

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ  
ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 1 (17)

2011

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

<i>Долгарев И. А., Долгарев А. И.</i> Альтернативные действительные линейные пространства размерностей 2, 3 и 4.....	3
<i>Смирнов Ю. Г., Васюнин Д. И.</i> Итерационный метод определения диэлектрической проницаемости неоднородного образца материала.....	20
<i>Медведик М. Ю., Родионова И. А.</i> Некоторые аналитические решения задачи Неймана на диске для уравнения Гельмгольца.....	31
<i>Исаева С. И., Шайдулов В. В.</i> Математическая модель движения твердого ядра Земли.....	40
<i>Карчевский Е. М., Фролов А. Г.</i> Численное решение задачи о распространении электромагнитных волн в слабо направляющих волноводах.....	47
<i>Бойков И. В.</i> Об одном критерии устойчивости решений нелинейных дифференциальных уравнений с последействием.....	58

ФИЗИКА

<i>Журавлев В. М., Патрушев А. В.</i> Динамика самогравитирующего пылевого диска в слабонелинейном режиме.....	69
<i>Пичужкина Е. М., Радченко В. М., Томилин С. В., Ротманов К. В.</i> Рентгенографическое исследование сплавообразования рутения с кюрием и технецием.....	80
<i>Кокорева М. А., Маргулис В. А., Пятаев М. А.</i> Электронный транспорт в квантовом цилиндре при наличии точечных примесей на его поверхности.....	87
<i>Зюзин А. М., Салкин Д. А.</i> Влияние высокотемпературного отжига на состояние ионов $\text{Eu}^{2+}$ в люминофорах.....	100
<i>Браже Р. А., Кочаев А. И.</i> Метод поиска чистых мод упругих волн в кристаллах из 3D-поверхностей фазовых скоростей.....	116
<i>Кревчик В. Д., Калинина А. В., Калинин Е. Н., Семенов М. Б.</i> Влияние диссипативного туннелирования на энергию связи и оптические свойства квазистационарных $d^{(-)}$ -состояний в квантовой молекуле.....	126

*Кревчик В. Д., Семенов М. Б., Смирнов Ю. Г., Зайцев Р. В.,  
Рудин В. А., Кревчик П. В., Гаврина З. А.* Влияние  
диэлектрической матрицы на  $2D$ -туннельные бифуркации  
в условиях внешнего электрического поля ..... 140

## АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ ПРОСТРАНСТВА РАЗМЕРНОСТЕЙ 2, 3 И 4

*Аннотация.* Рассматриваются абелевы подгруппы действительных унитарно-угольных групп третьего, четвертого и пятого порядков и изоморфные им группы кортежей длины 2, 3, 4 действительных чисел. На последних получены линейные пространства, альтернативные арифметическому пространству. Операции над векторами альтернативных пространств задаются нелинейными формулами. Группы автоморфизмов пространств одной размерности задаются нелинейными формулами различного вида. Все рассматриваемые линейные пространства являются подсубсонами. Определены субсоны размерностей 3, 6, 10.

*Ключевые слова:* действительные линейные пространства с нелинейными операциями, субсоны.

*Abstract.* The article considers Abelian subgroups of real unitriangular groups of the third, fourth and fifth orders and isomorphic to them – tuple length groups of 2, 3, 4 real numbers. The authors receive linear spaces alternative to arithmetical space on the basis of tuple length groups. Operations over alternative space vectors are set by nonlinear formulas. Groups of automorphism spaces of one dimension are set by nonlinear formulas of a various kind. All considered linear spaces are subsibsons. The article defines sibsons of dimensions 3, 6, 10.

*Key words:* real linear spaces with nonlinear operations, sibsons.

### Введение

Ранее изучались действительные линейные пространства размерности 2 [1], которые определены следующими операциями на парах действительных чисел:

$$(x, y) + (a, b) = (x + a, y + b), \quad t(x, y) = (xt, yt), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (1)$$

$$(x, y) + (a, b) = (x + a, y + b + ax), \quad t(x, y) = \left( xt, yt + x^2 \frac{(t-1)t}{2} \right), \quad t \in \mathbf{R}. \quad (2)$$

Первое из пространств является арифметическим и обозначается  $\mathbf{L}^2$ , второе составляет альтернативу арифметическому пространству и обозначается  ${}^a\mathbf{L}^2$ . Для векторов из  $\mathbf{L}^2$  используются обычные обозначения:  $\vec{0}, \vec{a}, \dots, \vec{x}, \dots$ ; векторы второго пространства обозначаются строчными греческими буквами. Согласно (2) нулевым вектором в  ${}^a\mathbf{L}^2$  является  $\vartheta = (0, 0)$ ; вектор, противоположный вектору  $\rho = (x, y)$ , равен

$$-\rho = -(x, y) = (-x, -y + x^2).$$

Выполнимость всех аксиом для  ${}^a\mathbf{L}^2$  проверена в [1]. Во вторых компонентах векторов из  ${}^a\mathbf{L}^2$  операции над векторами заданы нелинейными функциями (это хорошо видно при использовании следующих обозначений:  $(x, y) + (u, v) = (x + u, y + v + xu)$ ; последнее слагаемое во второй компоненте имеет порядок 2. Удобство обозначений в (2) использовано ниже при записи правых сдвигов на  ${}^a\mathbf{L}^2$ ). Одним из базисов пространства  ${}^a\mathbf{L}^2$  является  $\mathbf{B} = (\alpha, \beta)$ , где  $\alpha = (1, 0)$ ,  $\beta = (0, 1)$ . Всякий вектор  $\rho = (x, y)$  однозначно разлагается по векторам базиса  $\mathbf{B}$ :

$$\rho = (x, y) = x\alpha + \left( y - \frac{(x-1)x}{2} \right) \beta. \quad (3)$$

Компоненты  $x$ ,  $y$  вектора  $\rho$  отличаются от его координат  $x, \left( y - \frac{(x-1)x}{2} \right)$  в базисе  $\mathbf{B}$ . Оболочки векторов базиса  $\mathbf{B}$  таковы:

$$\begin{aligned} \langle \alpha \rangle &= \left\{ \vartheta, \alpha = (1, 0), 2\alpha = (2, 1), \dots, t\alpha = \left( t, \frac{(t-1)t}{2} \right), \dots \right\}; \\ \langle \beta \rangle &= \left\{ \vartheta, \beta = (0, 1), 2\beta = (0, 2), \dots, t\beta = (0, t), \dots \right\}. \end{aligned}$$

По (3), суммы  $x\alpha + y\beta$  исчерпывают линейное пространство  ${}^a\mathbf{L}^2$ , отсюда следует, что  ${}^a\mathbf{L}^2$  есть прямая сумма 1-мерных подпространств:  ${}^a\mathbf{L}^2 = \langle \alpha \rangle + \langle \beta \rangle$ . Если  $\mathbf{B}' = (\alpha', \beta')$  – еще один базис пространства  ${}^a\mathbf{L}^2$  и  $\alpha' = (a, p)$ ,  $\beta' = (0, b)$  в базисе  $\mathbf{B}$ , то

$$\begin{cases} x = ax', \\ y = (a^2 - b) \frac{(x'-1)x'}{2} + px' + by' \end{cases}$$

есть формулы замены координат векторов при замене базиса  $\mathbf{B}$  базисом  $\mathbf{B}'$ , см. [1]. Формулы нелинейны. Относительно композиции замен замены базисов линейного пространства составляют группу Ли. Замены базисов линейного пространства  $\mathbf{L}^2$  описываются линейными формулами и представляются матрицами. Нелинейные замены базисов пространства  ${}^a\mathbf{L}^2$  матрицами не представляются. Группы Ли замен базисов пространств  $\mathbf{L}^2$  и  ${}^a\mathbf{L}^2$  изучаются в [1]. Эти группы неизоморфны. Следовательно, неизоморфны группы автоморфизмов линейных пространств  $\mathbf{L}^2$  и  ${}^a\mathbf{L}^2$ . Указанные факты содержатся в [1].

В работе [2] построена альтернативная аффинная плоскость  ${}^a\mathbf{A}^2$  с линейным пространством  ${}^a\mathbf{L}^2$ . Пусть в репере  $\mathbf{V} = (O, \alpha, \beta)$ :  $A = (a, h)$ ,  $M(x, y)$ ,  $\mu = (m, p)$ . Прямая  $\langle A, \mu \rangle$ , определяемая точкой  $A$  и вектором  $\mu$ , описывается уравнениями

$$x = mt + a, \quad y = (am + p) + m^2 \frac{(t-1)t}{2} + h.$$

Уравнения прямой нелинейны. Коллинеация аффинной плоскости задается двумя реперами. Пусть  $\mathbf{B}' = (O', \alpha', \beta')$  – еще один репер аффинной плоскости  ${}^a\mathbf{A}^2$ ,  $O' = (c, d)$ ,  $\alpha' = (a, p)$ ,  $\beta' = (0, b)$ , и точка  $M(x, y)$ , заданная в репере  $\mathbf{B}$ , отображается на точку  $M'(x', y')$ , тоже заданную в репере  $\mathbf{B}$ , в репере  $\mathbf{B}'$  точка  $M'$  имеет координаты  $(x, y)$ . Коллинеация альтернативной аффинной плоскости описывается формулами

$$\begin{cases} x' = ax + c, \\ y' = (a^2 - b)\frac{(x-1)x}{2} + (p + ac)x + by + d. \end{cases}$$

Формулы нелинейны. Об альтернативной плоскости см. также [3, с. 237–280]. Результаты по альтернативным линейным пространствам сообщены в [4, с. 35–36].

Аффинная плоскость  $\mathbf{A}^2$  с арифметическим линейным пространством  $\mathbf{L}^2$  обладает коммутативной и линейной геометрией. Альтернативная аффинная плоскость  ${}^a\mathbf{A}^2$  имеет коммутативную и нелинейную геометрию. Группа коллинеаций плоскости  ${}^a\mathbf{A}^2$  неизоморфна группе коллинеаций классической аффинной плоскости  $\mathbf{A}^2$  с линейным пространством  $\mathbf{L}^2$ . Геометрии аффинных плоскостей  $\mathbf{A}^2$  и  ${}^a\mathbf{A}^2$  различны, так как определяются неизоморфными группами коллинеаций, что согласуется с Эрлангенской программой Ф. Клейна.

Ниже рассматриваются неизоморфные между собой действительные линейные пространства размерностей 3 и 4, имеющие неизоморфные группы замен базисов.

## 1. Абелевы подгруппы унитарной группы $UT(3)$

### 1.1. Подсбсоны 3-мерного сибсона

Рассмотрим один из действительных 3-мерных одулей Ли из [5]. Этот одуль Ли задается следующими операциями на множестве троек  $\mathbf{R}^3$  действительных чисел:

$$(x, y, z) + (a, b, c) = (x + a, y + b, z + c + ay); \quad (4)$$

$$t(x, y, z) = \left( xt, yt, zt + xy\frac{(t-1)t}{2} \right), \quad t \in \mathbf{R}, \quad (5)$$

см. [5, с. 107]. Сложение (4) троек некоммутативно. Указанный одуль Ли называется сибсоном и обозначается  $\Sigma^3$ , элементы сибсона называются сибсами и обозначаются строчными греческими буквами. В работе [5, с. 166–215] изучается дифференциальная галилеева геометрия пространства с сибсоном, геометрия является некоммутативной. Нулевой сибс есть  $\vartheta = (0, 0, 0)$ ; противоположный для сибса  $\rho = (x, y, z)$  равен

$$-\rho = -(x, y, z) = (-x, -y, -z + xy).$$

Одудь Ли  $\Sigma^3$  нильпотентен ступени 2. В работе [6] описаны нильпотентные ступени 2 одули над полем Галуа простой нечетной характеристики.

Рассмотрим правый сдвиг  $s_\pi$  сибсона  $\Sigma^3$  сибсом  $\pi = (a, b, c)$ . Обозначим:

$$\rho + \pi = \rho',$$

где  $\rho = (x, y, z)$  произвольный сибс;  $\rho' = (x', y', z')$  – образ сибса  $\rho$  в правом сдвиге  $s_\pi$ .

На основании (4) имеем формулы правого сдвига сибсом  $\pi$  и его матрицу:

$$\begin{cases} x' = x + a, \\ y' = y + b \\ z' = z + ay + c; \end{cases} \quad m_\pi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & 0 & a & 1 \end{pmatrix}.$$

Вместе с тем сибсы  $\rho = (x, y, z)$  представляются матрицами

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & y & 1 \end{pmatrix}$$

унитреугольной группы  $UT(3)$  третьего порядка.

Произведение унитреугольных матриц таково:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & y & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ c & b & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 \\ z+ay+c & y+b & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

В работе [7, с. 123] указана биекция между матрицами из  $UT(3)$  и тройками из  $\mathbf{R}^3$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & y & 1 \end{pmatrix} \leftrightarrow (x, y, z). \quad (7)$$

Умножение (6) матриц из  $UT(3)$  определяет внутреннюю операцию (4) на сибсоне  $\Sigma^3$ . Биекция (7) определяет внешнюю операцию возведения унитреугольных матриц в действительную степень:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & y & 1 \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ xt & 1 & 0 \\ h & yt & 1 \end{pmatrix}, \quad h = zt + xy \frac{(t-1)t}{2}.$$

Тем самым имеем сибсон матриц  $\Sigma_m^3$ .

В группе  $UT(3)$  содержатся подгруппы, состоящие из матриц следующего вида:

$$m_v^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & 0 & 1 \end{pmatrix}, m_a^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & x & 1 \end{pmatrix}.$$

На основе операции умножения

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ c & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 \\ z+c & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 \\ z & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ c & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 \\ z+ax+c & x+a & 1 \end{pmatrix}$$

закключаем, что указанные подгруппы матриц абелевы.

В биекции (7) для троек имеем

$$(x, 0, z) + (a, 0, c) = (x+a, 0, z+c), t(x, 0, z) = (xt, 0, zt); \quad (8)$$

$$(x, x, z) + (a, a, c) = (x+a, x+a, z+c+ax), t(x, x, z) = \left( xt, xt, zt + x^2 \frac{(t-1)t}{2} \right). \quad (9)$$

Заменяем биекцию (7) биекциями

$$m_v^2 \leftrightarrow (x, z), m_a^2 \leftrightarrow (x, z);$$

на парах из  $\mathbf{R}^2$  получаем операции вида (1) и (2):

$$(x, z) + (a, c) = (x+a, z+c), t(x, z) = (xt, zt), t \in \mathbf{R};$$

$$(x, z) + (a, c) = (x+a, z+c+ax), t(x, z) = \left( xt, zt + x^2 \frac{(t-1)t}{2} \right), t \in \mathbf{R}.$$

Тройки вида  $(x, 0, z)$  и тройки вида  $(x, x, z)$  составляют в сибсоне  $\Sigma^3$  коммутативные подсибсоны, являющиеся 2-мерными линейными пространствами. Линейные пространства  $\mathbf{L}^2$  и  ${}^a\mathbf{L}^2$  соответственно с операциями (1) и (2) изоморфны 2-мерным подсибсонам – линейным пространствам с операциями (8) и (9) соответственно. Указанные подсибсоны обладают, как отмечено во введении, неизоморфными группами автоморфизмов.

### 1.2. Автоморфизмы 2-мерных линейных пространств

Операция сложения в (1) определяет на  $\mathbf{L}^2$  сдвиг:  $s_p: \vec{r} + \vec{p} = \vec{r}'$ , где вектор  $\vec{r}' = (x', y')$  есть образ вектора  $\vec{r} = (x, y)$  в сдвиге  $s_p$  вектором  $\vec{p} = (a, b)$ . Сложению (1) соответствуют формулы сдвига  $x' = x + a, y' = y + b$ ; матрица этого сдвига имеет вид  $m_v^2$ :

$$m_v^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Сдвиг  $s_p$  на линейном пространстве  $\mathbf{L}^2$  является параллельным переносом.

На альтернативном линейном пространстве  ${}^a\mathbf{L}^2$  операция сложения из (3) определяет сдвиг  $s_\pi$  вектором  $\pi$ :

$$s_\pi: \rho + \pi = \rho',$$

где  $\rho' = (x', y')$ ,  $\rho = (x, y)$ ,  $\pi = (a, b)$ . Формулы и матрица сдвига  $s_\pi$  на  ${}^a\mathbf{L}^2$  имеют вид

$$\begin{cases} x' = x + a, \\ y' = y + ax + b; \end{cases} m_a^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & a & 1 \end{pmatrix}.$$

Формулы сдвига  $s_\pi$  на  ${}^a\mathbf{L}^2$  представляют собой частный случай галилеева движения плоскости:

$$\begin{cases} x' = x + a, \\ y' = vx + y + b; \end{cases} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & v & 1 \end{pmatrix}.$$

В автоморфизмах арифметического пространства  $\mathbf{L}^2$  инвариантами являются операция (1) сложения векторов и параллельные переносы  $s_p$ . В автоморфизмах альтернативного пространства  ${}^a\mathbf{L}^2$  инвариантами являются операция (2) сложения векторов и галилеевы движения  $s_\pi$  плоскости. Группы автоморфизмов  $Aut\mathbf{L}^2$  и  $Aut{}^a\mathbf{L}^2$ , имея различные инварианты, неизоморфны. Они содержат неизоморфные подгруппы сдвигов.

## 2. Линейные пространства размерности 3

### 2.1. Абелевы подгруппы группы $UT(4)$

В группе  $UT(4)$  действительных унитарных матриц порядка 4 имеются абелевы подгруппы следующего вида:

$$m_v^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{1a}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{2a}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & a & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{3a}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & b & a & 1 \end{pmatrix}; m_{4a}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & b & a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{2v}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & b & 1 \end{pmatrix}; m_2^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 \\ b & a & a & 1 \end{pmatrix};$$

в  $UT(4)$  матрицу  $m_v^2$  из  $UT(3)$  можно заменить блочной матрицей  $m_{2v}^3$ .

Произведения матриц каждого из видов есть матрица того же вида:

$$m_v^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ y & 0 & 1 & 0 \\ z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 1 & 0 \\ z+c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{1a}^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 \\ z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 \\ z+c & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{2a}^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 \\ z & x & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & a & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 \\ z+ax+c & x+a & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{3a}^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ y & 0 & 1 & 0 \\ z & y & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & b & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 1 & 0 \\ z+ay+bx+c & y+b & x+a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{4a}^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 \\ z & y & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 \\ c & b & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 \\ z+ay+bx+c & y+ax+b & x+a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{2v}^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & y & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & b & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & y+b & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_2^3: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ x & 0 & 1 & 0 \\ y & x & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 \\ b & a & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ x+a & 0 & 1 & 0 \\ y+2ax+c & x+a & x+a & 1 \end{pmatrix}.$$

Для матриц каждого вида существует биекция с множеством троек  $\mathbf{R}^3$ :

$$m_v^3 \leftrightarrow (a, b, c), m_{ia}^3 \leftrightarrow (a, b, c), i = \overline{1, 4}.$$

Матрицы  $m_{2v}^3$  здесь не рассматриваем, они заменяют матрицы  $m_v^2$ , которые рассмотрены в п. 1.1.

Произведение матриц  $m_{ia}^3$  из  $UT(4)$  определяет на  $\mathbf{R}^3$  сложение троек пяти видов:

$$(x, y, z) +_v (a, b, c) = (x + a, y + b, z + c) \leftrightarrow m_v^3; \quad (10)$$

$$(x, y, z) +_{1a} (a, b, c) = (x + a, y + ax + b, z + c) \leftrightarrow m_{1a}^3; \quad (11)$$

$$(x, y, z) +_{2a} (a, b, c) = (x + a, y + ax + b, z + ax + c) \leftrightarrow m_{2a}^3; \quad (12)$$

$$(x, y, z) +_{3a} (a, b, c) = (x + a, y + b, z + ay + bx + c) \leftrightarrow m_{3a}^3; \quad (13)$$

$$(x, y, z) +_{4a} (a, b, c) = (x + a, y + ax + b, z + ay + bx + c) \leftrightarrow m_{4a}^3. \quad (14)$$

Относительно операций сложения (10)–(14) множество  $\mathbf{R}^3$  составляет пять видов абелевых групп  $(\mathbf{R}^3, +_v)$ ,  $(\mathbf{R}^3, +_{ia})$ ,  $i = \overline{1, 4}$ . В отображениях  $\mathbf{R}^3 \rightarrow UT(4)$  каждой сумме троек соответствует произведение матриц одной из подгрупп в  $UT(4)$ , поэтому и множества троек с указанными операциями (10)–(14) являются группами. Для матриц  $m_2^3$  существует биекция  $m_2^3 \leftrightarrow (a, b)$ , в которой определяется операция сложения на парах из  $\mathbf{R}^2$ :

$$(x, y) +_2 (a, b) = (x + a, y + 2ax + b) \leftrightarrow m_2^3. \quad (15)$$

Автоморфизмы групп троек своими инвариантами имеют соответственно операции (10)–(14). Кроме того, операции (10)–(14) определяют на каждой группе соответствующие тройке  $(a, b, c)$  сдвиги  $s_v, s_{ia}$ :

$$(x, y, z) + (a, b, c) = (x', y', z').$$

Матрицы сдвигов есть

$$m_v^3, m_{2v}^3, m_{ia}^3, i = \overline{1, 4}, m_2^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 2a & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрицы сдвигов являются частными случаями матриц флагового движения (с матрицей  $m$ ) 3-мерного пространства [8, с. 301]:

$$\begin{cases} x' = x + a, \\ y' = hx + y + b, \\ z' = dx + fy + z + c; \end{cases} \quad m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & h & 1 & 0 \\ c & d & f & 1 \end{pmatrix}.$$

Группы автоморфизмов указанных групп троек содержат неизоморфные подгруппы сдвигов, а потому сами неизоморфны.

### 2.2. Линейные пространства размерности 3

На каждой из групп  $(\mathbf{R}^3, +_v)$ ,  $(\mathbf{R}^3, +_{ia})$ ,  $i = \overline{1,4}$ , определим внешние операции умножения троек на действительные числа:

– для (10):

$$t(x, y, z) = (xt, yt, zt), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (16)$$

– для (11):

$$t(x, y, z) = \left( xt, yt + x^2 \frac{(t-1)t}{2}, zt \right), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (17)$$

– для (12):

$$t(x, y, z) = \left( xt, yt + x^2 \frac{(t-1)t}{2}, zt + x^2 \frac{(t-1)t}{2} \right), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (18)$$

– для (13):

$$t(x, y, z) = (xt, yt, zt + xy(t-1)t), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (19)$$

– для (14):

$$t(x, y, z) = \left( xt, yt + x^2 \frac{(t-1)t}{2}, zt + xy(t-1)t \right), \quad t \in \mathbf{R}; \quad (20)$$

– для (15):

$$t(x, y) = (xt, yt + x^2(t-1)t), \quad t \in \mathbf{R}. \quad (21)$$

Тем самым получено пять видов действительных линейных пространств размерности 3:

$$\mathbf{L}^3 = (\mathbf{R}^3, +_v, \omega_R(+_v)),$$

$${}^a \mathbf{L}_i^3 = (\mathbf{R}^3, +_{ia}, \omega_R(+_{ia})), \quad i = \overline{1,4}.$$

Линейное пространство  $\mathbf{L}^3$  является арифметическим, остальные  ${}^a \mathbf{L}_i^3$  ему альтернативны. Получено и пространство  ${}^a \mathbf{L}_2^2$  размерности 2 с операциями (15), (21), отличное от пространств  $\mathbf{L}^2$ ,  ${}^a \mathbf{L}^2$ .

Имеется биекция между матрицами группы  $UT(4)$  и кортежами из  $\mathbf{R}^6$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ p & b & 1 & 0 \\ r & q & c & 1 \end{pmatrix} \leftrightarrow (a, b, c, p, q, r).$$

В этой биекции произведению матриц

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ u & y & 1 & 0 \\ w & v & z & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ p & b & 1 & 0 \\ r & q & c & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 \\ u+ay+p & y+b & 1 & 0 \\ w+av+pz+r & v+bz+q & z+c & 1 \end{pmatrix}$$

соответствует сумма кортежей:

$$\begin{aligned} & (x, y, z, u, v, w) + (a, b, c, p, q, r) = \\ & = (x+a, y+b, z+c, u+ay+p, v+bz+q, w+av+pz+r). \end{aligned}$$

Следовательно, множество кортежей  $\mathbf{R}^6$  с выписанной операцией сложения является группой  $(\mathbf{R}^6, +)$ . Введем на  $(\mathbf{R}^6, +)$  внешнюю операцию  $\omega_R(+)$  умножения кортежей на действительные числа:

$$\begin{aligned} & t(x, y, z, u, v, w) = \\ & = \left( xt, yt, zt, ut + xy \frac{(t-1)t}{2}, vt + yz \frac{(t-1)t}{2}, wt + (xv + zu) \frac{(t-1)t}{2} + xyz \frac{(t-2)(t-1)t}{6} \right). \end{aligned}$$

Получен одуль Ли  $\Sigma^6 = (\mathbf{R}^6, +, \omega_R(+))$ , который является 6-мерным сибсоном, его ступень нильпотентности равна 3. Сибсон  $\Sigma^6$  обладает пятью видами подсибсонов, являющихся линейными пространствами, они изоморфны линейным пространствам  $\mathbf{L}^3$ ,  ${}^a\mathbf{L}_i^3$ ,  $i = \overline{1, 4}$ ,  ${}^a\mathbf{L}_2^2$ . Указанные подсибсоны состоят из матриц видов  $m_v^3$ ,  $m_{ia}^3$ ,  $m_2^3$ . Операции над векторами линейных пространств  $\mathbf{L}^3$ ,  ${}^a\mathbf{L}_i^3$ ,  ${}^a\mathbf{L}_2^2$  индуцируются операциями на сибсоне  $\Sigma^6$ .

### 3. Линейные пространства размерности 4

#### 3.1. Абелевы подгруппы в $UT(5)$

В унитарной группе  $UT(5)$  содержатся матрицы видов

$$\begin{aligned} m_v^4 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{1a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \\ m_{2a}^4 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{3a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & a & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

$$m_{4a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & b & a & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; m_{5a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{6a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix}; m_{7a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & b & a & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{8a}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 1 \end{pmatrix}; m_3^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 1 & 0 \\ b & a & a & a & 1 \end{pmatrix}; m_{2,1}^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 1 & 0 \\ c & b & a & a & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрицы каждого вида составляют абелеву подгруппу в  $UT(5)$ ; см. произведения:

$$m_v^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z+c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w+d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{1a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ z & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ z+c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w+d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{2a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ z & x & 0 & 1 & 0 \\ w & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ z+ax+c & x+a & 0 & 1 & 0 \\ w+d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{3a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ z & x & 0 & 1 & 0 \\ w & x & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & a & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ z+ax+c & x+a & 0 & 1 & 0 \\ w+ax+d & x+a & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{4a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ z & y & x & 1 & 0 \\ w & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & b & a & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ z+ay+bx+c & y+ax+b & x+a & 1 & 0 \\ w+d & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{5a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w & z & y & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z+c & 0 & 0 & 1 & 0 \\ w+az+by+cx+d & z+c & y+b & x+a & 1 \end{pmatrix};$$

$$m_{6a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z & x & 0 & 1 & 0 \\ w & z & y & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ c & a & 0 & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 1 & 0 & 0 \\ z+ax+c & x+a & 0 & 1 & 0 \\ w+az+by+cx+d & z+ax+c & y+b & x+a & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{aligned}
& m_{7a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ z & y & x & 1 & 0 \\ w & z & y & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ c & b & a & 1 & 0 \\ d & c & b & a & 1 \end{pmatrix} = \\
& = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ z+ay+bx+c & y+ax+b & x+a & 1 & 0 \\ w+az+by+cx+d & z+ay+bx+c & y+ax+b & x+a & 1 \end{pmatrix}; \\
& m_{8a}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y & x & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ b & a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ y+ax+b & x+a & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z+c & 1 \end{pmatrix}; \\
& m_3^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 0 & 1 & 0 & 0 \\ x & 0 & 0 & 1 & 0 \\ y & x & x & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 1 & 0 \\ b & a & a & a & 1 \end{pmatrix} = \\
& = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ x+a & 0 & 0 & 1 & 0 \\ y+3ax+b & x+a & x+a & x+a & 1 \end{pmatrix}; \\
& m_{2,1}^4: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 0 & 1 & 0 & 0 \\ y & 0 & 0 & 1 & 0 \\ z & y & x & x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 1 & 0 \\ c & b & a & a & 1 \end{pmatrix} = \\
& = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x+a & 0 & 1 & 0 & 0 \\ y+b & 0 & 0 & 1 & 0 \\ z+bx+(a+b)y+c & y+b & x+a & x+a & 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Каждое из рассматриваемых множеств матриц составляет абелеву подгруппу в группе  $UT(5)$ . Группа матриц вида  $m_{8a}^4$  изоморфна группе матриц вида  $m_{1a}^3$  и далее не рассматривается. Группы матриц вида  $m_3^4$  и  $m_{2,1}^4$  можно заменить подгруппами в  $UT(3)$  и  $UT(4)$ :

$$m_3^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 2a & 1 \end{pmatrix} \text{ и } m_{2,1}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ b & 0 & 1 & 0 \\ c & b & a+b & 1 \end{pmatrix}.$$

### 3.2. Линейные пространства на $\mathbf{R}^4$

Для матриц из  $UT(5)$  используется биекция с множеством кортежей  $\mathbf{R}^{10}$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 & 0 \\ p & b & 1 & 0 & 0 \\ u & q & c & 1 & 0 \\ w & v & r & d & 1 \end{pmatrix} \leftrightarrow (a, b, c, d, p, q, r, u, v, w).$$

Выше, в биекции  $UT(4) \leftrightarrow \mathbf{R}^6$ , выписанной в п. 2.2, производится отождествление элементов кортежей, соответствующих одинаковым ненулевым элементам матриц  $m_v^3, m_{ia}^3, i = \overline{1,4}$ , обозначенных одинаковыми символами, и получаются биекции  $m_v^3 \leftrightarrow (a, b, c), m_{ia}^3 \leftrightarrow (a, b, c)$  между матрицами  $m_v^3, m_{ia}^3$  и кортежами троек  $\mathbf{R}^3$ . Это позволило по умножению матриц получить сложение троек (10)–(14). Первый столбец в матрице произведения и есть результат сложения кортежей. Эту идею применяем и к матрицам  $m_v^4, m_{ia}^4, i = \overline{1,7}$ , отображая их во множество кортежей  $\mathbf{R}^4$ . Различные операции на  $\mathbf{R}^4$  определяются произведениями матриц видов  $m_v^4, m_{ia}^4$ . Имеем следующие операции сложения:

$$(x, y, z, w) +_v (a, b, c, d) = (x + a, y + b, z + c, w + d); \quad (22)$$

$$(x, y, z, w) +_{1a} (a, b, c, d) = (x + a, y + ax + b, z + c, w + d); \quad (23)$$

$$(x, y, z, w) +_{2a} (a, b, c, d) = (x + a, y + ax + b, z + ax + c, w + d); \quad (24)$$

$$(x, y, z, w) +_{3a} (a, b, c, d) = (x + a, y + ax + b, z + ax + c, w + ax + d); \quad (25)$$

$$(x, y, z, w) +_{4a} (a, b, c, d) = (x + a, y + ax + b, z + ay + bx + c, w + d); \quad (26)$$

$$(x, y, z, w) +_{5a} (a, b, c, d) = (x + a, y + b, z + c, w + az + by + cx + d); \quad (27)$$

$$(x, y, z, w) +_{6a} (a, b, c, d) = (x + a, y + b, z + ax + c, w + az + by + cx + d); \quad (28)$$

$$(x, y, z, w) +_{7a} (a, b, c, d) =$$

$$= (x + a, y + ax + b, z + ay + bx + c, w + az + by + cx + d); \quad (29)$$

кроме того, имеются еще операции сложения для пар и троек:

$$(x, y) +_3 (a, b) = (x + a, y + 3ax + b), \leftrightarrow m_3^2; \quad (30)$$

$$(x, y, z) +_{2,1} (a, b, c) = (x + a, y + b, z + (b + a)x + ay + c), \leftrightarrow m_{2,1}^3. \quad (31)$$

Для введения внешних операций на группах  $(\mathbf{R}^4, +_v)$ ;  $(\mathbf{R}^4, +_{ia})$ ,  $i = \overline{1, 7}$ ;  $(\mathbf{R}^2, +_3)$ ;  $(\mathbf{R}^3, +_{2,1})$  можно воспользоваться внешней операцией на сибсоне  $\Sigma^{10}$ , который определяется следующими операциями:

$$\begin{aligned} & (x, y, z, s, p, q, r, u, v, w) + (a, b, c, d, e, f, g, h, k, l) = \\ & = (x + a, y + b, z + c, s + d, p + ay + e, q + bz + f, r + cs + g, u + aq + ez + h; \\ & \quad v + br + fs + k, w + av + er + hs + l); \\ & \quad t(a, b, c, d, e, f, g, h, k, l) = \\ & = \left( at, bt, ct, dt, et + ab \frac{(t-1)t}{2}, ft + bc \frac{(t-1)t}{2}, gt + cd \frac{(t-1)t}{2}, \right. \\ & \quad ht + (af + ce) \frac{(t-1)t}{2} + abc \frac{(t-2)(t-1)t}{6}, kt + (bg + df) \frac{(t-1)t}{2} + bcd \frac{(t-2)(t-1)t}{6}, \\ & \quad \left. lt + (ak + dh + eg) \frac{(t-1)t}{2} + (abg + adk + cde) \frac{(t-2)(t-1)t}{6} + abcd \frac{(t-3)(t-2)(t-1)t}{24} \right). \end{aligned}$$

Теперь запишем внешние операции на  $\mathbf{R}^4$ ,  $\mathbf{R}^3$ ,  $\mathbf{R}^2$ ,  $t \in \mathbf{R}$ :

– для (22):  $t(a, b, c, d) = (at, bt, ct, dt)$ ;

– для (23):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, ct, dt \right)$ ;

– для (24):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, ct + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, dt \right)$ ;

– для (25):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, ct + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, dt + a^2 \frac{(t-1)t}{2} \right)$ ;

– для (26):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, ct + ab(t-1)t, dt \right)$ ;

– для (27):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt, ct, dt + ac(t-1)t + b^2 \frac{(t-1)t}{2} \right)$ ;

– для (28):  $t(a, b, c, d) = \left( at, bt, ct + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, dt + ac(t-1)t + b^2 \frac{(t-1)t}{2} \right)$ ;

$$- \text{ для (29): } t(a, b, c, d) = \left( at, bt + a^2 \frac{(t-1)t}{2}, ct + ab(t-1)t + a^3 \frac{(t-2)(t-1)t}{6}, \right. \\ \left. dt + ac(t-1)t + b^2 \frac{(t-1)t}{2} + 3a^2b \frac{(t-2)(t-1)t}{6} + a^4 \frac{(t-3)(t-2)(t-1)t}{24} \right);$$

$$- \text{ для (30): } t(a, b) = \left( at, bt + 3a^2 \frac{(t-1)t}{2} \right), \leftrightarrow m_3^2;$$

$$- \text{ для (31): } t(a, b, c) = \left( at, bt, ct + ab(t-1)t + a^2 \frac{(t-1)t}{2} \right), \leftrightarrow m_{2,1}^3.$$

Как абелевы подсибсоны сибсона  $\Sigma^{10}$  полученные структуры

$$(\mathbf{R}^4, +_v, \omega_R(+_v)) = \mathbf{L}^4; (\mathbf{R}^4, +_{ia}, \omega_R(+_{ia})) = {}^a\mathbf{L}_i^4, i = \overline{1, 7};$$

$$(\mathbf{R}^2, +_3, \omega_R(+_3)) = \mathbf{L}_3^2; (\mathbf{R}^3, +_{2,1}, \omega_R(+_{2,1})) = \mathbf{L}_{2,1}^3$$

являются линейными пространствами над  $\mathbf{R}$ . Имеются прямые разложения:

$$\mathbf{L}^4 = \langle \vec{a} \rangle + \langle \vec{b} \rangle + \langle \vec{c} \rangle + \langle \vec{d} \rangle, {}^a\mathbf{L}_1^4 = \langle \vec{a}, \vec{b} \rangle + \langle \vec{c} \rangle + \langle \vec{d} \rangle,$$

$${}^a\mathbf{L}_4^4 = \langle \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \rangle + \langle \vec{d} \rangle.$$

Автоморфизмы пространств  $\mathbf{L}^4$ ,  ${}^a\mathbf{L}_i^4$ ,  $i = \overline{1, 7}$ ,  $\mathbf{L}_3^2$ ,  $\mathbf{L}_{2,1}^3$  различны для каждой пары пространств, каждая группа автоморфизмов имеет свои инварианты, к ним относятся операции над векторами и соответствующие флаговые сдвиги линейных пространств. Пространства  $\mathbf{L}_3^2$ ,  $\mathbf{L}_{2,1}^3$  имеют группы автоморфизмов, неизоморфные группам автоморфизмов, приведенным ранее 2-мерного и 3-мерного пространств.

Группы автоморфизмов линейных пространств попарно неизоморфны, так как содержат неизоморфные подгруппы сдвигов этих пространств.

### Заключение

Таким образом, существует по несколько линейных пространств одной размерности над  $\mathbf{R}$  с неизоморфными группами автоморфизмов: не менее двух 2-мерных, не менее пяти 3-мерных, не менее восьми 4-мерных. С увеличением размерности число линейных пространств с указанными свойствами увеличивается. Альтернативные к арифметическому пространству линейные пространства задаются на кортежах чисел нелинейными формулами операций в их компонентах.

### Список литературы

1. Долгарев, И. А. Альтернативная аффинная плоскость / И. А. Долгарев, А. И. Долгарев // Владикавказский математический журнал. – 2007. – Т. 9, Вып. 4. – С. 4–14.
2. Долгарев, И. А. Альтернативная аффинная плоскость / И. А. Долгарев, А. И. Долгарев // Владикавказский математический журнал. – 2008. – Т. 10, Вып. 2. – С. 9–20.

3. **Хубежты, И. А.** Теория плоскостей / И. А. Хубежты. – Владикавказ (Дзуджикау) : ГОУ ВПО СОГУ, 2009. – 476 с.
4. **Долгарев, И. А.** Действительные линейные пространства малых размерностей с нелинейными операциями / И. А. Долгарев, А. И. Долгарев // Алгебра, логика и методика обучения математике : материалы Всерос. конф., посв. 100-летию со дня рожд. С. Л. Эдельмана (Красноярск, 5–6 ноября 2010 г.). – Красноярск : КГПУ, 2010. – С. 35–37.
5. **Долгарев, А. И.** Классические методы в дифференциальной геометрии одулярных пространств / А. И. Долгарев. – Пенза : Информационно-издательский центр ПензГУ, 2005. – 306 с.
6. **Долгарев, А. И.** Описание конечных нильпотентных групп степени 2 простого нечетного периода / А. И. Долгарев // Известия вузов. Математика. – 2008. – № 12. – С. 17–27.
7. **Скотт, П.** Геометрии на трехмерных многообразиях / П. Скотт. – М. : Мир, 1986. – 168 с.
8. **Розенфельд, Б. А.** Неевклидовы пространства / Б. А. Розенфельд. – М. : Наука, 1969. – 548 с.

---

***Долгарев Иван Артурович***

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: delivar@yandex.ru

***Dolgarev Ivan Arturovich***

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

***Долгарев Артур Иванович***

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: delivar@yandex.ru

***Dolgarev Artur Ivanovich***

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

---

УДК 512 + 514.126

**Долгарев, И. А.**

**Альтернативные действительные линейные пространства размерностей 2, 3 и 4** / И. А. Долгарев, А. И. Долгарев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 3–19.

## ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НЕОДНОРОДНОГО ОБРАЗЦА МАТЕРИАЛА

*Аннотация.* Исследуется задача определения диэлектрической проницаемости неоднородных образцов материалов произвольной геометрической формы, помещенных в прямоугольный волновод с идеально проводящими стенками. Предложен итерационный метод для численного решения задачи. Доказана его сходимость. Представлены результаты расчетов диэлектрической проницаемости образцов материалов.

*Ключевые слова:* диэлектрическая проницаемость материала, обратная краевая задача, итерационный метод.

*Abstract.* The article investigates a problem of permittivity determination of dielectric body located in rectangular waveguide. Nonhomogeneous body has an arbitrary shape. The authors offer an iteration method for numerical problem solving and prove its convergence. The article also introduces numerical results of determining dielectric body permittivity.

*Key words:* permittivity of dielectric body, inverse boundary value problem, iteration method.

### Введение

Определение диэлектрических и магнитных параметров нанокomпозитных материалов и сложных наноструктур с различной геометрией является актуальной задачей нанотехнологии и наноэлектроники. Однако эти параметры, как правило, недоступны для экспериментального измерения (ввиду композитного характера материалов) [1, 2], что приводит к необходимости применять методы математического моделирования и решать задачи численно с помощью компьютеров [3]. При этом приходится решать трехмерные векторные задачи в полной электродинамической постановке.

В статье исследуется задача определения диэлектрической проницаемости неоднородных образцов материалов произвольной геометрической формы, помещенных в прямоугольный волновод с идеально проводящими стенками. В работе [4] задача сведена к решению нелинейного объемного сингулярного интегрального уравнения. Интегральное уравнение изучали, опираясь на результаты исследования соответствующей краевой задачи и теореме эквивалентности краевой задачи и интегрального уравнения [5]. Была доказана теорема о существовании и единственности решений нелинейного объемного сингулярного интегрального уравнения и обратной краевой задачи для определения эффективной диэлектрической проницаемости наноматериалов [6–8]. Численные результаты для случая однородного тела были получены в [9]. Некоторые особенности реализации численного алгоритма представлены в [10].

