивает количество дырочных радиационных центров $PO_4^{2-}$, возникающих в результате воздействия гамма-квантов на образцы исследуемых стекол.

БОРОФОСФАТНЫЕ СТЕКЛА. СПЕКТРОСКОПИЯ. ИОНООБМЕННАЯ ОБРАБОТКА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ. ГАММА-ОБЛУЧЕНИЕ.

Бронвальд Ю.А., Бурковский Р.Г., Филимонов А.В., Вахрушев С.Б., Фотиади А.Э., Е Цзо-Гуан. НАНОМАСШТАБНАЯ ГЕТЕРОФАЗНОСТЬ И ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА В ОБЛАСТИ МОРФОТРОПНОЙ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ.

В статье рассмотрены результаты исследования квазиупругого рассеяния синхротронного излучения на монокристаллическом образце цирконата-титаната свинца (ЦТС). Получено экспериментальное подтверждение гипотезы о двухфазности ЦТС в области морфотропной фазовой границы в исследуемом интервале температур.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ. ЦИРКОНАТ-ТИТАНАТ СВИНЦА. КВАЗИУПРУГОЕ ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ. СИНХРОТРОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. МОРФОТРОПНАЯ ФАЗОВАЯ ГРАНИЦА.

Булович С.В., Григорьев В.В., Исаков С.Н., Петров Р.Л. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПУЛЬСИРУЮЩЕГО ИСТЕЧЕНИЯ ГАЗА ИЗ РЕСИВЕРА.

Исследованы два варианта пульсирующего дозвукового истечения воздуха из ресивера с повышенным давлением в атмосферу: первый – непосредственно через запорный элемент, второй – через запорный элемент с присоединенной цилиндрической трубой большого удлинения. Получены зависимости расхода газа от частоты. Установлено, что для одних и тех же частот срабатывания запорного элемента в пульсирующем режиме течения газа наличие трубы может приводить к изменению расхода до 20 % на резонансных частотах и увеличению расхода в диапазоне умеренных частот (10 – 80 Гц).

ПУЛЬСИРУЮЩЕЕ ИСТЕЧЕНИЕ ГАЗА. МАССОВЫЙ РАСХОД. ВОЛНОВОЕ ДВИЖЕНИЕ. РЕСИВЕР. АКУСТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС. ЦИЛИНДРИЧЕСКАЯ ТРУБА.

Васильев Г.И., Холупенко Е.Е., Байко Д.А., Быков А.М., Красильщиков А.М., Павлов Г.Г. ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧЕРЕНКОВСКИХ ФОТОНОВ В СТВОЛЕ ШИРОКОГО АТМОСФЕРНОГО ЛИВНЯ, ВЫЗВАННОГО ГАММА-КВАНТОМ С ЭНЕРГИЕЙ 5 ГэВ.

В работе проведено моделирование широкого атмосферного ливня, порожденного первичным гамма-квантом с энергией 5 ГэВ, и исследовано пространственное распределение черенковского излучения от рождающихся в ливне ультрарелятивистских электронов и позитронов. Показано, что на высоте наблюдения 5 км, при значении магнитного поля 0,3 Гс среднее число черенковских фотонов, падающих на единицу поверхности от одного ливня, составляет 0,2 – 0,5 фотон/м$^2$ в зависимости от расстояния до оси ливня в пределах 200 м.

ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЕ. ЧЕРЕНКОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. ШИРОКИЕ АТМОСФЕРНЫЕ ЛИВНИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ. УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭЛЕКТРОНЫ.

Жгутов В.М. ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕРМОУПРУГОСТИ ОБОЛОЧЕК ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНЫ.

Разработаны математические модели деформирования оболочек переменной толщины (гладко-переменной толщины и ребристых), находящихся под действием механической нагрузки (статической или динамической) и стационарного температурного поля, учитывающие геометрическую нелинейность и поперечные сдвиги. Предложены уточненные геометрические соотношения для геометрически нелинейных задач и задач устойчивости.

ОБОЛОЧКИ ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНЫ (ГЛАДКО-ПЕРЕМЕННОЙ ТОЛЩИНЫ И РЕБРИСТЫЕ). ТЕРМОУПРУГОСТЬ. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ НЕЛИНЕЙНОСТЬ. ПОПЕРЕЧНЫЕ СДВИГИ.

Закревский В.А., Сударь Н.Т. РАБОТОСПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ.

В статье обсуждаются физические причины ограничения работоспособности органических светодиодов. Приводятся оценки долговечности органических материалов в сильных электрических полях.

ОРГАНИЧЕСКИЕ СВЕТОДИОДЫ. ДОЛГОВЕЧНОСТЬ. ПОЛИМЕРЫ. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОЛЯ.

Златин А.Н. НОВЫЕ КЛЮЧЕВЫЕ ПАРНЫЕ СУММАТОРНЫЕ УРАВНЕНИЯ, СВЯЗАННЫЕ С ЗАДАЧЕЙ ОСЕСИММЕТРИЧНОГО КРУЧЕНИЯ ПРОСТРАНСТВА СО СФЕРИЧЕСКОЙ ТРЕЩИНОЙ.