### 1. Постановка обратной задачи

Пусть в декартовой системе координат  $P = \{x: 0 < x_1 < a, 0 < x_2 < b, -\infty < x_3 < \infty\}$  – волновод с идеально проводящей поверхностью  $\partial P$ . В волно-

воде расположено неоднородное анизотропное тело  $Q$  ( $Q \subset P$  – область), характеризующееся постоянной магнитной проницаемостью  $\mu_0$  и функцией переменной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(x)$ . Функция  $\varepsilon(x)$  является ограниченной функцией в области  $\bar{Q}$ ,  $\varepsilon \in L_\infty(Q)$ , а также  $\varepsilon^{-1} \in L_\infty(Q)$ . Граница  $\partial Q$  области  $Q$  кусочно-гладкая.

Случай переменной магнитной проницаемости (при постоянной диэлектрической проницаемости, равной  $\varepsilon_0$ ) рассматривается аналогично и может быть получен из рассматриваемого случая простой заменой обозначений.

Как показано в [4, 5], рассматриваемая обратная задача может быть сведена к следующей задаче для нелинейного объемного сингулярного уравнения.

Введем ток:

$$\mathbf{J}(x) = \left[ \frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right] \mathbf{E}(x), \quad (1)$$

где  $\mathbf{E}(x)$  – электрическое поле.

Тогда электрическое поле выражается через ток по формуле

$$\mathbf{E}(x) = \left[ \frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right]^{-1} \mathbf{J}(x). \quad (2)$$

Интегродифференциальное уравнение, к которому сводится обратная задача, имеет вид

$$\left[ \frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right]^{-1} \mathbf{J}(x) = \mathbf{E}^0(x) + k_0^2 \int_Q \hat{G}_E(x, y) \mathbf{J}(y) dy + \\ + \text{grad div} \int_Q \hat{G}_E(x, y) \mathbf{J}(y) dy, \quad x \in Q. \quad (3)$$

Здесь  $\hat{G}_E(x, y)$  – (известный) диагональный тензор Грина [4, 5, 10] с компонентами:

$$G_E^1 = \frac{2}{ab} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}(1+\delta_{0n})} \cos \frac{\pi n}{a} x_1 \sin \frac{\pi m}{b} x_2 \cos \frac{\pi n}{a} y_1 \sin \frac{\pi m}{b} y_2 ; \\ G_E^2 = \frac{2}{ab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}(1+\delta_{0m})} \sin \frac{\pi n}{a} x_1 \cos \frac{\pi m}{b} x_2 \sin \frac{\pi n}{a} y_1 \cos \frac{\pi m}{b} y_2 ; \\ G_E^3 = \frac{2}{ab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}} \sin \frac{\pi n}{a} x_1 \sin \frac{\pi m}{b} x_2 \sin \frac{\pi n}{a} y_1 \sin \frac{\pi m}{b} y_2 .$$

В этих выражениях

$$\gamma_{nm} = \sqrt{\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b}\right)^2 - k_0^2},$$

при этом ветвь квадратного корня выбирается так, чтобы  $\text{Im} \gamma_{nm} \geq 0$  и  $\text{Re} \gamma_{nm} \geq 0$ , если  $\text{Im} \gamma_{nm} = 0$ . В формуле (3)  $k_0$  – волновое число свободного пространства,  $k_0^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0$ ;  $\omega$  – круговая частота. Параметры волновода выбраны так, чтобы  $\pi/a < k_0 < \pi/b$ . В этом случае в волноводе может распространяться только одна мода.  $\mathbf{E}^0(x) = \mathbf{e}_2 A^{(+)} i \omega \mu_0 \frac{\pi}{a} \sin \frac{\pi x_1}{a} e^{-i \gamma_1^{(2)} x_3}$  – известное падающее поле (мода в волноводе);  $A^{(+)}$  – (известная) амплитуда падающей волны,  $\gamma_1^{(2)} = \sqrt{k_0^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}$ ;  $\mathbf{e}_2$  – второй орт в декартовой системе координат.

Дополнительное асимптотическое уравнение запишется в форме [4, 5]

$$Q_1^{(+)} = A^{(+)} + k_0^2 \frac{1}{b \gamma_{10} i \pi \omega \mu_0} \int_Q \sin \frac{\pi y_1}{a} e^{i \gamma_1^{(2)} y_3} \left[ \frac{\epsilon(y)}{\epsilon_0} - 1 \right] \mathbf{E}(y) \cdot \mathbf{e}_2 dy, \quad (4)$$

где  $\gamma_{10} = \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2} - k_0^2}$ .

Коэффициент  $Q_1^{(+)}$  считается известным из измерений. Требуется определить диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(x), x \in Q$ , посредством серии измерений.

Поскольку количество измерений должно быть конечным, то и неизвестных параметров также должно быть конечное число. Поэтому будем предполагать, что тело  $Q$  состоит из  $N$  подобластей  $Q_j$  таких, что  $Q = \bigcup_j Q_j$ ,  $Q_i \cap Q_j = \emptyset$ ,  $i \neq j$ . Мы предполагаем, что  $\epsilon(x) = \epsilon^{(j)}$  при  $x \in Q_j$ ,

т.е. в каждой подобласти диэлектрическая проницаемость постоянна. Тогда общее число неизвестных параметров будет равно  $N$ .

При измерениях изменяются частоты  $\omega^{(1)}, \omega^{(2)}, \dots, \omega^{(N)}$  (происходит сканирование по частоте); при этом волновое число изменяется по формуле  $k_0^{(i)} = \omega^{(i)} \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ .

## 2. Формулировка итерационного метода

Будем предполагать, что тело имеет форму параллелепипеда  $Q = \{x: a_1 < x_1 < a_2, b_1 < x_2 < b_2, c_1 < x_3 < c_2\}$ . Выберем равномерную прямоугольную сетку в  $Q$ , образованную элементарными параллелепипедами:

$$\Pi_{klm} = \{x : x_{1,k} < x_1 < x_{1,k+1}, x_{2,l} < x_l < x_{2,l+1}, x_{3,m} < x_3 < x_{3,m+1}\};$$

$$x_{1,k} = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{N_1} k, \quad x_{2,l} = b_1 + \frac{b_2 - b_1}{N_2} l, \quad x_{3,m} = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{N_3} m,$$

где  $k = 0, \dots, N_1 - 1$ ,  $l = 0, \dots, N_2 - 1$ ,  $m = 0, \dots, N_3 - 1$ . Перенумеруем эти элементарные параллелепипеды с помощью одноиндексной нумерации  $\Pi_s$ ,  $s = 0, \dots, N_0 - 1$ ,  $N_0 = N_1 N_2 N_3$ .

Построим двухслойный итерационный процесс для решения обратной задачи по следующим формулам:

$$\xi_n(x) = \left[ \frac{\varepsilon_n(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right]^{-1}; \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \xi_n(x) \mathbf{J}_n(x) - k_0^2 \int_Q \widehat{G}(x, y) \mathbf{J}_n(y) dy - \\ & - \text{grad div} \int_Q \widehat{G}(x, y) \mathbf{J}_n(y) dy = \mathbf{E}^0(x), \quad x \in Q; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\mathbf{E}_n(x) = \xi_n(x) \mathbf{J}_n(x); \quad (7)$$

$$F = A + k_0^2 \frac{1}{ab\gamma_{10}} \int_Q \sin\left(\frac{\pi y_1}{a}\right) e^{i\gamma_1^{(2)} y_3} \eta_{n+1}(y) \mathbf{E}_n(y) \cdot \mathbf{e}_2 dy, \quad (8)$$

где

$$F = \frac{i\pi\omega\mu_0}{a} Q_1^{(+)}, \quad A = \frac{i\pi\omega\mu_0}{a} A^{(+)}, \quad \eta_n(x) = \left[ \frac{\varepsilon_n(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right], \quad \xi_n(x) = \eta_n^{-1}(x). \quad (9)$$

По этим формулам вычисление производится следующим образом. Сначала выбираем начальное приближение  $\varepsilon_0(x) = \varepsilon_e$  ( $n = 0$ ), где  $\varepsilon_e = \varepsilon_{eff}$ ,  $\varepsilon_{eff}$  – эффективная диэлектрическая проницаемость тела, вычисленная как решение обратной краевой задачи с постоянной диэлектрической проницаемостью [4, 5]. Нельзя взять в качестве  $\varepsilon_e = \varepsilon_0$ , так как по формуле (7) нельзя определить электрическое поле. По формуле (5) вычисляется значение  $\xi_0(x)$ .

Далее по формуле (6) определяется ток  $\mathbf{J}_n(x)$  как решение интегродифференциального уравнения методом коллокации. Затем по формуле (7) по току определяем электрическое поле  $\mathbf{E}_n(x)$  на сетке. Данную процедуру проводим  $N$  раз при различных значениях  $k_0 = k_0^{(1)}, k_0 = k_0^{(2)}, \dots, k_0 = k_0^{(N)}$ . Таким образом, получаем  $N$  значений полей  $\mathbf{E}_n^{(1)}, \mathbf{E}_n^{(2)}, \dots, \mathbf{E}_n^{(N)}$  при различных  $k_0^{(1)}, k_0^{(2)}, \dots, k_0^{(N)}$ . На этом заканчивается вычисление на первом «слое».

На втором «слое» по известным значениям полей  $\mathbf{E}_n^{(i)}(x)$  ( $i = 1, \dots, N$ ) из формулы (8) определяем новое значение  $\eta_{n+1}(x)$ . Для этого потребуется

произвести решение системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), составленной из уравнения (8), относительно неизвестных параметров. При этом «коэффициенты прохождения»  $F_i = F(k_0^{(i)})$  находятся с помощью измерений. Считаем, что  $A^{(+)} = 1$ .

Мы предположили выше, что  $\eta_n(x) = \eta_n^{(j)}$  при  $x \in Q_j$ . Кроме того, пусть подобласти  $Q_j$  состоят из объединения элементарных параллелепипедов сетки  $Q_j = \bigcup_l \Pi_l$ . Мы будем считать также, что  $\mathbf{E}_n^{(i)}(x) = \mathbf{E}_n^{(i,l)}$  при  $x \in \Pi_l$ , т.е. поле аппроксимируется некоторой постоянной внутри элементарных параллелепипедов.

Формула (8) приводит к конечномерной СЛАУ. Образует матрицы  $E = \{\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{E}_n^{(i,l)}\}_{i=1, l=1}^{N, N_0}$  размера  $N \times N_0$  и  $H = \{H_{ij}\}_{i=1, j=1}^{N_0, N}$  размера  $N_0 \times N$ , где  $H_{ij} = 0$  при  $l$  таких, что  $\Pi_l \not\subset Q_j$ . Тогда будем иметь СЛАУ с матрицей  $A_N = EH$  размера  $N \times N$ :

$$A_N \eta_{n+1} = B, \quad (10)$$

которая решается относительно неизвестных  $\eta_{n+1} = (\eta_{n+1}^{(1)}, \dots, \eta_{n+1}^{(N)})^T$ .

Здесь и ниже мы будем отождествлять (кусочно-постоянную) функцию  $\eta_{n+1} = \eta_{n+1}(x)$  и вектор  $(\eta_{n+1}^{(1)}, \dots, \eta_{n+1}^{(N)})^T$ , так как они однозначно определяют друг друга.

Выпишем коэффициенты матрицы  $A_N$  и правой части  $B$  в случае изотропного неоднородного тела. Они вычисляются по следующим формулам:

$$a_{ij} = \sum_{l: \Pi_l \subset Q_j} \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{E}_n^{(i,l)} H_{li}; \quad (11)$$

$$H_{li} = \int_{\Pi_l} \sin\left(\frac{\pi y_1}{a}\right) e^{iy_3 \sqrt{(k_0^{(i)})^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}} dy_1 dy_2 dy_3;$$

$$b_i = \frac{(F_i - A)ab}{(k_0^{(i)})^2} \sqrt{\frac{\pi^2}{a^2} - (k_0^{(i)})^2}. \quad (12)$$

Значение интеграла по параллелепипеду  $\Pi_l$  можно вычислить аналитически:

$$H_{li} \equiv \int_{x_{l0}-h_1/2}^{x_{l0}+h_1/2} \int_{y_{l0}-h_2/2}^{y_{l0}+h_2/2} \int_{z_{l0}-h_3/2}^{z_{l0}+h_3/2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{iz \sqrt{(k_0^{(i)})^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}} dx dy dz =$$

$$= \frac{4h_2 a}{\pi \sqrt{\left(k_0^{(i)}\right)^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}} e^{iz_{10} \sqrt{\left(k_0^{(i)}\right)^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}} \sin \left( \frac{h_3}{2} \sqrt{\left(k_0^{(i)}\right)^2 - \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \sin \frac{h_1}{2} \sin x_{l0}.$$

Далее проверяется выполнение неравенств  $\left| \eta_{n+1}^{(i)} - \eta_n^{(i)} \right| < \delta$  ( $i = 1, \dots, N$ ) с заданной точностью  $\delta (> 0)$ . Если требуемая точность достигнута для каждого  $\eta_{n+1}^{(i)}$  ( $i = 1, \dots, N$ ), то вычисления прекращаются. Если требуемая точность не достигнута, то  $\xi_{n+1}(x) := \eta_{n+1}^{-1}(x)$ ,  $n := n + 1$ , и вычисления повторяются с формулы (6).

В качестве искомого выбирается значение для относительной диэлектрической проницаемости  $\frac{\varepsilon_n(x)}{\varepsilon_0} = \eta_n(x) + 1$ .

Ключевым моментом в данном двухслойном итерационном процессе является возможность определения  $\varepsilon_{n+1}(x)$  по известному полю  $\mathbf{E}_n(x)$  из формулы (7). Если искомая функция  $\varepsilon(x)$  имеет  $N$  неизвестных параметров, то необходимо иметь по крайней мере результаты  $N$  различных измерений.

Поскольку размер матрицы  $A_N$  сравнительно невелик (не более нескольких тысяч) при решении системы (12) можно воспользоваться простыми методами решения систем линейных алгебраических уравнений, например, методом Гаусса с выбором ведущего элемента по всей матрице.

Решение уравнения (5) подробно описано в [10].

### 3. Теорема о сходимости итерационного метода

Для обоснования применения двухслойного процесса определения функции  $\varepsilon(x)$  при сделанных предположениях необходимо доказать однозначную разрешимость СЛАУ и сходимость итерационного метода (5)–(7).

Запишем итерационный метод в операторной форме:

$$\left( \xi_n I + S^{(i)} \right) \mathbf{J}_n^{(i)} = \mathbf{E}^{(0,i)} \quad (i = 1, \dots, N); \quad (13)$$

$$\mathbf{E}_n^{(i)} = \xi_n \mathbf{J}_n^{(i)} \quad (i = 1, \dots, N); \quad (14)$$

$$A_N \eta_{n+1} = B; \quad (15)$$

$$\xi_{n+1} = \eta_{n+1}^{-1}, \quad (16)$$

где  $I$  – единичный оператор,

$$S\mathbf{J} = k_0^2 \int_Q \widehat{G}(x, y) \mathbf{J}(y) dy + \text{grad div} \int_Q \widehat{G}(x, y) \mathbf{J}(y) dy - \quad (17)$$

линейный ограниченный оператор  $S: L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$  [4];  $S = S^{(i)}$  для  $k_0 = k_0^{(i)}$ . Уравнения (13), (14) рассматриваются в пространстве  $L_2(Q)$ .

Объединив эти уравнения, будем иметь

$$\mathbf{E}_n^{(i)} = \xi_n \left( \xi_n I + S^{(i)} \right)^{-1} \mathbf{E}^{(0,i)} \quad (i=1, \dots, N); \quad (18)$$

$$\eta_{n+1} = A_N^{-1} B,$$

предполагая, что существует  $A_N^{-1} = A_N^{-1}(\eta_n)$ . Тогда

$$\eta_{n+1} = A_N^{-1} \left( (I + \eta_n S)^{-1} \mathbf{E}^0 \right) B, \quad (19)$$

или

$$\eta_{n+1} = F(\eta_n) B, \quad (20)$$

где функция

$$F(\eta_n) \equiv A_N^{-1} \left( (I + \eta_n S)^{-1} \mathbf{E}^0 \right) \quad (21)$$

зависит от  $\eta_n$ .

Функцию (21) можно рассматривать как матрицу-функцию  $N$  переменных  $\eta_n^{(1)}, \dots, \eta_n^{(N)}$ . Пусть  $\eta_n = \left( \eta_n^{(1)}, \dots, \eta_n^{(N)} \right)^T \in R_\infty^N$  – вектор из пространства  $R_\infty^N$  с нормой  $\|\bullet\|_\infty$ .

Пусть существует  $F(\eta_e)$  для некоторого  $\eta_e$ . Будем предполагать, что

$$\eta_e = F(\eta_e) B_e. \quad (22)$$

Тогда в силу непрерывности функции  $(I + \eta S)^{-1} \mathbf{E}^0$  по  $\eta$  в некоторой окрестности точки  $\eta_e$  существует функция  $F(\eta) \equiv A_N^{-1} \left( (I + \eta S)^{-1} \mathbf{E}^0 \right)$ . Выберем в этой окрестности замкнутый шар  $B_r(\eta_e) := \{\eta : \|\eta - \eta_e\| \leq r\}$  (уменьшая  $r$ , если необходимо). Рассмотрим оценки:

$$\begin{aligned} \|F(\eta) B - \eta_e\| &= \|F(\eta) B - F(\eta_e) B_e\| = \|(F(\eta) - F(\eta_e)) B + F(\eta_e)(B - B_e)\| \leq \\ &\leq \|F(\eta) - F(\eta_e)\| \|B\|_\infty + \|F(\eta_e)\| \|B - B_e\|_\infty. \end{aligned} \quad (22)$$

Отображение (20) действует в из шара в шар  $F(\bullet) B : B_r(\eta_e) \rightarrow B_r(\eta_e)$  при условии

$$\max_{\eta \in B_r(\eta_e)} \|F(\eta) - F(\eta_e)\| \|B\|_\infty + \|F(\eta_e)\| \|B - B_e\|_\infty \leq r. \quad (23)$$

Очевидно, что максимум в первом слагаемом в (23) существует и достигается на некотором элементе из шара, так как пространство  $R_\infty^N$  конечномерное, а шар замкнутый. Оценка (23) будет выполняться при достаточно малом  $\max_{\eta \in B_r(\eta_e)} \|F(\eta) - F(\eta_e)\|$  (чего можно добиться уменьшением  $r$ ) и достаточно малом  $\|B - B_e\|_\infty$ .

Нетрудно видеть, что функция  $F(\eta) \equiv A_N^{-1} \left( (I + \eta S)^{-1} \mathbf{E}^0 \right)$  будет также сильно дифференцируема (по Фреше) как суперпозиция сильно дифференцируемых функций, поэтому справедлива оценка [11]

$$\|F(\eta) - F(\tau)\| \leq M \|\eta - \tau\|_{\infty} \quad (24)$$

для некоторого  $M (> 0)$  при  $\eta, \tau \in B_r(\eta_e)$ . Тогда отображение  $F(\bullet)B : B_r(\eta_e) \rightarrow B_r(\eta_e)$  будет сжатием, если дополнительно выполнено условие

$$\|B\|_{\infty} < M^{-1}. \quad (25)$$

Итак, доказано, что при перечисленных выше условиях отображение будет сжимающим, поэтому (см. [12]) верна

**Теорема 1.** Пусть существует  $F(\eta_e)$  для некоторого  $\eta_e$  и верно (22). Тогда найдется такое  $r > 0$ , что при выполнении условий (23) и (25) отображение  $F(\bullet)B : B_r(\eta_e) \rightarrow B_r(\eta_e)$  является сжимающим, итерационный процесс (20) сходится к точному (единственному) решению  $\eta \in B_r(\eta_e)$  уравнения

$$\eta = F(\eta)B \quad (26)$$

со скоростью геометрической прогрессии с показателем  $q := \|B\|_{\infty} M (< 1)$  при любом начальном приближении  $\eta_0 \in B_r(\eta_e)$ .

Эта теорема теоретически обосновывает двухслойный итерационный метод определения функции  $\varepsilon(x)$ . Наиболее сложным является обеспечение условия (22). Оно означает, что должно быть известно решение обратной задачи с «близкими» параметрами. В качестве такой задачи можно выбрать, например, задачу определения эффективной диэлектрической проницаемости, когда  $\eta^{(1)} = \dots = \eta^{(N)} = \eta_e$ . Эта задача подробно исследована в [4, 6, 7] (где также указаны условия существования ее решения).

#### 4. Численные результаты

Описание решения интегродифференциального уравнения методом коллокации имеется в [10]. В качестве точек коллокации выбираем центры элементарных параллелепипедов. Параметры задачи:  $a = 2$ ,  $b = 1$ ,  $c = 2$ ,  $k_0 = 2,5$ ,  $N = 1$ ,  $N_0 = 8$ . Коэффициент  $F$  вычисляется с помощью аналитического решения прямой задачи дифракции [13, 14].

Ниже представлены результаты расчетов относительной диэлектрической проницаемости двухслойным итерационным методом.

Точное значение равнялось  $\varepsilon = 1,5$ . В левом столбце табл. 1 указаны начальные значения  $\varepsilon_e$ ; в правом столбце указаны вычисленные (приближенные) значения двухслойным итерационным методом.

В табл. 2 представлены результаты расчетов для случая неоднородного тела, состоящего из двух секций:

$$Q_1 = \{x : 0 < x_1 < a, 0 < x_2 < b, 0 < x_3 < c_1\},$$

$$Q_2 = \{x : 0 < x_1 < a, 0 < x_2 < b, c_1 < x_3 < c\}.$$

Таблица 1

Начальное значение $\epsilon$	Вычисленное значение $\epsilon$	Начальное значение $\epsilon$	Вычисленное значение $\epsilon$
1,100000	1,507570	2,000000	1,507060
1,200000	1,507500	2,100000	1,507020
1,300000	1,507430	2,200000	1,506980
1,400000	1,507360	2,300000	1,506950
1,500000	1,507300	2,400000	1,506920
1,600000	1,507250	2,500000	1,506920
1,700000	1,507200	2,600000	1,507090
1,800000	1,507150	2,700000	1,507710
1,900000	1,507110		

Параметры задачи:  $a = 2$ ,  $b = 1$ ,  $c = 2$ ,  $c_1 = 1$ ,  $k_0^{(1)} = 1,7$ ,  $k_0^{(2)} = 1,6$ ,  $N = 2$ ,  $N_0 = 10$ . Начальное значение относительной диэлектрической проницаемости равнялось  $\epsilon_e = 1,15$  в каждой секции. Точные значения равнялись  $\epsilon^{(1)} = 1,1$  в первой секции и  $\epsilon^{(2)} = 1,2$  во второй секции.

Таблица 2

Количество итераций	Значение $\epsilon$	
	в первой секции	во второй секции
1	1,1442211 - i0,0018885104	1,1547399 - i0,00087996185
2	1,1440666 + i0,00031775959	1,1574058 - i0,004368522
3	1,140544 + i0,0077741992	1,1624472 - i0,0096281959
4	1,1316639 + i0,011875111	1,1695469 - i0,012195842
5	1,1253693 + i0,010341899	1,1745528 - i0,012229604
6	1,1238371 + i0,010211105	1,1776618 - i0,013340704
7	1,1209914 + i0,013582285	1,181974 - i0,015370148
8	1,114805 + i0,015177354	1,1873796 - i0,015540706
9	1,1098722 + i0,013085815	1,1913597 - i0,013888457
10	1,1080044 + i0,011108461	1,1937901 - i0,01250952
11	1,1062838 + i0,010900297	1,1962147 - i0,011620387
12	1,1033408 + i0,010241321	1,1987555 - i0,010081171
13	1,1009931 + i0,0080135619	1,2004106 - i0,0078635895
14	1,1002929 + i0,0057195404	1,2010552 - i0,005890436
15	1,1001548 + i0,0044050605	1,2013838 - i0,0044480784
16	1,0996759 + i0,0034048383	1,2016867 - i0,0031334373
17	1,0992887 + i0,0020517684	1,2017066 - i0,0017845466
18	1,099517 + i0,00071302208	1,2013461 - i0,00066606828
19	1,1000676 - i0,00010505475	1,2008618 + i6,8213645e-005

Расчеты показывают высокую точность (порядка 0,4 %) при определении относительной диэлектрической проницаемости образца. Метод быстро сходится даже при выборе сильно отличающегося начального приближения от точного значения.

## Список литературы

1. **Solymar, L.** Waves in Metamaterials / L. Solymar, E. Shamonina. – New York : Oxford University Press, 2009.
2. **Zharova, N. A.** Nonlinear Transmission and Spatiotemporal Solutions in Metamaterials with Negative Refraction / N. A. Zharova, I. V. Shadrivov, A. A. Zharov, Yu. S. Kivshar // Optics Express. – 2005. – V. 13, № 4. – P. 1291–1298.
3. **Shestopalov, Yu. V.** Development of Mathematical Methods for Reconstructing Complex Permittivity of a Scatterer in a Waveguide / Yu. V. Shestopalov, Yu. G. Smirnov, V. V. Yakovlev // Proceedings of 5th International Workshop on Electromagnetic Wave Scattering (Antalya, Turkey, October 22–25). – Antalya, 2008.
4. **Смирнов, Ю. Г.** Применение ГРИД-технологий для решения нелинейного объемного сингулярного интегрального уравнения для определения эффективной диэлектрической проницаемости наноматериалов / Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2008. – № 3. – С. 2–10.
5. **Kobayashi, K.** Investigation of Electromagnetic Diffraction by a Dielectric Body in a Waveguide Using the Method of Volume Singular Integral Equation / K. Kobayashi, Yu. V. Shestopalov, Yu. G. Smirnov // SIAM Journal of Applied Mathematics. – 2009. – V. 70, № 3. – P. 969–983.
6. **Смирнов, Ю. Г.** О существовании и единственности решений обратной краевой задачи для определения эффективной диэлектрической проницаемости наноматериалов / Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 1. – С. 11–24.
7. **Смирнов, Ю. Г.** О существовании и единственности решений обратной краевой задачи определения диэлектрической проницаемости материалов / Ю. Г. Смирнов, Д. А. Миронов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010. – Т. 50, № 9. – С. 1587–1597.
8. **Smirnov, Yu. G.** Existence and uniqueness of a solution to the inverse problem of the complex permittivity reconstruction of a dielectric body in a waveguide / Yu. G. Smirnov, Yu. V. Shestopalov // Inverse Problems. – 2010. – V. 26, № 105002. – P. 1–14.
9. **Smirnov, Y.** Analysis of Inverse Scattering in a Waveguide using the Method of Volume Singular Integral Equation / Y. Smirnov, Y. Shestopalov, D. Mironov // URSI International Symposium on Electromagnetic Theory (EMTS–2010) (Berlin, Germany, August 16–19). – Berlin, 2010. – P. 532–534.
10. **Васюнин, Д. И.** Метод коллокации решения объемного сингулярного интегрального уравнения в задаче определения диэлектрической проницаемости материала / Д. И. Васюнин, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 3. – С. 68–78.
11. **Колмогоров, А. Н.** Элементы теории функций и функционального анализа / А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин. – М. : Наука, 1976.
12. **Канторович, Л. В.** Функциональный анализ / Л. В. Канторович, Г. П. Акилов. – М. : Наука, 1984.
13. **Гурина, Е. Е.** Численное и аналитическое решение задачи дифракции электромагнитного поля на диэлектрическом параллелепипеде, расположенном в прямоугольном волноводе / Е. Е. Гурина, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 2. – С. 32–43.
14. **Гришина, Е. Е.** Численное и аналитическое решение задачи дифракции электромагнитного поля на двух секциях с разной диэлектрической проницаемостью, расположенных в прямоугольном волноводе / Е. Е. Гришина, Е. Д. Деревянчук,

М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4. – С. 73–81.

---

***Смирнов Юрий Геннадьевич***

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
математики и суперкомпьютерного  
моделирования, Пензенский  
государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

***Smirnov Yuri Gennadyevich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of mathematics and supercomputer  
modeling, Penza State University

***Васюнин Денис Игоревич***

аспирант, Пензенский  
государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

***Vasyunin Denis Igorevich***

Postgraduate student,  
Penza State University

---

УДК 517.3

**Смирнов, Ю. Г.**

**Итерационный метод определения диэлектрической проницаемости неоднородного образца материала / Ю. Г. Смирнов, Д. И. Васюнин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 20–30.**

УДК 517.3

М. Ю. Медведик, И. А. Родионова

## НЕКОТОРЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА НА ДИСКЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

*Аннотация.* Рассмотрена задача Неймана для уравнения Гельмгольца. Поставленная задача сведена к интегральному уравнению и описана теория разрешимости данного уравнения. Получены некоторые аналитические решения рассматриваемой задачи на диске.

*Ключевые слова:* аналитическое решение, интегральное уравнение, краевая задача.

*Abstract.* The article considers Neumann problem for Helmholtz equation. The problem is reduced to integral equation. The authors describe a theory of the equation solvability. The article presents several numerical results of the integral equation solution on a disk.

*Key words:* analytical solution, integral equation, boundary value problem.

### 1. Постановка задачи

Пусть  $S = \{x = (x_1, x_2, 0) \in R^3\}$  – ограниченная, плоская незамкнутая поверхность в  $R^3$  с границей  $\gamma$ .

Введем пространства Соболева:

$$H^s(\Omega) = \{u(\Omega) : u \in H^s(R^2)\};$$

$$\tilde{H}^s(\bar{\Omega}) = \{u \in H^s(R^2) : \text{supp } u \subset \bar{\Omega}\}.$$

Скалярное произведение и норма в  $H^s(R^2)$  определяются обычным образом:

$$(u, v)_s = \int_{R^2} \langle \xi \rangle^{2s} \hat{u}(\xi) \overline{\hat{v}(\xi)} d\xi, \quad \|u\|_s^2 = (u, u)_s; \quad \langle \xi \rangle = (1 + |\xi|^2)^{1/2},$$

где  $\hat{u}(\xi)$  обозначает преобразование Фурье функции  $u$ ;  $\tilde{H}^s(\bar{\Omega})$  является замкнутым подпространством  $H^s(R^2)$  с индуцированным скалярным произведением и нормой. Пространства  $H^{-s}(\Omega)$  и  $\tilde{H}^s(\bar{\Omega})$  антидвойственны друг к другу при всех  $s \in R$ ;  $\tilde{H}^s(\bar{\Omega})$  можно получить замыканием  $C_0^\infty(\Omega)$  в пространстве  $H^s(R^2)$  [4].

Пусть  $h \in H^{-1/2}(S)$ . Будем искать функцию  $u \in H_{loc}^1(\Omega_S)$ , что означает ограниченность энергии в любом конечном объеме пространства, удовлетво-

ряющую на  $\Omega_S = R^3 \setminus \bar{S}$  следующей краевой задаче для уравнения Гельмгольца:

$$(\Delta + k^2)u = 0 \text{ на } \Omega_S, \text{ Im } k \geq 0, \quad (1)$$

с краевыми условиями на нормальную производную (задача Неймана)

$$\frac{\partial u}{\partial n} = h \text{ на } S, \quad (2)$$

здесь  $n = \{0, 0, 1\}$ .

Для обеспечения единственности решения задачи необходимо, чтобы функция  $u$  удовлетворяла условию на бесконечности (условию Зоммерфельда):

$$\frac{\partial u}{\partial r} - iku = o(r^{-1}) \text{ для } k \neq 0, \quad (3)$$

или

$$u = O(r^{-1}) \text{ для } k = 0 \text{ при } r = |x| \rightarrow \infty.$$

Справедливо следующее утверждение.

**Утверждение 1** [2]. *Если решение краевой задачи Неймана (1) и (2), существует, то оно единственно.*

## 2. Сведение задачи к интегральному уравнению

Основное преимущество применения метода граничных интегральных уравнений к исследованию задач дифракции для уравнения Гельмгольца заключается в том, что подобный подход позволяет свести задачу, поставленную в неограниченной области, к задаче в ограниченной области меньшей размерности, т.е. для границы рассеивателя. Последнее обстоятельство и является решающим для перехода к интегральным уравнениям.

Задача Неймана сводится к интегральному уравнению [2]

$$D_S[u](x) \equiv \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial n_x} \int_S \left( \frac{\partial}{\partial n_y} \frac{e^{ik|x-y|}}{|x-y|} \right) [u](y) dy = -2h(x), \quad x \in S, \quad (4)$$

где  $[\cdot]$  есть изменение значения функции при прохождении через границу области  $S$ .

Уравнение (4) возникает при представлении решения задачи Неймана (1)–(3) в виде потенциала двойного слоя

$$u(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial n_x} \int_S \frac{\partial}{\partial n_y} \frac{e^{ik|x-y|}}{|x-y|} [u](y) dy. \quad (5)$$

Заметим, что представление (4) справедливо для всех  $x \notin S$  ( $x \in \Omega_S$ ). Выражение (4) удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца. Такое представление решения задачи Неймана приводит к автоматическому выпол-

нению условий Зоммерфельда (3) [3]. Требуя выполнения краевых условий для задачи Неймана, опустим точку  $x$  на экран  $S$  и сразу получим интегральное уравнение (4).

Интегральный оператор  $D_S$  может рассматриваться как в классической теории, так и в теории псевдодифференциальных операторов. Разрешимость уравнения (4) основывается на сильной эллиптичности оператора  $D_S$ , которой он обладает в соответствующих пространствах Соболева.

Интегральное уравнение (4) эквивалентно краевой задаче Неймана (1)–(3).

**Утверждение 2** [2]. Пусть  $u \in H_{loc}^1(\Omega_S)$  является решением краевой задачи Неймана (1)–(3), тогда скачок  $[u]_S$  принадлежит пространству  $\tilde{H}^{1/2}(S)$  и является решением гиперсингулярного интегрального уравнения (4). Обратно, если скачок  $[u]_S \in \tilde{H}^{1/2}(S)$  является решением уравнения (4), то функция  $u$  принадлежит пространству  $H_{loc}^1(\Omega_S)$  и является решением краевой задачи Неймана (1)–(3).

### 3. Теоретическое исследование краевой задачи и интегрального уравнения

Для удобства исследования в уравнении (4) введем новое обозначение  $z = -\frac{1}{4\pi}[u]_S$  для задачи Неймана. Тогда уравнение примет вид

$$D_S z(x) \equiv \frac{\partial}{\partial n_x} \int_S \left( \frac{\partial}{\partial n_y} \frac{e^{ik|x-y|}}{|x-y|} \right) z(y) dy = h(x), \quad x \in S. \quad (6)$$

Будем рассматривать оператор  $D_S$  как псевдодифференциальный оператор (ПДО)

$$D_S = \int_{R^2} a_D(\xi) \hat{u}(\xi) e^{ix \cdot \xi} d\xi$$

с символом  $a_D$ , где  $\hat{u}(\xi)$  – преобразование Фурье функции  $u$ .

Главную часть символа  $a_D(\xi)$  составляет  $\langle \xi \rangle$ , так как

$$\sqrt{|\xi|^2 - k^2} = \langle \xi \rangle + \frac{k^2 + 1}{2\langle \xi \rangle} + O(|\xi|^{-3}), \quad |\xi| \rightarrow \infty$$

На основании асимптотических свойств символа  $a_D$  оператора  $D_S$  можно сформулировать утверждения об их эллиптичности в соответствующих пространствах Соболева.

**Утверждение 3** [2]. Оператор  $D_S : \tilde{H}^{1/2}(S) \rightarrow H^{-1/2}(S)$  непрерывен, и существует константа  $\gamma_2 > 0$  и компактный оператор  $C_2 : \tilde{H}^{1/2}(S) \rightarrow H^{-1/2}(S)$  такой, что для любой функции  $v$  из  $\tilde{H}^{1/2}(S)$  выполняется условие

$$((D_s + C_2)v, v)_{L^2(S)} \geq \gamma_2 \|v\|_{\tilde{H}^{1/2}(S)}^2. \quad (7)$$

Из эллиптичности оператора  $D_S$  и утверждения 3 следует утверждение о существовании и единственности решений уравнения (6) в соответствующих пространствах Соболева.

**Утверждение 4** [2]. Пусть  $\text{Im} k \geq 0$ , тогда для любой функции  $h \in H^{-1/2}(S)$  существует единственное решение  $v \in \tilde{H}^{1/2}(S)$  уравнения (6).

#### 4. Аналитические решения задачи Неймана

В случае, когда  $k = 0$ , а  $S = \{x = (x_1, x_2, 0), \sqrt{x_1^2 + x_2^2} < 1\}$  – диск, задача

Неймана для уравнения Гельмгольца может быть решена аналитически. В этом случае уравнение (1) становится уравнением Лапласа

$$\Delta u = 0,$$

а соответствующая краевая задача Неймана – интегральным уравнением следующего вида:

$$\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial n_x} \int_S \frac{\partial}{\partial n_y} \frac{1}{|x-y|} [u](y) dy = -2h(x). \quad (8)$$

Обозначим через  $\tilde{f}_k(\rho)$  коэффициенты ряда Фурье функции  $f$

$$f_R(\rho, \varphi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_k(\rho) e^{-ik\varphi}. \quad (9)$$

Для коэффициентов ряда Фурье справедлива формула

$$\tilde{f}_k(\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) e^{-ik\varphi} d\varphi. \quad (10)$$

Преобразование Ханкеля  $S_{|k|}f$  имеет вид

$$S_{|k|}f(\rho) = \int_0^{\infty} r J_{|k|}(\rho r) f(r) dr, \quad (11)$$

где  $J_{|k|}$  – функция Бесселя первого рода.

Операторы Эрдели – Кобера определяются в [5]:

$$I_{\eta}f(\rho) = \frac{2\rho^{-2\eta-1}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\rho} \frac{u^{2\eta+1}}{\sqrt{\rho^2 - u^2}} f(u) du; \quad (12)$$

$$K_{\eta}f(\rho) = \frac{2\rho^{2\eta}}{\sqrt{\pi}} \int_{\rho}^{\infty} \frac{u^{-2\eta}}{\sqrt{u^2 - \rho^2}} f(u) du. \quad (13)$$

Для решения краевой задачи Неймана введем частичное конечное преобразование Фурье  $Ff : Z \times [0, \infty) \rightarrow C$  функции  $f$ , определенной в  $R^2$ :

$$(Ff)(k, \rho) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) e^{ik\varphi} d\varphi. \quad (14)$$

Для оператора  $D_S$  справедливо следующее представление ( $\omega \in C_0^\infty(0, 1)$ ):

$$\begin{aligned} (D_S \omega)(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) &= (F^{-1} m_1 F \omega)(\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} (S_{|k|} m_1 S_{|k|} F \omega)(k, \rho) e^{ik\varphi} \quad (0 < \rho < \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi), \end{aligned} \quad (15)$$

где мультипликативный оператор  $m_\alpha$  для  $\alpha \in R$  определяется следующим образом:

$$(m_\alpha f)(x) = |x|^\alpha f(x) \quad (x \in R). \quad (16)$$

Кроме этого, формальное обращение выражения  $S_{|k|} m_1 S_{|k|}$  имеет представление

$$(S_{|k|} m_1 S_{|k|})^{-1} = m_{\frac{1}{2}} K_{\frac{|k|}{2}} m_{\frac{1}{4}} m_{\frac{1}{2}} I_{\frac{|k|}{2}}. \quad (17)$$

Для получения обратного оператора  $D_S^{-1}$  необходимо просуммировать ряд Фурье (15) с использованием (17). Для этой цели введем операторы:

$$(I_- f)(\rho, \varphi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left( m_{\frac{1}{2}} I_{\frac{|k|}{2}} F f \right) (k, \rho) e^{-ik\varphi} \quad (0 < \rho < \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi); \quad (18)$$

$$(K_+ f)(\rho, \varphi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left( m_{\frac{1}{2}} K_{\frac{|k|}{2}} m_{\frac{1}{4}} F f \right) (k, \rho) e^{-ik\varphi} \quad (0 < \rho < \infty, 0 \leq \varphi \leq 2\pi). \quad (19)$$

Справедливы следующие утверждения.