В работе с помощью метода парных уравнений получены точные элементарные решения одного класса сумматорных уравнений по присоединенным функциям Лежандра. Такие уравнения встречаются в осесимметричной задаче кручения бесконечного упругого пространства, ослабленного сферической трещиной.

СУММАТОРНЫЕ УРАВНЕНИЯ. МЕТОД ПАРНЫХ УРАВНЕНИЙ. ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ.

Иванов В.И., Кузин А.А., Ливашвили А.И., Хе В.К. ДИНАМИКА СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЙ ТЕПЛОВОЙ ЛИНЗЫ В ЖИДКОФАЗНОЙ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ СРЕДЕ.

Проанализированы процессы тепломассопереноса в бинарной жидкофазной смеси под действием излучения с учетом термодиффузионных потоков. Получено выражение для фокусного расстояния термоиндуцированной линзы, возникающей в результате самовоздействия светового поля.

САМОВОЗДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ. ТЕПЛОВАЯ ЛИНЗА. ТЕРМОДИФФУЗИЯ.

Ковалевский Д.В. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ КРОНИГА – ПЕННИ С ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ РЕШЕТКОЙ СЛУЧАЙНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ.

При помощи формализма матриц перехода решается задача о падении блоховской волны на полубесконечную одномерную решетку дельтообразных потенциальных барьеров случайной мощности (модифицированная модель Кронига – Пенни). Показано, что сколь угодно малая случайная некоррелированная добавка к периодическому потенциалу приводит к невозможности распространения в глубь решетки незатухающих блоховских волн, характерных для классической модели Кронига – Пенни. Рассчитана глубина затухания блоховской волны.

ЭЛЕКТРОНЫ. НЕУПОРЯДОЧЕННЫЕ СРЕДЫ. МОДЕЛЬ КРОНИГА–ПЕННИ. СЛУЧАЙНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ. ЛОКАЛИЗАЦИЯ.

Корсун М.М., Рояк М.Э. УЧЕТ ШИХТОВАННОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПРОЦЕССОВ.

В статье приводится описание технологии численного моделирования электромагнитных процессов, основанной на использовании векторного и скалярного потенциалов и учитывающей анизотропные свойства среды в виде тензоров магнитной проницаемости и электрической проводимости. Рассматриваются возможности использования этой технологии для учета влияния шихтованных материалов. Приведены результаты вычислительных экспериментов, демонстрирующих возможности использования предложенного метода.

ШИХТОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ. АНИЗОТРОПНЫЕ СРЕДЫ. ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ПРОЦЕССЫ. СКИН-ЭФФЕКТ.

Миронов В.О. РАЗРАБОТКА МЕТОДИК КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ДЛЯ МНОГОЛЕПЕСТКОВОГО КОЛЛИМАТОРА В ДИСТАНЦИОННОЙ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ.

Рассмотрены результаты тестирования работы 48-лепесткового коллиматора, установленного на линейном медицинском ускорителе электронов Mevatron Primus Siemens по данным пленочной дозиметрии. При тестировании проведена оценка положения гентри и коллиматора относительно нулевого уровня, положения лепестков коллиматора при вращении гентри и коллиматора, межлепестковой и межблочной утечек ионизирующего излучения; выполнена оценка фактора клина для функции виртуального клиновидного фильтра, а также анализ размера поля облучения. Даны практические рекомендации относительно назначения и периодичности калибровочных процедур для клинических условий.

МНОГОЛЕПЕСТКОВЫЙ КОЛЛИМАТОР. ПЛЕНОЧНАЯ ДОЗИМЕТРИЯ. КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА. АНАЛИЗ ПОГРЕШНОСТИ. ПАРАМЕТРЫ МЛК. ФИЗИЧЕСКИЙ И ВИРТУАЛЬНЫЙ КЛИНОВИДНЫЕ ФИЛЬТРЫ. ЛУЧЕВАЯ ТЕРАПИЯ.

Мокрушин Ю.М. ВЛИЯНИЕ НЕЛИНЕЙНОСТИ АКУСТООПТИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДУЛЯТОРЕ ИЗ ПАРАТЕЛЛУРИТА НА ФОРМИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ.

Теоретически исследовано влияние нелинейности акустооптического взаимодействия при больших амплитудах ультразвукового сигнала на эффективность дифракции света на звуке. Рассчитано искажение формы в гармоническом сигнале изображения после акустооптического модулятора выполненного из кристалла парателлурита.

АКУСТООПТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ. ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДИФРАКЦИИ. МОДУЛЯТОР. ЧАСТОТНО-КОНТРАСТНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА. ИНТЕНСИВНОСТЬ СВЕТА.

Мороз А.П., Серебряков А.С., Бердников Я.А. ЧИСЛЕННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ КОЛИЧЕСТВЕННОГО РЕНТГЕН-ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА ОБРАЗЦОВ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ.

Рассмотрены проблемы анализа неоднородных образцов рентген-флуоресцентным методом. Описана методика РФ-томографии, а также моделирующая программа.

РЕНТГЕН-ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ. НЕОДНОРОДНЫЕ ОБРАЗЦЫ. РФ-ТОМОГРАФИЯ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ.

Осипова Н.Г., Семёнов А.С. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ПОВЕДЕНИЯ ПЬЕЗОКЕРАМИКИ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДАМИ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЙ ГОМОГЕНИЗАЦИИ.

Исследуется возможность применения модели сегнетоэлектроупругого материала, основанной на определении эффективных свойств поликристалла методами конечно-элементной гомогенизации, для описания процессов циклического нагружения поликристаллической пьезокерамики. Представлены результаты конечно-элементного решения нелинейных связанных электромеханических задач для представительного объема поликристалла. Производится сравнение с результатами экспериментов при различных режимах нагружения.

ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСТВО. СЕГНЕТОЭЛАСТИКИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ. ГИСТЕРЕЗИС. ГОМОГЕНИЗАЦИЯ. МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.

Павлов В.В. ПРИНЦИП КОНФОРМНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ.

В статье рассматриваются двумерные электрические поля с идеальной фокусировкой. Излагается метод преобразования потенциала и траекторий заряженных частиц к конформным координатам посредством аппарата теории функций комплексного переменного. Демонстрируются различные трансформации поля Корсунского, и для одного из результатов преобразования вычисляется энергетическая дисперсия.

ИДЕАЛЬНАЯ ФОКУСИРОВКА. КОНФОРМНЫЕ КООРДИНАТЫ. КОМПЛЕКСНОЕ ПЕРЕМЕННОЕ. КОНФОРМНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ. ТЕОРЕМА ГУРСА. ДИСПЕРСИЯ.

Павлов Ф.Ф. ПОВЕДЕНИЕ ИНВАРИАНТНЫХ АМПЛИТУД НУКЛОН-НУКЛОННОГО РАССЕЯНИЯ.

Статья посвящена исследованию поведения инвариантных амплитуд нуклон-нуклонного рассеяния в зависимости от кинетической энергии одного из нуклонов в лабораторной системе отсчета в диапазоне от 800 до 2500 МэВ и переданного импульса. Находится явный вид инвариантных амплитуд, выраженных через спиральные амплитуды.

НУКЛОН. ПРОТОН. НЕЙТРОН. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ. СПИРАЛЬНОСТЬ. НУКЛОН-НУКЛОННЫЕ АМПЛИТУДЫ. ИНВАРИАНТНЫЕ АМПЛИТУДЫ.

Пастор А.А., Сердобинцев П.Ю., Тимофеев Н.А., Ходорковский М.А., Накозина А.А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ КАТОДОВ.

Работа посвящена исследованию взаимодействия импульсного лазерного излучения с твердыми образцами методами фемтосекундной лазерной спектроскопии отражения. Анализ временных зависимостей наведенного коэффициента отражения позволил определить время релаксации свободных носителей и сформулировать основы методики создания нанокомпозитных катодов на основе редкоземельных элементов с полупроводниковыми включениями.

РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫЕ МЕТАЛЛЫ. НАНОКОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ. ПОЛУПРОВОДНИКИ. ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ. КАТОДЫ.

Прохорова Т.В., Степанова Т.Р. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛЗУЧЕСТИ И РАЗРУШЕНИЯ ЖАРОПРОЧНОЙ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ P91.

Предложен расчетно-экспериментальный метод прогнозирования длительной прочности жаропрочных сталей на основе кинетических уравнений состояния материала по критерию повреждаемости с учетом изменения механизмов ползучести при различном уровне напряжений. Выполнено моделирование процесса ползучести при постоянном напряжении, учитывающее первую и третью стадии, с использованием феноменологической зависимости поврежденности в виде степенной и экспоненциальной функций от накопленной деформации ползучести мартенситной стали 10XCrMoVNb-9-1 (P91) при 625 °C.

УСТАНОВИВШАЯСЯ ПОЛЗУЧЕСТЬ. ПЕРВАЯ И ТРЕТЬЯ СТАДИИ ПОЛЗУЧЕСТИ. ФУНКЦИЯ ПОВРЕЖДЕННОСТИ. ДЛИТЕЛЬНАЯ ПРОЧНОСТЬ.

Радомский В.С., Астапова Е.С., Филимонов А.В. ФОРМИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ЦЕОЛИТ – НАНОЧАСТИЦЫ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ.

Исследована пористая структура цеолитов, модифицированных наночастицами железа и его оксида с помощью механического смешения. Модифицирование приводит к увеличению удельной поверхности и удельного объема пор цеолитов за счет увеличения микропористости.

ВЫСОКОКРЕМНЕЗЕМНЫЕ ЦЕОЛИТЫ. НАНОЧАСТИЦЫ. ПОРИСТАЯ СТРУКТУРА. МЕХАНИЧЕСКАЯ АКТИВАЦИЯ.