**Утверждение 5** [5]. Пусть  $-1 < s < \frac{1}{2}$ . Операторы  $I_-$  и  $K_+$  могут быть непрерывно продолжены до обратимых операторов

$$K_+ : \tilde{H}^s(S) \rightarrow \tilde{H}^{s+\frac{1}{2}}(S); \quad (20)$$

$$I_- : H^s(S) \rightarrow H^{s+\frac{1}{2}}(S). \quad (21)$$

Для заданной функции  $f \in C_0^\infty(S)$   $K_+$  представим в виде

$$(K_+f)(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{|x|>|y|} \frac{(|x|^2 - |y|^2)^{1/2}}{|x-y|^2} f(x) \frac{dx}{|x|^{1/2}} \quad (22)$$

и для функции  $g \in C^\infty(S)$  оператор  $I_-$  имеет представление

$$(I_-g)(y) = \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{|x|<|y|} \frac{(|y|^2 - |x|^2)^{1/2}}{|x-y|^2} g(x) \frac{dx}{|y|^{1/2}}. \quad (23)$$

**Утверждение 6** [5]. Обратный оператор для  $D_S : \tilde{H}^{1/2}(S) \rightarrow H^{-1/2}(S)$  есть

$$D_S^{-1} = K_+I_- . \quad (24)$$

#### 4.1. Аналитическое решение задачи Неймана для правой части $h(\rho, \varphi) = 1$

Коэффициенты ряда Фурье для функции  $h(\rho, \varphi)$  имеют вид

$$\tilde{h}_0(\rho) = 1, \quad \tilde{h}_k(\rho) = 0, \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Воспользовавшись формулой [5]

$$w_k = \rho^{1/2} K_{\frac{|k|}{2}} \frac{1}{4^{1/2}} \chi(0,1) \left( \rho^{-1-|k|} \frac{d}{d\rho} \rho^{|k|+3/2} I_{\frac{|k|}{2} + \frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2\tilde{h}_k$$

и учитывая, что  $k = 0$ , получим

$$w_0 = \rho^{1/2} K_{\frac{1}{4}} \frac{1}{4^{1/2}} \chi(0,1) \left( \rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2.$$

Положим  $C(\rho) = \left( \rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2$ , тогда

$$\rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} C(\rho) = 2, \quad \text{где } I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} C(\rho) := \frac{2\rho^{-3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\rho \frac{u^{3/2}}{\sqrt{\rho^2 - u^2}} C(u) du;$$

$$\rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} \frac{2\rho^{-3/2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\rho \frac{u^{3/2}}{\sqrt{\rho^2 - u^2}} C(u) du = 2.$$

Произведем замену переменных  $\{\rho t = u, \rho dt = du\}$  и обозначим  $\{C(u) = \bar{C}\sqrt{u} = \sqrt{\rho t}, \tilde{C}(t) = \sqrt{\rho t}\}$ , тогда после несложных преобразований получаем

$$\frac{\bar{C}}{\rho\sqrt{\pi}} \frac{d}{d\rho} \rho^2 \int_0^1 \frac{t^2}{\sqrt{1-t^2}} dt = 1.$$

Отсюда  $\bar{C} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}$  и  $C(\rho) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\rho}$ ;

$$\begin{aligned} w_k &= \rho^{1/2} K_{-\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \chi(0,1) C(\rho) = \frac{4\rho^{1/2} \rho^{-1/2}}{\sqrt{\pi}\sqrt{\pi}} \int_0^1 \frac{u^{1/2}}{\rho \sqrt{u^2 - \rho^2}} u^{1/2} du = \\ &= \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{u}{\rho \sqrt{u^2 - \rho^2}} du = \frac{4}{\pi} \sqrt{1 - \rho^2}. \end{aligned}$$

#### 4.2. Аналитическое решение задачи Неймана

для правой части  $h(\rho, \varphi) = \rho^{-1}$

Коэффициенты ряда Фурье для функции  $h(\rho, \varphi)$  имеют вид

$$\tilde{h}_0(\rho) = \rho^{-1}, \quad \tilde{h}_k(\rho) = 0, \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Воспользовавшись формулой [5]

$$w_k = \rho^{1/2} K_{\frac{|k|}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \chi(0,1) \left( \rho^{-1-|k|} \frac{d}{d\rho} \rho^{|k|+3/2} I_{\frac{|k|}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2\tilde{h}_k$$

и учитывая, что  $k = 0$ , получим

$$w_0 = \rho^{1/2} K_{-\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \chi(0,1) \left( \rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2\rho^{-1}.$$

Положим  $C(\rho) = \left( \rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right)^{-1} 2\rho^{-1}$ , тогда

$$\left( \rho^{-1} \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \right) C(\rho) = 2\rho^{-1} \quad \text{или} \quad \frac{d}{d\rho} \rho^{3/2} I_{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} C(\rho) = 2.$$

После несложных преобразований получаем

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\rho \left( \frac{u^{3/2}}{\sqrt{\rho^2 - u^2}} C(\rho) \right) du = 2\rho.$$

Будем искать  $C(\rho)$  в виде  $C(\rho) = \frac{\tilde{C}}{\rho^{1/2}}$ . Подставим это выражение в последнее интегральное равенство и получим

$$\tilde{C} \int_0^{\rho} \frac{u}{\sqrt{\rho^2 - u^2}} du = \sqrt{\pi} \rho.$$

Вычисляем интеграл и получаем значение константы  $\tilde{C} = \sqrt{\pi}$ . Таким образом,

$$C(\rho) = \frac{\sqrt{\pi}}{\rho^{1/2}}.$$

Продолжаем вычисление коэффициента  $w_0$  и получаем:

$$w_0 = \rho^{1/2} K_{-\frac{1}{4}, \frac{1}{2}} \chi(0, 1) \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\rho^{1/2}} \right);$$

$$w_0 = \rho^{1/2} \frac{2\rho^{-1/2}}{\sqrt{\pi}} \int_{\rho}^{\infty} (u^2 - \rho^2)^{-1/2} u^{1/2} \chi(0, 1) \left( \frac{\sqrt{\pi}}{u^{1/2}} \right) du,$$

или

$$w_0 = 2 \int \frac{1}{\rho (u^2 - \rho^2)^{1/2}} du, \text{ и, окончательно, } w_0 = 2 \ln \left( \sqrt{1 - \rho^2} + 1 \right) - 2 \ln(\rho).$$

Аналогичные решения для задачи Дирихле при различных значениях правых частей были получены в [7].

#### **Список литературы**

1. **Колтон, Д.** Методы интегральных уравнений в теории рассеяния : пер. с англ. / Д. Колтон, Р. Кресс. – М. : Мир, 1987. – 312 с.
2. **Stephan, E. P.** Boundary Integral Equations For Screen Problem In  $R^3$  / E. P. Stephan // Integral Equations and Operator Theory. – 1987. – V. 10.
3. **Тихонов, А. Н.** Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Наука, 1966. – 798 с.
4. **Ильинский, А. С.** Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах (Псевдодифференциальные операторы в задачах дифракции) / А. С. Ильинский, Ю. Г. Смирнов. – М. : ИПРЖР, 1996. – 176 с.
5. **Penzel, F.** Sobolev Space Methods For The Laplace Equation In The Exterior Of The Disk / F. Penzel // Integral Equations and Operator Theory. – 1993. – V. 17.
6. **Kress, R.** Linear integral equations / R. Kress // Applied mathematical sciences. – 1989. – V. 82. – 238 с.
7. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический метод решения интегрального уравнения на плоских экранах произвольной формы / М. Ю. Медведик // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 4. – С. 49–55.

**Медведик Михаил Юрьевич**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: \_medv@mail.ru

**Medvedik Mikhail Yuryevich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

**Родионова Ирина Анатольевна**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

**Rodionova Irina Anatolyevna**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

---

УДК 517,3

**Медведик, М. Ю.**

**Некоторые аналитические решения задачи Неймана на диске для уравнения Гельмгольца / М. Ю. Медведик, И. А. Родионова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 31–39.**

## **МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ ТВЕРДОГО ЯДРА ЗЕМЛИ**

*Аннотация.* Предлагается новая математическая модель движения твердого внутреннего ядра Земли, основанная на гравитационном взаимодействии Солнца, Луны, Земли и ядра, как отдельного небесного тела. На ядро также действуют дополнительные силы, обусловленные взаимодействием твердого ядра с другими слоями Земли. Полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений решена методом Мерсона с контролем точности и устойчивости вычислительной схемы.

*Ключевые слова:* внутреннее ядро Земли, математическая модель, метод Мерсона, устойчивость.

*Abstract.* The authors suggest a new mathematic model of the Earth's inner solid core movement. This model is based on the gravitational interaction of the Sun, Moon, Earth and the core as a separate celestial body. The core is induced by extra force resulting from the interaction between the core and other Earth layers. The authors solve the obtained ordinary differential equations by applying the Merson method with computational scheme accuracy and stability control.

*Key words:* the Earth's inner core, mathematic model, Merson method, stability.

### **Введение**

Функционирование отечественной спутниковой радионавигационной системы ГЛОНАСС, интенсивное развитие которой происходит в настоящее время, невозможно без детальной информации о гравитационных аномалиях Земли, одним из источников которых является земное ядро.

В 1936 г. было установлено, что в центре Земли находится твердое внутреннее ядро, окруженное жидким расплавом. А в 1996 г. была опубликована первая работа [1], где сообщалось о сейсмологическом доказательстве существования явления дифференциального вращения твердого внутреннего ядра Земли. То есть установлено отличие вращения твердого ядра от вращения Земли в целом.

Внешнее жидкое ядро начинается на глубине 2900 км и заканчивается на глубине 5150 км [2]. Дальше находится твердое внутреннее ядро. На сегодня изучение движения внутреннего ядра Земли осуществляется тремя способами. Первый способ основан на обработке сейсмических данных, второй – на анализе результатов лабораторных экспериментов, а третий базируется на методах математического моделирования.

Существующие математические модели рассматривают движение внутреннего ядра Земли в поле тяготения твердой оболочки Земли и жидкого внешнего ядра [3–5]. Решается гидродинамическая задача взаимодействия твердого внутреннего ядра и жидкого внешнего ядра. Влияние Солнца и Луны учитывается лишь исходя из аналитических приближений.

В данной работе рассматривается движение внутреннего ядра Земли как отдельного небесного тела, взаимодействующего как с Солнцем и Луной, так и с другими слоями Земли. Целью работы является математиче-

ское моделирование движения твердого внутреннего ядра Земли и выбор метода для численного решения полученной дифференциальной задачи Коши.

### 1. Математическая модель

Наиболее простая физическая модель движения твердого ядра включает в себя четыре объекта – Солнце, Луну, Землю в целом и отдельно твердое внутреннее ядро Земли. Поскольку расчеты ведутся в гелиоцентрической системе координат, то Солнце считается неподвижной точкой с массой  $m_{sun}$ , оказывающей гравитационное воздействие на три остальных объекта.

В предлагаемой модели Луна представляет собой точку с массой  $m_{moon}$ , двигающуюся в поле тяготения Солнца и Земли.

Предполагается, что Земля в целом имеет массу  $m_{earth}$  и вращается с постоянной угловой скоростью, а положение ее центра масс в пространстве совпадает с положением материальной точки массой  $m_{earth}$ , двигающейся в поле тяготения Солнца и Луны.

Твердое внутреннее ядро рассматривается как отдельное небесное тело, находящееся внутри шара из вращающейся вязкой жидкости с плотностью  $\rho_{liquid}$ . Ядро моделируется шаром фиксированного радиуса  $R_{core}$  со сферически симметричным распределением плотности  $\rho_{core}$  и массой  $m_{core}$ . Его вращение вокруг собственной оси в обсуждаемой модели во внимание не принимается. Допускается его текущее смещение от центра Земли в целом, точнее, от центра условной сферы, ограничивающей поверхность Земли. Поэтому учитывается вращение его центра вокруг текущей оси суточного вращения Земли. Поскольку движение твердого ядра осуществляется в жидкой среде, то учитывается также сопротивление жидкости, пропорциональное скорости перемещения твердого ядра относительно окружающей среды.

В итоге на твердое внутреннее ядро Земли в настоящей модели действуют следующие силы.

1. Гравитационная сила Солнца, действующая на ядро, равна

$$\vec{F}_1 = -Gm_{sun}m_{core} \frac{\vec{r}_{core}}{|\vec{r}_{core}|^3},$$

где  $\vec{r}_{core}$  – радиус-вектор между Солнцем и центром тяжести ядра;  $G$  – гравитационная постоянная.

2. Гравитационное воздействие Луны на ядро задается соотношением

$$\vec{F}_2 = -Gm_{moon}m_{core} \frac{\vec{r}_{core} - \vec{r}_{moon}}{|\vec{r}_{core} - \vec{r}_{moon}|^3},$$

где  $\vec{r}_{moon}$  – радиус-вектор между Солнцем и Луной.

3. Сумма гравитационных сил и сил гидростатического давления остальной части Земли, называемая силой Шлихтера, равна

$$\vec{F}_3 = -\frac{4}{3}\pi G m_{core} \rho_{liquid} \left(1 - \frac{\rho_{liquid}}{\rho_{core}}\right) (\vec{r}_{core} - \vec{r}_{center\ of\ earth}),$$

где  $\vec{r}_{center\ of\ earth}$  – радиус-вектор от Солнца до геометрического центра Земли, вычисляемый по формуле

$$\vec{r}_{center\ of\ earth} = \left( m_{earth} \vec{r}_{earth} - \frac{4}{3}\pi R_{core}^3 (\rho_{core} - \rho_{liquid}) \vec{r}_{core} \right) / \frac{4}{3}\pi R_{earth}^3 \rho_{liquid}.$$

4. Центробежная сила, действующая на ядро ввиду смещения его центра от оси вращения Земли в целом, равна

$$\vec{F}_4 = [\vec{w}, [\vec{w}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}]] m_{core} = |\vec{w}|^2 (\vec{a}(\vec{a}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}) - (\vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth})) m_{core},$$

где  $\vec{a} = \frac{\vec{w}}{|\vec{w}|}$ ,  $w = 2\pi / \text{сутки}$  – угловая скорость Земли относительно оси суточного вращения.

5. Экваториальная составляющая силы сопротивления перемещению твердого ядра относительно окружающей его жидкости равна

$$\vec{F}_5 = -\eta \left( \vec{v}_{core} - \vec{v}_{earth} - [\vec{w}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}] \frac{((\vec{v}_{core} - \vec{v}_{earth}), [\vec{a}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}])}{([\vec{a}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}], [\vec{a}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}])} \right) \times \\ \times (1 - |\vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}|) / R_{core},$$

где  $\vec{v}_{core}$ ,  $\vec{v}_{earth}$  – скорости ядра и центра масс Земли соответственно;  $\eta$  – некоторый коэффициент сопротивления окружающей жидкости.

Отметим, что

$$[\vec{w}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}] = |\vec{w}| [\vec{a}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}] = |\vec{w}| \begin{vmatrix} i & j & k \\ \vec{a}_x & \vec{a}_y & \vec{a}_z \\ \Delta \vec{r}_x & \Delta \vec{r}_y & \Delta \vec{r}_z \end{vmatrix},$$

причем вектор  $\vec{a} \parallel \vec{w}$  и  $|\vec{a}| = 1$ .

Итоговая система дифференциальных уравнений, описывающая в рамках предложенной модели орбитальное движение Земли, Луны и твердого внутреннего ядра Земли, выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} m_{earth} \frac{d^2 \vec{r}_{earth}}{dt^2} = -G m_{sun} m_{earth} \frac{\vec{r}_{earth}}{|\vec{r}_{earth}|^3} - G m_{earth} m_{moon} \frac{\vec{r}_{earth} - \vec{r}_{moon}}{|\vec{r}_{earth} - \vec{r}_{moon}|^3}, \\ m_{moon} \frac{d^2 \vec{r}_{moon}}{dt^2} = -G m_{sun} m_{moon} \frac{\vec{r}_{moon}}{|\vec{r}_{moon}|^3} - G m_{earth} m_{moon} \frac{\vec{r}_{moon} - \vec{r}_{earth}}{|\vec{r}_{moon} - \vec{r}_{earth}|^3}, \\ m_{core} \frac{d^2 \vec{r}_{core}}{dt^2} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2 + \vec{F}_3 + \vec{F}_4 + \vec{F}_5. \end{cases} \quad (1)$$

Далее систему дифференциальных уравнений второго порядка (1) сведем к системе дифференциальных уравнений первого порядка, обозначая  $\vec{v}_{earth}$ ,  $\vec{v}_{moon}$ ,  $\vec{v}_{core}$  – скорости Земли, Луны и ядра соответственно:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}_{earth}}{dt} = \vec{v}_{earth}, \\ \frac{d\vec{v}_{earth}}{dt} = -Gm_{sun} \frac{\vec{r}_{earth}}{|\vec{r}_{earth}|^3} - Gm_{moon} \frac{\vec{r}_{earth} - \vec{r}_{moon}}{|\vec{r}_{earth} - \vec{r}_{moon}|^3}, \\ \frac{d\vec{r}_{moon}}{dt} = \vec{v}_{moon}, \\ \frac{d\vec{v}_{moon}}{dt} = -Gm_{sun} \frac{\vec{r}_{moon}}{|\vec{r}_{moon}|^3} - Gm_{earth} \frac{\vec{r}_{moon} - \vec{r}_{earth}}{|\vec{r}_{moon} - \vec{r}_{earth}|^3}, \\ \frac{d\vec{r}_{core}}{dt} = \vec{v}_{core}, \\ \frac{d\vec{v}_{core}}{dt} = \frac{1}{m_{core}} (\vec{F}_1 + \vec{F}_2 + \vec{F}_3 + \vec{F}_4 + \vec{F}_5). \end{array} \right. \quad (2)$$

Для задания движения Луны и Земли в целом необходимы 12 начальных условий: 3 координаты и 3 компоненты скорости для каждого объекта, которые взяты нами из астрономических данных. Для определения траектории движения ядра необходимы 6 начальных условий: 3 координаты и 3 компоненты скорости. В координатах задается начальное отклонение от центра Земли. Компоненты скорости должны учитывать как его орбитальное движение вокруг Солнца, так и составляющую от вращения твердого ядра вокруг оси суточного вращения Земли ввиду его отклонения от условного центра Земли, т.е. начальные скорости движения ядра и геометрического центра Земли связаны соотношением

$$\vec{v}_{core} = \vec{v}_{earth} + [\vec{\omega}, \vec{r}_{core} - \vec{r}_{earth}].$$

## 2. Выбор численного метода

Устойчивость численного метода исследуется на линейном скалярном уравнении

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad t \geq 0,$$

с комплексными  $\lambda$ ,  $\text{Re}(\lambda) < 0$ .

Применяя численную схему для решения данной задачи, получим

$$y_{n+1} = Q(z)y_n,$$

где  $z = h\lambda$ ,  $h$  – шаг интегрирования;  $Q(z)$  – функция устойчивости.

Условие устойчивости имеет вид

$$|Q(z)| \leq 1.$$

Для выбора численного метода решения полученной задачи Коши (2) была исследована матрица Якоби системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Среди собственных чисел матрицы Якоби имеются отрицательные, положительные и мнимые собственные числа. Следовательно, метод интегрирования должен быть устойчивым в левой полуплоскости комплексной плоскости, причем модуль функции устойчивости должен быть равен единице на мнимой оси. Такими свойствами обладает известный пятистадийный метод Рунге – Кутты – Мерсона четвертого порядка точности [6], который имеет вид

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_4 + \frac{1}{6}k_5; \\ k_1 &= hf(y_n); \quad k_2 = hf\left(y_n + \frac{1}{3}k_1\right); \quad k_3 = hf\left(y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2\right); \\ k_4 &= hf\left(y_n + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_3\right); \quad k_5 = hf\left(y_n + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4\right). \end{aligned} \quad (3)$$

Пятое вычисление правой части не дает увеличение порядка с четвертого до пятого, однако позволяет расширить интервал устойчивости до 3,5 [7]. Из анализа неравенства  $|Q(z)| \leq 1$  следует, что область устойчивости метода Мерсона достаточно велика как по вещественной, так и по мнимой оси комплексной плоскости  $z = h\lambda$ . Это позволяет использовать этот метод при решении задач, в которых собственные числа матрицы Якоби имеют большую мнимую часть, как в нашем случае.

Для контроля точности метода применяется неравенство из работы [8]:

$$\|2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5\| \leq 150\epsilon^{5/4}, \quad (4)$$

а для контроля устойчивости – из работы [7]:

$$6 \max_{1 \leq i \leq N} |(k_3 - k_2)_i| / |(k_2 - k_1)_i| \leq 3,5. \quad (5)$$

Алгоритм реализован на языке C++.

Решения полученной системы отличаются сильной разномасштабностью. Поэтому при численном интегрировании этой системы дифференциальных уравнений необходима повышенная точность арифметических операций, что достигается применением QD-библиотеки [9].

### **Заключение**

Проведенные численные эксперименты показали, что время выхода на стационарную орбиту твердого ядра относительно центра Земли сильно зависит от сопротивления окружающей его жидкости  $\eta$ . Один из примеров рассчитанной траектории движения ядра вокруг центра Земли представлен на рис. 1. Поэтому необходимо дальнейшее уточнение параметра сопротивления  $\eta$  либо из физических принципов, либо путем решения некоторых обратных задач.

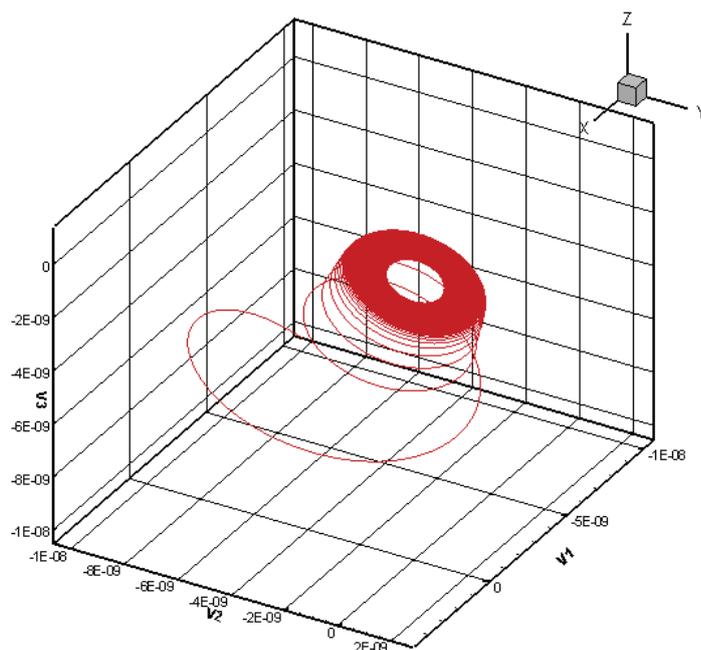


Рис. 1. Траектория движения внутреннего ядра

#### Список литературы

1. **Song, X.** Seismological evidence for differential rotation of the Earth's inner core / X. Song, P. G. Richard // Nature. – 1996. – V. 382. – P. 221–224.
2. **Добрецов, Н. Л.** Глубинная геодинамика / Н. Л. Добрецов, А. Г. Кирдяшкин, А. А. Кирдяшкин. – Новосибирск : Изд-во СО РАН. Филиал «ГЕО», 2001.
3. **Пасынок, С. Л.** О полярных колебаниях внутреннего ядра Земли в поле сил тяжести и гидростатического давления / С. Л. Пасынок // Труды ГАИШ. – М. : МГУ : ГАИШ, 1996. – Т. LXV. – С. 130–135.
4. **Григорьев, Ю. М.** О влиянии приливных деформаций на вращение внутреннего ядра Земли / Ю. М. Григорьев, О. Е. Скрябина // Тезисы докладов. – Новосибирск, 2009. – С. 56–67.
5. **Баркин, Ю. В.** К динамике твердого ядра Земли / Ю. В. Баркин // Труды ГАИШ. – М. : МГУ : ГАИШ, 1996. – Т. LXV. – С. 136–145.
6. **Merson, R. H.** An operational methods for integration processes / R. H. Merson // Proc. of Symp. on Data Processing. Weapons Research Establishment. – Salisbury, Australia, 1957.
7. **Новиков, Е. А.** Явные методы для жестких систем / Е. А. Новиков. – Новосибирск : Наука, 1997. – 197 с.
8. **Демидов, Г. В.** Об одном способе контроля точности при интегрировании обыкновенных дифференциальных уравнений / Г. В. Демидов, Е. А. Новиков // Теоретическая электроника. – 1984. – № 37. – С. 57–65.
9. **Yozo Hida.** Quad-double arithmetic: Algorithms, implementation, and application / Yozo Hida, Xiaoye S. Li, David H. Bailey. // Technical Report LBNL-46996 (Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94720, October 2000). – Berkeley, 2000.

***Исаева Светлана Ивановна***

старший преподаватель, кафедра  
математического обеспечения  
дискретных устройств и систем,  
Сибирский федеральный университет

E-mail: sv.is@mail.ru

***Isayeva Svetlana Ivanovna***

Senior lecturer, sub-department of Software  
for Discrete Devices and Systems,  
Siberian Federal University

***Шайдуров Владимир Викторович***

доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН, Институт  
вычислительного моделирования  
Сибирского отделения Российской  
академии наук

E-mail: shidurov@icm.krasn.ru

***Shaydurov Vladimir Victorovich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, corresponding member  
of the Russian Academy of Sciences,  
Institute of computational SB RAS

---

УДК 51-72

**Исаева, С. И.**

**Математическая модель движения твердого ядра Земли / С. И. Исаева, В. В. Шайдуров // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 40–46.**

## ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О РАСПРОСТРАНЕНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В СЛАБО НАПРАВЛЯЮЩИХ ВОЛНОВОДАХ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Изучается задача о распространении электромагнитных волн в слабо направляющем диэлектрическом волноводе. Задача сводится к линейной задаче на собственные значения для интегрального оператора с симметричным, положительным, слабополярным ядром. Для решения используется метод Галеркина. Представлены результаты численных экспериментов.

*Ключевые слова:* распространение электромагнитных волн в волноводе, задача на собственные значения, интегральные уравнения, численный метод.

*Abstract.* The article analyses a problem of electromagnetic waves propagation in weakly guiding dielectric waveguide. The problem is reduced to the linear eigenvalue problem for integral operator with symmetric, positive, weakly polar kernel. The authors apply the Galerkin method for problem solving. The article introduces the numerical results.

*Key words:* propagation of electromagnetic waves in waveguides, eigenvalue problems, integral equations, numerical methods.

### Введение

Интерес к задачам о собственных волнах диэлектрических волноводов стремительно возрастает в течение последних двух десятилетий в связи с бурным развитием оптических телекоммуникационных технологий передачи данных на большие расстояния [1] и использованием в радиоэлектронной промышленности миниатюрных интегрированных оптических схем вместо классических электрических [2]. Эти задачи являются спектральными задачами теории дифракции, т.е. задачами поиска частных решений уравнений Максвелла в виде бегущих (собственных) волн в неограниченных областях, удовлетворяющих условиям сопряжения на границах раздела сред и соответствующим условиям на бесконечности [3]. Достаточно эффективные и универсальные алгоритмы решения задач дифракции в неограниченных областях основаны на переходе к интегральным уравнениям (см. [4–7]).

В данной статье метод интегральных уравнений применяется для изучения электромагнитных волн, распространяющихся в диэлектрическом волноводе, показатель преломления которого в области поперечного сечения является функцией, мало отличающейся от постоянного показателя преломления окружающей среды. Это позволяет использовать известное скалярное приближение слабо направляющего волновода [8]. Задача сводится к линейной задаче для интегрального оператора с симметричным, положительным, слабополярным ядром. Доказывается теорема о существовании характеристических чисел и собственных функций. Для приближенного решения задачи используется метод Галеркина. Представлены результаты численных экспериментов.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 09-01-97009.

### 1. Постановка задачи

Задача о поверхностных волнах слабо направляющего диэлектрического волновода заключается [8] в определении таких значений частоты электромагнитных колебаний  $\omega > 0$  и постоянных распространений  $\beta > 0$ , при которых существуют нетривиальные, экспоненциально убывающие на бесконечности функции  $u$ , удовлетворяющие уравнениям

$$\left[ \Delta + (k^2 n^2 - \beta^2) \right] u = 0, \quad x \in \Omega; \quad (1)$$

$$\left[ \Delta + (k^2 n_\infty^2 - \beta^2) \right] u = 0, \quad x \in \Omega_\infty = \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}; \quad (2)$$

$$u^+ = u^-, \quad \frac{\partial u^+}{\partial \nu} = \frac{\partial u^-}{\partial \nu}, \quad x \in \Gamma. \quad (3)$$

Здесь  $\Omega$  – ограниченная область на плоскости  $\mathbb{R}^2$ , ее граница  $\Gamma$  – липшицева кривая (см. рис. 1);  $u^+(u^-)$  – предельное значение функции  $u$  извне (изнутри) контура  $\Gamma$ ;  $\partial u / \partial \nu$  – производная по внешней нормали;  $n$  – показатель преломления волновода;  $n_\infty > 0$  – постоянный показатель преломления окружающей среды;  $k^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0$  – продольное волновое число;  $\epsilon_0(\mu_0)$  – электрическая (магнитная) постоянная. Будем считать, что показатель преломления непрерывен и непрерывно дифференцируем в области  $\Omega$ . Предположим также, что  $n(x) > n_\infty$  при  $x \in \Omega$ , обозначим  $n_+ = \max_{x \in \Omega} n(x)$ .

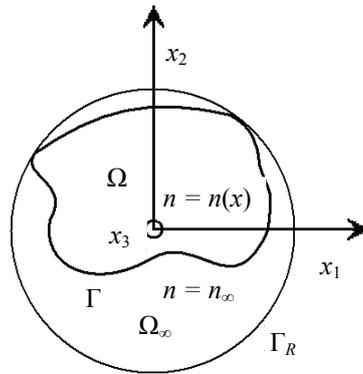


Рис. 1. Поперечное сечение волновода

Будем разыскивать нетривиальные решения  $u$  задачи (1)–(3) в классе функций, непрерывных и непрерывно дифференцируемых в  $\bar{\Omega}$  и  $\bar{\Omega}_\infty$ , дважды непрерывно дифференцируемых в  $\Omega$  и  $\Omega_\infty$ . Обозначим это множество функций через  $U$ . В работе [3] доказано, что для существования экспоненциально убывающих на бесконечности решений задачи (1), (3) необходимо, чтобы  $(\beta, \omega) \in \Lambda$ , где  $\Lambda = \{(\beta, \omega) : \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} n_\infty < \beta < \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} n_+, \omega > 0\}$ . Если  $(\beta, \omega) \in \Lambda$ ,

то поперечное волновое число  $\sigma = \sqrt{\beta^2 - k^2 n_\infty^2}$  является вещественным, положительным и определяет скорость затухания амплитуд собственных волн на бесконечности. Точнее,

$$u(x) = \exp(-\sigma|x|) O\left(\frac{1}{\sqrt{|x|}}\right), \quad |x| \rightarrow \infty. \quad (4)$$

Задачу о собственных волнах слабо направляющего цилиндрического диэлектрического волновода сформулируем теперь следующим образом. Требуется найти  $(\beta, \omega) \in \Lambda$  и ненулевые функции  $u \in U$ , удовлетворяющие условиям (1)–(4).

## 2. Существование решений задачи

Сведем задачу (1)–(4) к спектральной задаче для интегрального оператора.

**Лемма 1.** Пусть  $u$  – решение задачи (1)–(4), отвечающее некоторым значениям спектральных параметров  $(\beta, \omega) \in \Lambda$ . Тогда

$$u(x) = (A(\sigma)u)(x), \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad (5)$$

где

$$(A(\sigma)u)(x) = \int_{\Omega} \Phi(\sigma; x, y) p^2(y) u(y) dy; \quad (6)$$

$$p^2(y) = k^2(n^2(y) - n_\infty^2);$$

$$\Phi(\sigma; x, y) = \frac{1}{2\pi} K_0(\sigma|x-y|). \quad (7)$$

Здесь  $K_0$  – функция Макдональда (см. [9]).

**Доказательство.** Функция  $u$  удовлетворяет в области  $\Omega_\infty$  однородному уравнению Гельмгольца с постоянным отрицательным коэффициентом:

$$\Delta u - \sigma^2 u = 0, \quad x \in \Omega_\infty. \quad (8)$$

Запишем в области  $\Omega$  уравнение (2) формально в виде неоднородного уравнения Гельмгольца с тем же коэффициентом:

$$\Delta u - \sigma^2 u = -p^2 u, \quad x \in \Omega, \quad (9)$$

где функция  $p$  определена в (6). Применим в области  $\Omega$  формулу Грина:

$$w(x)u(x) = \int_{\Gamma} \left( \Phi(x, y) \frac{\partial u(y)}{\partial \nu(y)} - u(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial \nu} \right) dl(y) + \int_{\Omega} \Phi(x, y) p^2(y) u(y) dy, \quad (10)$$

где  $w(x) = \{1, x \in \Omega; 1/2, x \in \Gamma; 0, x \in \Omega_\infty\}$ . Отметим, что при  $(\beta, \sigma) \in \Lambda$  фундаментальное решение  $\Phi$  уравнения Гельмгольца (8) имеет вид (7), так как в этом случае

$$\Phi(\sigma; x, y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(i\sigma|x-y|) = \frac{1}{2\pi} K_0(\sigma|x-y|), \quad \sigma > 0.$$

Обозначим  $\Omega_R$  область, ограниченную контуром  $\Gamma$  и окружностью  $\Gamma_R$  достаточно большого радиуса  $R$  такого, что область  $\Omega$  целиком лежит в круге этого радиуса. Применим в области  $\Omega_R$  формулу Грина:

$$\begin{aligned} w_R(x)u(x) = & -\int_{\Gamma} \left( \Phi(x, y) \frac{\partial u(y)}{\partial v(y)} - u(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial v(y)} \right) dl(y) + \\ & + \int_{\Gamma_R} \left( \Phi(x, y) \frac{\partial u(y)}{\partial v(y)} - u(y) \frac{\partial \Phi(x, y)}{\partial v(y)} \right) dl(y), \end{aligned} \quad (11)$$

где  $w_R(x) = \{1, x \in \Omega_R; 1/2, x \in \Gamma; 0, x \in \Omega\}$ . Вычислим предел при  $R \rightarrow \infty$  от второго интеграла в правой части равенства (11). Подынтегральное выражение экспоненциально убывает на бесконечности в силу асимптотики (4) и экспоненциального убывания на бесконечности функции Макдональда [9]. Следовательно, искомый предел равен нулю. Сложим теперь полученное предельное выражение с равенством (10), учитывая условия сопряжения (3). В результате получим искомое интегральное представление (5). Лемма доказана.

Равенство (5) при  $x \in \Omega$  представляет собой спектральную задачу для интегрального оператора, которую запишем в виде

$$u(x) = \lambda \int_{\Omega} \Phi(\sigma; x, y) g^2(y) u(y) dy, \quad x \in \Omega, \quad (12)$$

где  $g^2(x) = (n^2(x) - n_{\infty}^2)/(n_+^2 - n_{\infty}^2)$ ,  $\lambda = k^2(n_+^2 - n_{\infty}^2)$ .

Умножим обе части равенства (12) на  $g$  и положим  $v = gu$ . Тогда

$$v(x) = \lambda \int_{\Omega} \Phi(\sigma; x, y) g(x) g(y) v(y) dy. \quad (13)$$

Обозначим  $B(\sigma)$  интегральный оператор, определяемый правой частью последнего равенства,

$$(B(\sigma)v)(x) = \int_{\Omega} \Phi(\sigma; x, y) g(x) g(y) v(y) dy. \quad (14)$$

Будем рассматривать оператор  $B(\sigma)$  как оператор, действующий в пространстве вещественнозначных интегрируемых с квадратом функций  $L_2(\Omega)$  со стандартным скалярным произведением. Запишем задачу (13) в операторном виде:

$$v = \lambda B(\sigma)v. \quad (15)$$

**Лемма 2.** *При любом  $\sigma > 0$  ядро оператора  $B(\sigma)$  является симметричным, положительным и слабополярным.*

**Доказательство.** Пусть  $\sigma > 0$ . Ядро оператора  $B$  имеет вид

$$K(\sigma; x, y) = \frac{1}{2\pi} K_0(\sigma |x - y|) g(x) g(y).$$

Функция  $K_0(z) > 0$  при  $z > 0$  [9]. Функция

$$g = \left( n^2 - n_\infty^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( n_+^2 - n_\infty^2 \right)^{-\frac{1}{2}} > 0,$$

так как  $n_+ \geq n(x) > n_\infty$  при  $x \in \Omega$ .

Таким образом, ядро  $K$  положительное. Функция  $K_0$  зависит от расстояния между точками  $x$  и  $y$ , поэтому ядро  $K$  симметричное. Запишем ядро  $K$  формально в виде

$$K(\sigma |x - y|) = \frac{K_0(\sigma |x - y|) g(x) g(y) |x - y|^\alpha}{2\pi |x - y|^\alpha}, \quad \alpha < 1.$$

Так как функция  $K_0(\sigma |x - y|)$  имеет логарифмическую особенность при  $|x - y| \rightarrow 0$ , то функция  $K_0(\sigma |x - y|) |x - y|^\alpha$ ,  $\alpha < 1$ , непрерывна в области  $\bar{\Omega} \times \bar{\Omega}$ . Следовательно, ядро слабополярное. Лемма доказана.

При фиксированных значениях параметра  $\sigma$  задачу (15) удобно рассматривать как линейную спектральную задачу определения характеристических чисел  $\lambda$  и собственных функций  $v$  оператора  $B$  (см. [10]). Если  $(\beta, \omega) \in \Lambda$ , то параметры  $\sigma$  и  $\lambda$  должны удовлетворять следующим условиям:  $\lambda > 0$ ,  $0 < \sigma < \sqrt{\lambda}$ . Итак, требуется найти такие  $(\lambda, \sigma) \in \Psi$ , где  $\Psi = \{(\lambda, \sigma) : 0 < \sigma < \sqrt{\lambda}, \lambda > 0\}$ , и ненулевые функции  $v \in L_2(\Omega)$ , удовлетворяющие равенству (15). Задачи (15) и (1)–(4) эквивалентны, а именно справедлива

**Теорема 1.** Если ненулевая функция  $u \in U$  и параметры  $(\beta, \omega) \in \Lambda$  удовлетворяют условиям (1)–(4), то

$$v = gu \in L_2(\Omega), \quad \lambda = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 (n_+^2 - n_\infty^2), \quad \sigma = \sqrt{\beta^2 - \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 n_\infty^2}$$

удовлетворяют равенству (15). С другой стороны, если для ненулевой функции  $v \in L_2(\Omega)$  и  $(\lambda, \sigma) \in \Psi$  выполняется равенство (14), то

$$u = \lambda B(\sigma) (g^{-1} v) \in U;$$

$$\beta = \left( \sigma^2 + \lambda \frac{n_\infty^2}{n_+^2 - n_\infty^2} \right)^{1/2}; \quad \omega = \left( \frac{\lambda}{\varepsilon_0 \mu_0 (n_+^2 - n_\infty^2)} \right)^{1/2} \quad (16)$$

удовлетворяют условиям (1)–(4).

**Доказательство.** Первое утверждение теоремы непосредственно следует из леммы 1. Докажем второе утверждение. Пусть для ненулевой функции  $v \in L_2(\Omega)$  и  $(\lambda, \sigma) \in \Psi$  выполняется равенство (18). Ядро оператора  $B(\sigma)$  слабополярное. Следовательно, функция  $u = \lambda B(\sigma) (g^{-1} v)$  непрерывна в  $\bar{\Omega}$

[10]. Теперь в силу известных свойств потенциала площади [10] функция  $u$  непрерывна и непрерывно дифференцируема в  $\mathbb{R}^2$ , дважды непрерывно дифференцируема в  $\Omega$  и  $\Omega_\infty$ ; кроме того, функция  $u$  и параметры  $\beta$ ,  $\omega$ , определяемые равенствами (16), удовлетворяют уравнениям (1), (2). Условие (4) экспоненциального убывания функции  $u$  следует из соответствующего поведения на бесконечности функции Макдональда [9]. Теорема доказана.

Относительно существования решений задачи (15) справедлива

**Теорема 2.** *Для любого  $\sigma > 0$  справедливы следующие утверждения:*

1) *существует счетное множество положительных характеристических чисел  $\lambda_i$ ,  $i = 1, 2$ , с единственной точкой накопления на бесконечности;*

2) *система собственных функций  $\{v_k\}$  может быть выбрана ортонормальной;*

3) *наименьшее по модулю характеристическое число  $\lambda_1$  положительное и простое, соответствующая собственная функция  $v_1$  положительна в  $\bar{\Omega}$ ;*

4)  $\lambda_1 \rightarrow 0$  при  $\sigma \rightarrow 0$ .

**Доказательство.** Первые три утверждения теоремы следуют из леммы 2 и результатов спектральной теории интегральных операторов с симметричными, положительными, слабо полярными ядрами [10]. Докажем, что  $\lambda_1 \rightarrow 0$  при  $\sigma \rightarrow 0$ . Используем вариационный принцип для первого характеристического числа  $\lambda_1$ :

$$\lambda_1 = \inf_{f \in L_2(\Omega)} \frac{(f, f)}{(B(\sigma)f, f)}.$$

В силу непрерывной зависимости ядра оператора  $B$  от  $\sigma$  функция  $\lambda_1 = \lambda_1(\sigma)$  непрерывна [3]. Так как ядро оператора  $B$  имеет логарифмическую особенность, для любой функции  $f \in L_2(\Omega)$  имеем  $(B(\sigma)f, f) \rightarrow \infty$  при  $\sigma \rightarrow 0$ . Следовательно,  $\lambda_1 \rightarrow 0$  при  $\sigma \rightarrow 0$ . Теорема доказана.