Руденко Е.Д., Сабанцев А.В., Швецов А.В., Илатовский А.В., Червякова Д.Б., Григорьев М.Ю., Петухов М.Г. АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕХАНИЗМОВ РАСТЯЖЕНИЯ КОРОТКИХ ФРАГМЕНТОВ ДВУХНИТЕВЫХ ДНК.

Разработаны алгоритмы и программное обеспечение для растягивания двунитевой ДНК произвольной последовательности и структуры с помощью ICM-Pro – пакета программ для молекулярного моделирования биомакромолекул. Исследованы различия структурных переходов в днДНК при растяжении за различные концы 3′и 5′.

днДНК. РАСТЯЖЕНИЕ. ВНУТРЕННИЕ КООРДИНАТЫ. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Спирин Д.О., Бердников А.Я., Марков С.И., Сафонов А.С. ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРА ДИСКРИМИНАЦИИ В МЕТОДЕ ДУАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ.

В работе рассматривается возможность улучшения дискриминации материалов по группам значений эффективного атомного номера при интроскопическом исследовании крупногабаритных объектов за счет установки предварительного фильтра тормозного излучения. Получены оптимальные значения параметров фильтра и дуальной энергии ускорителя для наилучшей дискриминации материалов.

ИНТРОСКОПИЯ. МЕТОД ДУАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ. БАЙЕС. ДИСКРИМИНАЦИЯ МАТЕРИАЛОВ.

Степанова Т.П. Глаздовская М.М., Капралова В.М. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ МЕЗОГЕНСОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИМЕРА.

Исследованы дипольные моменты полипентаметилен-2,4-(2,2,4,4-тетраметил)-силил-3-оксифумароил-бис-4-оксибензоната (пФУБ-Si) и его низкомолекулярного аналога дидецил-фумароил-бис-4-оксибензоната (ФУБ-10) и их изменение под действием внешнего ориентирующего электрического поля. Установлено, что в отсутствие поля температурный ход дипольного момента ПФУБ-Si симбатен температурному ходу дипольного момента его низкомолекулярного аналога. При наложении поля с напряженностью 10 кВ/см наблюдается инверсия знака изменения с температурой эффективного дипольного момента ПФУБ-Si, в области 50 °С проявляется конформационный переход. Фактор Кирквуда снижается с 0,94 при 20 °С до 0,35 при 70 °С.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ. ПОЛИМЕР. ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ. ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ.

Шацкий А.В., Шацкая Л.А. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ИМПЕДАНС ПЬЕЗОПЛАСТИНЫ, НАГРУЖЕННОЙ НА СРЕДУ ЧЕРЕЗ КОНТАКТНЫЙ СЛОЙ ЖИДКОСТИ.

На основании уравнений пьезоэффекта было получено выражение для электрического импеданса плоского пьезопреобразователя, нагруженного на среду через контактный слой жидкости. Показано, что наличие тонкого, сильно отражающего контактного слоя приводит к тому, что спектр собственных частот становится не эквидистантным, а добротность колебаний на порядок выше, чем таковая для пьезопластины, нагруженной непосредственно на среду.

АКУСТИЧЕСКИЕ ВОЛНЫ. УЛЬТРАЗВУК. ВОЗБУЖДЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ВОЛН. ПЬЕЗОЭФФЕКТ. УЛЬТРАЗВУКОВЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ.

Шемякина Т.А. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ВАРИАНТОВ СИСТЕМЫ ФРАНКЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА.

В работе приведены примеры, в которых получено точное аналитическое решение задачи Коши для эллиптических систем квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка. Решение представлено в явном виде и в исходных переменных.

Метод дополнительного аргумента как основной позволил выявить качественные причины некорректности решений и определить условия существования классического решения.

КВАЗИЛИНЕЙНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ ПЕРВОГО ПОРЯДКА. СИСТЕМА ФРАНКЛЯ. СИСТЕМА ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА. МЕТОД ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО АРГУМЕНТА. ФУНКЦИЯ ЛАМБЕРТА.

Шухаев С.В., Федорович Е.Д., Карякин Ю.Е., Кораблев В.В. ВЯЗКОУПРУГИЕ БИОПОЛИМЕРЫ: ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ В ОФТАЛЬМОЛОГИИ.

В статье рассмотрены проблемы изучения физико-механических свойств вязкоупругих биополимеров, применяемых в офтальмологии. Изложены технологии хирургического вмешательства при лечении катаракты глаза.

ВЯЗКОУПРУГИЕ БИОПОЛИМЕРЫ. ОФТАЛЬМОЛОГИЯ. КАТАРАКТА ГЛАЗА. ЛЕЧЕНИЕ КАТАРАКТЫ.

# ABSTRACTS

## KEYWORDS

Aksenov E.T., Kafidova G.A., Mokrova D.V., Petrov V.M. GLUCOSE CONCENTRATION TESTING IN THE BIOLOGICAL TISSUE BY COHERENT OPTICAL POLARIMETRY.

The possibility of glucose quantification monitoring in the human blood by polarization parameters of backscattered beam (the visible range) has been considered. The basic theoretical background and results of preliminary experiments are presented.

GLUCOMETRY. POLARIMETRY. DIFFERENTIAL SCHEME. SENSOR. LASER.

Bagraev N.T., Brilinskaya E.S., Klyachkin L.E., Malyarenko A.M., Romanov V.V. THE SHUBNIKOV – DE HAAS AND THE DE HAAS – VAN ALPHEN EFFECTS IN BULK CRYSTALS AND LOW-DIMENSION STRUCTURES.

The Shubnikov and de Haas (SdH) as well as de Haas and van Alphen (dHvA) effects that allow the identification of quantum-dimensional processes of the energy and magnetic moment in solids are analyzed within frameworks of the classical Landau level formation under the conditions of the prolonged movement of carriers in three- and two-dimensional systems. The methods that are based on the SdH and dHvA effects are possible to be used as the powerful instrument to study quantum interference processes for the studies of the semiconductor nanostructures, with the dimensions close to the Fermi wavelength.

LANDAU QUANTIZATION. SHUBNIKOV – DE HAAS OSCILLATIONS. DE HAAS – VAN ALPHEN OSCILLATIONS. EFFECTIVE MASS. QUANTUM INTERFERENCE.

Berdnikov Ya.A., Ivanov A.E., Kim V.T., Murzin V.A. HADRON PRODUCTION IN LEPTON-NUCLEUS INTERACTIONS AT HIGH ENERGIES.

Hadron production in lepton-nucleus interactions at high-energies is considered in framework of developing Monte Carlo (MC) generator HARDPING (Hard Probe Interaction Generator). Such effects as formation length, energy loss and multiple rescattering for produced hadrons are implemented into the HARDPING. Available data from HERMES on hadron production in lepton-nucleus collisions are described by the current version of the HARDPING generator in a reasonable agreement.

MONTE CARLO EVENT GENERATOR. FORMATION LENGTH. LEPTON-NUCLEUS SCATTERING. HADRON PRODUCTION.

Bocharova T.V., Tagil'tseva N.O., Sysoev D.S., Vasil'eva A.G. THE EFFECT OF THE ION-EXCHANGE TREATMENT AND GAMMA-IRRADIATION ON THE SPECTRA OF PHOSPHATE GLASSES DOPED WITH EUROPIUM.

Spectroscopic investigation of boron-phosphate glasses of variable alkali compositions, doped with europium, revealed growth of $Eu^{3+}$ concentration and reducement of $Eu^{2+}$ concentration in case of replacement of Li by Na. Glasses of variable compositions were treated in molten salt, as a result one could see growth of $Eu^{2+}$ concentration and reducement of $Eu^{3+}$concentration. It has been shown that ion-exchange treatment increases the amount of hole $PO_4^{2-}$ defects caused by gamma-radiation.

BORON-PHOSPHATE GLASSES. SPECTROSCOPY. ION-EXCHANGE TREATMENT. LUMINESCENCE. GAMMA-IRRADIATION.

Bronwald Yu.A., Burkovski R.G., Filimonov A.V., Vakhrushev S.B., Fotiadi A.E., Ye Z.-G. NANOSCALE HETEROPHASITY AND SYNCHROTRON RADIATION DIFFUSE SCATTERING IN LEAD ZIRCONATE TITANATE SINGLE CRYSTALS NEAR THE MORPHOTROPIC PHASE BOUNDARY.

The paper presents the results of quasielastic diffuse scattering of synchrotron radiation in lead zirconate titanate (PZT) single crystals. The experimental confirmation of the hypothesis of two-phase PZT near the morphotropic phase boundary in the investigated temperature range is achieved.

FERROELECTRIC. LEAD ZIRCONATE TITANATE. QUASIELASTIC DIFFUSE SCATTERING. SYNCHROTRON RADIATION. MORPHOTROPIC PHASE BOUNDARY.

Bulovich S.V., Grigoriev V.V., Isakov S.N., Petrov R.L. AN EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE PULSING GAS EFFLUX FROM THE RECEIVER.

Two alternative schemes of a pulsing subsonic air efflux from the receiver with an elevated pressure to the atmosphere have been investigated. The 1st efflux takes place only through the closing unit, the 2nd one – through the closing unit which has the attached cylindrical pipe of the long extending. The frequency dependences of flow rate were obtained. It was established that the pipe presence (the 2nd scheme) can cause a change up to 20 per cent in the flow rate at resonance frequencies and the flow rate increase over a range of moderate frequencies (10 – 80 Hz) when compared two schemes at the same action frequencies of the closing unit operating in the pulse mode of gas efflux.

PULSING GAS EFFLUX. MASS FLOW RATE. WAVE MOVEMENT. RECEIVER. ACOUSTIC RESONANCE. CYLINDRICAL PIPE.

Ivanov V.I., Kuzin A.A., Livashvili A.I., Khe V.K. THE LIGHT INDUCED THERMAL LENS DYNAMICS IN A BINARY FLUID MEDIUM.

The thermal-mass transport processes in a binary fluid medium which is under the influence of the radiation taking into account thermal diffusion flows are analysed. The expression for a focal distance of the thermoinduced lens resulting self-action of a light field is found.