### 3. Численный метод

Для численного решения задачи применим метод Галеркина. Произведем триангуляцию области:

$$\Omega_N = \bigcup_{k=1}^N \Omega_k \subseteq \Omega.$$

Выберем в качестве базисных функций  $\varphi_k$  характеристические функции для каждого треугольника  $\Omega_k$ . Приближенное решение  $v^N$  будем разыскивать в виде

$$v^N = \sum_{k=1}^N w_k \varphi_k. \quad (17)$$

Подставим представление (17) в формулу (15). Используя линейность оператора  $B$ , получим

$$\sum_{k=1}^N w_k \varphi_k - \lambda \left( \sum_{k=1}^N w_k B(\sigma) \varphi_k \right) = 0.$$

Для определения коэффициентов  $w_k$  потребуем, чтобы левая часть последнего равенства была ортогональна функциям  $\varphi_l$ ,  $l = \overline{1, N}$ :

$$\left( \sum_{j=1}^N w_j \varphi_j, \varphi_l \right) - \left( \lambda \sum_{k=1}^N w_k B(\sigma) \varphi_k, \varphi_l \right) = 0, \quad l = \overline{1, N}.$$

Следовательно,

$$w_l \int_{\Omega_l} dx = \lambda \sum_{k=1}^N w_k \int_{\Omega_l} \int_{\Omega_k} \Phi(\sigma; x, y) g(x) g(y) dy dx, \quad l = \overline{1, N}.$$

Таким образом, мы пришли к спектральной задаче

$$w_l \text{mes}(\Omega_l) = \lambda \sum_{k=1}^N \alpha_{lk} w_k, \quad l = \overline{1, N},$$

$$\text{где } \alpha_{lk} = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_l} \int_{\Omega_k} K_0(\sigma |x - y|) g(x) g(y) dy dx, \quad l, k = \overline{1, N}.$$

Опишем способ вычисления диагональных элементов  $\alpha_{ll}$ . Будем аппроксимировать функцию  $g$  константой на каждом треугольнике  $\Omega_l$ . Внешний интеграл по  $x$  вычислим следующим образом:

$$\alpha_{ll} = \frac{g^2(\xi_l) \text{mes}(\Omega_l)}{2\pi} \int_{\Omega_l} K_0(\sigma |\xi_l - y|) dy,$$

где  $\xi_l$  – центр тяжести треугольника  $\Omega_l$ . Ядро интегрального оператора имеет логарифмическую особенность при совпадении аргументов. Выделим эту особенность явно:

$$\alpha_{ll} = \frac{g^2(\xi_l) \text{mes}(\Omega_l)}{2\pi} \left( \int_{\Omega_l} \ln \frac{1}{|\xi_l - y|} dy + \int_{\Omega_l} \Phi_0(\sigma; |\xi_l - y|) dy \right),$$

где  $\Phi_0(\sigma; \xi_l, y) = K_0(\sigma |\xi_l - y|) - \ln \frac{1}{|\xi_l - y|}$  – функция, не имеющая особенности. Нетрудно видеть, что  $\Phi_0(\sigma, \xi_l, \xi_l) = -\ln \frac{\sigma Y}{2}$ . Интеграл от логарифма вычисляется аналитически и имеет значение

$$\int_{\Omega_l} \ln \frac{1}{|\xi_l - y|} dy = \left( \frac{3}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \text{mes}(\Omega_l).$$

Аппроксимируем интеграл от функции  $\Phi_0$  выражением

$$\int_{\Omega_i} \Phi_0(\sigma, \xi_l, y) dy = -\ln \frac{\sigma \gamma}{2} \text{mes}(\Omega_l).$$

Формула для вычисления элемент  $\alpha_{ll}$  принимает следующий вид:

$$\alpha_{ll} = \frac{g^2(\xi_l) \text{mes}^2(\Omega_l)}{2\pi} \left( \frac{3}{2} - \frac{\pi}{4} - \ln \frac{\sigma \gamma}{2} \right).$$

Внедиагональные элементы могут быть вычислены по формуле

$$\alpha_{lk} = \frac{\text{mes}(\Omega_l) \text{mes}(\Omega_k)}{2\pi} K_0(\sigma |\xi_l - \xi_k|) g(\xi_l) g(\xi_k).$$

Запишем полученную алгебраическую задачу в матричном виде:

$$S w = \lambda A(\sigma) w, \tag{18}$$

где  $S = \text{diag}(\text{mes}(\Omega_1), \text{mes}(\Omega_2), \dots, \text{mes}(\Omega_N))$ .

Таким образом, мы свели исходную задачу к обобщенной задаче на собственные значения (18), которая решается при каждом  $\sigma$ .

#### 4. Результаты численных экспериментов

Для волновода кругового поперечного сечения с постоянным показателем преломления известно точное решение задачи [8]. Опишем результаты численных экспериментов для этого случая. На рис. 2 непрерывными линиями показаны дисперсионные кривые, графики функций  $\lambda_k = \lambda_k(\sigma)$ , для  $k = 1, \dots, 10$ , построенные с помощью метода Галеркина. Кружочками обозначены точные решения задачи.

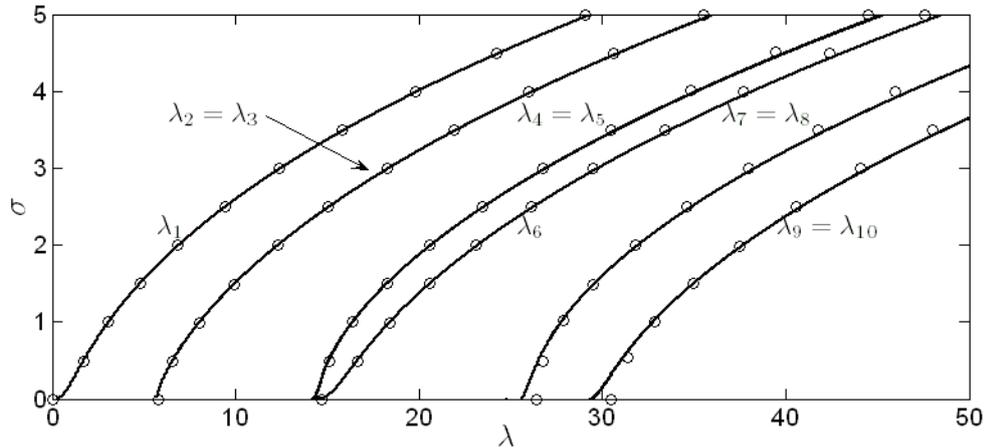


Рис. 2. Дисперсионные кривые для поверхностных собственных волн волновода кругового сечения. Сплошные линии – результаты расчетов методом Галеркина, кружочки – точное решение

В табл. 1 приведена зависимость относительной ошибки  $\varepsilon = \frac{|\lambda_6^2 - \bar{\lambda}_6^2|}{\lambda_6^2}$  и величины  $e = \frac{\varepsilon}{h^2}$  от количества треугольников  $N$ . Здесь  $\lambda_6 = 18,4324$  – точное значение характеристического числа;  $\bar{\lambda}_6$  – значение, полученное при расчете методом Галеркина;  $h$  максимальная длина стороны треугольника. Видно, что с увеличением числа  $N$  относительная погрешность  $\varepsilon$  убывает, а величина  $e$  принимает постоянное значение, следовательно, скорость сходимости имеет второй порядок.

Таблица 1  
Результаты численных расчетов для собственного значения  $\lambda_6$   
для волновода кругового поперечного сечения

$N$	64	256	1032	2304	4128	6528
$h$	0,4856	0,2594	0,1184	0,0875	0,0620	0,0491
$\bar{\lambda}_6$	12,3395	16,7829	18,0594	18,2892	18,3695	18,4013
$\varepsilon$	0,3306	0,0895	0,0202	0,0078	0,0034	0,0017
$e$	1,4018	1,3299	1,4435	1,0147	0,8877	0,6999

На рис. 3 приведены линии уровня собственных функций, построенные при  $\sigma = 1$  и  $N = 4128$ .

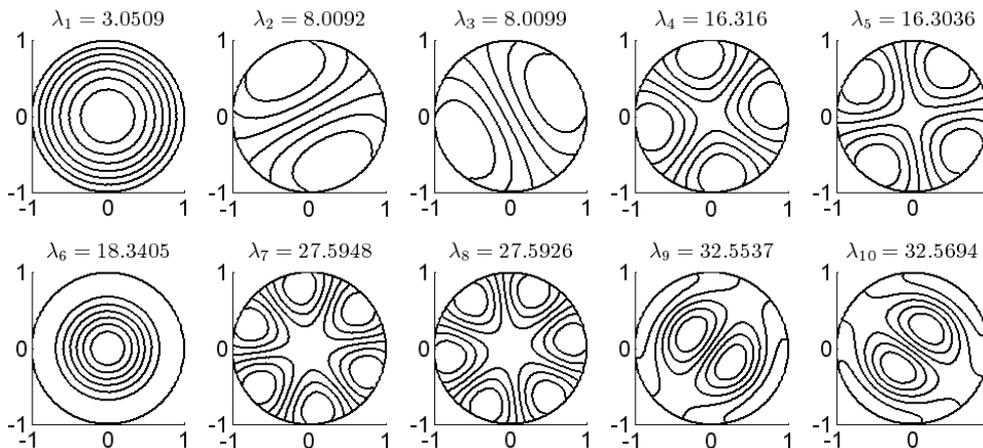


Рис. 3. Линии уровня собственных функций волновода кругового поперечного сечения при  $\sigma = 1$

Приведем результаты расчетов для волновода прямоугольного поперечного сечения. На рис. 4 непрерывными линиями показаны дисперсионные кривые, графики функций  $\lambda_k = \lambda_k(\sigma)$  для  $k = 1, \dots, 10$ , построенные с помощью метода Галеркина. Кружочками обозначены данные из работы [11], полученные методом контурных интегральных уравнений. На рис. 5 приведены линии уровня собственных функций  $v_k^N$ , построенные при  $\sigma = 1$  и  $N = 6656$ .

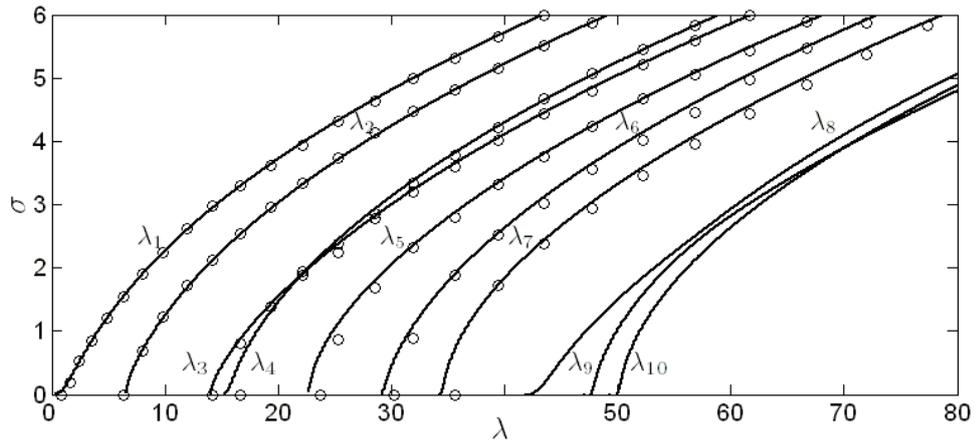


Рис 4. Дисперсионные кривые для поверхностных собственных волн волновода прямоугольного сечения. Сплошные линии – результаты расчетов методом Галеркина, кружочки – данные из работы [11]

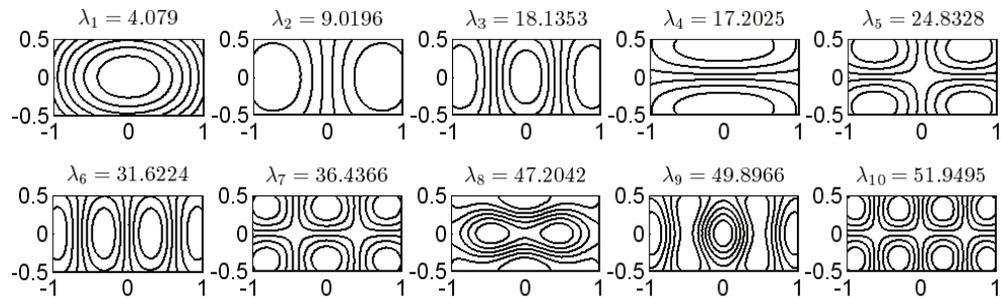


Рис 5. Линии уровня собственных функций волновода прямоугольного поперечного сечения при  $\sigma = 1$

#### Список литературы

1. **Karimov, I. P.** Optical Fiber Telecommunications III / I. P. Karimov, T. L. Koch. – New York : Academic Press, 1997. – 437 p.
2. **Hunspenger, R. G.** Integrated optics: theory and technology / R. G. Hunspenger // Optical Sciences 33. – New York : Springer-Verlag, 1991. – 426 p.
3. **Даутов, Р. З.** Метод интегральных уравнений и точные нелокальные граничные условия в теории диэлектрических волноводов / Р. З. Даутов, Е. М. Карчевский. – Казань : Казан. гос. ун-т, 2009. – 271 с.
4. **Колтон, Д.** Методы интегральных уравнений в теории рассеяния / Д. Колтон, Р. Кресс. – М. : Мир, 1987. – 312 с.
5. **Ильинский, А. С.** Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах (Псевдодифференциальные операторы в задачах дифракции) / А. С. Ильинский, Ю. Г. Смирнов. – М. : ИПРЖР, 1996. – 176 с.
6. **Самохин, А. Б.** Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – М. : Радио и связь, 1998. – 160 с.
7. **Смирнов, Ю. Г.** Математические методы исследования задач электродинамики / Ю. Г. Смирнов. – Пенза : Информационно-издательский центр ПензГУ, 2009. – 268 с.
8. **Снайдер, А.** Теория оптических волноводов / А. Снайдер, Дж. Лав. – М. : Радио и связь, 1987. – 656 с.

9. **Янке, Е.** Специальные функции / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – М. : Наука, 1968. – 344 с.
10. **Владимиров, В. С.** Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – М. : Наука, 1976. – 527 с.
11. **Eyges, L.** Modes of dielectric waveguides of arbitrary cross sectional shape / L. Eyges, P. Gianino, P. Wintersteiner // J. Opt. Soc. Am. – 1979. – V. 69, № 9. – P. 1226–1235.

---

**Фролов Александр Геннадьевич**

студент, кафедра прикладной математики, Казанский (Приволжский) федеральный университет

E-mail: Alexander\_ksu@mail.ru

**Frolov Alexander Gennadyevich**

Student, sub-department of applied mathematics, Kazan Federal University

**Карчевский Евгений Михайлович**

доктор физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной математики, Казанский (Приволжский) федеральный университет

E-mail: Alexander\_ksu@mail.ru

**Karchevsky Evgeny Mikhaylovich**

Doctor of physical and mathematical sciences, associate professor, sub-department of applied mathematics, Kazan Federal University

---

УДК 517.9

**Карчевский, Е. М.**

**Численное решение задачи о распространении электромагнитных волн в слабо направляющих волноводах** / Е. М. Карчевский, А. Г. Фролов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 47–57.

## ОБ ОДНОМ КРИТЕРИИ УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ПОСЛЕДЕЙСТВИЕМ

*Аннотация.* Получены критерии устойчивости решений нелинейных дифференциальных уравнений с последействием в банаховых пространствах. Приводимые критерии справедливы как в регулярном, так и в критических случаях.

*Ключевые слова:* дифференциальные уравнения с последействием, критерии устойчивости, банаховы пространства.

*Abstract.* The article introduces criteria of solution stability of differential equations with aftereffect. These criteria are valid in the regular and singular cases.

*Key words:* differential equations with aftereffect, criteria of stability, Banach spaces.

### Введение

Устойчивость решений дифференциальных уравнений с последействием исследовалась многими авторами [1–3]. При этом большое внимание уделялось исследованию устойчивости решений уравнений с последействием в критических случаях [4].

В работах [5, 6] предложен метод исследования устойчивости решений систем нелинейных дифференциальных уравнений в критическом случае одного нулевого корня, основанный на исследовании спектра якобиана правой части уравнения в окрестности возмущенного решения. В работах [7, 8] он распространен на дифференциальные и разностные уравнения в банаховых пространствах и на всевозможные критические случаи. При этом вместо спектров операторов исследуются логарифмические нормы и спектры действительных частей множества специальным образом построенных матриц. Аналогичный подход использован в статьях [9, 10] при исследовании устойчивости решений систем нелинейных дифференциальных уравнений с последействием. Эти результаты подытожены в книге [11]. Ниже эти результаты распространяются на дифференциальные уравнения с последействием в банаховых пространствах. Приводимые критерии устойчивости справедливы как в регулярных, так и в критических случаях.

Приведем обозначения, используемые в статье. Пусть  $X$  – банахово пространство,  $K$  – оператор, действующий из  $X$  в  $X$ . Тогда  $B(a, r) = \{x, a \in X : \|x - a\| \leq r\}$ ,  $S(a, r) = \{x, a \in X : \|x - a\| = r\}$ ,  $\Lambda(K)$  – логарифмическая норма линейного оператора  $K$ , определяемая [12] выражением

$$\Lambda(K) = \lim_{h \downarrow 0} \frac{\|I + hK\| - 1}{h}.$$

### 1. Устойчивость решений автономных систем с запаздыванием

Рассмотрим в банаховом пространстве  $X$  уравнение

$$\frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + B(x(t - \eta)). \quad (1)$$

Здесь  $A \in [X, X]$  – линейный ограниченный оператор, действующий из  $X$  в  $X$ ;  $B(x)$  – нелинейный оператор, действующий из банахова пространства  $X$  в  $X$ , причем  $B(0) = 0$ .

Будем считать выполненным условие

$$\|B(x)\| \leq \beta \|x\|. \quad (2)$$

Исследуем устойчивость тривиального решения уравнения (1). Дадим функции  $x(t)$  возмущение

$$x(t) = \psi(t), \quad -\eta \leq t < 0, \|\psi(t)\|_{C[-\eta, 0]} = \delta. \quad (3)$$

Из условия (3) следует, что в момент времени  $t_0 = 0$  возмущение

$$x(0) = \psi(0) = x_0, \quad \|x_0\| \leq \delta. \quad (4)$$

Рассмотрим задачу Коши (1), (4) при условии (3). Обозначим через  $x(t, x_0)$  траекторию решения задачи Коши (1), (4).

При  $0 \leq t \leq \eta$  решение задачи Коши (1), (4) представимо в виде

$$x(t) = e^{At} x_0 + \int_0^t e^{A(t-s)} B(\psi(s-\eta)) ds.$$

Переходя к нормам, имеем

$$\begin{aligned} \|x(t)\| &\leq e^{\Lambda(A)t} \|x_0\| + \int_0^t e^{\Lambda(A)(t-s)} \beta \delta ds \leq \\ &\leq e^{\Lambda(A)t} \left( \delta + \int_0^t e^{-\Lambda(A)s} \beta \delta ds \right) = \delta \left( e^{\Lambda(A)t} + \frac{\beta}{\Lambda(A)} - \frac{\beta}{\Lambda(A)} e^{\Lambda(A)t} \right). \end{aligned}$$

Так как логарифмическая норма  $\Lambda(A) < 0$ , то отсюда имеем

$$\begin{aligned} \|x(t)\| &\leq \delta \left( e^{\Lambda(A)t} - \frac{\beta}{|\Lambda(A)|} (1 - e^{\Lambda(A)t}) \right) = \\ &= \delta \left( e^{\Lambda(A)t} + \frac{\beta}{|\Lambda(A)|} \left( \frac{\Lambda(A)t}{1!} + \frac{(\Lambda(A)t)^2}{2!} + \dots \right) \right) \leq \\ &\leq \delta \left( e^{\Lambda(A)t} - \beta \left( \frac{t}{1!} - \frac{|\Lambda(A)| t^2}{2!} + \dots \right) \right) \leq \delta_*, \end{aligned}$$

где

$$\delta_* = \delta \max_{0 \leq t \leq \eta} \left( e^{\Lambda(A)t} - \beta \left( \frac{t}{1!} - \frac{|\Lambda(A)| t^2}{2!} + \dots \right) \right).$$

Докажем, что при выполнении условия  $\Lambda(A) + \beta < 0$  траектория  $x(t, x_0)$  решения задачи Коши (1), (4) с возмущением (3) не покидает шара  $B(0, \delta_0)$ ,  $\delta_* < \delta_0 \leq 2\delta_*$ . Предположим противное. Пусть в момент времени  $T$  траектория решения задачи Коши достигает сферы  $S(0, \delta_0)$  и при  $t > T$  покидает шар  $B(0, \delta_0)$ . Пусть существует промежуток  $[T, T + \Delta T]$ , в течение которого значения  $x(t)$  находятся вне шара  $B(0, \delta_0)$ , но при этом значения  $x(t - \eta)$  остаются в открытом шаре  $B(0, \delta_0) \setminus S(0, \delta_0)$ .

Тогда при  $T \leq t \leq T + \Delta T$  решение задачи Коши (1), (4) может быть представлено в виде

$$x(t) = e^{A(t-T)}x(T) + \int_T^t e^{A(t-s)}B(x(s-\eta))ds. \quad (5)$$

Отметим, что так как в момент времени  $T$  траектория  $x(t, x_0)$  впервые достигает сферы  $S(0, \delta_0)$ , то  $\|x(s - \eta)\| < \delta_0$  при  $0 \leq s \leq T$ .

Переходя к нормам, имеем

$$\|x(t)\| \leq e^{\Lambda(A)(t-T)}\|x(T)\| + \int_T^t e^{\Lambda(A)(t-s)}\beta\|x(s-\eta)\|ds. \quad (6)$$

Так как  $\|x(s - \eta)\| < \delta_0$  при  $0 \leq t \leq T + \Delta T$ , то в промежутке времени  $[T, T + \Delta T]$

$$\|x(t - \eta)\| \leq \|x(T)\| < \|x(t)\|.$$

Продолжим с учетом этого замечания исследование неравенства (6). Очевидно, что

$$\|x(t)\| \leq e^{\Lambda(A)(t-T)}\|x(T)\| + \beta \int_T^t e^{\Lambda(A)(t-s)}\|x(s)\|ds. \quad (7)$$

Пусть  $\varphi(t) = e^{-\Lambda(A)t}\|x(t)\|$ . Тогда неравенство (7) можно представить в виде

$$\varphi(t) \leq \varphi(T) + \beta \int_T^t \varphi(s)ds. \quad (8)$$

Применяя к неравенству (8) неравенство Гронуолла – Беллмана [12], имеем

$$\varphi(t) \leq \varphi(T)e^{\beta(t-T)}.$$

Возвращаясь к нормам, имеем

$$\|x(t)\| \leq \exp\{(\Delta(A) + \beta)(t - T)\}\|x(T)\|. \quad (9)$$

Из (9) следует, что если

$$\Lambda(A) + \beta < 0, \quad (10)$$

то  $\|x(t)\| < \|x(T)\|$  при  $t \in [T, T + \Delta T]$ . Таким образом, получено противоречие, и в момент времени  $t = T$  траектория решения задачи Коши (1), (4) не покидает шара  $B(0, \delta_0)$ .

Таким образом, при выполнении условия (10) доказана устойчивость задачи Коши (1), (4) при возмущении (3).

**Теорема 1.** Пусть логарифмическая норма оператора  $A$  отрицательна ( $\Lambda(A) < 0$ ) и выполнено условие (10). Тогда решение задачи Коши (1), (4) при возмущении (3) устойчиво.

Исследуем асимптотическую устойчивость тривиального решения уравнения (1).

Дадим функции  $x(t)$  возмущение (3) и рассмотрим задачу Коши (1), (4) при условии (3).

Как и выше, решение этой задачи представляется уравнением (5). Запишем решение при  $t \geq \eta$  в виде

$$x(t) = e^{At} x_0 + \int_0^{\eta} e^{A(t-s)} g(s) ds + \int_{\eta}^t e^{A(t-s)} B(x(s-\eta)) ds, \quad (11)$$

где  $g(s) = B(x(s-\eta))$ .

Перейдем в уравнении (11) к нормам:

$$\begin{aligned} \|x(t)\| &\leq e^{\Lambda(A)t} \|x_0\| + \beta \|\psi(t)\|_{C[-\eta, 0]} \int_0^{\eta} e^{\Lambda(A)(t-s)} ds + \\ &+ \beta \int_{\eta}^t e^{\Lambda(A)(t-s)} \|x(s-\eta)\| ds \leq e^{\Lambda(A)t} \delta_0 + \beta \int_{\eta}^t e^{\Lambda(A)(t-s)} \|x(s-\eta)\| ds \leq \\ &\leq e^{\Lambda(A)t} \delta_0 + \beta \int_0^{t-\eta} e^{\Lambda(A)(t-s-\eta)} \|x(s)\| ds \leq \\ &\leq e^{\Lambda(A)t} \delta_0 + \beta \int_0^t e^{\Lambda(A)(t-s-\eta)} \|x(s)\| ds. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь  $\delta_0 = \left( \|x_0\| + \frac{\psi_0 \beta}{\Lambda(A)} (1 - e^{-\Lambda(A)\eta}) \right)$ ,  $\psi_0 = \|\psi(t)\|_{C[-\eta, 0]}$ .

Введем функцию  $\varphi(t) = e^{-\Lambda(A)t} \|x(t)\|$  и представим неравенство (12) в виде

$$\varphi(t) \leq \delta_0 + \beta e^{-\Lambda(A)\eta} \int_0^t \varphi(s) ds \quad (13)$$

Воспользовавшись неравенством Гронуолла – Беллмана, имеем

$$\varphi(t) \leq \delta_0 \exp\{\beta e^{-\Lambda(A)\eta} t\}.$$

Возвращаясь к нормам, получаем оценку

$$\|x(t)\| \leq \delta_0 \exp\left\{\left(\Lambda(A) + \beta e^{-\Lambda(A)\eta}\right)t\right\}.$$

Из этого неравенства следует, что при выполнении условий  $\Lambda(A) < 0$  и

$$\beta e^{\Lambda(A)\eta} < |\Lambda(A)| \quad (14)$$

тривиальное решение задачи Коши асимптотически устойчиво.

**Теорема 2.** Пусть логарифмическая норма оператора  $A$  отрицательна ( $\Lambda(A) < 0$ ), и выполнены условия (2), (14). Тогда тривиальное решение уравнения (1) асимптотически устойчиво.

## 2. Устойчивость решений неавтономных систем с запаздыванием

Исследуем в банаховом пространстве  $X$  устойчивость тривиального решения уравнения

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(t)x(t) + B(t, x(t - \eta)). \quad (15)$$

Дадим функции  $x(t)$  возмущение

$$x(t) = \psi(t), \quad -\eta \leq t < 0, \quad \|\psi(t)\|_{C[-\eta, 0]} \leq \delta. \quad (16)$$

Пусть при любом  $t$  выполняются условия

$$\Lambda(A(t)) \leq -\alpha(t), \quad \alpha(t) \geq \alpha > 0; \quad (17)$$

$$\|B(t, x(t))\| \leq \beta(t) \|x(t)\|, \quad -\alpha(t) + \beta(t) < 0, \quad (18)$$

где  $\beta(t)$  – неубывающая функция.

**Теорема 3.** Пусть выполнены условия (17), (18). Тогда тривиальное решение уравнения (15) устойчиво.

**Доказательство.** Рассмотрим решение уравнения (15) при возмущении тривиального решения (16). Пусть

$$x(0) = \psi(0) = x_0, \quad \|x_0\| \leq \delta = \max_{-\eta \leq t \leq 0} |\psi(t)|. \quad (19)$$

Покажем, что в течение промежутка времени  $0 \leq t \leq \eta$  траектория решения задачи Коши (15), (19) при возмущении (16) не покидает шара  $B(0, \delta)$ .

Предположим противное. Пусть в момент времени  $T$ ,  $0 < T < \eta$ , траектория  $x(t, x_0)$  задачи Коши покидает шар  $B(0, \delta)$ , проходя через точку  $x_*$ , и в течение промежутка времени  $(T, T + \Delta T]$   $\|x(t)\| > \delta$ . При  $T \leq t \leq \eta$  решение задачи Коши (15), (19) при дополнительных условиях (16) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
x(t) = & e^{A(T)(t-T)}x(T) + \int_T^t e^{A(T)(t-s)}(A(s) - A(T))x(s)ds + \\
& + \int_T^t e^{A(T)(t-s)}B(T, \psi(s - \eta))ds + \\
& + \int_T^t e^{A(T)(t-s)}(B(t, \psi(s - \eta)) - B(T, \psi(s - \eta)))ds. \quad (20)
\end{aligned}$$

Так как функция  $A(t)$  непрерывна, то существует такой промежуток времени  $T \leq t \leq T + \Delta T_1$  ( $\Delta T_1 \leq \Delta T$ ), в течение которого  $\|A(t) - A(T)\| \leq \varepsilon$ ,  $\|B(t, \psi(s - \eta)) - B(T, \psi(s - \eta))\| \leq \varepsilon \|x(T)\|$ .

Переходя в (20) к нормам, имеем при  $t \in [T, T + \Delta T_1]$

$$\begin{aligned}
\|x(t)\| \leq & e^{\Lambda(A(T))(t-T)} \|x(T)\| + 2\varepsilon \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} \|x(s)\| ds + \\
& + \beta \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} \|\psi(s - \eta)\| ds \leq \\
\leq & e^{\Lambda(A(T))(t-T)} \|x(T)\| + 2\varepsilon \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} \|x(s)\| ds + \beta \delta \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} ds \leq \\
\leq & e^{\Lambda(A(T))(t-T)} \|x(T)\| + 2\varepsilon \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} \|x(s)\| ds + \\
& + \beta \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} \|x(s)\| ds = \\
= & e^{\Lambda(A(T))(t-T)} \|x(T)\| + \int_T^t e^{\Lambda(A(T))(t-s)} (2\varepsilon + \beta) \|x(s)\| ds. \quad (21)
\end{aligned}$$

Введем функцию  $\varphi(t) = e^{-\Lambda(A(T))t}$ . Тогда неравенство (21) представим в виде

$$\varphi(t) \leq \varphi(T) + \int_T^t (2\varepsilon + \beta)\varphi(s)ds.$$

Применяя неравенство Гронуолла – Беллмана и возвращаясь к нормам, имеем

$$\|x(t)\| \leq e^{(\Lambda(A(T)) + \varepsilon + \beta)(t-T)} \|x(T)\|.$$

Таким образом, при выполнении условия  $\Lambda(A(T)) + \beta < 0$ , траектория  $x(t, x_0)$  при  $t \in [0, \eta]$  не выходит из шара  $B(0, \delta)$ .

Покажем, что при  $t \geq \eta$  траектория решения системы уравнений (15), (19) не покидает шара  $B(0, \delta_*)$ ,  $\delta_* = 2\delta$ . Предположим противное. Пусть в момент времени  $T_1$  траектория системы (15), (19) покидает шар  $B(0, \delta_*)$ , проходя через точку  $x(T_1)$ . Представим уравнение (15) в следующем виде:

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(T_1)x(t) + C(t)x(t) + B(t, x(t - \eta)); \quad (22)$$

$$C(t) = A(t) - A(T_1).$$

Тогда решение уравнения (22) при начальном условии  $x(T_1)$  можно представить в виде

$$x(t) = e^{A(T_1)(t-T_1)}x(T_1) + \int_{T_1}^t e^{A(T_1)(t-s)}(C(s) + B(s, x(s - \eta)))ds. \quad (23)$$

Возьмем достаточно малый промежуток времени  $\Delta T_2$  такой, что при  $T_1 \leq t \leq T_2 = T_1 + \Delta T_2$

$$\|A(t) - A(T_2)\| \leq \varepsilon_1 \|x(t)\|, \quad (24)$$

и предположим, что в течение этого промежутка времени значения функции  $x(t)$  находятся вне шара  $B(0, \delta_*)$ , а значения  $x(t - \eta)$  находятся внутри шара  $B(0, \delta_*)$ .

Переходя в (23) к нормам, имеем

$$\begin{aligned} \|x(t)\| &\leq e^{\Lambda(A(T_1))(t-T_1)} \|x(T_1)\| + \varepsilon_1 \int_{T_1}^t e^{\Lambda(A(T_1))(t-s)} \|x(s)\| ds + \\ &+ \int_{T_1}^t e^{\Lambda(A(T_1))(t-s)} \beta(s) \|x(s - \eta)\| ds \leq e^{\Lambda(A(T_1))(t-T_1)} \|x(T_1)\| + \\ &+ \int_{T_1}^t (\varepsilon_1 + \beta(s)) e^{\Lambda(A(T_1))(t-s)} \|x(s)\| ds. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь учтено то обстоятельство, что в промежутке времени  $[T_1, T_1 + \Delta T_2]$  по предположению  $\|x(s - \eta)\| < \|x(s)\|$ .

Введем функцию

$$\varphi(t) = e^{-\Lambda(A(T_1))(t-T_1)} \|x(t)\|.$$

Тогда неравенство (25) представимо в виде

$$\varphi(t) = \varphi(T_1) + \int_{T_1}^t \beta_1(s)\varphi(s)ds, \quad (26)$$

где  $\beta_1(s) = \varepsilon_1 + \beta(s)$ .

Применяя к неравенству (26) лемму Гронуолла – Беллмана [12] и возвращаясь к нормам, имеем

$$\|x(t)\| \leq \exp \left\{ (\Lambda(A(T_1)) + \varepsilon_1)(t - T_1) + \int_{T_1}^t \beta(s)ds \right\} \|x(T_1)\|. \quad (27)$$

В предположении, что  $\Lambda(A(T_1)) < 0$  и  $\Lambda(A(T_1)) + \beta(T_1) < 0$ , из неравенства (27) следует, что в момент времени  $T_1$  траектория  $x(t)$  не покидает шара  $B(0, \delta_*)$ .

Из полученного противоречия следует справедливость теоремы.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(t, x(t - \eta)), \quad (28)$$

где  $A(t, x) = (A_1(t, x), \dots, A_n(t, x))$ ,  $x \in R_n$ .

Будем считать, что при  $-\eta \leq t \leq 0$  функция  $x(t)$  равна

$$x(t) = \psi(t), -\eta \leq t \leq 0. \quad (29)$$

Положим

$$x(0) = x_0, \|x_0\| \leq \delta = \max_{-\eta \leq t \leq 0} |\psi(t)|. \quad (30)$$

Исследуем устойчивость решения задачи Коши (28), (30) при условии (29). Представим уравнение (28) в виде

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(t, x(t)) + A(t, x(t - \eta)) - A(t, x(t)). \quad (31)$$

Пусть  $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in R_n$ ,  $\|\gamma\| \neq 0$ ,  $T(t_0 \leq T < \infty)$  – фиксированный момент времени.

Введем матрицу  $B(T, \gamma) = b_{ij}(T, \gamma)$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , элементы которой имеют вид

$$b_{ij}(T, \gamma) = \begin{cases} \alpha_{ij} \frac{A_i(T, \gamma_1, \dots, \gamma_{j-1}, \gamma_j, \gamma_{j+1}, \dots, \gamma_n)}{\gamma_j}, & \gamma_j \neq 0, \\ 0, & \gamma_j = 0, \end{cases}$$

где  $\alpha_{ij} \geq 0$ , причем  $\alpha_{ij} = 0$ , если  $\gamma_j = 0$ , и  $\sum_{j=1}^n \alpha_{ij} = 1$ .

**Замечание.** Возможны и другие способы определения матрицы  $B(T, \gamma)$ . В частности, возможно следующее определение:

$$b_{ij}(T, \gamma) = \begin{cases} \alpha_{ij} \frac{A_i(T, 0, \dots, 0, \gamma_j, \gamma_{j+1}, \dots, \gamma_n) - A_i(T, 0, \dots, 0, \gamma_{j+1}, \dots, \gamma_n)}{\gamma_j}, & \gamma_j \neq 0, \\ 0, & \gamma_j = 0, \end{cases}$$

где на  $\alpha_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , налагаются те же условия, что и в предыдущей формуле.

Справедливо следующее утверждение.

**Теорема 4.** Пусть  $\delta$  – достаточно малое положительное число,  $A_i(t, 0) \equiv 0$ , функции  $A_i(t, u_1, \dots, u_n)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , непрерывны по всем аргументам,

$$\|A'_2(t, z)\| \leq L(t) \tag{32}$$

при  $t \geq 0$ ,  $z \in B(0, \delta)$ , где  $A'_2(t, z, )$  означает производную Фреше по второй переменной.

Пусть функция  $L(t)$  удовлетворяет одному из следующих условий:

1) функция  $L(t)$  невозрастающая; 2) функция  $L(t)$  непрерывная.

Пусть для любого  $\gamma$ ,  $0 < \|\gamma\| \leq \delta$ , и для любого  $T$ ,  $0 \leq T < \infty$ , выполнено условие

$$\Lambda(B(T, \gamma)) + 2L(T) < 0.$$

Тогда тривиальное решение системы уравнений (28) устойчиво.

**Доказательство.** Покажем, что при выполнении условий теоремы траектория  $x(t, x_0)$  не покидает шара  $B(0, \delta_1)$ ,  $\delta_1 = 2\delta$ . Предположим противное. Пусть в момент времени  $T$  траектория  $x(t, x_0)$  достигает сферы  $S(0, \delta_1)$  в точке  $\gamma^* = (\gamma_1^*, \dots, \gamma_n^*)$  и в течение промежутка времени  $t \in [T, T + \Delta T]$  выполняются неравенства  $|x(t)| \geq \delta_1$ ,  $|x(t - \eta)| < \delta_1$ .

Система уравнений (28) эквивалентна следующей системе

$$\frac{dx(t)}{dt} = B(T, \gamma^*)x(t) + (A(t, x(t)) - B(T, \gamma^*)x(t)) + (A(t, x(t - \eta)) - A(t, x(t))). \tag{33}$$

Нетрудно видеть, что из непрерывности функций  $A_i(t, u_1, \dots, u_n)$  по всем переменным следует, что для любого  $\varepsilon > 0$  найдется такой промежуток времени  $\Delta T_1$  ( $\Delta T_1 \leq \Delta T$ ), что при  $t \in [T, T + \Delta T_1]$

$$\|A(t, x(t)) - B(T, \gamma^*)x(t)\| \leq \varepsilon \|x(t)\|.$$

Из условия (32) следует, что при  $x(t) \in B(0, \delta)$  и  $t \in [T, T + \Delta T]$

$$\begin{aligned} & \|A(t, x(t - \eta)) - A(t, x(t))\| \leq \\ & \leq L(t) \|x(t - \eta) - x(t)\| \leq 2L(t) \|x(t)\|. \end{aligned}$$

Решение уравнения (33) при начальном условии  $x(T) = \gamma^*$  имеет вид

$$x(t) = e^{B(T, \gamma^*)(t-T)} x(T) + \int_T^t e^{B(T, \gamma^*)(t-s)} \times \\ \times \left[ \left( A(s, x(s)) - B(T, \gamma^*) x(s) \right) + \left( A(s, x(s-\eta)) - A(s, x(s)) \right) \right] ds.$$

Переходя к нормам, имеем при  $t \in [T, T + \Delta T]$

$$\|x(t)\| \leq e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-T))} \|x(T)\| + \\ + \int_T^t e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-s))} (\varepsilon + 2L(s)) \|x(s)\| ds. \quad (34)$$

В случае, если функция  $L(t)$  невозрастающая, из последнего неравенства следует, что

$$\|x(t)\| \leq e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-T))} \|x(T)\| + \int_T^t e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-s))} (\varepsilon + 2L(T)) \|x(s)\| ds. \quad (35)$$

В случае, если функция  $L(t)$  непрерывна, для любого  $\varepsilon$  найдется такой промежуток времени  $\Delta T_2$  ( $\Delta T_2 \leq \Delta T_1$ ), что при  $t \in [T, T + \Delta T_2]$  справедливо неравенство  $\|L(t) - L(T)\| \leq \varepsilon$ . Тогда неравенство (34) может быть усилено:

$$\|x(t)\| \leq e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-T))} \|x(T)\| + 2 \int_T^t e^{\Lambda(B(T, \gamma^*)(t-s))} (\varepsilon + L(T)) \|x(s)\| ds. \quad (36)$$

В дальнейшем будем рассматривать неравенство (36), у которого правая часть больше, нежели у неравенства (35).

Введем функцию

$$\varphi(t) = e^{-\Lambda(B(T, \gamma^*))t} \|x(t)\|,$$

тогда

$$\varphi(t) \leq \varphi(T) + 2(\varepsilon + L(T)) \int_T^t \varphi(s) ds. \quad (37)$$

Применяя к неравенству (37) неравенство Гронуолла – Беллмана и возвращаясь к нормам, имеем

$$\|x(t)\| \leq e^{(\Lambda(B(T, \gamma^*)) + 2\varepsilon + 2L(T))(t-T)} \|x(T)\|. \quad (38)$$

Из неравенства (38) следует, что если выполняется неравенство

$$\Lambda(B(T, \gamma^*)) + 2L(T) < 0,$$

то найдется такой промежуток времени  $\Delta T^*$  ( $\Delta T^* \leq \Delta T_2$ ), что при  $t \in (T, T + \Delta T^*]$  выполняется неравенство  $\|x(t)\| < \|x(T)\|$ . Получено противоречие, из которого следует справедливость теоремы.

#### **Список литературы**

1. **Красовский, Н. Н.** Некоторые задачи теории устойчивости движения / Н. Н. Красовский. – М. : ГИФМЛ, 1959. – 212 с.
2. **Беллман, Р.** Дифференциально-разностные уравнения / Р. Беллман, К. Л. Кук. – М. : Мир, 1967. – 548 с.
3. **Мышкис, А. Д.** Линейные дифференциальные уравнения с запаздывающим аргументом / А. Д. Мышкис. – М. : Наука, 1972. – 352 с.
4. **Резван, В.** Абсолютная устойчивость автоматических систем с запаздыванием / В. Резван. – М. : Наука, 1983. – 359 с.
5. **Виноград Р. Э.** Замечание о критическом случае устойчивости особой точки на плоскости // Доклады Академии Наук СССР, 1953. – Т. 101. – С. 209–212.
6. **Красовский, Н. Н.** Об устойчивости движения в критическом случае одного нулевого корня / Н. Н. Красовский // Математический сборник. – 1955. – Т. 37, № 1. – С. 83–88.
7. **Бойков И. В.** Об устойчивости решений дифференциальных и разностных уравнений в критических случаях // Доклады Академии Наук СССР. – 1990. – Т. 314, № 6. – С. 1298–1300.
8. **Бойков, И. В.** Об устойчивости решений дифференциальных и разностных уравнений с недифференцируемыми правыми частями / И. В. Бойков // Дифференциальные уравнения. – 1993. – Т. 29, № 8. – С. 1453–1455.
9. **Бойков, И. В.** Об устойчивости движения в одной системе с последствием / И. В. Бойков // Прикладная математика и механика. – 1997. – Т. 61, Вып. 3. – С. 398–402.
10. **Бойков, И. В.** Об устойчивости решений дифференциальных уравнений с последствием / И. В. Бойков // Дифференциальные уравнения. – 1998. – Т. 34, № 8. – С. 1134–1138.
11. **Бойков, И. В.** Устойчивость решений дифференциальных уравнений / И. В. Бойков. – Пенза : Изд-во Пенз. гос. ун-та, 2008. – 244 с.
12. **Далецкий, Ю. А.** Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховых пространствах / Ю. А. Далецкий, М. Г. Крейн. – М. : Наука, 1970. – 534 с.