RADIATION SELF-ACTION. THERMAL LENS. THERMODIFFUSION.

Korsun M.M., Royak M.E. TAKING ACCOUNT THE LAMINATION FACTOR IN ELECTROMAGNETIC PROCESSES SIMULATION.

The article describes the numerical simulation of technology based on vector and scalar potentials and taking into account anisotropic properties of the medium in the form of magnetic permeability and electrical conductivity tensors. The possibilities of using this technology for taking into account laminated materials influence are discussed. The results of numerical experiments demonstrating the possibilities of the proposed method are presented.

LAMINATED MATERIALS. ANISOTROPIC MEDIA. ELECTROMAGNETIC PROCESSES. SKIN EFFECT.

Kovalevsky D.V. ELECTRONIC PROPERTIES OF THE KRONIG-PENNEY MODEL WITH SEMI-INFINITE LATTICE OF RANDOM POTENTIAL BARRIERS.

By using the transfer matrices technique a problem on incidence of the Bloch wave on a semi-infinite one-dimensional lattice of δ-function potential barriers of random strength (the modified Kronig–Penney model) is solved. It is shown that an arbitrarily small uncorrelated perturbation of the periodic potential makes the propagation of undamped Bloch waves characteristic for the classical Kronig–Penney model into the lattice impossible. The extinction length of the Bloch wave is calculated.

ELECTRONS. DISORDERED MEDIA. THE KRONIG–PENNEY MODEL. RANDOM POTENTIAL. LOCALIZATION.

Mironov V.O. TESTING PROCEDURE DEVELOPMENT FOR MULTILEAF COLLIMATOR IN REMOTE RADIATION THERAPY.

The testing results for the work of 48-leaf collimator set up on the Mevatron Primus Siemens linear medical electron accelerator have been considered on evidence obtained by film dosimetry. On testing there were estimated such parameters as the gentry and the collimator attitudes relative to the zero-level, the collimator leafs positions while the gentry and the collimator were rotating, interleaf and interblock radiation leakages, wedge factors for physical and virtual wedges, radiation field dimensions. Practical recommendations on specification and periodicity of calibration procedures for clinical conditions are given.

MULTILEAF COLLIMATOR. FILM DOSIMETRY. QUALITY CONTROL. ERRORS ANALYSIS. MLC PARAMETERS. PHYSICAL AND VIRTUAL WEDGES. RADIATION THERAPY.

Mokrushin Yu.M. THE NONLINEARITY INFLUENCE OF ACOUSTO-OPTICAL INTERACTION IN THE PARATELLURITE MODULATOR ON THE FORMATION OF HARMONIOUS SIGNALS IMAGING.

The influence of acousto-optical nonlinearity on diffraction efficiency at the high amplitude ultrasonic signals is investigated theoretically. Waveform distortion in the light image formed by paratellurite acousto-optical modulator is considered.

ACOUSTO-OPTICAL INTERACTION. DIFFRACTION EFFICIENCY. MODULATOR. FREQUENCY-CONTRAST CHARACTERISTICS. LIGHT INTENSITY.

Moroz A.P., Serebryakov A.S., Berdnikov Ya.A. THE COMPUTATIONAL APPROACH TO THE PROBLEM OF QUANTITATIVE XRF ANALYSIS FOR COMPLEX GEOMETRY SAMPLES.

The paper considers the inhomogeneous sample analysis by XRF method. The method of XRF-tomography and imitation program are described.

XRF ANALYSIS. HETEROGENEOUS SAMPLES. XRF-TOMOGRAPHY. COMPUTATIONAL MODELING. MONTE CARLO METHOD. QUANTITATIVE ANALYSIS. FUNDAMENTAL PARAMETERS.

Osipova N.G., Semyonov A.S. THE SIMULATION OF NONLINEAR BEHAVIOR FOR FERROELECTRIC CERAMICS WITH TETRAGONAL STRUCTURE BY FINITE-ELEMENT HOMOGENIZING.

The application possibility for the model of ferroelectroelastic material based on the testing of effective properties of polycrystal using the methods of finite element homogenization to describe the cyclic loading of polycrystalline piezoceramics has been investigated. The results of finite element solution for nonlinear coupled electro-mechanical problems for a representative volume element of the polycrystal were presented. They were compared with experimental results under various loading conditions.

PIEZOELECTRICITY. FERROELASTICS. SIMULATION. HYSTERESIS. HOMOGENIZATION. FINITE ELEMENT METHOD.

Pastor A.A., Serdobintsev P.Yu., Timofeev N.A., Khodorkovskii M.A., Nakozina A.A. DETERMINATIONS OF ELECTROKINETIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTING MATERIALS FOR MAKING NANOCATHODS.

The interaction of the pulse laser radiation with the solid state samples were studied using the method of the femtosecond laser reflection spectroscopy. The time dependences of the induced reflection coefficient were analyzed. This analysis allowed to measure the relaxation time of free carriers and to formulate the basic technique of development of nanocomposite cathodes based on rare-earth metals with semiconductor impurities.