---

**Бойков Илья Владимирович**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
высшей и прикладной математики,  
Пензенский государственный университет  
E-mail: math@pnzgu.ru

**Boikov Ilya Vladimirovich**  
Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of higher and applied mathematics,  
Penza State University

---

УДК 517.91

**Бойков, И. В.**

**Об одном критерии устойчивости решений нелинейных дифференциальных уравнений с последствием / И. В. Бойков // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 58–68.**

УДК 521.14; 52-856; 523.46-862

В. М. Журавлев, А. В. Патрушев

## ДИНАМИКА САМОГРАВИТИРУЮЩЕГО ПЫЛЕВОГО ДИСКА В СЛАБОНЕЛИНЕЙНОМ РЕЖИМЕ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Рассматривается задача описания динамики самогравитирующего пылевого диска с внутренним трением вблизи статического его состояния с учетом слабой нелинейности в гидродинамическом приближении. В нелинейном приближении найдены асимптотические точные решения, описывающие кольцевые и спиральные структуры, возникающие в диске при  $t \rightarrow \infty$ .

*Ключевые слова:* пылевые дисковые структуры, кольца планет, спиральная структура галактик, нелинейные процессы.

*Abstract.* The article considers a problem of dynamics of self-gravitation dust disk internal friction when approaching a static condition. The investigation takes into account dynamics nonlinearity in hydrodynamic approximation. The authors discovered asymptotic exact solutions in nonlinear approximation that derive ring and spiral structures in a disk for  $t \rightarrow \infty$ .

*Key words:* dust disk structures, planet's rings, galaxy spiral structures, nonlinear processes.

### Введение

Задачи, связанные с исследованием динамики самогравитирующих пылевых объектов являются широко распространенными в астрофизике и планетарной космогонии [1, 2]. Эти задачи важны для задач описания динамики и дисковых галактик, в которых наблюдается характерная спиральная структура, и в задачах планетарных колец и аккреционных дисков у звезд. В силу сложности задачи, в которой приходится учитывать множество факторов, влияющих на динамику объекта, ее обычно рассматривают в рамках теории возмущений по величине флуктуаций плотности. В результате задача полностью линеаризуется, что облегчает ее исследование, однако при этом исчезают специфические эффекты, обусловленные нелинейным характером динамики таких объектов. Вместе с тем учет нелинейных эффектов в дисковой динамике может существенно изменить характер получаемых решений и получить уже в первом порядке теории возмущений характерную кольцевую структуру [3]. Как показано в [3], кольцевые структуры могут возникать в дисках без вращения.

В настоящей работе излагается обобщение подхода, предложенного в [3]. В отличие от этой работы, здесь рассматриваются задачи динамики спиральных волн. Эти проблемы решаются тем же методом теории возмуще-

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 11-01-00747-а, и федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы», проект НК-594П/8.

ний, что и в работе [3], со специальной процедурой исключения из уравнений секулярных по времени слагаемых в ряде возмущений. Это как раз и позволяет учитывать слабонелинейные эффекты в динамике таких объектов. В целом динамика описывается уравнениями Эйлера с дополнительной объемной силой пропорциональной скорости гидродинамического потока и его плотности. Эта сила позволяет приближенно учитывать наличие в диске диссипативных эффектов.

### 1. Постановка задачи описания динамики самогравитирующей пыли

Уравнения динамики самогравитирующей пыли можно представить в следующем виде:

$$v_t + (v, \nabla)v = -\alpha v - \nabla\Phi - \frac{1}{\rho}\nabla P; \quad (1)$$

$$\rho_t + \operatorname{div}(\rho v) = 0; \quad (2)$$

$$\Delta\Phi = 4\pi G\rho. \quad (3)$$

Здесь  $u = (u, v, w)$  – поле скоростей движения пыли в системе;  $\rho$  – плотность пыли и газа;  $\Phi$  – потенциал поля тяготения в системе; коэффициент  $\alpha = \alpha(t)$  – параметр, характеризующий диссипацию в системе;  $P$  – давление газовой составляющей диска. Первое уравнение этой системы есть собственно уравнение Эйлера динамики идеальной жидкости, в котором отсутствует массовая сила, связанная с давлением. Давление отсутствует для пыли. Второе уравнение есть уравнение сохранения массы, а последнее уравнение есть уравнение Пуассона.

Мы будем полагать, что рассматриваемая система имеет характерную дисковую форму, так что масса пыли сосредоточена вблизи плоскости диска. Обычно предполагают, что плотность пыли можно представить в следующем виде [1, 2]:

$$\rho = \frac{\sigma(x, y)}{h_0} \delta(z/h_0) + \rho, \quad (4)$$

где  $\sigma = \sigma(x, y)$  – плотность пыли в плоскости диска;  $h_0$  – характерная толщина диска;  $\rho$  – плотность пыли вне диска. Ось  $z$  направлена перпендикулярно диску.

В настоящей работе мы рассмотрим упрощенный случай такой модели, предполагая, что диск полностью не сформировался. В этом случае имеются два основных варианта задачи. Первый соответствует ситуации, когда есть центральный компактный тяготеющий объект, а второй – ситуации, когда такого объекта нет. Второй случай и был рассмотрен в [3]. В данной работе будут рассмотрены оба этих случая. В первом в нулевом порядке возмущений соответствует выбор  $\sigma = M\delta(r)$ , где  $M$  – масса центрального тела, а во втором случае  $\sigma = 0$ . При этом в обоих случаях будем полагать, что плотность пыли вне диска мала по сравнению с некоторой характерной плотностью  $\rho_0$ , так что  $\rho/\rho_0 = \varepsilon \ll 1$ . Будем считать также, что система находится вблизи своего статического состояния, так что скорости движения пыли вне диска малы.

Будем полагать далее, что скорость движения пыли можно представить в следующем виде:

$$v = V_0(x, y) + u, \quad (5)$$

где  $V_0(x, y)$  скорость пыли в плоскости диска, которая без изменений передается в направлении, перпендикулярном плоскости диска, так что все слои над диском имеют одинаковые скорости движения на одинаковых расстояниях от оси диска. Векторное поле  $u$  есть поле скорости вне диска, вызванное эффектами самогравитации пыли. Будем полагать, что  $u$  имеет величину следующего порядка малости по сравнению с  $V_0$ .

Введем следующие характерные параметры системы. Пусть  $T_0$  – характерный масштаб времени;  $X_0$  – характерный пространственный масштаб в плоскости диска, а  $\xi_0$  – вне диска. Далее, соответственно,  $\rho_0$  – масштаб плотности вне диска, а  $q_0$  – его плоскости. Масштаб по координате  $z$  выберем равным  $h_0$ . В результате обезразмеривания соотношения (4), (5) приобретут следующую форму:

$$\tilde{\rho} = \rho/q_0 = \tilde{\sigma}\delta(\zeta) + \varepsilon\tilde{\rho}; \quad (6)$$

$$v = T_0 v/X_0 = V_0 + \varepsilon u. \quad (7)$$

Здесь величины со знаком обозначают безразмерные величины, а  $\varepsilon = \rho_0/q_0 = \xi_0/X_0$ . В дальнейшем знак предполагает, что мы имеем дело с безразмерными величинами и уравнениями.

Удобно сразу уравнения для полей в плоскости диска и вне его рассматривать по отдельности. В этом случае имеем для полей в плоскости диска:

$$\begin{aligned} (V_0, \nabla)V_0 &= -\kappa V_0 - \nabla\Phi_0; \\ \operatorname{div}(\sigma V_0) &= 0; \\ \Delta\Phi_0 &= \mu_0\sigma. \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогично вне плоскости диска уравнения выглядят так:

$$\begin{aligned} u_\tau + (V_0, \nabla)u + (u, \nabla)V_0 + \varepsilon(u, \nabla)u &= -\kappa u - \nabla\Phi; \\ \rho_\tau + \operatorname{div}(\rho, V_0) + \varepsilon \operatorname{div}(\rho u) &= 0; \\ \Delta\phi &= \mu\rho. \end{aligned} \quad (9)$$

Граничными условиями для полей вне диска будут условия убывания полей плотности и скорости при удалении от плоскости диска и от оси диска, т.е. при  $\zeta \rightarrow \pm\infty$  и  $r \rightarrow \infty$ , где  $r^2 = x^2 + y^2$ . В дальнейшем мы будем уточнять вид граничных условий в зависимости от симметрии задачи.

## 2. Уравнения динамики формирующегося пылевого диска

Рассмотрим первоначально задачу описания динамики пыли в случае, когда диск еще не сформировался, так что  $\sigma = \varepsilon\sigma_1$  и  $V_0 = 0$ . Поэтому величи-

на плотности пыли в плоскости диска имеет первый порядок малости по параметру  $\varepsilon$  и, следовательно, является продолжением решения для  $\rho$  в пределе  $\zeta \rightarrow 0$ . В этом случае нет необходимости рассматривать отдельно уравнения (8). В этом случае уравнения динамики пыли будут иметь следующий вид:

$$u_{,\tau} + \varepsilon(u, \nabla)u = -\kappa u - \nabla\phi, \quad \rho_{,\tau} + \varepsilon \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad \Delta\phi = \mu\rho. \quad (10)$$

Будем искать решения в виде разложения по степеням  $\varepsilon$ :

$$\phi = \phi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n \phi_n, \quad u = u_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n u_n, \quad \rho = \rho_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n \rho_n.$$

Кроме этого, для выяснения характера приближения к стационарному состоянию введем медленное время  $T = \varepsilon\tau$ . Заметим, что при необходимости в высших порядках теории можно вводить высшие масштабы времени  $T_n = \varepsilon^n \tau, n > 1$  [4].

В нулевом и первом порядках уравнения будут иметь следующий вид:  
– нулевой порядок:

$$u_{0,\tau} = -\kappa u_0 - \nabla\phi_0, \quad \rho_{0,\tau} = 0, \quad \Delta\phi_0 = \mu\rho_0; \quad (11)$$

– первый порядок

$$u_{1,\tau} + u_{0,T} + (u_0, \nabla)u_0 = -\kappa u_1 - \nabla\phi_1, \quad \rho_{1,\tau} + \rho_{0,T} = -\operatorname{div}(\rho_0 u_0), \quad (12)$$

$$\Delta\phi_1 = \mu\rho_1.$$

В нулевом порядке решение находится без труда:

$$u_0 = U_0(x, y, z, T) - e^{-\kappa\tau} \int_0^{\tau} \nabla\phi_0(\tau, x, y, z, T) e^{\kappa\tau'} d\tau', \quad (13)$$

где  $U_0(x, y, z, T)$  – начальное распределение поля скорости пыли в системе. Из второго уравнения получаем  $\rho_0 = \rho_0(x, y, z, T)$ , из чего можно заключить, что гравитационный потенциал не должен зависеть от времени в нулевом порядке. Последнее уравнение Пуассона для потенциала  $\phi_0$  может быть проинтегрировано обычным способом. Так как  $\phi_{0,\tau} = 0$ , то решение (13) можно представить в следующем виде:

$$u_0 = U_0(x, y, z, T) - f(\tau)\nabla\phi_0(x, y, z, T), \quad (14)$$

здесь

$$f(\tau) = \frac{1}{\kappa} (1 - e^{-\kappa\tau}).$$

В пределе при  $\tau \rightarrow \infty$  формируется поле скорости с ярко выраженным стационарным радиальным потоком, пропорциональным ускорению свободного падения в системе, вне зависимости от начального распределения скорости.

Как можно видеть, полученное решение содержит одну произвольную функцию  $\rho_0$ . Для ее нахождения воспользуемся дополнительными условиями на решение в первом порядке по  $\varepsilon$ .

Нам нет необходимости решать систему уравнений первого порядка целиком, хотя это сделать несложно. Первое уравнение этой системы будет решаться совершенно аналогично решению в нулевом порядке. Поэтому сосредоточимся на последних двух уравнениях. Нашей задачей является получение статического решения данной системы. В силу этого мы должны предположить, что плотность массы в первом порядке должна также не зависеть от времени, т.е.

$$\rho_{1,\tau} = 0, \quad (15)$$

и, следовательно,  $\phi_{1,\tau} = 0$ . В силу этого мы из второго уравнения системы (11) получаем дополнительное уравнение для полей в нулевом порядке:

$$\rho_{0,T} + \operatorname{div}(\rho_0 u_0) = 0. \quad (16)$$

Последнее уравнение является нелинейным и описывает слабонелинейный режим статического течения пыли в собственном поле гравитации. Согласно (14) поле скорости состоит из двух слагаемых:  $U_0$  и  $v_0 = f(\tau)\nabla\phi_0$ . Первое не зависит от  $\tau$ , а второе – зависит. В силу этого для каждого из этих слагаемых должно выполняться соотношение (16) по отдельности.

Используя (15), теперь можно решение для поля скорости в первом порядке записать следующим образом:

$$u_1 = U_1(x, y, z) - f(\tau)[U_{0,T} + (U_0, \nabla)U_0 + \nabla\phi_1] - \\ - f_1(\tau)[v_{0,T} - (\nabla\phi_0, \nabla)U_0 - (U_0, \nabla)\nabla\phi_0] - f_2(\tau)[(\nabla\phi_0, \nabla)\nabla\phi_0],$$

где  $U_1(x, y, z)$  – начальное распределение поля скорости в первом порядке,

$$f_1(\tau) = e^{-\kappa\tau} \int_0^\tau f(\tau') e^{\kappa\tau'} d\tau' = \frac{1}{\kappa^2} (1 - (1 + \kappa\tau)e^{-\kappa\tau}) = \frac{1}{\kappa} (f(\tau) - \tau e^{-\kappa\tau}),$$

$$f_2(\tau) = e^{-\kappa\tau} \int_0^\tau f^2(\tau') e^{\kappa\tau'} d\tau' = \frac{1}{\kappa^3} (1 - 2\kappa\tau e^{-\kappa\tau} - e^{-2\kappa\tau}).$$

Поскольку выражение для  $u_1$  содержит три слагаемых с различной зависимостью коэффициентов от времени, то, как показывает простой анализ, уже во втором порядке  $\rho_{2,\tau} \neq 0$ .

Поэтому плотность во втором порядке будет изменяться со временем, что приводит к медленному формированию дисковой структуры.

### 3. Уравнения в цилиндрических координатах

Рассмотрим теперь возможные типы структур диска на стадии его формирования. Как было показано, для анализа этой структуры в нулевом порядке необходимо решать систему уравнений

$$\Delta\phi = \mu\rho, \quad (17)$$

$$\operatorname{div}(\rho\nabla\phi) = 0, \quad (18)$$

а также уравнение для медленной эволюции плотности во времени:

$$\rho_T + \operatorname{div}(\rho U_0) = 0. \quad (19)$$

Это уравнение является ограничивающим условием на начальное распределение скорости в облаке пыли, при котором возможно статическое распределение пыли в нулевом порядке в смысле отсутствия зависимости от  $\tau$ . Для сокращения записи в следующих двух разделах, где речь идет о решениях в нулевом порядке, индексы 0 у функций  $\phi$  и  $\rho$  опущены.

Переходя в (17), (18) к цилиндрическим координатам  $r, z, \phi$ , приходим к следующей системе уравнений:

$$\frac{\phi_{rr}}{\phi} + \frac{1}{r} \frac{\phi_r}{\phi} + \frac{1}{r^2} \frac{\phi_{\phi\phi}}{\phi} + \frac{\phi_{zz}}{\phi} = \frac{\mu\rho}{2\phi}; \quad (20)$$

$$\frac{\phi_r}{\phi} \frac{\rho_r}{\rho} + \frac{1}{r^2} \frac{\rho_\phi}{\rho} \frac{\phi_\phi}{\phi} + \frac{\rho_z}{\rho} \frac{\phi_z}{\phi} + \frac{\mu\rho}{2\phi} = 0. \quad (21)$$

Будем искать решение для  $\rho$  в следующем виде:

$$\rho(r, \phi, z) = q(r, \phi, z)\phi_r(r, \phi, z), \quad (22)$$

где  $q = q(r, \phi, z)$  – вспомогательная функция. Подставляя  $\rho$  в таком виде в уравнение (21) и используя уравнение (20), приходим к уравнению

$$\begin{aligned} & (\phi_r)^2 \left( q_r - \frac{1}{r} q + \mu q^2 \right) + \frac{q}{r^2} \left[ \phi_\phi \phi_{r\phi} - \phi_{\phi\phi} \phi_r \right] + \\ & + q \left[ \phi_z \phi_{rz} - \phi_{zz} \phi_r \right] + \frac{1}{r^2} q_\phi \phi_r \phi_\phi + q_z \phi_r \phi_z = 0. \end{aligned}$$

Это соотношение можно переписать в следующей форме:

$$\left( \frac{d}{dr} \frac{1}{q} + \frac{1}{rq} - \mu \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ \frac{\phi_\phi}{q\phi_r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\phi_z}{q\phi_r} \right] = 0.$$

Вводя функцию  $f = r/q$ , последнее уравнение можно переписать в следующем виде:

$$f_r + \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \frac{f\phi_\phi}{\phi_r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{f\phi_z}{\phi_r} \right) \right] = r\mu. \quad (23)$$

Уравнение же (20) в результате примет следующий вид:

$$\phi_{rr} + \frac{1}{r} \phi_r + \frac{1}{r^2} \phi_{\phi\phi} + \phi_{zz} = \frac{\mu}{2} \frac{r}{f} \phi_r. \quad (24)$$

Уравнения, представленные в таком виде, более удобны для анализа, чем исходные. Рассмотрим некоторые точные решения этой системы, чтобы

выяснить некоторые особенности распределений пыли, подчиняющиеся данной системе уравнений.

#### 4. Радиальное поле гравитации

В качестве первой задачи рассмотрим случай, когда статическое состояние системы не содержит спиральной структуры. В этом случае все функции системы будут зависеть только от  $r$  и  $z$ . Далее положим:

$$\phi = h(z)u(r), \quad \rho = h(z)p(r), \quad q = q(r).$$

Здесь величины со штрихами означают производные по радиальной координате:

$$u' = \frac{\partial u}{\partial r}.$$

Из требования разделения переменных следует, что

$$h(z) = h_0 e^{-\lambda z}.$$

При этом следует предполагать, что плотность пыли и потенциал убывают при удалении от диска как в сторону  $z \rightarrow +\infty$ , так в сторону  $z \rightarrow -\infty$ . Поэтому при условии  $\lambda > 0$  вдали от плоскости диска  $h(z) = h_0 e^{-\lambda|z|}$   $z \rightarrow \infty$ . Фактически эти условия означают, что в плоскости диска формируется сингулярное распределение пыли вида  $\rho_0 : \delta(z)$ .

В результате для функций  $u$  и  $q$  получаем следующие уравнения:

$$u'' + \frac{1}{r}u' + \lambda^2 u = \frac{\mu}{2}qu'; \quad (25)$$

$$q' - \frac{1}{r}q + \mu q^2 = 0. \quad (26)$$

Последнее уравнение интегрируется и имеет общее решение следующего вида:

$$q(r) = \frac{2}{\mu} \frac{r}{r^2 + q_0}, \quad (27)$$

где  $q_0$  – постоянная интегрирования. Для распределения плотности находим

$$\rho(r) = \frac{2}{\mu} \frac{r}{r^2 + q_0} u'(r) h(z), \quad (28)$$

где  $u(r)$  теперь удовлетворяет уравнению

$$u'' + \frac{q_0}{r(r^2 + q_0)} u' + \lambda^2 u = 0. \quad (29)$$

При малых  $q_0$  или больших  $\zeta$  уравнение близко к уравнению гармонических колебаний с волновым числом  $\lambda$ . Если  $u(r)$  удовлетворяет уравне-

нию (29), а  $q(r)$  – (26), то функция  $p(r) = q(r)u'(r)$  при этом удовлетворяет уравнению

$$p'' + \frac{2r^2 - q_0}{r(r^2 + q_0)} p' + \lambda^2 p = 0. \quad (30)$$

Для вывода граничных условий необходимо учесть свойства функции  $p(r)$ , описывающей распределение плотности пыли в плоскости диска. По определению  $p(r) > 0$  (как функция пропорциональная плотности пыли). Согласно (28) плотность обращается в ноль вместе с градиентом потенциала. В результате диск разбивается на отдельные кольца, разделенные тонкими кольцами отсутствия пыли. Анализируя структуру гидродинамического потока, обнаруживаем, что кольца представляют собой не перемешивающиеся между собой образования. Однако градиент потенциала в соседних кольцах, в силу его квазипериодичности, имеет разные знаки. Если требовать непрерывности плотности на краях колец, то мы в результате получим, что плотность должна менять знак вместе с  $u'$ . Отсюда следует вывод, что в каждом кольце с постоянным знаком  $u'$  знак и величину постоянной  $q_0$  следует выбирать таким образом, чтобы выполнялось условие  $p(r) > 0$ . Значение этой постоянной будет определять ширину кольца и массу пыли, захваченной в нем.

Граничные условия для вычисления параметров кольца сводятся к требованию непрерывности потенциала и его производной на границе колец, что является следствием требования равенства сил, действующих на частицу пыли на границе колец. Постоянные  $q_0$  в каждом из колец задаются величиной массы пыли, содержащейся в кольце. Пусть  $r_i, i = 1, 2, \dots$  – границы колец, т.е. точки, в которых производная потенциала равна нулю:  $u'|_{r_i} = 0$ . Тогда уравнения модели будут иметь вид системы

$$u_j'' + \frac{q_j}{r(r^2 + q_j)} u_j' + \lambda^2 u_j = 0, \quad r \in [r_j, r_{j+1}]$$

с граничными условиями:

$$u_j'(r_j) = 0, \quad u_j'(r_{j+1}) = 0, \quad u_{j-1}(r_j) = u_j(r_j), \quad u_{j+1}(r_{j+1}) = u_j(r_{j+1}),$$

$$\pi \mu \int_{r_j}^{r_{j+1}} \frac{r^2}{(r^2 + q_j)} u_j'(r) dr = \sigma_j.$$

где  $\sigma_j$  – постоянная поверхностная плотность массы в  $j$ -м кольце (рис. 1).

## 5. Спиральные волны

Рассмотрим теперь решения в предположении зависимости функций от  $\varphi$ . Положим

$$\varphi = h(z)(a(r) \cos m\varphi + b(r) \sin m\varphi), \quad q = q(r),$$

где  $h(z) = h_0 e^{-\lambda|z|}$ , как и раньше, а  $a(r)$ ,  $b(r)$  – новые вспомогательные функции – амплитуды спиральных волн. Подставляя эти соотношения в уравнения (23) и (24), находим, что уравнение для  $q = r/f$  будет выполнено, если  $q(r)$  удовлетворяет уравнению (26), а функции  $a$  и  $b$  удовлетворяют условию

$$\frac{d}{dr}(a^2 + b^2) = 0.$$

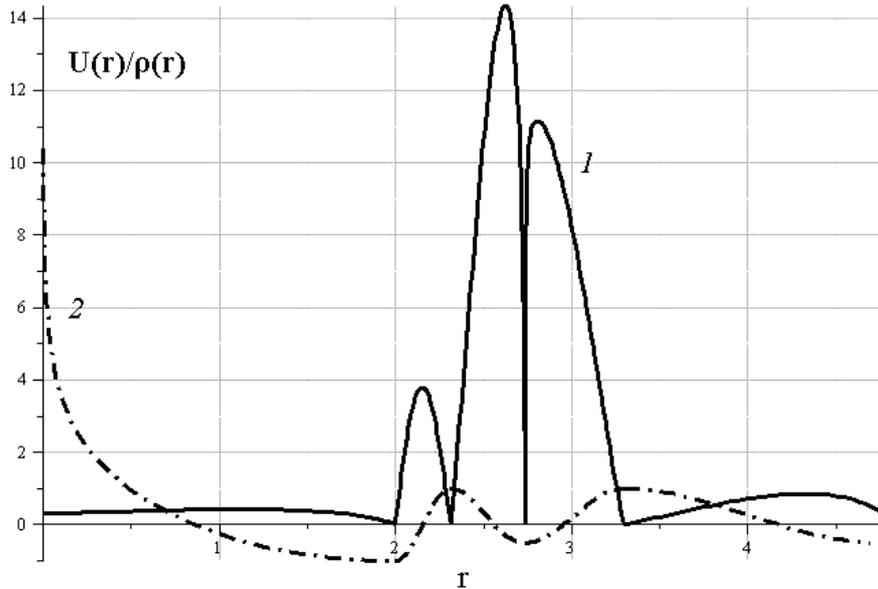


Рис. 1. Пример радиального распределения плотности (1) пыли и потенциала (2) для параметров:  $r_1 = 2,0$ ,  $r_2 = 2,73$ ,  $r_3 = 3,3$ ,  $r_4 = 4,7$ ,  $q_1 = 1,0$ ,  $q_2 = -7,58$ ,  $q_3 = -7,49$ ,  $q_4 = -25$  и  $\lambda = 1,0$

Без ограничения общности можем положить:

$$a(r) = A \cos \Theta(r), \quad b(r) = A \sin \Theta(r).$$

Тогда из уравнения (24) для  $\phi$  следует, что  $\Theta(r)$  удовлетворяет переопределенной системе уравнений:

$$-\Theta'' - \frac{1}{r}\Theta' + \frac{\mu}{2}q\Theta' = 0, \quad -(\Theta')^2 - \frac{m^2}{r^2} + \lambda^2 = 0.$$

Последняя система имеет единственное решение

$$\Theta(r) = \int_{r_0}^r \sqrt{\lambda^2 - \frac{m^2}{r^2}} dr = \sqrt{\lambda^2 r^2 - m^2} + m \left( \frac{m}{\sqrt{\lambda^2 r^2 - m^2}} \right) + \Theta_0$$

при условии, что в решении (27) для  $q(r)$  постоянная  $q_0 = -m^2/\lambda^2$ . Из этого соотношения следует, что спиральная волна может существовать лишь в об-

ласти  $r > r_{cr} = m/\lambda$ . В области  $r \leq r_{cr} = m/\lambda$  волновых решений не существует. Эта область в структуре галактик называется балджем. Окружность критического радиуса  $r_{cr} = m/\lambda$  является предельным множеством, на которое интегральные кривые гидродинамического потока навиваются бесконечное число раз. Распределение плотности в такой структуре описывается соотношением

$$\rho = q(r)\phi'(r, \varphi) = \frac{2A\lambda^2}{\sqrt{\lambda^2 r^2 - m^2}} \sin(\Theta(r) - m\varphi). \quad (31)$$

Важным элементом полученной модели спиральной волны плотности является простая связь между радиусом балджа и отношением числа рукавов к толщине диска галактики:

$$r_{cr} = m/\lambda.$$

Эта формула может использоваться для проверки предложенной модели. Это наглядно демонстрирует рис. 2.

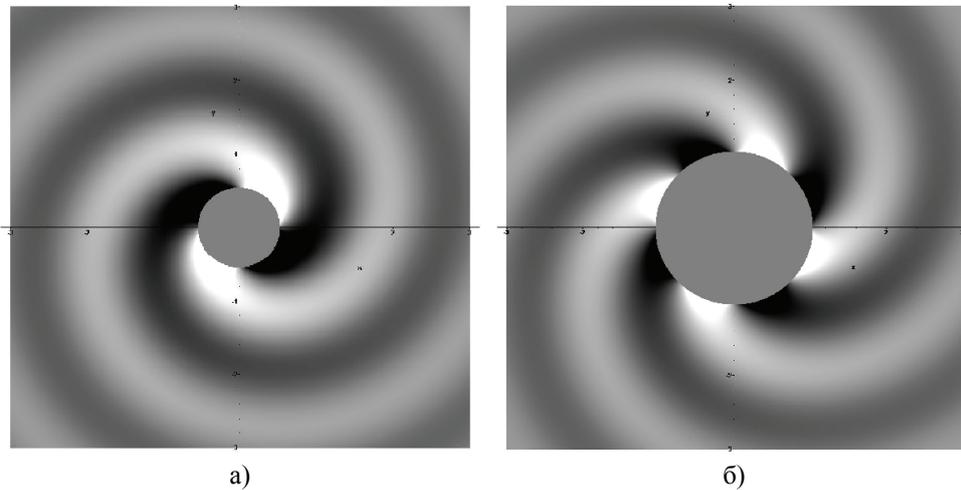


Рис. 2. Пример спирального распределения плотности пыли (а)  $m=2$  и (б)  $m=4$  для следующих значений параметров  $\lambda=4$ ,  $A=2$

### Заключение

Полученные решения описывают фрагментацию пылевых самогравитирующих дисковых структур при  $t \rightarrow \infty$  на отдельные кольца или спиральные волны плотности. Разделение диска на отдельные кольца происходит таким образом, что ширина колец гораздо больше узких делений между ними. Ширина колец, масса в них и ее распределение внутри кольца могут быть различными и определяются параметрами  $\lambda$  и  $q_0$  для каждого кольца в отдельности. Важным моментом в полученном решении является то, что кольцеобразная и спиральная структуры появляются без общего вращения диска. С другой стороны, для сопоставления полученных решений с наблюдаемыми кольцевыми структурами, такими как у Сатурна, необходимо включить в модель вращение пылевого диска. Эта задача требует отдельного анализа.

Спиральные структуры, найденные в работе, больше подходят для описания структуры спиральных галактик. Эти решения содержат все основные структурные элементы спиральных галактик – спиральные рукава и балдж. Число рукавов может быть произвольным. Для описания структуры распределения пыли в балдже требуются дополнительные исследования. Как и в случае кольцевых структур, для сопоставления с реальными данными о спиральных галактиках необходимо включить в модель вращение систем.

### Список литературы

1. **Горькавый, Н. Н.** Физика планетарных колец / Н. Н. Горькавый, А. М. Фридман. – М. : Наука, 1994.
2. **Морозов, А. Г.** Физика дисков / А. Г. Морозов, А. В. Хоперсков. – Волгоград : Изд-во Волгоград. гос. ун-та, 2005. – 422 с.
3. [Электронный ресурс] Zhuravlev V. M., Patrushev A. V. – URL : <http://arXiv:astro-ph/0602564>.
4. **Бхатнагар, Н.** Нелинейные волны в одномерных дисперсных системах / Н. Бхатнагар. – М. : Мир, 1983. – 137 с.

---

#### ***Журавлев Виктор Михайлович***

доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра теоретической  
физики, Ульяновский государственный  
университет

E-mail: zhvictorm@gmail.com

#### ***Zhuravlev Viktor Mikhaylovich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, sub-department  
of theoretical physics,  
Ulyanovsk State University

#### ***Патрушев Александр Владимирович***

аспирант, факультет прикладной  
математики, Университет западного  
Онтарио (Лондон, Онтарио, Канада)

E-mail: apatrush@uwo.ca

#### ***Patrushev Alexander Vladimirovich***

Postgraduate student, Faculty of Applied  
Mathematics, University of West  
Ontario (London, Ontario, Canada)

---

УДК 521.14; 52-856; 523.46-862

#### **Журавлев, В. М.**

**Динамика самогравитирующего пылевого диска в слабонелинейном режиме** / В. М. Журавлев, А. В. Патрушев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 69–79.

## РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЛАВООБРАЗОВАНИЯ РУТЕНИЯ С КЮРИЕМ И ТЕХНЕЦИЕМ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Представлены результаты получения и рентгенографического исследования соединений рутения с кюрием и технецием. Микрообразец сплава кюрия-244 с рутением получен методом высокотемпературной конденсации паров металлического кюрия на подложку из рутения и исследован рентгеновским дифрактометрическим методом. В образце обнаружены два интерметаллида:  $\text{Ru}_2\text{Cm}$  с гексагональной решеткой типа  $\text{Zn}_2\text{Mg}$  с параметрами  $a = 5,279$  (1) Å,  $c = 8,812$  (3) Å;  $\text{Ru}_3\text{Cm}$  с кубической решеткой типа  $\text{Cu}_3\text{Au}$  и  $a = 4,151$  (2) Å. Получены данные по рентгеноаморфизации решетки интерметаллида  $\text{Ru}_3\text{Cm}$  под действием интенсивного альфа-распада кюрия-244. С использованием метода рентгеновской дифрактометрии изучены образцы металлического технеция, а также образцы сплавов технеция, облученные в реакторе до накопления 19, 45, 70 % рутения. Показано, что в результате накопления рутения образуются гомогенные твердые растворы рутений-технеций с гексагональной плотноупакованной структурой.

*Ключевые слова:* кюрий, металлический технеций, рутений, рентгеновский дифрактометрический анализ, сплав, кристаллическая структура, параметры кристаллической решетки.

*Abstract.* The article introduces the results of radiographic examination of ruthenium compounds with curium and technetium. The authors have obtained a microsample of curium-244-ruthenium alloy by high-temperature condensation of metallic Cm on a ruthenium substrate. After X-ray diffractometry method examination, the authors have discovered two intermetallic semiconductors in the microsample:  $\text{Ru}_2\text{Cm}$  with a hexagonal lattice of  $\text{Zn}_2\text{Mg}$  type with the following parameters:  $a = 5,279$  (1) Å,  $c = 8,812$  (3) Å;  $\text{Ru}_3\text{Cm}$  with a cubic lattice of  $\text{Cu}_3\text{Au}$  type and  $a = 4,151$  (2) Å. The authors have received the data on X-ray lattice amorphization of  $\text{Ru}_3\text{Cm}$  intermetallic semiconductor under intensive alpha decay of curium-244. Metallic samples of technetium, as well as samples of technetium alloys, irradiated in the reactor up to the accumulation of 19, 45, 70 % ruthenium have been studied by the X-ray diffraction method. The article shows that ruthenium accumulation results in formation of homogeneous solid solutions of ruthenium-technetium with hexagonal close-packed structures.

*Key words:* curium, metallic technetium, ruthenium, X-ray diffractometry analysis, alloy, crystal structure, lattice parameters.

### Введение

На протяжении многих лет в НИИАР проводятся работы по получению и исследованию металлов трансплутониевых элементов (ТПЭ), их сплавов и соединений. Исследование системы Ru-Cm является продолжением изучения сплавообразования кюрия с элементами группы платиновых металлов. Ранее были получены интерметаллиды Cm с Pt, Ir, Rh [1].

<sup>1</sup> Работа частично финансируется в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы».

Исследование сплавообразования рутения с технецием проводится в рамках работ по изучению трансмутации технеция. Этот процесс с приемлемой скоростью может быть реализован в высокопоточном реакторе СМ-3 (Димитровград, Россия). Для последующего выделения рутения из облученных образцов необходимы сведения о фазовых соотношениях в системе технеций-рутений в условиях облучения. В настоящей работе с использованием метода рентгеновской дифрактометрии изучены образцы металлического технеция, а также образцы технеция, облученные в реакторе до накопления 19, 45, 70 % рутения.

## 1. Экспериментальная часть

Образец сплава Ru с  $^{244}\text{Cm}$  был получен методом торий-термического восстановления оксида кюрия с одновременной конденсацией паров металлического кюрия на плоскую подложку из рутения (диаметр 8 мм, толщина 0,3 мм). Процесс проводили в высоком вакууме при постепенном повышении температуры до 2000 °С в течение 5 мин. Содержание кюрия в образце определяли по количеству испускаемых нейтронов спонтанного деления  $^{244}\text{Cm}$  методом сравнения с эталоном. Было установлено, что образец содержит примерно 365 мкг кюрия.

Сплавы Ru с Tc были получены в результате облучения металлического технеция в реакторе СМ. Исходные образцы металлического технеция, а также сплавов Tc-Ru, полученных в реакторных экспериментах, представляли собой диски серого цвета диаметром 6 мм и толщиной 0,3 мм. По данным спектрофотометрического и эмиссионного спектрального анализа, содержание рутения в исследуемых образцах составляло 19, 45 и 70 %.

Образцы исследовали рентгеновским дифрактометрическим методом (дифрактометр ДРОН-3М) при комнатной температуре. Использовали отфильтрованное (Ni-фильтр) немонахроматизированное медное  $K_{\alpha}$ -излучение. Начальную обработку рентгенограмм проводили с использованием специального программного комплекса. Угловое положение рефлексов корректировали по рефлексам кубической решетки алмаза, наносимого тонким слоем на поверхность образцов при каждой съемке. Рентгенографическую идентификацию фаз выполняли с использованием картотеки ASTM [2] и компьютерного банка данных по кристаллическим структурам неорганических материалов. Параметры кристаллических решеток (ПКР) рассчитывали аналитическим методом с экстраполяцией точных значений ПКР по задаваемым наборам Брэгговских рефлексов.

## 2. Результаты и обсуждение

### 2.1. Сплавы рутения с кюрием

Исходная рентгенограмма образца (РГ1) была получена через 6 ч после его изготовления. После 68 сут хранения на воздухе образец был отожжен в высоком вакууме (0,1 мПа) при 1000–1100 °С. Затем было снято еще несколько рентгенограмм – сразу после отжига образца (РГ2), а также в ходе выдержки его на воздухе при комнатной температуре (с целью наблюдения динамики изменения дифракционной картины).

На исходной рентгенограмме образца РГ1 были выявлены рефлексы, принадлежащие следующим кристаллическим решеткам:

- гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетке металлического Ru;
- гексагональной решетке типа  $Zn_2Mg$ , идентифицированной, по аналогии с  $Ru_2Gd$  [2], как интерметаллид  $Ru_2Sm$ ;
- моноклинной решетке  $B-Sm_2O_3$ .

Расчетные параметры кристаллической решетки интерметаллида  $Ru_2Sm$  приведены в табл. 1.

Таблица 1

Расчетные ПКР интерметаллидов кюрия,  
обнаруженных на рентгенограммах образца системы Ru-Sm

Фаза	Сингония (пространственная группа)	$n$	Параметры решетки		
			$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
РГ1					
$Ru_2Sm$	Гексагональная ( $P6_3/mmc$ )	9	5,279 (1)	8,812 (3)	212,7 (1)
РГ2					
$Ru_3Sm$	Кубическая ( $Pm\bar{3}m$ )	4	4,151 (2)	–	71,51 (5)

**Примечание.** Здесь и далее:  $n$  – число рефлексов в расчетном наборе;  $V$  – объем элементарной ячейки. В скобках после значений параметров решетки приведены ошибки определения последнего знака.

На рентгенограмме образца РГ2 были выявлены рефлексы, отнесенные к следующим кристаллическим решеткам:

- ГПУ решетке металлического Ru;
- кубической решетке типа  $Cu_3Au$ , идентифицированной, по аналогии с  $Rh_3Sm$  [1], как интерметаллид  $Ru_3Sm$ ;
- моноклинной решетке  $B-Sm_2O_3$ .

Расчетные параметры кристаллической решетки интерметаллида  $Ru_3Sm$  приведены в табл. 1.

Идентификацию интерметаллидов рутения с кюрием проводили методом, ставшим традиционным при идентификации новых соединений ТПЭ с другими элементами Периодической системы. Он заключается в сравнении наборов межплоскостных расстояний и интенсивностей рефлексов известных соединений лантанидов и актинидов с данными, полученными на рентгенограмме исследуемого образца, при этом учитывается разница металлических радиусов лантанидов и кюрия.

Следует заметить, что полученные ранее методом высокотемпературной конденсации паров кюрия на подложки из Rh, Pt, Ir интерметаллиды  $Rh_2Sm$ ,  $Pt_2Sm$ ,  $Ir_2Sm$  [1], в отличие от полученного в данной работе  $Ru_2Sm$  с гексагональной решеткой, имели кубическую решетку типа  $Cu_2Mg$ . Этот результат, видимо, закономерен, поскольку известные фазы Лавеса, образованные металлами с ГПУ структурой (Ru, Os) с элементами IIIA группы, обладают преимущественно гексагональной структурой типа  $Zn_2Mg$ , в то время как платиноиды с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой (Ir, Rh, Pt, Pd) образуют фазы Лавеса с кубической решеткой типа  $Cu_2Mg$  [3].

Интерметаллид  $Ru_3Sm$  имеет кубическую решетку того же типа, что и полученные ранее методом конденсации паров кюрия интерметаллиды

$Pt_3Sm$ ,  $Ir_3Sm$ ,  $Rh_3Sm$  [1]. Зависимость параметра кристаллической решетки от металлического радиуса платиноида для интерметаллидов  $M_3Sm$  с кубической решеткой типа  $Cu_3Au$ , полученных методом конденсации паров, приведена на рис. 1. Показано, что ПКР этих соединений пропорционален металлическому радиусу платиноида.

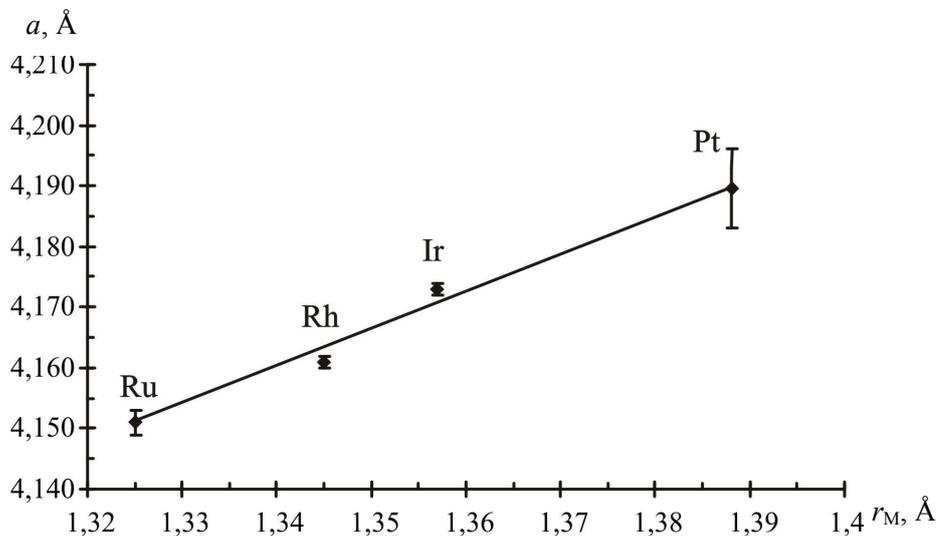


Рис. 1. Зависимость параметра решетки для интерметаллидов  $M_3Sm$  от металлического радиуса платиноида

Установлено, что параметры кристаллической решетки рутения после конденсации кюрия не изменились, что свидетельствует об отсутствии растворимости кюрия в рутении.

Влияние интенсивного альфа-распада  $^{244}Sm$  на кристаллическую структуру интерметаллида  $Ru_3Sm$  проявилось в увеличении объема его кристаллической ячейки в процессе выдержки образца, которое сопровождалось уменьшением интенсивности рефлексов вплоть до полного их исчезновения (рентгеноаморфизация фазы).

Полная аморфизация кристаллической решетки интерметаллида  $Ru_3Sm$  произошла за 2–3 сут. Зафиксированное увеличение объема элементарной ячейки ( $\Delta V/V$ ) составило 0,7 % за первые сутки выдержки.

## 2.2. Сплавы рутения с технецием

В настоящей работе исследованы сплавы рутения с технецием, полученные в результате облучения металлического технеция в реакторе СМ.

Результаты рентгенографического фазового анализа исследованных образцов обобщены в табл. 2.

Наиболее сильные и многочисленные рефлексы во всех облученных образцах дает ГПУ-фаза твердого раствора рутения в технеции (рис. 2), изоструктурная с ГПУ-фазой металлического Тс и обозначенная в табл. 2 как Тс-Ru (Ф-1). Особенностью дифракционной картины этой фазы во всех образцах, начиная с необлученного Тс и заканчивая образцом Тс – 70 % Ru, является плохое разрешение  $K_\alpha$ -дублетов на больших углах отражения, что сви-

детельствует, по-видимому, о заметной дефектности кристаллической структуры этой фазы. Другая особенность этой фазы заключается в текстурированности, т.е. в перераспределении интенсивности с усилением отражений типа 00 $l$ . Последнее обстоятельство является, видимо, следствием способа приготовления металлических дисков с использованием прокатки.

Таблица 2

Результаты рентгенографического анализа сплавов рутения и технеция

Образец	Фазовый состав	Число наблюдаемых рефлексов фазы	ПКР, нм	
			<i>a</i>	<i>c</i>
Тс	Тс (Ф-1)	10	0,2740 (1)	0,4397 (1)
	НФ (1)	3		
Тс – 19 % Ru	Тс-Ru (Ф-1)	8	0,2778 (14)	0,4508 (16)
	НФ (1)	2		
	ГПУ (Ф-2)	5		
	НФ (2)	3		
Тс – 45 % Ru	Тс-Ru (Ф-1)	10	0,2724 (1)	0,4330 (1)
	НФ (1)	3		
	ГПУ (Ф-2)	6		
Тс – 70 % Ru	Тс-Ru (Ф-1)	10	0,2716 (2)	0,4299 (1)
	НФ (1)	3		
	ГПУ (Ф-2)	4		

**Примечание.** Здесь и далее: НФ – неизвестная фаза.

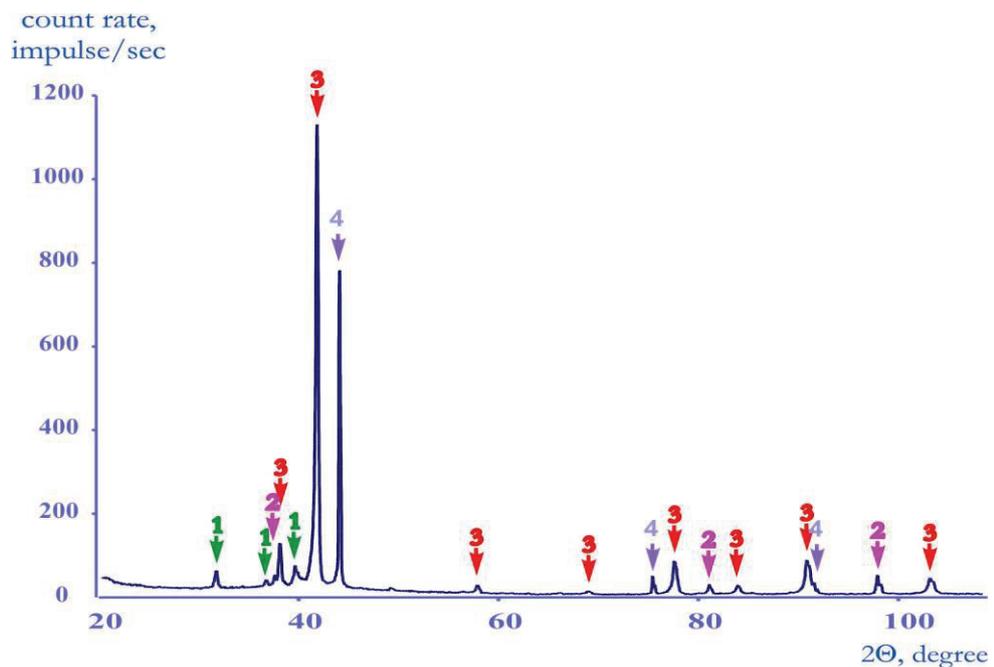


Рис. 2. Дифрактограмма образца Тс – 45 % Ru: 1 – пики неизвестной фазы; 2 – пики неизвестной фазы ГПУ-типа; 3 – пики твердого раствора Тс-Ru; 4 – пики алмаза

Значения параметров кристаллической решетки твердого раствора Тс-Ru зависят от содержания рутения (табл. 2) и находятся между значения-

ми параметров чистых компонентов (для Tc  $a = 2,743 \text{ \AA}$  и  $c = 4,400 \text{ \AA}$ , для Ru  $a = 2,706 \text{ \AA}$  и  $c = 4,281 \text{ \AA}$  [4]).

На дифрактограммах всех без исключения образцов обнаружены 2–3 слабых рефлекса на передних углах (рис. 2), местоположение и относительная интенсивность которых практически одинаковы для всех образцов. По-видимому, они принадлежат фазе, которая изначально присутствовала во всех образцах. Они интерпретированы как рефлексы НФ (1) (табл. 2).

Кроме того, на рентгенограммах всех облученных образцов обнаружены слабые рефлексы фазы, которая была интерпретирована как вторая ГПУ-фаза с параметрами решетки  $a = 2,78 - 2,79 \text{ \AA}$  и  $c = 4,50 - 4,52 \text{ \AA}$  (табл. 2, фаза Ф-2; рис. 2). Существование этой фазы не укладывается в рамки представлений о твердом растворе Tc–Ru, и для выяснения ее природы необходимы дополнительные исследования.

### Заключение

Таким образом, в результате проведенных исследований были впервые идентифицированы ранее неизвестные соединения: интерметаллид  $\text{Ru}_2\text{Cm}$  с гексагональной решеткой типа  $\text{Zn}_2\text{Mg}$  (ПКР  $a = 5,279(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 8,812(3) \text{ \AA}$ ) и интерметаллид  $\text{Ru}_3\text{Cm}$  с кубической решеткой типа  $\text{Cu}_3\text{Au}$  (ПКР  $a = 4,151(2) \text{ \AA}$ ). Установлено, что ПКР интерметаллидов  $\text{M}_3\text{Cm}$  (где М – металл платиновой группы) с кубической решеткой типа  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , полученных методом конденсации паров, пропорционален металлическому радиусу платиноида.

Рентгенофазовый анализ облученных в реакторе образцов металлического технеция показал, что при накоплении рутения образуются гомогенные твердые растворы рутений-технеций с ГПУ-структурой; параметры их кристаллической решетки  $a$  и  $c$  закономерно уменьшаются с увеличением концентрации рутения.

### Список литературы

1. **Радченко, В. М.** Синтез и изучение бинарных соединений актиноидов и лантаноидов. XVIII. Исследование сплавов  $^{244}\text{Cm}$  с платиной, иридием и родием, полученных конденсацией паров металлического кюрия / В. М. Радченко и др. // Радиохимия. – 1994. – Т. 36, Вып. 4. – С. 299–303.
2. X-Ray Diffraction Data Cards. Joint Committee on Powder Diffraction Standards. Amer. Soc. for Testing Materials (ASTM). – Philadelphia, 1999.
3. **Савицкий, Е. М.** Металловедение платиновых металлов / Е. М. Савицкий и др. – М. : Металлургия, 1975. – 224 с.
4. **Эмсли, Дж.** Элементы / Дж. Эмсли. – М. : Мир, 1993. – 256 с.

**Пичужкина Елена Михайловна**

аспирант, Ульяновский государственный университет; научный сотрудник ОАО «ГНЦ Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

**Pichuzhkina Elena Mikhailovna**

Postgraduate student, Ulyanovsk State University, researcher at “GNT Nauchno-issledovatel'skiy institute yadernykh reaktorov” plc. (State research institute of nuclear reactors)

E-mail: elena810@mail.ru

**Радченко Вячеслав Михайлович**

доктор химических наук, лауреат Государственной премии РФ в области науки и техники, начальник лаборатории технологии источников Радиохимического объединения ОАО «ГНЦ Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

**Radchenko Vyacheslav Mikhaylovich**

Doctor of chemical sciences, laureate of the public award of the Russian Federation in science and engineering, head of the laboratory of sources technology at “GNT Nauchno-issledovatel'skiy institut yadernykh reaktorov” plc. (State research institute of nuclear reactors)

***Томилин Сергей Васильевич***

кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник ОАО «ГНЦ Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

***Tomilin Sergey Vasilyevich***

Candidate of chemical sciences, chief researcher at “GNT Nauchno-issledovatel'skiy institut yadernykh reaktorov” plc. (State research institute of nuclear reactors)

E-mail: RotmKV@yandex.ru

***Ротманов Константин Владиславович***

кандидат химических наук, старший научный сотрудник ОАО «ГНЦ Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

***Rotmanov Konstantin Vladislavovich***

Candidate of chemical sciences, senior staff researcher at “GNT Nauchno-issledovatel'skiy institut yadernykh reaktorov” plc. (State research institute of nuclear reactors)

E-mail: RotmKV@yandex.ru

---

УДК 539.125

**Пичужкина, Е. М.**

**Рентгенографическое исследование сплавообразования рутения с кюрием и технецием / Е. М. Пичужкина, В. М. Радченко, С. В. Томилин, К. В. Ротманов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 80–86.**

М. А. Кокорева, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев

## ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В КВАНТОВОМ ЦИЛИНДРЕ ПРИ НАЛИЧИИ ТОЧЕЧНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ЕГО ПОВЕРХНОСТИ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Теоретически исследован электронный транспорт в полупроводниковой нанотрубке, находящейся в продольном магнитном поле, при наличии нескольких короткодействующих примесей на ее поверхности. Получено явное аналитическое выражение для кондактанса системы как функции химического потенциала электронов. Изучена зависимость кондактанса от величины магнитного поля, положения примесей и силы точечных потенциалов. Показано, что наличие одиночной примеси приводит к появлению провалов на зависимости кондактанса от химического потенциала, а наличие нескольких примесей приводит к появлению интерференционных эффектов в электронном транспорте, проявляющихся в осцилляциях кондактанса.

*Ключевые слова:* кондактанс, квантовый цилиндр, резонансы Фано, потенциалы нулевого радиуса.

*Abstract.* The article describes a theoretical investigation of electron transport in a semiconductor nanotube with some short-range impurities on its surface. The tube is placed in an axial magnetic field. The authors derive an explicit analytical expression for the conductance of the system as a function of electron chemical potential. The article examines the conductance dependence on magnetic field range, impurities positioning, and zero-range potentials' strength. The authors show that the presence of a single impurity leads to appearance of dips in the conductance dependence on the chemical potential. The presence of several impurities results in interference phenomena in electron transport manifested in conductance oscillations.

*Key words:* conductance, quantum cylinder, Fano resonances, zero-range potentials.

### Введение

Настоящая работа посвящена исследованию электронного транспорта в нанотрунке, на поверхности которого имеется несколько короткодействующих примесей. Интерес к изучению такой системы вызван активным исследованием в настоящее время углеродных нанотрубок, а также свернутых в цилиндр напряженных полупроводниковых слоев GaAs/AlGaAs [1–4]. В этих системах экспериментально был обнаружен целый ряд интересных явлений, таких как квантование кондактанса [5], резонансы Фано в электронном транспорте [6, 7], индуцированная и собственная сверхпроводимость [8]. Как показано в [9], величина тока в коротких однослойных нанотрубках может достигать значений  $70\mu A$ , а плотность тока может превышать  $10^9 A/cm^2$  [10]. Уникальные физические свойства нанотрубок делают их весьма привлекательным материалом для создания электронных устройств нового поколения. Уже несколько лет на их основе создаются такие устройства, как нанодиоды [11–13] и одноэлектронные транзисторы [14–16].

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы» (грант № 2.1.1/2656).

Большинство теоретических исследований по кондактансу в нанотрубках [17–22] основано на применении формулы Ландауэра [23–27] и приближения сильной связи. В работе [28] в модели сильной связи исследуется электронный транспорт через нанотрубку с одноатомными контактами, присоединенными к боковой поверхности. Показано, что в зависимости от типа трубки, ее радиуса и симметрии, а также от положения контактов проводимость может обращаться в нуль при значениях энергии, в которых имеется сингулярность плотности состояний. В работе [29] экспериментально исследовался баллистический электронный транспорт в одиночных углеродных нанотрубках. Наблюдалась осцилляция кондактанса, связанные с интерференцией электронных волн между контактами. Кондактанс достигал максимального возможного для однослойных нанотрубок значения  $2G_0$ . В работе [7] наблюдались резонансы Фано в электронном транспорте через однослойную нанотрубку. В работах [30, 31] исследовался кондактанс нанотрубок при комнатной температуре в трехтерминальном устройстве, в котором в качестве одного из электродов используется зонд атомного силового микроскопа. Показано, что в многослойных нанотрубках транспорт носит диффузный характер, а однослойные нанотрубки являются баллистическими проводниками вплоть до длин в несколько микрон.

В большинстве теоретических исследований электронного транспорта в нанотрубках рассматривается случай чистых образцов, в которых отсутствуют дефекты кристаллической решетки или примеси. Однако недавние теоретические и экспериментальные исследования показывают, что даже одиночная примесь может оказывать существенное влияние на кондактанс квантовой проволоки [32] и нанотрубки [18], нарушая ступенчатую структуру кондактанса. В частности, возможно появление провалов вблизи порогов ступеней кондактанса. В ряде работ [6, 7] по изучению кондактанса нанотрубок подобные эффекты были обнаружены экспериментально. Следует отметить, что примеси могут появляться на поверхности нанотрубки случайно, а могут быть внедрены в систему преднамеренно, с целью получения новых транспортных характеристик. В частности, примеси могут приводить к появлению резонансов в кондактансе системы, которые могут быть использованы при разработке резонансных наноэлектронных диодов и транзисторов. То есть контролируемое введение примесей в наноструктуры позволяет создавать системы, транспортные характеристики которых отличаются большой чувствительностью к изменению внешнего магнитного поля или напряжения на затворе.

Наличие нескольких примесей в нанотрубке может приводить к появлению новых эффектов, связанных с интерференцией электронных волн. В связи с этим вызывает интерес задача о влиянии короткодействующих рассеивающих центров на кондактанс нанотрубки, которой и посвящена настоящая работа.

### **1. Постановка задачи и метод решения**

Целью настоящей работы является исследование влияния точечных примесей на кондактанс наноцилиндра радиуса  $r$ , помещенного в продольное магнитное поле  $B$ . Рассмотренная модель может описывать электронный газ в свернутых напряженных слоях GaAs/AlGaAs и нанотрубках, так как в таких системах движение электронов происходит только по поверхности трубки.

Для исследования транспортной задачи получим гамильтониан электрона на поверхности цилиндра при наличии точечных возмущений, а затем решим уравнение Шредингера и найдем коэффициенты прохождения электрона и контактанс.

Рассмотрим сначала гамильтониан  $H_0$  электрона на цилиндре при отсутствии примесей. В цилиндрической системе координат гамильтониан  $H_0$  в может быть записан в виде

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*r^2} \left( i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 + \frac{p_z^2}{2m^*}, \quad (1)$$

где  $m^*$  – эффективная электронная масса;  $p_z$  – оператор проекции импульса на ось цилиндра;  $\Phi = \pi r^2 B$  – магнитный поток через сечение цилиндра;  $\Phi_0 = 2\pi\hbar c / |e|$  – квант магнитного потока.

Спектр гамильтониана  $H_0$  состоит из дискретной составляющей

$$E_m = \varepsilon \left( m + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2$$

и энергии свободного движения вдоль оси  $z$ . Здесь  $\varepsilon = \hbar^2 / (2m^*r^2)$ . Для цилиндра радиусом 30 нм при  $m^* = 0,1m_e$  величина  $\varepsilon$  имеет порядок 0,4 meV. Гамильтониан  $H$  наноцилиндра при наличии примесей в точках  $\vec{q}_j = (z_j, \varphi_j)$  является точечным возмущением оператора  $H_0$ , которое определяется граничными условиями.

Согласно формуле Ландауэра – Бьюттикера контактанс  $G(\mu)$  при нулевой температуре выражается через коэффициенты прохождения электрона  $T_{mm'}$  из состояния с магнитным числом  $m$  в состояние с  $m'$

$$G = G_0 \sum_{m'm} T_{mm'} = G_0 \sum_{m'm} \frac{k_{m'}}{k_m} |t_{mm'}|^2, \quad (2)$$

где  $G_0 = e^2 / \pi\hbar$  – квант контактанса;  $T_{mm'}$  – коэффициент прохождения электрона;  $k_m = \sqrt{2m^*(E - E_m)} / \hbar$  – волновое число;  $t_{mm'}$  – амплитудный коэффициент прохождения, а сумма берется по всем состояниям, энергия которых не превышает энергию Ферми.

Для описания примесей в работе используется модель потенциалов нулевого радиуса, успешно применявшаяся для исследования  $D^{(-)}$ -центров в различных наноструктурах [33, 34]. В настоящей работе точечные примеси моделируются с помощью линейных граничных условий, накладываемых на волновую функцию. Для получения явного вида граничных значений волновой функции используется подход, основанный на теории потенциалов нулевого радиуса [35], использовавшийся ранее в работах [36, 37]. Как следует из теории потенциалов нулевого радиуса, при наличии точечного возмущения

в точке  $\vec{q}_j$  волновая функция электрона  $\psi_j(\vec{x})$  имеет логарифмическую сингулярность в окрестности этой точки [35]

$$\psi(\vec{x}) = -u_j \ln \rho(\vec{x}, \vec{q}_j) + v_j + R(\vec{x}, \vec{q}_j), \quad (3)$$

где  $\rho(\vec{x}, \vec{q}_j)$  – расстояние между точками  $\vec{x}$  и  $\vec{q}_j$  по поверхности цилиндра;  $R(\vec{x}, \vec{q}_j) \rightarrow 0$  при  $\vec{x} \rightarrow \vec{q}_j$ , а комплексные коэффициенты  $u_j$  и  $v_j$  играют роль граничных параметров для волновой функции в точке контакта  $\vec{q}_j$ .

Ясно, что граничные условия должны представлять собой линейные соотношения между параметрами  $u_j$  и  $v_j$ , а поскольку гамильтониан  $H$  всей системы должен быть самосопряженным оператором, коэффициенты этих соотношений должны быть действительными числами. С учетом этого в работе граничные условия выбраны в виде

$$v_j = P_j u_j. \quad (4)$$

Параметр  $P_j$  описывает силу точечного потенциала в точке  $\vec{q}_j$ . Как следует из теории потенциалов нулевого радиуса [35],  $P_j$  может быть выражен через длину рассеяния  $\lambda_j$  по формуле  $P_j = 2 \ln \lambda_j$ . Отметим, что с увеличением  $\lambda_j$  сила точечного возмущения уменьшается, а предел  $\lambda_j \rightarrow \infty$  соответствует отсутствию возмущения в точке  $\vec{q}_j$ .

Перейдем к решению уравнения Шредингера для гамильтониана  $H$ . Наличие примесей на цилиндре приводит к появлению в выражении для волновой функции рассеянных волн, которые описываются с помощью функции Грина гамильтониана  $H_0$ . В результате волновая функция электрона принимает следующий вид:

$$\psi(\vec{x}, E) = \psi_m(\vec{x}, E) + \sum_{j=1}^{N_p} \xi_j G(\vec{x}, \vec{q}_j; E). \quad (5)$$

Здесь  $\psi_m(\vec{x}, E) = \exp(ik_m z + im\varphi)$  – электронная волна, которая распространялась бы в цилиндре, если бы примеси отсутствовали;  $N_p$  – число примесей;  $\xi_j$  – коэффициенты, определяемые из граничных условий, а  $G(\vec{x}, \vec{x}'; E)$  – функция Грина оператора  $H_0$ , имеющая вид [37]

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \frac{im^*}{2\pi\hbar^2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik_m |z - z'| + im(\varphi - \varphi'))}{k_m r}. \quad (6)$$

Учитывая асимптотику функции Грина  $G(\vec{x}, \vec{q}_j; E)$  при  $\vec{x} \rightarrow \vec{q}_j$ , получим

$$u_j = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \xi_j, \quad v_j = \psi_m(\vec{q}_j) + \sum_{i=1}^{N_p} Q_{ji}(E) \xi_i, \quad (7)$$

где  $Q_{ji}(E)$  –  $Q$ -матрица Крейна, т.е. перенормированная функция Грина гамильтониана  $H_0$ , недиагональные элементы которой равны  $Q_{ij}(E) = G(\bar{q}_i, \bar{q}_j; E)$ , а диагональные определяются выражением [37]

$$Q_{jj}(E) = \lim_{\bar{x} \rightarrow \bar{q}_j} \left[ G(\bar{x}, \bar{q}_j; E) + \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \ln \rho(\bar{x}, \bar{q}_j) \right]. \quad (8)$$

Обозначим  $\tilde{Q}_{ij}(E) = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} Q_{ij}(E) - P_j \delta_{ij}$ . Как показано в [37],  $Q(E)$  имеет вид

$$\tilde{Q}_{jj}(E) = \frac{i}{2k_0 r} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \left( \frac{i}{k_m r} + \frac{i}{k_{-m} r} - \frac{1}{m} \right) + \ln \frac{r}{\lambda_j}. \quad (9)$$

Здесь квадратный корень выбран таким образом, что  $\text{Re } k_m > 0$  при  $E > E_m$  и  $\text{Im } k_m > 0$  при  $E < E_m$ .

Подставляя волновую функцию (5) в граничные условия (4), найдем следующие уравнения для определения коэффициентов  $u_j$ :

$$\sum_{i=1}^{N_p} \tilde{Q}_{ji} u_i = -\Psi_m(\bar{q}_j). \quad (10)$$

Используя уравнения (6), (5) и (10), получим следующую формулу для амплитудного коэффициента прохождения  $t_{mm'}$ :

$$t_{m'm} = \delta_{m'm} - \frac{i}{2rk_{m'}} \sum_{j,l=1}^{N_p} \tilde{Q}_{jl}^{-1} e^{ik_m z_l + im\varphi_l - ik_{m'} z_j - im'\varphi_j}. \quad (11)$$

Тогда формула для  $G(\mu)$  примет вид

$$\frac{G(\mu)}{G_0} = M(\mu) - 2 \text{ReTr} \left[ i \tilde{Q}^{-1} A \right] + \text{Tr} \left[ \tilde{Q}^{-1} A \left( \tilde{Q}^{-1} \right)^+ A \right]. \quad (12)$$

Здесь  $M(\mu) = m_{\max} - m_{\min} + 1$  – число электронных мод с энергией ниже  $\mu$ , а матрица  $A$  определяется выражением

$$A_{lj} = \sum_{m=m_{\min}}^{m_{\max}} \frac{\exp \left[ ik_m (z_l - z_j) + im(\varphi_l - \varphi_j) \right]}{2rk_m}, \quad (13)$$

где  $m_{\min}$  и  $m_{\max}$  – наименьшее и наибольшее значения квантового числа  $m$  для электронных мод с энергией ниже  $\mu$ .

## 2. Случай одиночной примеси

Рассмотрим подробнее случай одиночной примеси. Формула (12) в этом случае запишется в виде

$$\frac{G(\mu)}{G_0} = M(\mu) - \frac{(\text{Im} \tilde{Q})^2}{|\tilde{Q}|^2}. \quad (14)$$

При отсутствии примеси на цилиндре в формуле (14) имеется только первое слагаемое и зависимость  $G(\mu)$  имеет ступенчатый характер (рис. 1,а). Второе слагаемое в формуле (14) описывает уменьшение кондактанса за счет отражения электронов от точечной примеси и приводит к появлению провалов на зависимости  $G(\mu)$ , связанных с резонансным рассеянием на виртуальном уровне (рис. 1). В этом случае точечный потенциал создает квазистационарное состояние ниже границы подзоны с номером  $m$ . Взаимодействие этого состояния с состояниями непрерывного спектра в нижележащей подзоне увеличивает вероятность рассеяния электрона и приводит к появлению резонансов в амплитудах отражения.

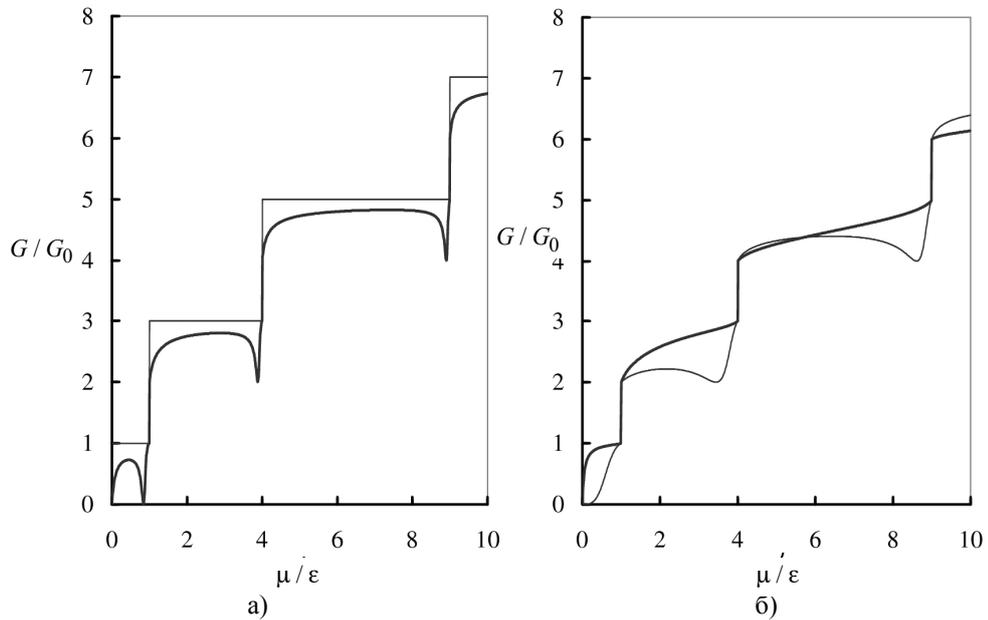


Рис. 1. Кондактанс  $G$  как функция химического потенциала  $\mu$ :

а – тонкая линия – примесь отсутствует; толстая линия –  $\lambda_1 = 5r$ ;

б – тонкая линия –  $\lambda_1 = r$ ; толстая линия –  $\lambda_1 = 0,1r$  (здесь и далее  $\epsilon = \hbar^2 / (2m^* r^2)$ )

Как видно из формулы (14), максимальная глубина провалов равна  $G_0$ . Положение минимумов кондактанса определяется уравнением  $\text{Re} Q_{11} - P_1 = 0$  и зависит от силы точечного потенциала. При  $\lambda_1 \gg r$  провалы на графике зависимости  $G(\mu)$  располагаются вблизи порогов ступеней слева (рис. 1,а). С уменьшением  $\lambda_1$  провал смещается в область меньших энергий и, дойдя до нижней границы подзоны ( $\mu = E_m$ ), исчезает (рис. 1,б). В этом случае зависимость  $G(\mu)$  носит монотонный характер.

В магнитном поле при нецелых и неполоцелых значениях  $\mu/\epsilon$  каждая ступенька расщепляется на две (рис. 2), а при полуцелых вырождение возни-

кает снова. Влияние одиночной примеси в этом случае остается таким же, как и в отсутствие поля.

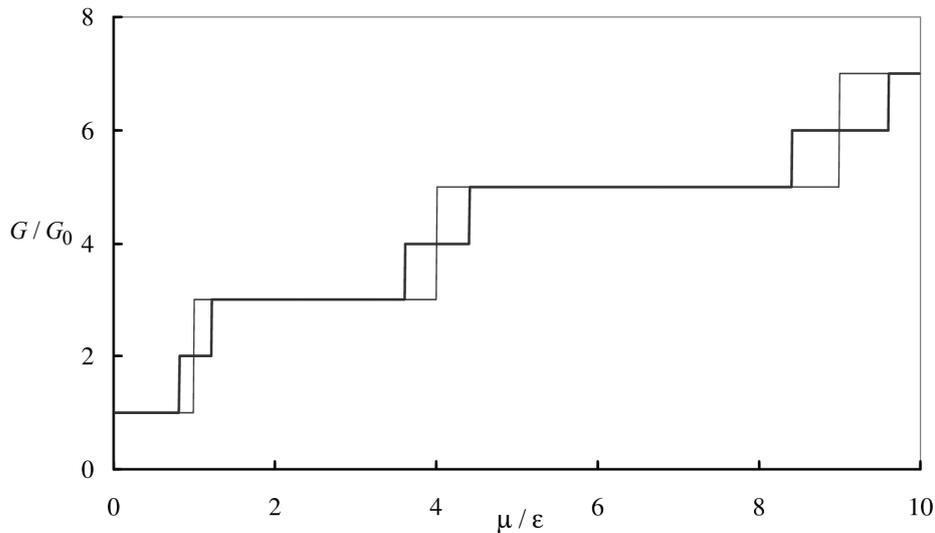


Рис. 2. Кондуктанс при отсутствии поля (тонкая линия), зависимость кондуктанса от химического потенциала при наличии поля  $\eta = 0,2$  (толстая линия)

### 3. Случай двух точечных примесей

Рассмотрим случай, когда на цилиндре имеется два возмущения. Как видно из формулы (12),  $T_{mm'}$  зависит только от разности координат примесей  $\Delta z = z_2 - z_1$  и  $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ , т.е. кондуктанс определяется только взаимным расположением примесей, а не координатами каждой примеси в отдельности. Таким образом, поведение кондуктанса определяется следующими параметрами системы: расстоянием  $\Delta z$  между примесями вдоль оси цилиндра, углом  $\Delta\varphi$  между образующими, на которых расположены примеси, величиной длины рассеяния  $\lambda_j$  и потоком магнитного поля  $\eta = \Phi/\Phi_0$  через поперечное сечение цилиндра. Отметим, что электронные волны, которые имеют узел в точках расположения обеих примесей, не рассеиваются. Поэтому следует ожидать, что при высокой симметрии в расположении примесей кондуктанс системы будет большим, чем при остальных положениях.

При наличии двух примесей на графике зависимости кондуктанса от химического потенциала могут появляться дополнительные провалы, а также асимметричные резонансы Фано (рис. 3,а). Глубина провалов в этом случае может превышать квант кондуктанса. При особых положениях примесей может происходить исчезновение дополнительных провалов и коллапс резонансов Фано (рис. 3,б). Например, при нахождении примесей на противоположных образующих цилиндра  $\varphi_2 - \varphi_1 = \pi$  в отсутствие поля исчезают дополнительные провалы в окрестности порогов ступеней. При приближении  $(\varphi_2 - \varphi_1)$  к значению  $\pi$  уменьшается не амплитуда, а ширина провалов и резонансов.

Рассмотрим зависимость кондуктанса от энергии Ферми, когда примеси расположены очень близко друг к другу, т.е. расстояние между ними много меньше радиуса цилиндра ( $\Delta z \ll r$ ) и примеси расположены на одной обра-

зующей. В этом случае зависимость кондактанса от химического потенциала (рис. 4) имеет вид, аналогичный случаю одной примеси (рис. 1). При больших значениях длины рассеяния на графике  $G(\mu)$  имеются провалы, которые при уменьшении длины рассеяния смещаются в область меньших энергий, а затем исчезают (рис. 4). Следовательно, две примеси ведут себя, как одна, если расстояние между ними мало.

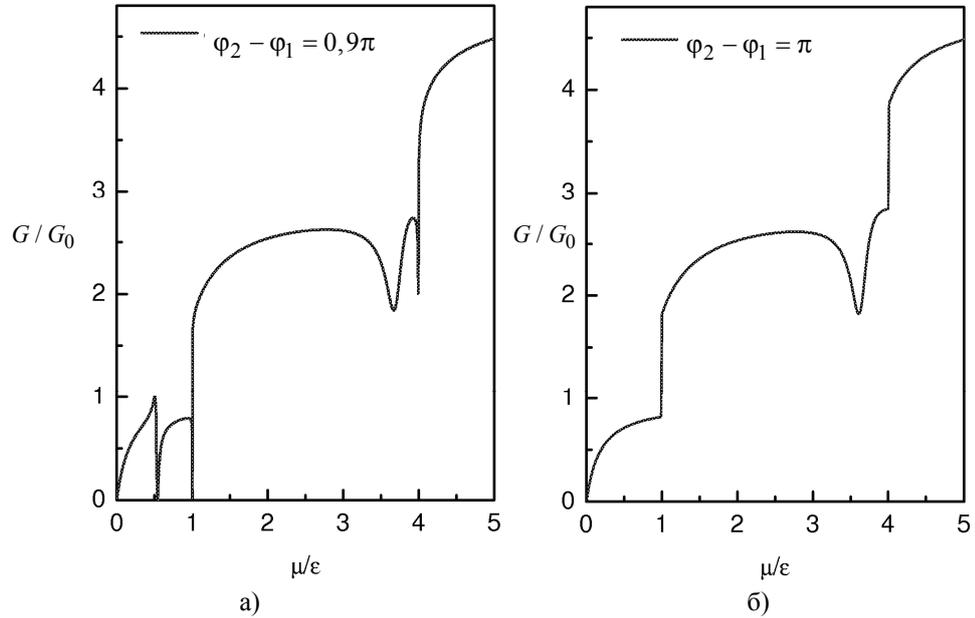


Рис. 3. Кондактанс  $G$  как функция химического потенциала  $\mu$  при  $\lambda_1 = 5r$ ,  $z_2 - z_1 = 0$ ; а –  $\phi_2 - \phi_1 = 0,9\pi$ ; б –  $\phi_2 - \phi_1 = \pi$

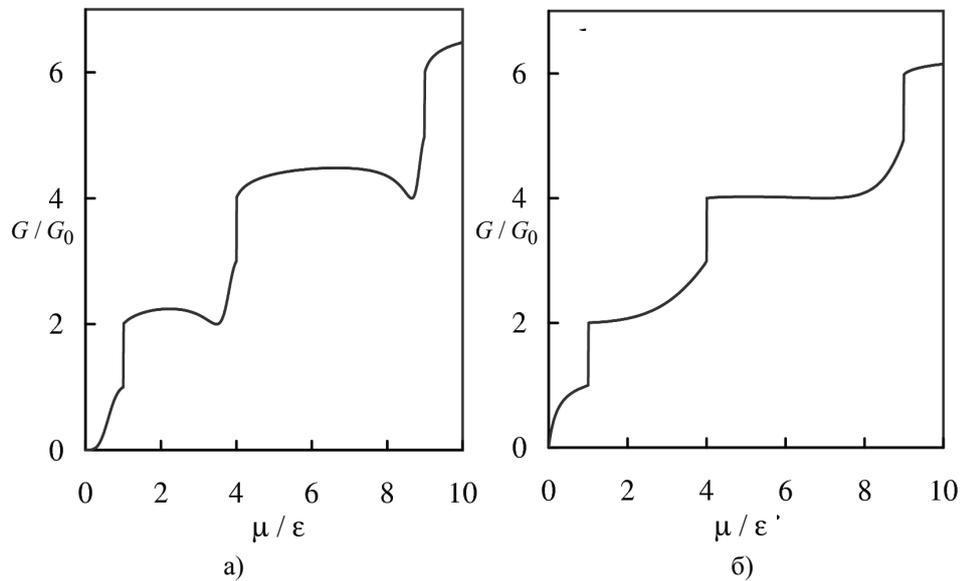


Рис. 4. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей, расположенных так, что  $\Delta\phi = 0$ ,  $\Delta z = 0,2r$ . Примеси имеют равные параметры, определяемые длиной рассеяния: а –  $\lambda = 5r$ ; б –  $\lambda = 0,5r$

Рассмотрим теперь зависимость кондактанса от угла  $\Delta\varphi$ . Начнем с наиболее интересных случаев, когда примеси расположены на одной образующей цилиндра ( $\Delta\varphi = 0$ ) или на диаметрально противоположных образующих ( $\Delta\varphi = \pi$ ).

На рис. 5 показаны зависимости кондактанса при  $\Delta\varphi = 0$  и при  $\Delta\varphi = \pi$ . Как видно из графика, при  $\Delta\varphi = \pi$  величина кондактанса при любых значениях химического потенциала становится меньше, чем при  $\Delta\varphi = 0$ . То есть при расположении примесей на одной образующей влияние примесей оказывается менее значительным, чем при расположении на противоположных образующих. Такое поведение кондактанса может объясняться тем, что расположенные на одной образующей примеси не рассеивают электронные волны, которые имеют узел на этой образующей. Следовательно, уменьшение кондактанса при  $\Delta\varphi = 0$  должно быть менее значительным, чем при  $\Delta\varphi = \pi$ . Этот эффект наблюдается при малых  $\lambda$ . При больших значениях  $\lambda$  при  $\Delta\varphi = \pi$  глубина провалов оказывается большей, чем при  $\Delta\varphi = 0$ , и на первой ступени кондактанса возникает асимметричный резонанс Фано (рис. 6,б).

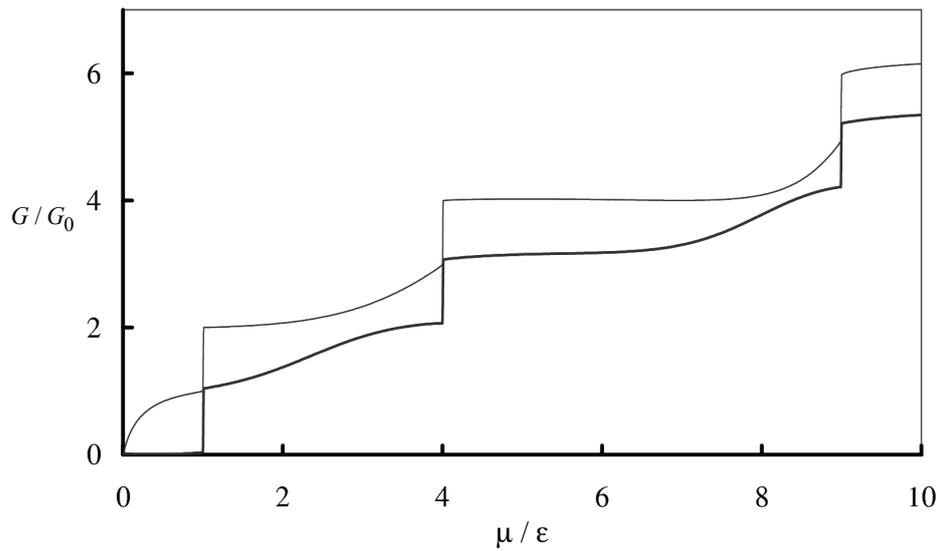


Рис. 5. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при  $\lambda = 0,5r$ ,  $\Delta z = 0,2r$ ,  $\eta = 0$ ,  $\Delta\varphi = 0$  (тонкая линия); при  $\Delta\varphi = \pi$  (толстая линия)

Следует отметить, что при  $\Delta\varphi = 0$  резонанс исчезает (рис. 6,а). При этом его амплитуда остается неизменной, а ширина уменьшается, при  $\Delta\varphi = 0$  происходит коллапс резонанса Фано.

Если расстояние между примесями значительно превышает радиус цилиндра, на зависимости  $G(\mu)$  наблюдаются осцилляции, связанные с интерференцией электронных волн, рассеянных на разных примесях (рис. 7). Отметим, что для наблюдения подобной интерференции длина свободного

пробега электронов в системе должна значительно превышать расстояние между примесями. Экспериментальное исследование электронного транспорта в углеродных нанотрубках [29] показало возможность наблюдения квантовой интерференции в этих системах, что позволяет надеяться на возможность экспериментальной реализации и других когерентных эффектов в нанотрубках.