RARE-EARTH METALS. NANOCOMPOSITE MATERIALS. SEMICONDUCTORS. ELECTROKINETIC PROPERTIES. CATHODES. FEMTOSECOND LASER SPECTROSCOPY.

Pavlov F.F. THE BEHAVIOR OF INVARIANT AMPLITUDES OF NUCLEON-NUCLEON SCATTERING.

The paper investigates the behavior of the invariant amplitudes of nucleon-nucleon scattering as a function of the kinetic energy of a nucleon in the laboratory frame in the range from 800 MeV to 2500 MeV and of a momentum transfered. An explicit form of the invariant amplitudes, expressed in terms of helicity amplitudes is found.

NUCLEON. PROTON. NEUTRON. ELASTIC SCATTERING. HELICITY. NUCLEON-NUCLEON AMPLITUDE. INVARIANT AMPLITUDES.

Pavlov V.V. A PRINCIPLE OF THE CONFORMAL TRANSFORMATION OF ELECROSTATIC FIELDS.

Two-dimensional electric fields with ideal focusing are considered. The procedure for a potential and charged particles trajectories transformation into the conformal coordinates by means of methods of the theory of functions of a complex variable is outlined. Various transformations of the Korsunsky field are shown. Energy dispersion is calculated for one of the transformed field.

IDEAL FOCUSING. CONFORMAL COORDINATES. COMPLEX VARIABLE. CONFORMAL TRANSFORMATION. GURSA THEOREM. DISPERSION.

Prokhorova T.V., Stepanova T.R. MODELLING OF A CREEP AND A DAMAGE PROCESSES FOR HIGH-TEMPERATURE CHROMIUM P-91 STEEL.

The simulation of a creep and a damage processes for P91 type heat-resistant steel on the ground of constitutive equation with internal state damage variable in a wide stress range is proposed. The damage-creep strain relation is defined from standard creep test data in two forms: power law and exponential. The proposed model allows to obtain constant stress creep curves for 10XCrMoVNb-9-1 (P91) steel under $T = 625°C$ in consideration of the primary and tertiary creep stages and creep strength in a wide stress range.

STEADY-STATE CREEP. PRIMARY AND TRETIARY CREEP STAGES. DAMAGE VARIABLE. LONG-DURATION STRENGTH.

Radomskiy V.S., Astapova E.S., Filimonov A.V. THE FORMATION OF PHYSICAL-CHEMICAL PROPERTIES OF ZEOLITE-NANOPARTICLES SYSTEM BY MECHANICAL ACTIVATION.

Pore structure of zeolites modificated with nanoparticles of iron and iron oxides by mechanical mixing are investigated. The modification causes an increase in the specific surface and specific pore volume of zeolites at the cost of a microporosity increase.

HIGH-SILICA ZEOLITES. NANOPARTICLES. PORE STRUCTURE. MECHANICAL ACTIVATION.

Rudenko E.D., Sabantsev A.V., Shvetsov A.V., Ilatovskiy A.V., Chervyakova D.B., Grigoriev M.Yu., Petukhov M.G. AN ANALYSIS OF MOLECULAR MECHANISMS OF STRETCHING OF SHORT FRAGMENTS OF DNA DOUBLE STRANDED .

In this work we have developed algorithms and computer programs for stretching of dsDNA with arbitrary nucleotide sequence and structure with ICM-Pro – software package for molecular modeling of biomacromolecules.The differences in structure transitions in dsDNA under stretching from 3′and 5′DNA ends investigated.

dsDNA. STRETCHING. INTERNAL COORDINATES. MOLECULAR SIMULATION.

Shatsky A.V., Shatskaya L.A. ELECTRICAL IMPEDANCE OF FLAT PIEZOTRANSDUCER LOADED ON ENVIRONMENT THROUGH THE CONTACT LAYER FLUID.

On the basis of the piezoeffect equations an expression for an electrical impedance of the flat piezotransducer loaded on the environment through a contact layer of a liquid has been received. It is shown that presence of a thin strongly reflecting contact layer leads to that the spectrum of natural frequencies becomes not the equidistant, and good quality of oscillations 10 times more, than in a case flat piezotransducer loaded immediately on the environment.

ACOUSTIC WAVES. ULTRASOUND. EXCITATION OF ULTRASONIC WAVES. PIEZOEFFECT. ULTRASONIC MEASUREMENTS.

Shemyakina T.A. SOLUTION EXAMPLES OF THE CAUCHY PROBLEM FOR SOME VARIANTS OF THE FRANKL SYSTEM OF ELLIPTIC TYPE.

The work contains examples of faithful analytic solutions of the Cauchy problem for some elliptic systems of the first order quasilinear partial differential equations. The solutions are presented in explicit forms and in initial variables.

The method of an additional argument as basical one has allowed to establish the qualitative causes of an incorrectness of solutions and to define conditions of the classical solutions existing.

FIRST ORDER QUASI-LINEAR PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS. FRANKL SYSTEM. SYSTEM OF ELLIPTIC TYPE. METHOD OF AN ADDITIONAL ARGUMENT. LAMBERT FUNCTION.