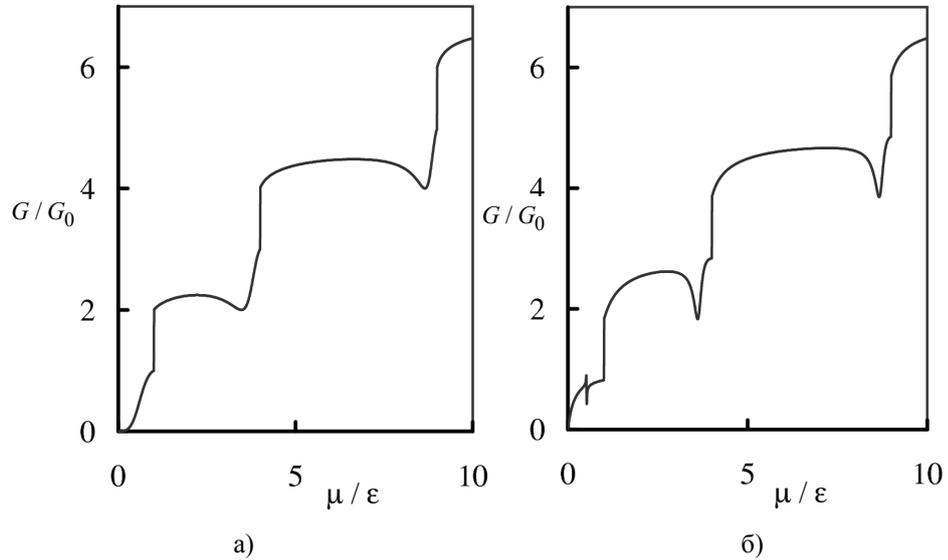


Рис. 6. Зависимость кондактанса от химического потенциала при наличии двух примесей при  $\lambda = 5r$ ,  $\Delta z = 0,2r$ : а –  $\Delta\varphi = 0$ ; б –  $\Delta\varphi = \pi$

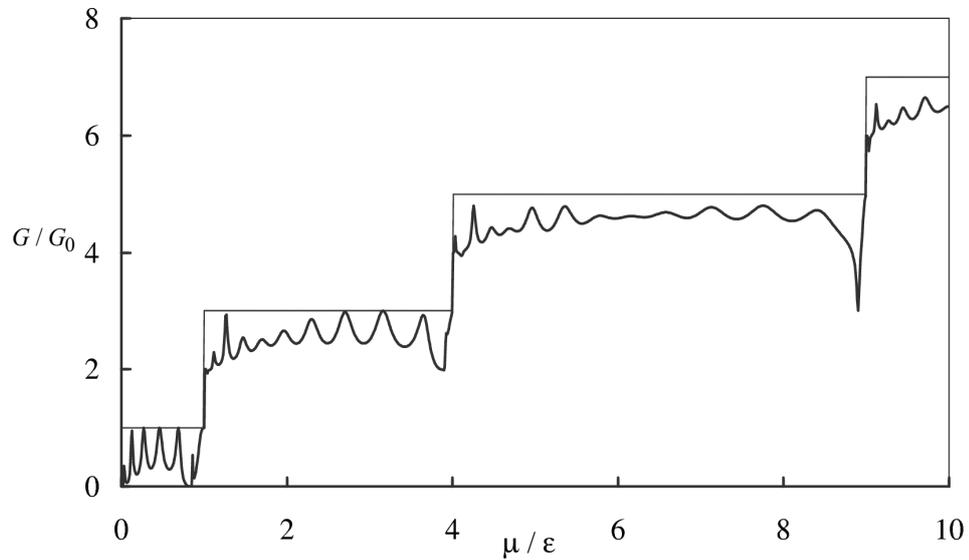


Рис. 7. Кондактанс  $G$  как функция химического потенциала  $\mu$ . Тонкая линия – примесь отсутствует; толстая линия –  $\lambda = 5r$ ,  $z_2 - z_1 = 20r$ ,  $\varphi_2 = \varphi_1$ ,  $B = 0$

### Заключение

Проведено теоретическое исследование кондактанса наноцилиндра, на поверхности которого имеются примеси, моделируемые потенциалами нулевого радиуса. Получена явная формула для кондактанса системы при нулевой температуре. Подробно рассмотрены случаи одной и двух примесей. Показано, что наличие точечных возмущений приводит к появлению провалов в кондактансе, связанных с резонансным рассеянием электронов. В случае одной примеси глубина провала равна  $G_0$ , а его положение зависит от силы точечного потенциала. С увеличением силы потенциала провал смещается в область меньших энергий и, дойдя до нижней границы подзоны, исчезает. В случае нескольких примесей максимальная глубина провалов превышает  $G_0$ . Если две примеси расположены на одной образующей цилиндра на достаточно близком расстоянии друг от друга (расстояние между примесями меньше длины волны электрона), то их влияние на электронный транспорт аналогично случаю одной примеси. Наличие двух и более примесей может приводить к появлению резонансов Фано в дополнение к провалам. При особых положениях примесей, отличающихся высокой симметрией, возможно исчезновение провалов и коллапс резонансов Фано. В частности, коллапс резонансов Фано наблюдается при расположении примесей на одной образующей. Интерференция электронных волн, рассеянных на разных примесях, приводит к появлению осцилляций на зависимости  $G(\mu)$ .

### Список литературы

1. **Prinz, V. Ya.** Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays / V. Ya. Prinz et al. // *Physica E*. – 2000. – V. 6. – P. 828.
2. **Prinz, V. Ya.** Precise semiconductor nanotubes and nanocorrugated quantum systems / V. Ya. Prinz // *Physica E*. – 2004. – V. 24. – P. 54.
3. **Prinz, V. Ya.** Precise semiconductor nanotubes and nanoshells fabricated on (110) and (111) Si and GaAs / V. Ya. Prinz // *Physica E*. – 2004. – V. 23. – P. 260.
4. **Vorob'ev, A. B.** Magnetotransport properties of two-dimensional electron gas on cylindrical surface / A. B. Vorob'ev et al. // *Physica E*. – 2004. – V. 23. – P. 171.
5. **Frank, S.** Carbon nanotube quantum resistors / S. Frank et al. // *Science*. – 1998. – V. 280. – P. 1744.
6. **Kim, J.** Fano Resonance in Crossed Carbon Nanotubes / J. Kim et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 90. – P. 166403.
7. **Babič, B.** Observation of Fano resonances in single-wall carbon nanotubes / B. Babič, C. Schönberger // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 70. – P. 195408.
8. **Kasumov, A.** Quantum transport through carbon nanotubes: Proximity-induced and intrinsic superconductivity / A. Kasumov et al. // *Phys. Rev. B*. – 2003. – V. 68. – P. 214521.
9. **Javey, A.** High-Field Quasiballistic Transport in Short Carbon Nanotubes / A. Javey et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 106804.
10. **Yao, Z.** High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes / Z. Yao, C. L. Kane, C. Dekker // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 2941.
11. **Yao, Z.** Carbon nanotube intramolecular junctions / Z. Yao et al. // *Nature*. – 1999. – V. 402. – P. 273.
12. **Fuhrer, M. S.** Crossed Nanotube Junctions / M. S. Fuhrer et al. // *Science*. – 2000. – V. 288. – P. 494–497.

13. **Zhou, C.** Modulated Chemical Doping of Individual Carbon Nanotubes / C. Zhou, J. Kong, E. Yenilmez, H. Dai // *Science*. – 2000. – V. 290. – P. 1552–1555.
14. **Tans, S. J.** Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube / S. J. Tans, A. R. M. Verschueren, C. Dekker // *Nature*. – 1998. – V. 393. – P. 49.
15. **Ch. Postma, H. W.** Carbon Nanotube Single-Electron Transistors at Room Temperature / H. W. Ch. Postma et al. // *Science*. – 2001. – V. 293. – P. 76–79.
16. **Appenzeller, J.** Multimode Transport in Schottky-Barrier Carbon-Nanotube Field-Effect Transistors / J. Appenzeller et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 226802-1.
17. **Nardelli, M. B.** Electronic transport in extended systems: Application to carbon nanotubes / M. B. Nardelli // *Phys. Rev. B*. – 1999. – V. 60. – P. 7828.
18. **Choi, H. J.** Exact solutions to the tight-binding model for the conductance of carbon nanotubes / H. J. Choi, J. Ihm // *Solid State Commun.* – 1999. – V. 111. – P. 385.
19. **Anantram, M. P.** Transmission through carbon nanotubes with polyhedral caps / M. P. Anantram, T. R. Govindan // *Phys. Rev. B*. – 2000. – V. 61. – P. 5020.
20. **Sanvito, S.** Fractional Quantum Conductance in Carbon Nanotubes / S. Sanvito et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 1974.
21. **Uryu, S.** Electronic states and quantum transport in double-wall carbon nanotubes / S. Uryu // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69. – P. 075402.
22. **Dag, S.** Theoretical study of crossed and parallel carbon nanotube junctions, three-dimensional grid structures / S. Dag, R. T. Senger, S. Ciraci // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 70. – P. 205407.
23. **Laundauer, R.** Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction / R. Laundauer // *IBM J. Res. Dev.* – 1957. – V. 1. – P. 223.
24. **Шарвин, Ю. В.** Об одном возможном методе исследования поверхности Ферми / Ю. В. Шарвин // *ЖЭТФ*. – 1965. – Т. 48. – С. 984.
25. **Laundauer, R.** Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices / R. Laundauer // *Philos. Mag.* – 1970. – V. 21. – P. 863.
26. **Laundauer, R.** Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction / R. Laundauer // *IBM J. Res. Dev.* – 1988. – V. 32. – P. 306.
27. **Buttiker, M.** Four-Terminal Phase-Coherent Conductance / M. Buttiker // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – V. 57. – P. 1761.
28. **Chibotaru, L. F.** Electron transmission through atom-contacted carbon nanotubes / L. F. Chibotaru, S. Compernelle, A. Ceulemans // *Phys. Rev. B*. – 2003. – V. 68. – P. 125412.
29. **Kong, J.** Quantum Interference and Ballistic Transmission in Nanotube Electron Waveguides / J. Kong et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 87. – P. 106801.
30. **Bachtold, A.** Scanned Probe Microscopy of Electronic Transport in Carbon Nanotubes / A. Bachtold et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 6082.
31. **Yaish, Y.** Electrical Nanoprobng of Semiconducting Carbon Nanotubes Using an Atomic Force Microscope / Y. Yaish et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 046401.
32. **Гейлер, В. А.** Проводимость квантовой проволоки в продольном магнитном поле / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, Л. И. Филина // *ЖЭТФ*. – 1998. – Т. 113. – С. 1376.
33. **Кревчик, В. Д.** Энергетический спектр и оптические свойства комплекса квантовая точка – примесный центр / В. Д. Кревчик, А. В. Левашов // *ФТП*. – 2002. – Т. 36. – С. 216.
34. **Кревчик, В. Д.** Магнитооптика квантовых ям с  $D^{(-)}$ -центрами / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, Вас. В. Ефстифеев // *ФТП*. – 2006. – Т. 40. – С. 689.
35. **Демков, Ю. Н.** Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике / Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. – Л. : Изд-во Ленинградского ун-та, 1975. – 240 с.

36. **Гейлер, В. А.** Резонансное туннелирование через двумерную наноструктуру с присоединенными проводниками / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев // ЖЭТФ. – 2003. – Т. 124. – С. 851.
37. **Margulis, V. A.** Electron transport on a cylindrical surface with one-dimensional leads / V. A. Margulis, M. A. Pyataev // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 075312.

---

**Кокорева Мария Алексеевна**

аспирант, Институт физики и химии  
Мордовского государственного  
университета имени Н. П. Огарева  
(г. Саранск)

E-mail: maria-kokoreva@yandex.ru

**Kokoreva Mariya Alekseevna**

Postgraduate student, Institute of physics  
and chemistry, Mordovia State University  
named after N. P. Ogaryov (Saransk)

**Маргулис Виктор Александрович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
теоретической физики, Институт физики  
и химии Мордовского государственного  
университета имени Н. П. Огарева  
(г. Саранск)

E-mail: theorphysics@mrsu.ru

**Margulis Viktor Alexandrovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, head of sub-department  
of theoretical physics, Institute of physics  
and chemistry, Mordovia State University  
named after N. P. Ogaryov (Saransk)

**Пятаев Михаил Анатольевич**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра теоретической физики,  
Институт физики и химии Мордовского  
государственного университета  
имени Н. П. Огарева (г. Саранск)

E-mail: pyataevma@gmail.com

**Pyataev Mikhail Anatolyevich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, sub-department of theoretical  
physics, Institute of physics and chemistry,  
Mordovia State University  
named after N. P. Ogaryov (Saransk)

---

УДК 538.935

**Кокорева, М. А.**

**Электронный транспорт в квантовом цилиндре при наличии точечных примесей на его поверхности** / М. А. Кокорева, В. А. Маргулис, М. А. Пятаев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 87–99.

## ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА СОСТОЯНИЕ ИОНОВ $\text{Eu}^{2+}$ В ЛЮМИНОФОРАХ

*Аннотация.* Исследовано влияние высокотемпературного отжига в воздушной среде на оптические и парамагнитные свойства ионов активатора  $\text{Eu}^{2+}$  в люминофорах. Обнаружено, что термостабильность ионов  $\text{Eu}^{2+}$ , находящихся в двух разных кристаллографических позициях  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  и  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ , существенно отличается. Показана возможность регулирования с помощью высокотемпературного отжига концентрации  $\text{Eu}^{2+}$  и спектральных характеристик люминофоров.

*Ключевые слова:*  $\text{Eu}^{2+}$ -содержащие люминофоры, центры люминесценции  $\text{Eu}^{2+}$ , парамагнитные центры  $\text{Eu}^{2+}$ , электронный парамагнитный резонанс, локальная симметрия окружения.

*Abstract.* The article considers the impact of high-temperature annealing in air upon optical and paramagnetic properties of the activator  $\text{Eu}^{2+}$  ions in phosphors. The authors discovered that thermal stability of  $\text{Eu}^{2+}$  ions located in two different crystallographic sites  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  and  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$  is significantly different. The article shows a possibility of regulating the  $\text{Eu}^{2+}$  concentration and phosphors spectral characteristics by means of high-temperature annealing.

*Key words:*  $\text{Eu}^{2+}$ -containing phosphors, luminescence centers  $\text{Eu}^{2+}$ , paramagnetic centers  $\text{Eu}^{2+}$ , electron paramagnetic resonance, the local symmetry of the environment.

### Введение

Неорганические люминофоры, активированные ионами европия, находят широкое применение в современных энергоэкономичных люминесцентных лампах, белых светоизлучающих диодах, плазменных дисплейных панелях, электронно-лучевых трубках и полевых эмиссионных дисплеях. Для этих целей широко используются, в частности, такие люминофоры, как гексаалюминат бария-магния ( $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$ ) и хлорфосфат стронция-бария ( $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ ), активированные двухвалентным европием, поскольку имеют высокий квантовый выход и обладают хорошей термической и радиационной стабильностью. Однако до настоящего времени нет полной ясности относительно кристаллографических позиций и состояния ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в вышеназванных матрицах. В связи с этим одной из актуальных задач является изучение влияния ближайшего окружения на активаторные центры европия в  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  и  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$  (подробную информацию об этом может дать совместное исследование методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и оптической спектроскопии).

В исследованиях [1–4], посвященных интерпретации спектров ЭПР, редкоземельных  $S$ -ионов ( $\text{Eu}^{2+}$ ,  $\text{Gd}^{3+}$ ) как в кристаллических веществах (в том числе и люминофорах), так и неупорядоченных системах, таких как стекла, делается предположение о том, что спектры ЭПР обусловлены несколькими типами парамагнитных центров. Причем линии поглощения в малых полях связывают с положениями парамагнитных ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в кристаллической решетке, в которых на них действуют достаточно сильные поля лигандов, а ли-

нии поглощения в области  $g \approx 2$  приписывают центрам с относительно малой величиной поля лигандов и более высокой, как правило, кубической симметрией окружения. Наличие нескольких кристаллографических позиций ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в кристаллической решетке люминофоров также подтверждается спектрами люминесценции [5–10].

С другой стороны, из работ [11–12] следует, что в спектрах ЭПР ионов  $\text{Eu}^{2+}$ , находящихся в различных неупорядоченных матрицах, наблюдается одна и та же группа линий. Кроме того, в результате исследований частотной зависимости формы спектров ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в различных структурах установлено, что видоизменение спектров объясняется не наличием центров с различной симметрией окружения, а различной величиной поля лигандов, действующего на ионы  $\text{Eu}^{2+}$ . Таким образом, сложная структура спектра ЭПР может быть обусловлена двумя различными факторами – наличием нескольких кристаллографически неэквивалентных позиций, занимаемых ионами  $\text{Eu}^{2+}$  или расщеплением зеемановских уровней в кристаллическом поле лигандов.

Поэтому цель настоящей работы заключалась в определении кристаллографического состояния ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в основаниях люминофоров  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  и  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$ . Для этого нами было проведено исследование влияния высокотемпературного отжига на спектры ЭПР вышеназванных люминофоров и их спектры люминесценции.

Следует отметить, что исследование влияния высокотемпературного отжига на состояние ионов  $\text{Eu}^{2+}$ , в частности на их оптические характеристики, представляет также и несомненный практический интерес. В процессе производства люминесцентных ламп люминофорный слой дважды подвергается термическому воздействию – при выжигании биндера из люминофорного покрытия и при термовакуумной обработке ламп. Поэтому весьма важно знать, как высокотемпературный отжиг влияет на концентрацию ионов активатора  $\text{Eu}^{2+}$  и как изменяется воздействие ближайшего окружения на ионы активатора  $\text{Eu}^{2+}$ , поскольку от этого сильно зависят оптические характеристики люминофора – спектр излучения, яркость люминесценции, световая отдача.

### 1. Образцы и методика эксперимента

Люминофор  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  был синтезирован путем прокаливании смеси карбоната бария ( $\text{BaCO}_3$ ), окиси европия ( $\text{Eu}_2\text{O}_3$ ), фторида магния ( $\text{MgF}_2$ ) и окиси алюминия ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) сначала при температуре  $1350^\circ\text{C}$  в атмосфере азота и водорода в течение 2 ч, а затем при температуре  $1250^\circ\text{C}$  в потоке азота, водорода и паров воды в течение 2 ч.

Как известно,  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  кристаллизуется в виде гексагональной кристаллической системы с  $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$  структурой и относится к пространственной группе  $P6_3/mmc$ . В целом кристаллическая структура  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  подобна структуре  $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}$  [13], но содержит меньшее количество больших катионов ( $\text{Ba}^{2+}$  и  $\text{Eu}^{2+}$ ). Элементарная ячейка состоит из блоков шпинельной структуры, содержащих ионы  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  и  $\text{O}^{2-}$ , которые отделяются друг от друга слоями, содержащими ионы  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Eu}^{2+}$  и один ион  $\text{O}^{2-}$ . Большие катионы могут занимать разные положения в кристаллической решетке в слое между блоками шпинели ( $6h$  и  $2d$ ) [10].

Для приготовления люминофора  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  использовалась гомогенизированная шихта, состоящая из  $\text{SrCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SrHPO}_4$ ,  $\text{BaHPO}_4$ ,

BaCO<sub>3</sub> и Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, которая прокаливалась при температуре 1100 °С в атмосфере азота и водорода в течение 2 ч.

Люминофор (Sr,Ba)<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>Cl:Eu<sup>2+</sup> имеет структуру кристалла хлор-апатита, обладающего гексагональной симметрией и относящегося к группе R<sub>6<sub>3/m</sub></sub> [5, 8]. Двухвалентные ионы металлов M<sup>2+</sup> (Sr<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup>, Eu<sup>2+</sup>) в кристаллической решетке апатита могут находиться в центре слегка искаженной трехгранной призмы, состоящей из девяти атомов кислорода с локальной симметрией окружения C<sub>3</sub>, а также в позиции, сосредоточенной в окружении шести атомов кислорода из системы PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> и одного иона галогена (в нашем случае Cl), имеющей локальную симметрию окружения C<sub>1h</sub>. Таким образом, позициям с локальными симметриями C<sub>3</sub> и C<sub>1h</sub> соответствуют координационные комплексы MO<sub>9</sub> и MClO<sub>6</sub>.

Измерения спектров ЭПР образцов люминофоров BaMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup> и (Sr,Ba)<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>Cl:Eu<sup>2+</sup> производились на радиоспектрометре ЭПР PS100.X на частоте СВЧ поля  $f = 9,34$  ГГц при комнатной температуре  $T = 293$  К. Квазистатическое магнитное поле сканировалось от 0,1 до 7 кГс.

Спектры люминесценции регистрировались на установке с монохроматором МДР-23 [14]. Для возбуждения фотолюминесценции использовалось отфильтрованное излучение ртутного разряда высокого давления.

Высокотемпературный отжиг образцов люминофоров производился на воздухе изохронно в течение одного часа в температурном интервале от 523 до 1273 К для каждой температуры отжига.

## 2. Результаты эксперимента

### 2.1. Спектры ЭПР

В спектре ЭПР исходного неотожженного люминофора BaMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup> (рис. 1) зарегистрированы четыре линии поглощения, обусловленные ионами Eu<sup>2+</sup> с  $g = 2,3; 4,9; 7,1; 22,3$ , где наиболее интенсивной является линия с  $g = 4,9$ .

В спектре ЭПР исходного образца люминофора (Sr,Ba)<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>Cl:Eu<sup>2+</sup> наблюдаются линии поглощения с  $g = 2; 2,9; 4; 6,5; 26,6$  (рис. 2) с наиболее интенсивной линией с  $g = 2,9$ . Кроме того, можно заметить, что на эту серию линий накладывается более широкая линия поглощения с  $g \approx 2,86$ .

Сопоставление исходных спектров ЭПР иона Eu<sup>2+</sup> в двух разных основаниях люминофора показывает, что и тот, и другой имеют сложную структуру и не являются идентичными. Так, если в хлорфосфате стронция-бария наиболее интенсивной является линия с  $g = 2,9$ , то в алюминате бария-магния подобная линия вообще отсутствует, а самой интенсивной является линия с  $g = 4,9$ . Следует также отметить, что линии поглощения в спектре ЭПР (Sr,Ba)<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>Cl:Eu<sup>2+</sup> гораздо более интенсивнее линий поглощения BaMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup>, что свидетельствует о большей концентрации парамагнитных центров Eu<sup>2+</sup> в первом люминофоре.

Таким образом, из сопоставления спектров ЭПР двух исследованных люминофоров можно сделать вывод о том, что влияние полей лигандов на ионы Eu<sup>2+</sup> в алюминате бария-магния и хлорфосфате стронция-бария является существенно различным.

Спектры ЭПР люминофоров BaMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup> и (Sr,Ba)<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>Cl:Eu<sup>2+</sup>, отожженных на воздухе изохронно в течение одного часа при различных температурах, приведены на рис. 1, 2.

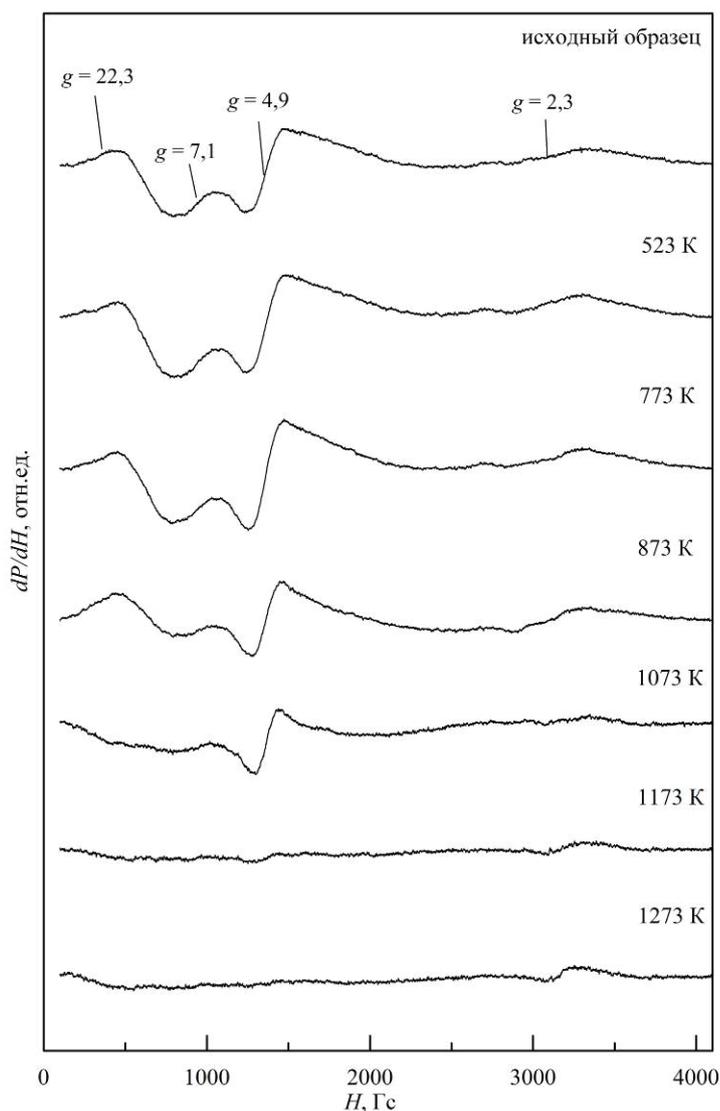


Рис. 1. Влияние температуры отжига на спектры ЭПР люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  (числа у кривых – температуры отжига)

Для анализа трансформации спектров ЭПР, происходящей при отжиге, нами были построены зависимости основных параметров спектров ЭПР:  $g$ -фактора; интенсивности производной линии поглощения  $I'$ ; площади под кривой линии поглощения  $S \sim I' \Delta H_{pp}^2$ , которая здесь пропорциональна концентрации парамагнитных центров ( $\Delta H_{pp}$  – ширина линии) [15].

Из рис. 3 видно, что разброс значений  $g$ -факторов наиболее ярко выраженных наблюдаемых линий лежит в пределах погрешности измерений, следовательно, можно сделать вывод о том, что в результате отжига на воздухе люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  положения линий поглощения в спектре ЭПР не изменяются. На рис. 4 представлены зависимости нормированных значений интенсивностей отдельных линий поглощения  $I'$  от температуры отжига на воздухе. Видно, что поведение линий с  $g = 4,9$  и  $g = 7,1$  сильно отличается. Так, если после отжига при  $T = 523$  К интенсивности обеих линий возросли

одновременно, то уже после отжига при  $T = 773$  К интенсивность линии с  $g = 4,9$  продолжала возрастать, а интенсивность линии с  $g = 7,1$ , наоборот, уменьшилась и стала приблизительно равной исходной интенсивности для неотожженного образца. При дальнейшем повышении температуры отжига ( $T \geq 873$  К) наблюдается снижение интенсивности обеих линий поглощения, при этом интенсивность линии с  $g = 4,9$  уменьшается медленнее, чем интенсивность линии с  $g = 7,1$ . В результате этого линия с  $g = 4,9$  становится доминирующей в спектре ЭПР. После отжига при  $T > 1173$  К все линии поглощения в спектре ЭПР, в том числе и линия с  $g = 4,9$ , практически полностью исчезают.

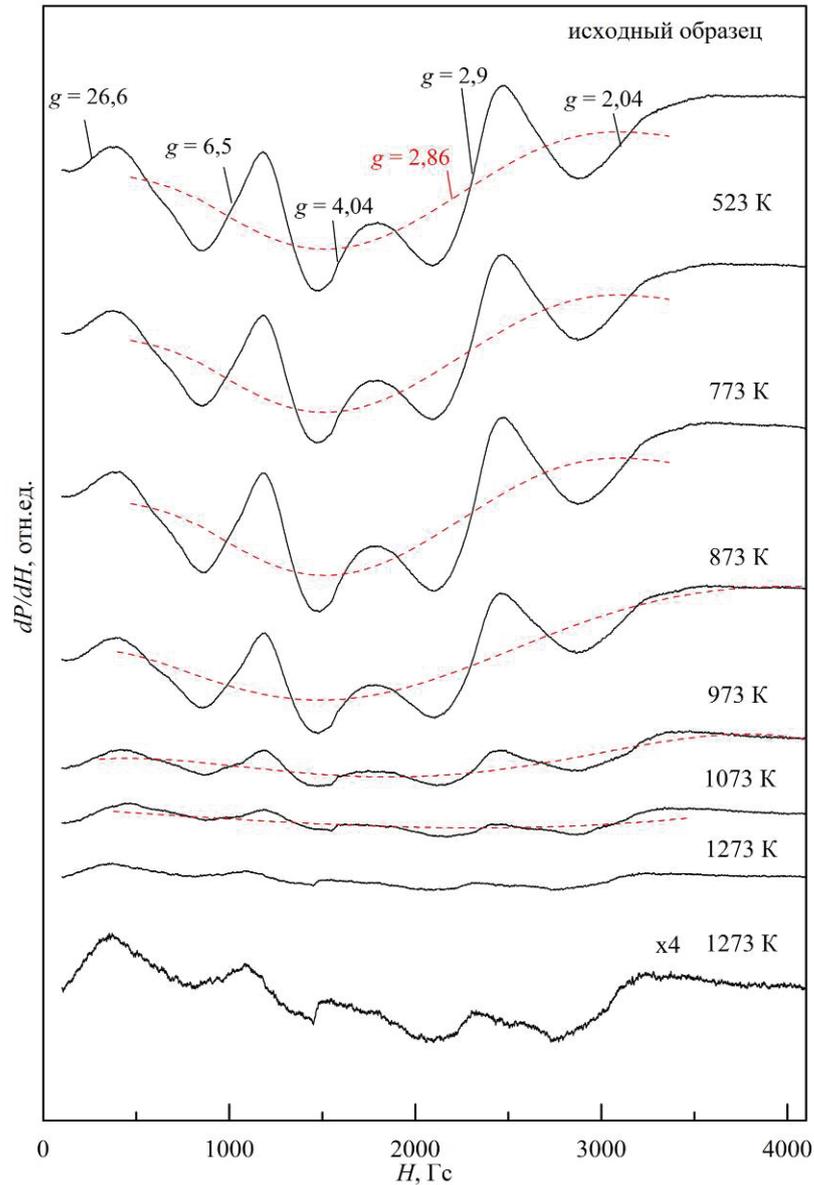


Рис. 2. Влияние температуры отжига на спектры ЭПР люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  (числа у кривых – температуры отжига, нижний спектр записан при таком же усилении, как для образца  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$ )

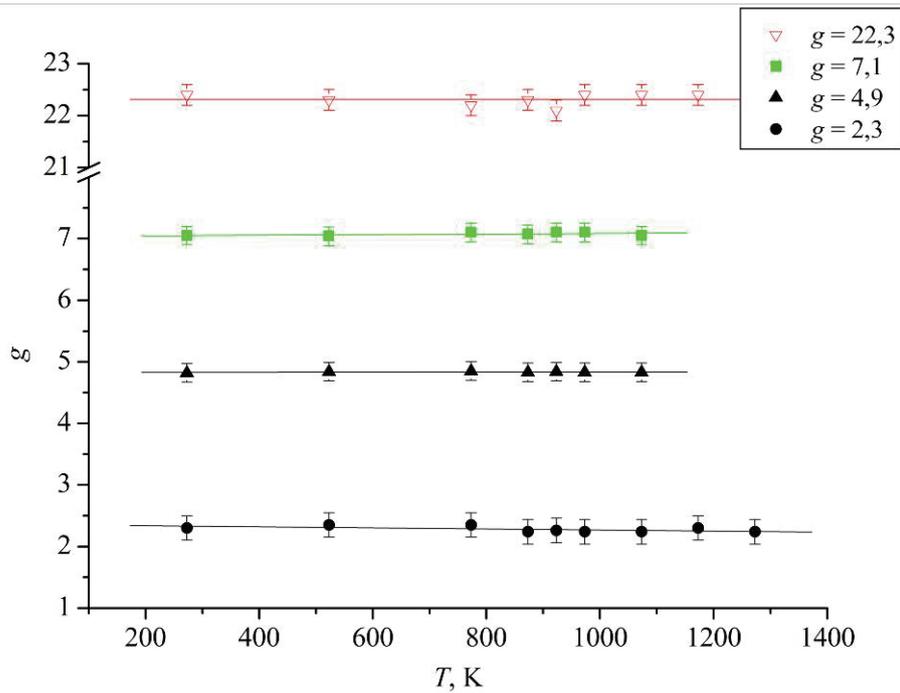


Рис. 3. Зависимости значений  $g$ -факторов линий поглощения в спектре ЭПР ВаMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup> от температуры отжига

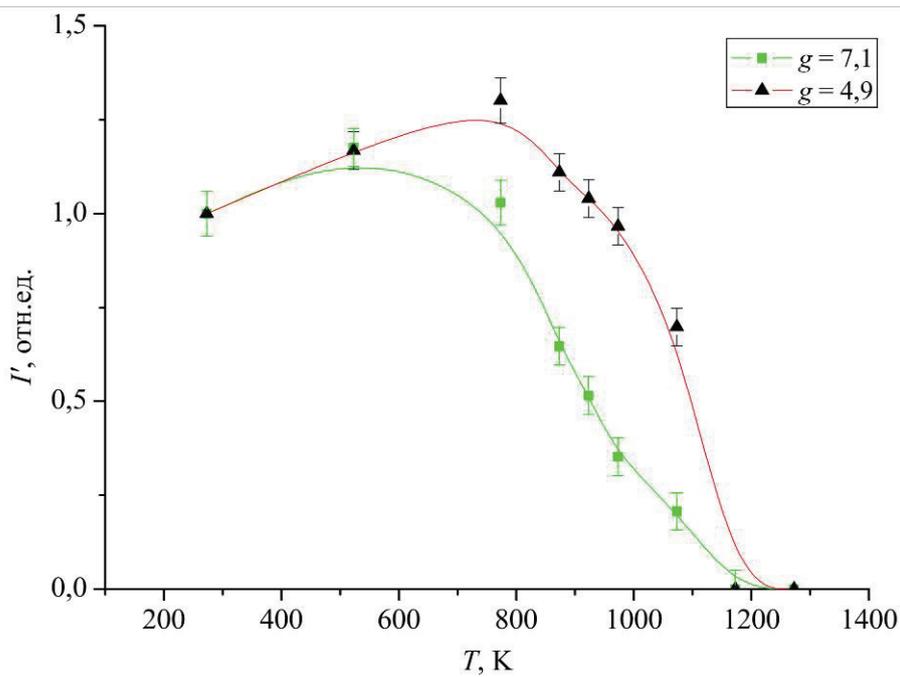


Рис. 4. Зависимости нормированных значений интенсивности линий ЭПР ВаMg<sub>2</sub>Al<sub>16</sub>O<sub>27</sub>:Eu<sup>2+</sup> от температуры отжига

Представляет интерес выяснить, как влияет высокотемпературный отжиг на концентрацию ионов активаторов. Концентрация парамагнитных цен-

тров, обусловленных ионами европия, оценивалась в настоящей работе по площади под кривыми линий поглощения в спектре ЭПР ( $C_i \sim S_i \sim I_i' \Delta H_{ppi}^2$ ).

Из рис. 5 видно, что поведение линий поглощения в спектре ЭПР с  $g = 4,9$  и  $g = 7,1$  с увеличением температуры отжига сильно различается. Для линии с  $g = 7,1$  происходит уменьшение площади под кривой поглощения с увеличением температуры отжига. В то же время отжиг при  $T = 523$  К приводит к некоторому увеличению площади под кривой с  $g$ -фактором 4,9. При более высоких температурах наблюдается уменьшение этой площади вплоть до практически полного исчезновения линии при температуре отжига свыше 1173 К. Линия поглощения с  $g = 7,1$ , а также линии с  $g = 2,3$  и  $g = 22,3$  после отжига при  $T > 1173$  К также практически полностью исчезают.

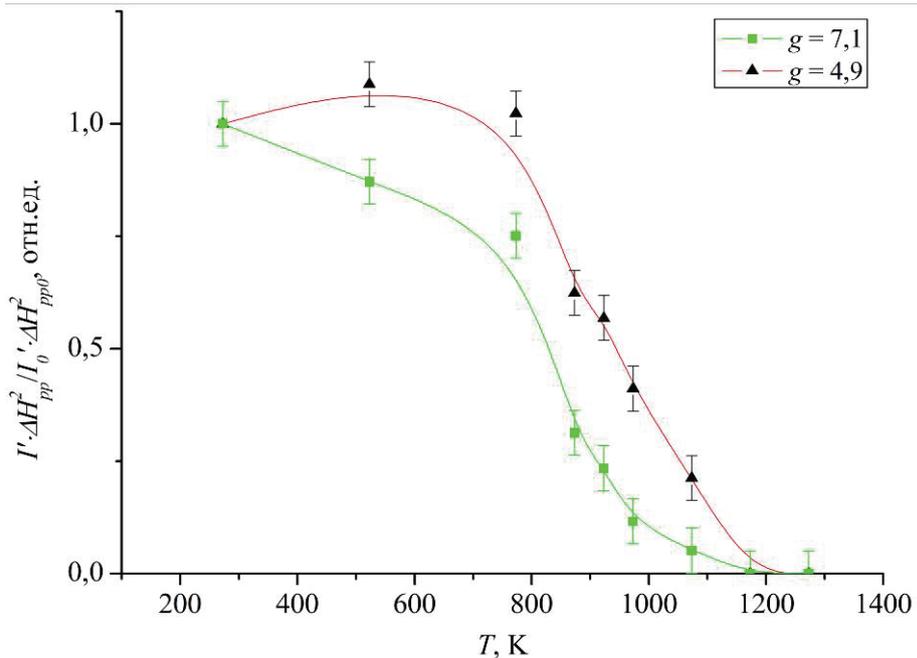


Рис. 5. Зависимости нормированных значений площадей под кривыми поглощения в спектре ЭПР  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  от температуры отжига

Как видно из спектров ЭПР, приведенных на рис. 1, менее интенсивные линии поглощения с  $g = 2,3$  и  $g = 22,3$  с увеличением температуры отжига ведут себя подобно линии с  $g = 7,1$ .

Таким образом, из результатов проведенных исследований люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  следует, что линии поглощения, обусловленные ионами  $\text{Eu}^{2+}$ , не изменяют своего положения в спектре под действием отжига на воздухе. С ростом температуры отжига наблюдается различающееся по характеру изменение интенсивностей и площадей линии поглощения с  $g = 4,9$  и линий с  $g = 7,1$ ; 2,3; 22,3. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что линия с  $g = 4,9$  более стабильна к высокотемпературному отжигу на воздухе по сравнению с другими линиями. Данный факт свидетельствует о наличии как минимум двух типов парамагнитных центров, обусловленных ионами  $\text{Eu}^{2+}$ .

На рис. 6 приведены зависимости значений  $g$ -факторов линий поглощения в спектре ЭПР  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  от температуры отжига. Видно,

что, так же как и для люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$ , изменения значений  $g$ -факторов не превышают погрешности измерений, т.е. положения линий в спектре не изменяются.

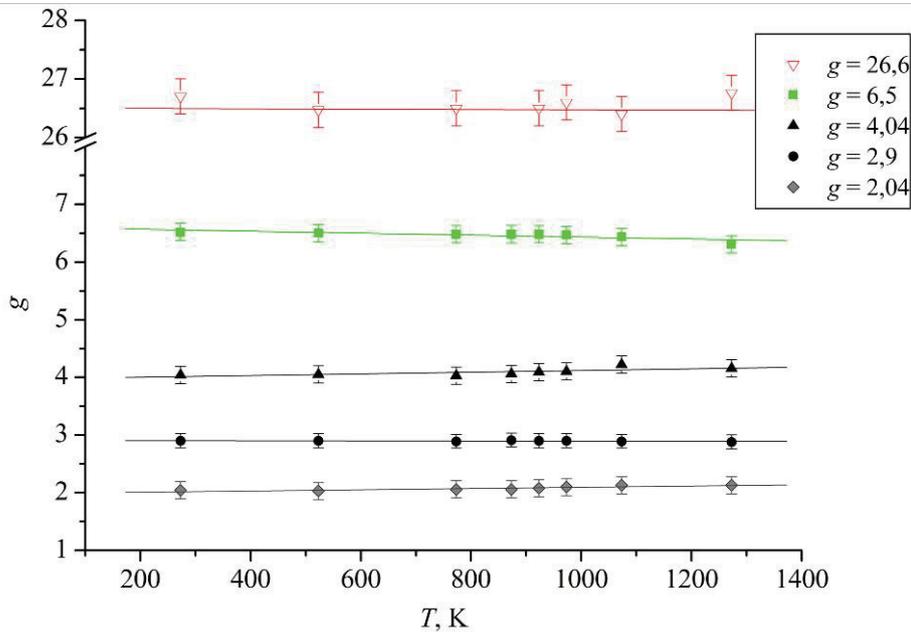


Рис. 6. Зависимости значений  $g$ -факторов линий поглощения в спектре ЭПР  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  от температуры отжига

Как следует из зависимостей, представленных на рис. 7, с увеличением температуры отжига на воздухе происходит синхронное снижение интенсивности линий поглощения с  $g = 2,9; 4,04; 6,5$ . Причем если до температуры  $T = 773$  К интенсивность уменьшалась незначительно, то при более высоких температурах происходит достаточно резкий спад.

Как видно из рис. 8, значения относительных площадей под кривыми линий поглощения ( $S_i \sim I_i' \Delta H_{ppi}^2$ ) также изменяются с увеличением температуры отжига, что свидетельствует об изменении концентрации парамагнитных центров. При этом отжиг приводит к синхронному уменьшению значений  $I_i' \Delta H_{ppi}^2$  всех линий поглощения наблюдаемого мультиплета ( $g = 2,04; 2,9; 4,04; 6,5; 26,6$ ). Наиболее резкое уменьшение  $I_i' \Delta H_{ppi}^2$  происходит при температуре отжига  $T > 773$  К.

Как следует из полученных результатов, даже после отжига люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  при температуре  $T = 1273$  К линии поглощения в спектре ЭПР, в отличие от алюминатного люминофора, продолжают наблюдаться, хотя их интенсивность существенно уменьшается.

Как видно из рис. 2, в исходном спектре ЭПР люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ , кроме линий поглощения с  $g = 2,04; 2,9; 4,04; 6,5; 26,6$ , наблюдается также широкая линия с  $g \approx 2,86$ , перекрывающая все линии мультиплета, на которую высокотемпературный отжиг оказывает несколько иное воздействие. В частности, ее интенсивность с увеличением температуры отжига уменьшается быстрее, чем интенсивность линий мультиплета, и уже при температуре отжига 973 К линия практически полностью исчезает.