Shukchaev S.V., Fedorovich E.D., Karyakin Yu.E., Korablev V.V. VISCOUS-ELASTIC BIOPOLYMERS: PHYSICAL-MECHANICAL PROPERTIES AND APPLICATION IN OPHTHALMOLOGY.

The investigation problems of viscous-elastic biopolymers physical-mechanical properties are considered in the paper. The technologies of surgery in the eye cataract treatment are described.

VISCOUS-ELASTIC BIOPOLYMERS. OPHTHALMOLOGY. EYE CATARACT. CATARACT TREATMENT.

Spirin D.O., Berdnikov A.Ya., Markov S.I., Safonov A.S. OPTIMIZATION OF DISCRIMINATION EFFECT OF THE DUAL-ENERGY METHOD IN RADIOSCOPY.

In this work we consider the possibility of material discrimination improvement for groups of effective atomic number values in radioscopy of large-sized objects at the expense of the bremsstrahlung preliminary filter installation. Optimum values of filter parameters and dual energy of the accelerator for the best material discrimination are evaluated.

RADIOSCOPY. DUAL-ENERGY METHOD. BAYES. DISCRIMINATION OF MATERIALS.

Stepanova T.P., Glazdovskaya M.M., Kapralova V.M. THE EFFECT OF THE EXTERNAL CONSTANT ELECTRIC FIELD ON DIPOLE MOMENT OF LC MAIN-CHAIN POLYMER.

The comparison study of dipole moments of LC main-chain polymer (I) and its low-molecular analog (II) under applied external electric field of 10 kV/cm was carried out. It was found temperature dependences of dipole moment of (I) and (II) at the absence of external electric field were similar. Under external electric field the dipole moment of (II) doesn't change but the dipole moment of (I) dramatically reduced with temperature revealing intramacromolecular transition at 50 °C. The Kirkwood factor varies from 0,94 at 20 °C to 0,35 at 70 °C.

PERMITTIVITY. POLYMER. DIPOLE MOMENT. INTERNAL ROTATION.

Vasilyev G.I., Kholupenko E.E., Baiko D.A., Bykov A.M., Krassilchtchikov A.M., Pavlov G.G. THE SPATIAL DISTRIBUTION FEATURES OF CHERENKOV PHOTON FLUX IN THE CORE OF AN ELECTRON-PHOTON EXTENSIVE ATMOSPHERIC SHOWER INDUCED BY A 5 GeV PRIMARY GAMMA-QUANTUM.

Modeling of the electromagnetic component of an extensive atmospheric shower induced by a 5 GeV primary gamma-quantum is performed. It is shown that at 5 km a.s.l. the mean value of Cherenkov photon flux is 0.2 – 0.5 photon/m$^2$ depending on the distance from the axis of shower (within the distance of 200 m).

GAMMA-RAYS. CHERENKOV RADIATION. EXTENSIVE ATMOSPHERIC SHOWERS. SIMULATION. ULTRARELATIVISTIC ELECTRONS.

Zakrevskii V.A., Sudar N.T. DURABILITY OF POLYMER LIGHT EMITTING DIODES.

The paper discusses the physical reasons for the limited efficiency of organic light-emitting diodes. The evaluation of lifetime of organic materials in strong electric fields is made.

OLEDs. DURABILITY. POLYMERS. ELECTRIC FIELDS.

Zhgoutov V.M. GEOMETRICALLY NONLINEAR THERMOELASTICITY MATHEMATIC MODELS OF SHELLS WITH THE VARIABLE THICKNESS.

The mathematical deformation models of variable thickness shells (smoothly-variable and ribbed shells), experiencing either mechanical load or permanent temperature field and taking into account the geometrical nonlinearity and transverse shear, have been developed. There are given refined geometrical proportions for geometrically nonlinear and steadiness problems.

VARIABLE THICKNESS SHELLS (SMOOTHLY-VARIABLE AND RIBBED SHELLS). THERMOELASTICITY. GEOMETRICAL NONLINEARITY. TRANSVERSE SHEAR.

Zlatin A.N. NEW KEY DUAL SERIES EQUATIONS CONNECTED WITH AXISYMMETRIC TORSION PROBLEM FOR AN ELASTIC SPACE CONTAINING SPHERICAL CRACK.

With the help of dual equations method exact solutions are obtained for a class of series relations in associated Legendre functions. Those dual series relations arise in axisymmetric torsion problem for an elastic space containing spherical crack.

DUAL SERIES EQUATIONS. DUAL EQUATIONS METHOD. EXACT SOLUTIONS.

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ СПбГПУ**

**№ 4 (134) 2011**

**Серия «Физико-математические науки»**

Учредитель – Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Издание зарегистрировано в Госкомпечати РФ, свидетельство № 013165 от 23.12.94

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
*Н.А. Бушманова* – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка – *С.В. Горячева*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

---

Подписано в печать. .2011. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 27,5. Уч.-изд. л. 27,5. Тираж 1000. Заказ 602

---

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России.
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.