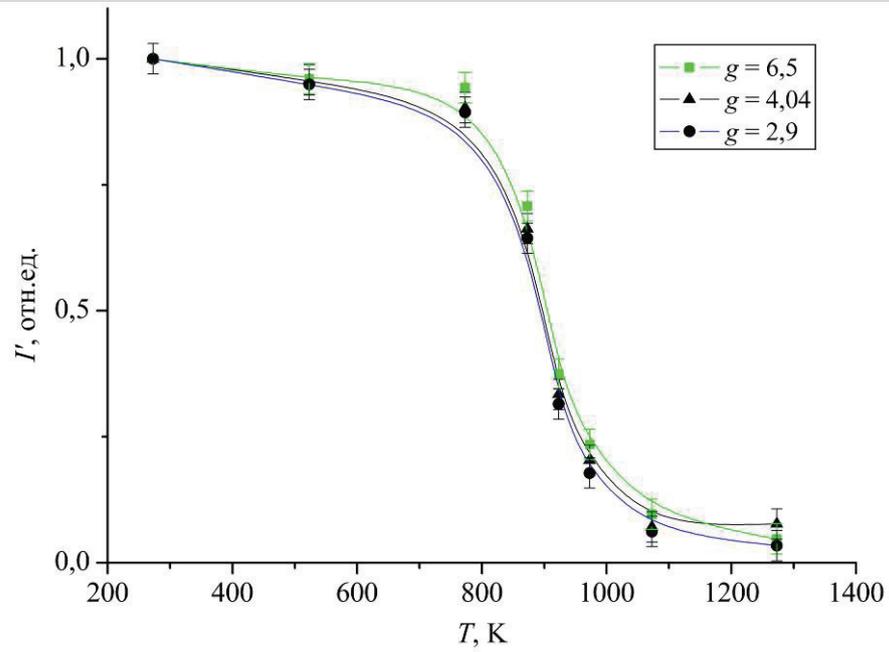


Рис. 7. Зависимости нормированных значений интенсивности линий ЭПР  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  от температуры отжига

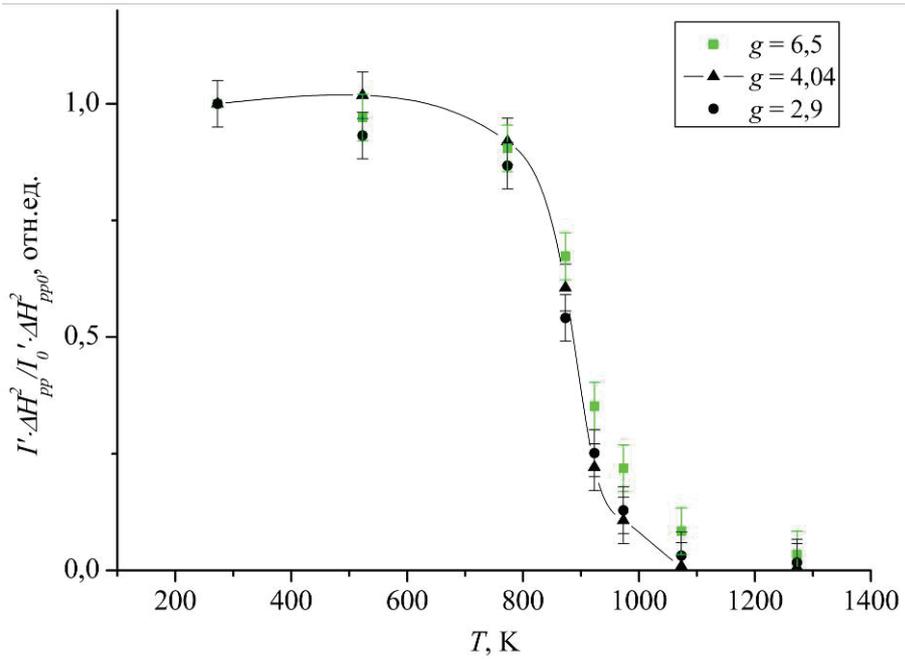


Рис. 8. Зависимости нормированных значений площадей под кривыми поглощения в спектре ЭПР  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  от температуры отжига

Таким образом, анализ влияния высокотемпературного отжига на спектры ЭПР люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  показал, что линии поглощения, обусловленные ионами  $\text{Eu}^{2+}$ , не изменяют своего положения в спектре; с ро-

стом температуры отжига наблюдается синхронное изменение интенсивностей и площадей под кривыми линий поглощения с  $g = 2,04; 2,9; 4,04; 6,5; 26,6$ , что указывает на одинаковую стабильность всех линий этого мультиплета к высокотемпературному отжигу на воздухе. Из этого можно сделать вывод о том, что линии данного мультиплета обусловлены одним типом парамагнитных центров  $\text{Eu}^{2+}$ . Установлено, что широкая линия с  $g \approx 2,86$  менее термостабильна, чем линии мультиплета, и в процессе отжига исчезает при более низких температурах, из чего можно сделать вывод о том, что она обусловлена другим типом парамагнитных центров  $\text{Eu}^{2+}$ .

## 2.2. Спектры люминесценции

На рис. 9, 10 приведены спектры люминесценции исходных и отожженных на воздухе при температуре 1273 К люминофоров  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  и  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ . Как видно из этих рисунков, исходные спектры люминесценции представляют собой полосы излучения  $\text{Eu}^{2+}$ , соответствующие энергетическому переходу  $4f^65d - 4f^7(^8S_{7/2})$ , с максимумами при 456 нм для  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  и при 450 нм для  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ .

Отжиг на воздухе при температуре 1273 К приводит к тому, что люминесценция люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  практически полностью пропадает (рис. 9,б), а у люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ , напротив, наблюдается люминесценция, причем сама полоса излучения становится значительно уже, а максимум полосы смещается приблизительно на 5 нм в сторону коротких длин волн (рис. 10,б).

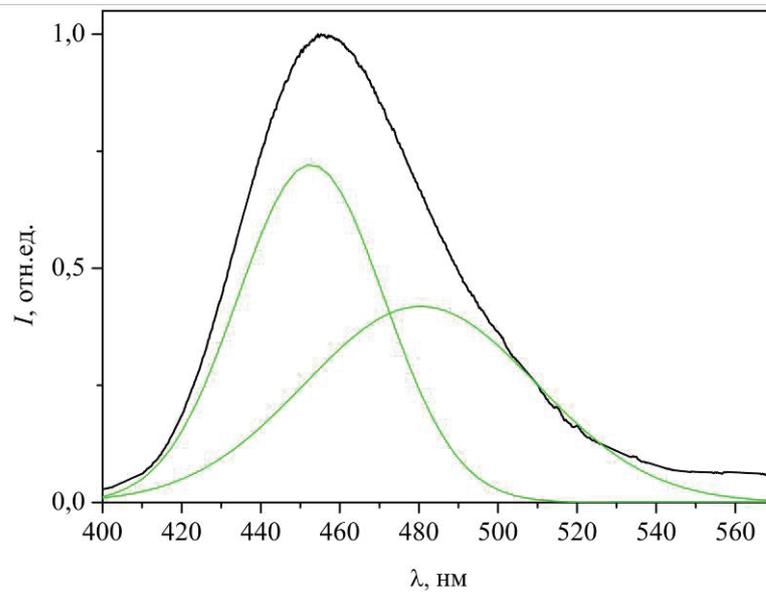
Также можно заметить, что полосы в спектрах люминесценции как исходных, так и отожженных образцов неэлементарны и являются суперпозицией полос, соответствующих центрам свечения разных типов. Разложение полосы люминесценции исходного люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  на гауссовы составляющие показывает наличие двух элементарных полос с максимумами в области  $\lambda_{\text{max}} = 453$  и 480 нм. Полоса люминесценции исходного люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  состоит также из двух элементарных гауссовых составляющих  $\lambda_{\text{max}} = 447$  и 479 нм. Из рис. 10 видно, что после отжига полоса люминесценции представляет собой суперпозицию как минимум двух элементарных полос с максимумами в области  $\lambda_{\text{max}} = 443$  и 467 нм.

Таким образом, как следует из полученных результатов, отжиг на воздухе существенно модифицирует спектры излучения люминофоров  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  и  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$ .

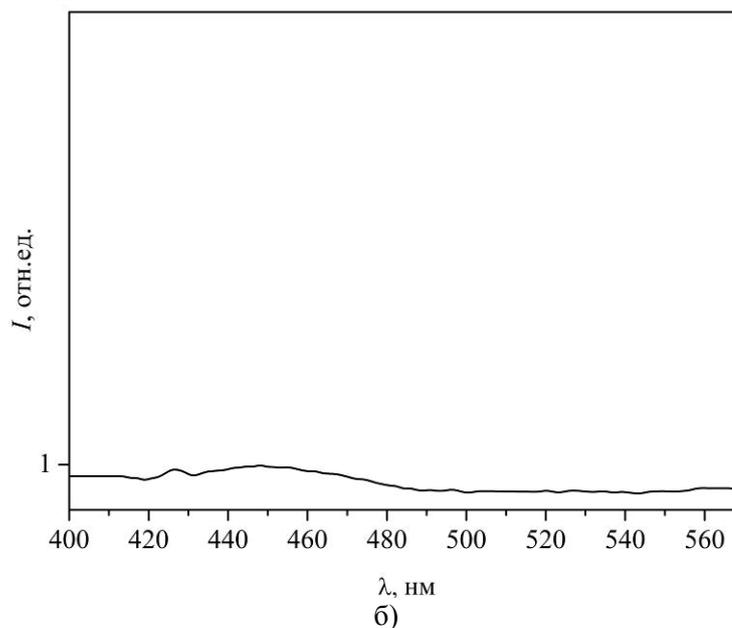
## 3. Обсуждение результатов

Рентгеноструктурными исследованиями алюминатных люминофоров [10,13] установлено, что для крупных катионов ( $\text{Ba}^{2+}$  и  $\text{Eu}^{2+}$ ) предпочтительна позиция  $2d$  в кристаллической решетке, имеющая исходную локальную симметрию окружения  $D_{3h}$ . Однако вышеприведенный анализ спектров люминесценции и спектров ЭПР  $\text{Eu}^{2+}$  в  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  показал, что мы имеем дело с неэквивалентными центрами двухвалентного европия, поскольку отмечено разное поведение некоторых линий поглощения в спектре ЭПР и полос излучения в спектре люминесценции. Данный экспериментальный факт можно объяснить искажением локальной симметрии окружения иона  $\text{Eu}^{2+}$  в позиции  $2d$  дефектами компенсации избыточного заряда [16], а также возможным

смещением иона  $\text{Eu}^{2+}$  из позиции  $2d$  в позицию  $6h$  с более низкой локальной симметрией окружения  $C_{2v}$  [17].



а)



б)

Рис. 9. Спектр люминесценции исходного люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  (а) и отожженного при  $T = 1273$  К (б) (штриховые линии – представление в виде гауссовых составляющих)

Искажение исходной локальной симметрии окружения иона  $\text{Eu}^{2+}$  в позиции  $2d$  кристаллической структуры  $\text{BaMg}_2\text{Al}_{16}\text{O}_{27}$  может происходить следующим образом. Поскольку при синтезе люминофоров европий вводится в шихту в виде оксида  $\text{Eu}_2\text{O}_3$ , то изначально европий будет находиться

в трехвалентном состоянии и, следовательно, ионы  $\text{Eu}^{3+}$  будут неэквивалентно замещать ионы  $\text{Ba}^{2+}$  в кристаллической решетке алюминатного люминофора.

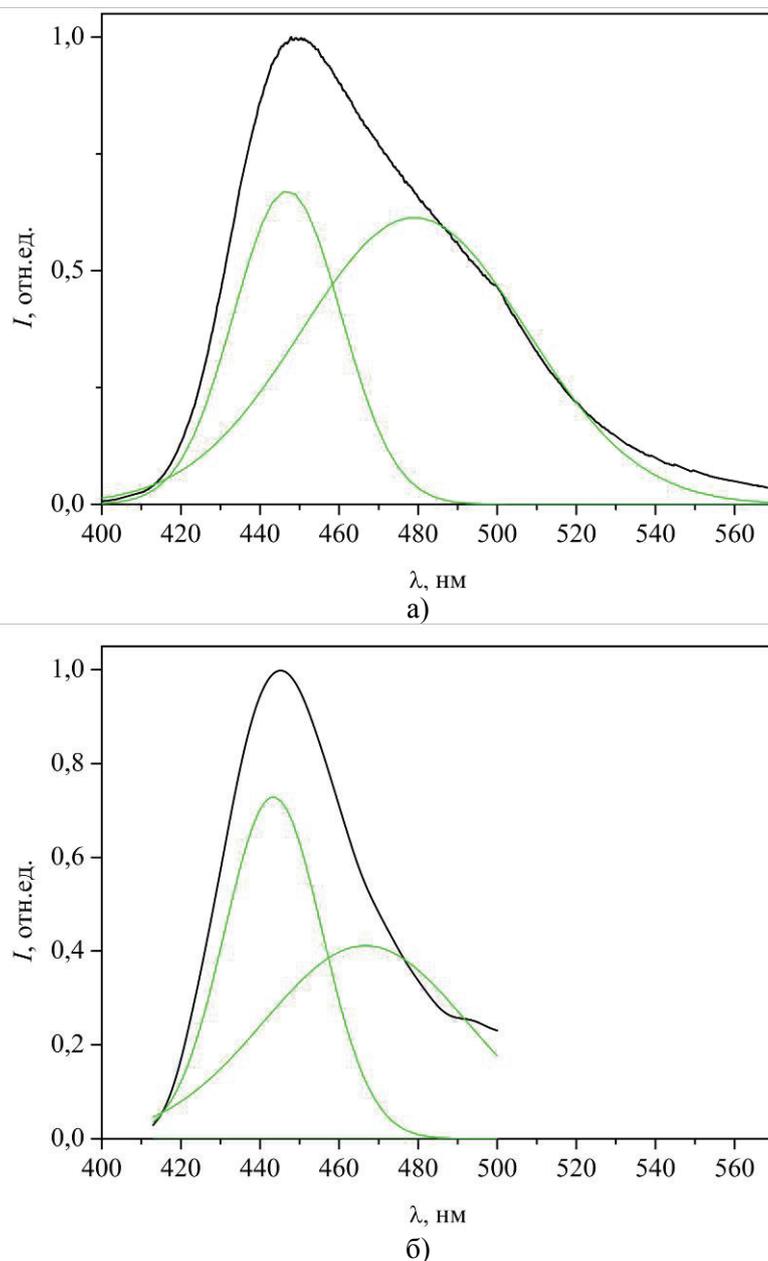


Рис. 10. Спектр люминесценции исходного люминофора  $(\text{Sr,Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  (а) и отожженного при  $T = 1273$  К (б) (штриховые линии – представление в виде гауссовых составляющих)

А именно: при каждом внедрении двух ионов  $\text{Eu}^{3+}$  в структуру будет создаваться два положительно заряженных дефекта  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$  и один дефект компенсации заряда – дважды отрицательно заряженная вакансия  $V''_{\text{Ba}}$ . Далее под действием температурного фактора электроны делокализируются с вакан-

сий и захватываются дефектами  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$ , в результате чего происходит восстановление трехвалентного иона до двухвалентного, а вакансия становится нейтральной  $V_{\text{Ba}}^{\times}$  и, следовательно, не может оказывать воздействия на окружающие ионы. Однако в процессе синтеза могут восстанавливаться не все ионы европия. Часть из них остается в трехвалентном состоянии, о чем свидетельствуют спектры люминесценции в работе [18]. В результате в кристаллической решетке будут наблюдаться заряженные точечные дефекты  $V_{\text{Ba}}''$  и  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$ , оказывающие достаточно сильное воздействие на ближнее окружение. Кроме того, известно, что ионы  $\text{Mg}^{2+}$  занимают тетраэдрические позиции внутри шпинельных блоков, замещая ионы  $\text{Al}^{3+}$  [10, 13]. Следовательно, компенсация заряда  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$  в позиции  $2d$  возможна ионами  $\text{Mg}^{2+}$ , находящимися в позициях  $\text{Al}^{3+}$ , при этом сохраняется отрицательно заряженная вакансия  $V_{\text{Ba}}''$ , либо  $V_{\text{Ba}}'$ .

Таким образом, искажение локальных кристаллических полей иона  $\text{Eu}^{2+}$  может происходить, во-первых, за счет нахождения вблизи дефектов  $V_{\text{Ba}}''$ ,  $V_{\text{Ba}}'$  и  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$ , а во-вторых, за счет того, что ионы  $\text{Mg}^{2+}$ , замещая позиции  $\text{Al}^{3+}$ , могут несколько изменять ориентацию тетраэдра, тем самым искажая исходное локальное кислородное окружение ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в позициях  $2d$ . При этом исследования, проведенные в работах [16], показали, что в зависимости от того, в какую позицию  $\text{Al}^{3+}$  внедряются ионы  $\text{Mg}^{2+}$ , зависит степень искажения локальной симметрии в позиции  $2d$ . Так, если  $\text{Mg}^{2+}$  занимает позиции  $2b$  и  $4e$ , то локальная симметрия окружения позиции  $2d$  понижается до  $C_{2v}$ , а внедрение  $\text{Mg}^{2+}$  в другие возможные позиции  $\text{Al}^{3+}$  снижает симметрию позиции  $2d$  до  $C_s$ .

На основании исследований спектров люминесценции и спектров ЭПР  $\text{BaMg}_2\text{Al}_6\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  можно сделать вывод о том, что в структуре имеется как минимум два неэквивалентных центра ионов с  $\text{Eu}^{2+}$ , отличающихся локальной симметрией окружения ( $D_{3h}$  и  $C_{2v}$ ). Линия в спектре ЭПР с  $g = 4,9$  и элементарная полоса в спектре люминесценции с  $\lambda_{\text{max}} = 453$  нм принадлежат более термостабильному центру с гексагональным окружением  $D_{3h}$  иона  $\text{Eu}^{2+}$  ионами  $\text{O}^{2-}$ , а мультиплет ( $g = 2,3; 7,1; 22,3$ ) и полосу с  $\lambda_{\text{max}} = 480$  нм можно отнести к иону  $\text{Eu}^{2+}$ , вблизи которого находится вакансия  $V_{\text{Ba}}''$  с более низкой симметрией (не выше  $C_{2v}$ ) [16]. Отжиг люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_6\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  на воздухе приводит к появлению в спектре люминесценции полосы с максимумом около 425 нм (рис. 9,б), который (согласно [16]) можно связать с центром люминесценции иона  $\text{Eu}^{2+}$ , вблизи которого находится ион  $\text{Eu}^{3+}$ .

В результате отжига на воздухе люминофора  $\text{BaMg}_2\text{Al}_6\text{O}_{27}:\text{Eu}^{2+}$  при  $T > 1173$  К линии поглощения в спектре ЭПР и люминесценция в диапазоне 400–570 нм практически полностью исчезают, что объясняется переходом европия из двухвалентного состояния в трехвалентное ( $\text{Eu}^{2+} \rightarrow \text{Eu}^{3+}$ ). Однако при относительно небольших температурах отжига  $T \leq 773$  К, как видно из рис. 5, наблюдается некоторый рост концентрации ионов  $\text{Eu}^{2+}$  в позициях  $2d$  с локальной симметрией окружения  $D_{3h}$  с одновременным уменьшением концентрации  $\text{Eu}^{2+}$  в позициях с локальной симметрией окружения  $C_{2v}$ . Этот факт можно объяснить восстановлением части оставшихся после синтеза ионов  $\text{Eu}^{3+}$  в кристаллической решетке  $\text{BaMg}_2\text{Al}_6\text{O}_{27}$  до двухвалентного состояния. Возможность восстановления европия в алюминатах в окислительной атмо-

сфере доказана в работе [18]. Причем концентрация может увеличиваться в позициях с симметрией  $D_{3h}$  как за счет восстановления  $\text{Eu}^{3+} \rightarrow \text{Eu}^{2+}$  в позициях  $2d$ , так и за счет повышения локальной симметрии окружения ( $C_{2v} \rightarrow D_{3h}$ ) в результате исчезновения дефектов  $V_{\text{Ba}}''$  и  $[\text{Eu}^{3+}]_{\text{Ba}}$  вблизи ионов  $\text{Eu}^{2+}$ .

Другой исследуемый в работе люминофор  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  имеет типичную структуру апатита, для которого известно, что катионы  $\text{Ba}^{2+}$  и  $\text{Sr}^{2+}$  могут находиться в двух неэквивалентных положениях, имеющих локальную симметрию окружения  $C_3$  и  $C_{1h}$  [5–8]. Соответственно ионы  $\text{Eu}^{2+}$ , замещая ионы  $\text{Ba}^{2+}$  и  $\text{Sr}^{2+}$ , также могут занимать два этих положения.

Анализ спектра излучения исходного люминофора  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  показал, что полоса в спектре люминесценции, соответствующая межконфигурационному переходу  $4f^65d - 4f^7$  ( ${}^8S_{7/2}$ ), состоит из двух элементарных гауссовых полос с максимумами в области 447 и 479 нм. Отжиг на воздухе, как видно из рис. 10,б, приводит к тому, что полоса люминесценции становится уже и смещается в сторону коротковолновых длин волн. Как показывает разложение на гауссовы составляющие, она начинает представлять собой суперпозицию двух линий с максимумами 443 и 467 нм. Такое смещение спектра в коротковолновую область можно объяснить уменьшением концентрации ионов за счет окислительных процессов ( $\text{Eu}^{2+} \rightarrow \text{Eu}^{3+}$ ) [19]. Однако следует отметить, что, во-первых, длинноволновая полоса больше смещается в коротковолновую область ( $\lambda_{\text{max}} = 479 \text{ нм} \rightarrow 467 \text{ нм}$ ), чем коротковолновая полоса ( $\lambda_{\text{max}} = 447 \text{ нм} \rightarrow 443 \text{ нм}$ ), а во-вторых, относительное соотношение интенсивностей полос в результате отжига перераспределяется в пользу коротковолновой полосы. Из этого можно сделать вывод о том, что полосы с  $\lambda_{\text{max}} = 447 \text{ нм}$  и  $\lambda_{\text{max}} = 479 \text{ нм}$  соответствуют центрам люминесценции разной природы, которые связаны с позициями в кристаллической решетке  $\text{Eu}(\text{II})$  с симметрией  $C_{1h}$  и  $\text{Eu}(\text{I})$  с симметрией  $C_3$  соответственно, и имеют разную термостабильность. В то же время проведенные в настоящей работе исследования по влиянию отжига на воздухе на спектры ЭПР показали, что интенсивности и площади под кривыми линий поглощения с  $g = 2,04; 2,9; 4,04; 6,5; 26,6$  при повышении температуры отжига изменяются синхронно. Следовательно, поскольку синхронное уменьшение концентрации ионов, находящихся в нескольких неэквивалентных кристаллографических позициях, маловероятно, то можно сделать вывод, что в этом случае данные линии ЭПР принадлежат парамагнитным центрам с одинаковой симметрией окружения, а ЭПР-мультиплет  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  представляет собой «тонкую структуру» спектра, что обусловлено расщеплением энергетических уровней в кристаллическом поле. Широкая линия поглощения в спектре ЭПР  $(\text{Sr},\text{Ba})_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}:\text{Eu}^{2+}$  в области  $g \approx 2,86$ , как было отмечено, с увеличением температуры отжига уменьшается быстрее линий мультиплета и при температуре отжига  $T = 973 \text{ К}$  практически полностью исчезает. Поэтому можно предположить, что она принадлежит менее термостабильным парамагнитным центрам  $\text{Eu}^{2+}$ , имеющим другую локальную симметрию окружения.

Сравнение результатов оптической и ЭПР спектроскопии позволяет сделать вывод о том, что линии мультиплета в спектре ЭПР и полоса излучения в спектре люминесценции с максимумом в области 447 нм принадлежат ионам  $\text{Eu}^{2+}$  в позиции  $\text{Eu}(\text{II})$  с локальной симметрией окружения  $C_{1h}$ , а широкая линия в спектре ЭПР и полоса излучения с максимумом в области 479 нм –

позиции Eu(I) с локальной симметрией окружения  $C_3$ . При этом позиция Eu(II) в кристаллической решетке  $(Sr,Ba)_5(PO_4)_3Cl$  более термостабильна, чем позиция Eu(I).

### Заключение

Таким образом, на основании результатов, полученных в настоящей работе, можно сделать следующие выводы:

1) методами ЭПР и оптической спектроскопии выявлено наличие двух неэквивалентных центров  $Eu^{2+}$  в основаниях люминофоров  $BaMg_2Al_{16}O_{27}$  и  $(Sr,Ba)_5(PO_4)_3Cl$  и обнаружено различие в их термостабильности;

2) установлено наличие четкой корреляции между трансформациями спектров ЭПР и спектров люминесценции, происходящими при высокотемпературном отжиге;

3) показана принципиальная возможность регулирования концентрации ионов  $Eu^{2+}$  в люминофорах и их спектральных характеристик с помощью высокотемпературного отжига.

Обнаруженная в результате отжига трансформация спектра люминесценции может быть использована для регулирования координат цветности люминофора при разработке источников света.

### Список литературы

1. **Nakamura, T.** EPR investigations on europium(II)-doped aluminates / T. Nakamura et al. // Journal Chem. Soc., Faraday Trans. – 1998. – № 94. – P. 3009–3012.
2. **Nakamura, T.** EPR investigations on europium(II)-doped barium aluminate / T. Nakamura et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 1999. – № 1. – P. 4011–4014.
3. **Мшвелидзе, Г. Г.** Исследование структуры стеклянных волокон, содержащих трехвалентный гадолиний, методом ЭПР / Г. Г. Мшвелидзе, Х. И. Гаприндашвили // ФТТ. – 1971. – Т. 46, № 12. – С. 3405–3406.
4. **Nicula, Al.** EPR of rare earth elements ( $Gd^{3+}$  and  $Eu^{2+}$ ) in zeolites / Al. Nicula, J. Turkevich // Rev. Roum. Phys. – 1974. – V. 19, № 2. – P. 191–201.
5. **Kottaisamy, M.** Divalent europium-activated alkaline-earth-metal chlorophosphate luminophores [ $M_5(PO_4)_3Cl_3Eu^{2+}$ ;  $M=Ca, Sr, Ba$ ] by self-propagating high-temperature synthesis / M. Kottaisamy, M. Mohan Rao, D. Jeyakumar // J. Mater. Chem. – 1997. – V. 7(2). – P. 345–349.
6. **Kottaisamy, M.**  $Eu^{2+}$  luminescence in  $M_5(PO_4)_3X$  apatites, where M is  $Ca^{2+}$ ,  $Sr^{2+}$  and  $Ba^{2+}$ , and  $F^-$ ,  $Cl^-$ ,  $Br^-$  and  $OH^-$  / M. Kottaisamy et al. // Journal Phys. D: Appl. Phys. – 1994. – № 27. – P. 2210–2215.
7. **Zhou, Y.** VUV spectrum of  $Eu^{2+}$  doped halophosphates / Yingxue Zhou et al. // Materials science and engineering. – 1999. – B. 68. – P. 48–51.
8. **Nötzold, D.** Structural and optical properties of the system  $(Sr, Ba, Eu)_5(PO_4)_3Cl$  / D. Nötzold, H. Wulff // Physica status solidi. A. Applied research. – 1996. – V. 158, № 1. – P. 303–311.
9. **Ronda, C. R.** Chemical composition of and  $Eu^{2+}$  luminescence in the barium hexaaluminates / C. R. Ronda, B. M. J. Smets // Journal electrochemical society. – 1989. – V. 136, № 2. – P. 570–573.
10. **Nötzold, D.** Structure and optical properties under VUV/UV excitation of  $Eu^{2+}$  doped Alkaline Earth Aluminate Phosphors / D. Nötzold et al. // Physica status solidi (a). – 2006. – V. 203, № 5. – P. 919–929.
11. **Клява, Я. Г.** Спектры ЭПР и оптического поглощения гадолиния в германатных стеклах / Я. Г. Клява и др. // Известия АН Латв. ССР. Сер. физ. тех. наук. – 1984. – № 1. – С. 36–40.

12. **Клява, Я. Г.** ЭПР  $Gd^{3+}$  в композиционно-неупорядоченном кристалле  $YAlG:Sc$  / Я. Г. Клява, Л. А. Чугунов // ФТТ. – 1984. – Т. 2–6, № 3. – С. 868–869.
13. **Kim, Yong-II.** Combined Rietveld refinement of  $BaMgAl_{10}O_{17}:Eu^{2+}$  using X-ray and neutron powder diffraction data / Yong-II Kim et al. // Journal of Luminescence. – 2002. – № 99. – P. 91–100.
14. **Большиков, Ф. А.** Установка для проведения спектроскопических исследований в области длин волн 0,2–2 мкм / Ф. А. Большиков и др. // Вестник Мордовского университета. Серия «Физико-математические науки». – 2007. – № 3. – С. 109–114.
15. **Вертц, Дж.** Теория и практические приложения метода ЭПР / Дж. Вертц, Дж. Болтон. – М.: Мир, 1975. – 550 с.
16. **Быковский, П. И.** Центры люминесценции  $Eu^{2+}$  и  $Eu^{3+}$  в гексаалюминатах / П. И. Быковский и др. // Сб. тр. ВНИИ люминофоров. – Ставрополь, 1990. – Вып. 39. – С. 74–79.
17. **Dexpert-Ghys, J.** Lanthanum  $\beta$ -alumina phase doped with europium: Optical investigation by dye laser site-selective excitation / J. Dexpert-Ghys, M. Faucher, P. Caro // Journal of Solid State Chemistry. – 1982. – V. 41, № 1. – P. 27–38.
18. **Peng, M.** Reduction from  $Eu^{3+}$  to  $Eu^{2+}$  in  $BaAl_2O_4:Eu$  phosphor prepared in an oxidizing atmosphere and luminescent properties of  $BaAl_2O_4:Eu$  / Peng Mingying, Hong Guangyan // Journal of Luminescence. – 2007. – № 127. – P. 735–740.
19. **Архангельский, Г. Е.** Неизоструктурные парамагнитные центры в одноактиваторных кристаллофосфорах / Г. Е. Архангельский // Труды ордена Ленина физического института им. П. Н. Лебедева АН СССР. – М.: Наука, 1974. – Т. 79. – С. 64–107.

---

**Зюзин Александр Михайлович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра общей физики,  
Мордовский государственный  
университет им. Н. П. Огарева  
(г. Саранск)

E-mail: salkin\_da@mail.ru

**Zyuzin Alexander Mikhailovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, sub-department of general  
physics, Mordovia State University  
named after N. P. Ogaryov (Saransk)

**Салкин Дмитрий Александрович**

аспирант, Мордовский государственный  
университет им. Н. П. Огарева  
(г. Саранск)

E-mail: salkin\_da@mail.ru

**Salkin Dmitry Alexandrovich**

Postgraduate student, Mordovia State  
University named after N. P. Ogaryov  
(Saransk)

---

УДК 535.37

**Зюзин, А. М.**

**Влияние высокотемпературного отжига на состояние ионов  $Eu^{2+}$  в люминофорах** / А. М. Зюзин, Д. А. Салкин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 100–115.

## **МЕТОД ПОИСКА ЧИСТЫХ МОД УПРУГИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ ИЗ 3D-ПОВЕРХНОСТЕЙ ФАЗОВЫХ СКОРОСТЕЙ<sup>1</sup>**

*Аннотация.* Предложен новый метод поиска чистых мод упругих волн в кристаллах из анализа 3D-поверхностей фазовых скоростей. От известных методов данный метод отличается учетом пьезоэффекта, что существенно влияет на результаты, особенно для сильных пьезоэлектриков. Разработана компьютерная программа, позволяющая строить указанные поверхности и их сечения базовыми плоскостями кристалла, а также указывать на них направления распространения чисто продольных и чисто поперечных упругих волн. Данную информацию можно получить, если известен класс симметрии кристалла, его упругие, диэлектрические, пьезоэлектрические константы и плотность.

*Ключевые слова:* упругие волны, волновые поверхности, продольные нормали, поперечные нормали, пьезоэффект.

*Abstract.* The article suggests a new method for pure modes of elastic waves search in crystals. The method is based on analyzing 3D-surfaces of phase velocities and differs from the known analogous methods by consideration of piezoeffect. The piezoelectric corrections essentially influence the research result. A special computer program has been built to construct these surfaces and their sections from the base planes of a crystal. The program also indicates the directions of pure longitudinal and pure transverse elastic waves propagation on these surfaces.

*Key words:* elastic waves, wave surfaces, longitudinal normals, transverse normals, piezoeffect.

### **Введение**

В работе [1] нами был предложен общий метод поиска чистых мод упругих волн в кристаллах с учетом дополнительной жесткости, обусловленной пьезоэффектом, основанный на диагонализации коэффициентов волнового уравнения. Там же была описана компьютерная программа, позволяющая отыскивать направления распространения и поляризации чисто продольных и чисто поперечных волн, если заданы класс симметрии, компоненты тензоров упругих постоянных, пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей кристалла. Этот метод обладает точностью, определяемой точностью задания соответствующих констант, но не обладает наглядностью.

Известно также [2], что направления продольных и поперечных нормалей перпендикулярны поверхностям фазовых скоростей упругих волн, как, например, в оптике векторы групповой скорости, определяющие направление переноса энергии, перпендикулярны волновым поверхностям [3]. Методы построения трехмерных (3D) поверхностей волновых скоростей также известны [4–6], однако они не учитывают дополнительной жесткости кристалла, вызванной пьезоэффектом (в тех случаях, когда он присутствует). Между тем наличие пьезоэффекта, как показано в [1], может существенно исказить результат.

---

<sup>1</sup> Работа поддержана грантом (проект 10-02\_97002-р\_поволжье\_a).

В данной работе мы восполняем этот пробел. Разработанная нами компьютерная программа позволяет строить 3D-волновые поверхности упругих волн с учетом пьезоэффекта и указывать на них направления распространения чисто продольных и чисто поперечных упругих волн. Метод обладает большой наглядностью.

### Поправки к уравнению Грина – Кристоффеля

Сначала рассмотрим плоские упругие волны в неограниченной анизотропной непроводящей непьезоэлектрической среде. Уравнение Грина – Кристоффеля [7] имеет вид

$$\rho v^2 u_\alpha = \Lambda_{\alpha\gamma} u_\gamma, \quad (1)$$

$$\Lambda_{\alpha\gamma} = \bar{c}_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{1\beta} a_{1\delta},$$

где  $\vec{u}$  и  $\vec{a}$  – направления поляризации и распространения;  $\Lambda_{\alpha\gamma} = \bar{c}_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{1\beta} a_{1\delta}$  – тензор Грина – Кристоффеля;  $\rho$  и  $v$  – плотность кристалла и скорость распространения волны. Вектор смещения плоской волны  $\vec{u}$  является собственным вектором, а произведение плотности и квадрата фазовой скорости  $\rho v^2$  – собственным значением тензора  $\bar{c}_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{1\beta} a_{1\delta}$ . Поэтому  $\rho v^2$  есть корень характеристического уравнения

$$\left| \Lambda_{\alpha\gamma} - \rho v^2 \delta_{\alpha\gamma} \right| = 0, \quad (2)$$

или в развернутом виде

$$\begin{vmatrix} \Lambda_{11} - \rho v^2 & \Lambda_{12} & \Lambda_{13} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} - \rho v^2 & \Lambda_{23} \\ \Lambda_{31} & \Lambda_{32} & \Lambda_{33} - \rho v^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (3)$$

Компоненты тензора Грина – Кристоффеля расписываются по следующему правилу:

$$\Lambda_{11} = a_{11}^2 c_{11} + a_{12}^2 c_{66} + a_{13}^2 c_{55} + 2a_{12} a_{13} c_{56} + 2a_{11} a_{13} c_{15} + 2a_{11} a_{12} c_{16};$$

$$\Lambda_{12} = a_{11}^2 c_{16} + a_{12}^2 c_{26} + a_{13}^2 c_{45} + a_{12} a_{13} (c_{46} + c_{25}) + \\ + a_{11} a_{13} (c_{56} + c_{14}) + a_{11} a_{12} (c_{12} + c_{66});$$

$$\Lambda_{13} = a_{11}^2 c_{15} + a_{12}^2 c_{46} + a_{13}^2 c_{35} + a_{12} a_{13} (c_{45} + c_{36}) + \\ + a_{11} a_{13} (c_{13} + c_{55}) + a_{11} a_{12} (c_{56} + c_{14});$$

$$\Lambda_{21} = \Lambda_{12};$$

$$\Lambda_{22} = a_{11}^2 c_{66} + a_{12}^2 c_{22} + a_{13}^2 c_{44} + 2a_{12} a_{13} c_{24} + 2a_{11} a_{13} c_{46} + 2a_{11} a_{12} c_{26};$$

$$\Lambda_{23} = a_{11}^2 c_{56} + a_{12}^2 c_{24} + a_{13}^2 c_{34} + a_{12} a_{13} (c_{23} + c_{44}) +$$

$$+a_{11}a_{13}(c_{45} + c_{36}) + a_{11}a_{12}(c_{46} + c_{25});$$

$$\Lambda_{31} = \Lambda_{13};$$

$$\Lambda_{32} = \Lambda_{23};$$

$$\Lambda_{33} = a_{11}^2c_{55} + a_{12}^2c_{44} + a_{13}^2c_{33} + 2a_{12}a_{13}c_{34} + 2a_{11}a_{13}c_{35} + 2a_{11}a_{12}c_{45}.$$

Уравнение (3) кубическое относительно  $\rho v^2$  и имеет в общем случае три независимых решения, каждое из которых определяет фазовую скорость изонормальной волны. Фазовая скорость зависит, таким образом, от постоянных величин – модулей упругости и плотности кристалла, и от переменных – направлений распространения. Для определения величины скорости волны в произвольном направлении удобно построить трехмерную поверхность. Она образована концом вектора фазовой скорости, проведенного из начала кристаллофизической системы координат. На такой поверхности легко увидеть направления, для которых скорость волны имеет экстремальные значения, что важно для целей практического применения. В работах [5, 6] построение 3D-моделей было проведено описанным выше способом. Данные компьютерные программы не позволяют получить правильного результата при исследовании акустических свойств пьезоэлектрических кристаллов.

Поправки для случая пьезоэлектрической среды были сделаны в [8]. За счет пьезоэлектрической связи в пьезоэлектрике при распространении упругой волны возникают электрические поля, действие которых проявляется в увеличении эффективного модуля упругости. Поэтому ко всем неужесточенным модулям упругости в (1)–(4) следует учесть добавочную жесткость, зависящую от направляющих косинусов, пьезомодулей и диэлектрических проницаемостей:

$$\bar{c}_{ijkl} = c_{ijkl} + \frac{a_{1n}a_{1m}e_{mij}e_{nkl}}{a_{1r}a_{1s}\epsilon_{rs}}. \quad (5)$$

### Программная реализация метода

Будем рассматривать плоские упругие волны в неограниченной анизотропной непроводящей (в общем случае пьезоэлектрической) среде, используя адиабатическое приближение. Предполагаем, что магнитные эффекты отсутствуют, а электромеханические поля являются квазистатическими. Кристалл считается электрически разомкнутым.

С учетом поправки (5) уравнение Грина – Кристоффеля (1) принимает вид

$$\rho v^2 u_\alpha = \left( c_{ijkl} + \frac{a_{1n}a_{1m}e_{mij}e_{nkl}}{a_{1r}a_{1s}\epsilon_{rs}} \right) u_\gamma, \quad (6)$$

а соответствующее характеристическое уравнение –

$$\left| \left( c_{ijkl} + \frac{a_{1n}a_{1m}e_{mij}e_{nkl}}{a_{1r}a_{1s}\epsilon_{rs}} \right) - \rho v^2 \right| = 0. \quad (7)$$

Кубическое уравнение (7) успешно решается с использованием программного пакета Maple 11 в операционной системе Windows XP. Его решением являются три явно установленные функциональные зависимости ( $f_1, f_2, f_3$ ) скорости волны  $v$  от модулей упругости, пьезоконстант, диэлектрических проницаемостей, плотности кристалла и трех направляющих косинусов направлений распространения  $a_{11}, a_{12}, a_{13}$ :

$$\begin{aligned}v_1 &= f_1(c_{ijkl}, e_{nkl}, \epsilon_{rs}, \rho, a_{11}, a_{12}, a_{13}); \\v_2 &= f_2(c_{ijkl}, e_{nkl}, \epsilon_{rs}, \rho, a_{11}, a_{12}, a_{13}); \\v_3 &= f_3(c_{ijkl}, e_{nkl}, \epsilon_{rs}, \rho, a_{11}, a_{12}, a_{13}).\end{aligned}\quad (8)$$

Значения постоянных величин для каждого кристалла можно взять из [9].

Расширенный пакет plots (в Maple 11) предоставляет возможность построения трехмерной поверхности в сферических координатах. Для этого необходимо задание двух изменяющихся углов – широты  $\varphi \in [0, 2\pi]$  и долготы  $\theta \in [0, \pi]$  (рис. 1).

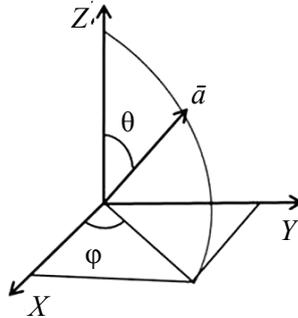


Рис. 1. Ориентация направления распространения упругой волны в кристаллофизической системе координат

Соответствие между направляющими косинусами направления распространения и углами  $\varphi$  и  $\theta$  в сферической системе координат задается в виде

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.\quad (9)$$

Выражая в уравнениях (7) направляющие косинусы через соответствующие углы с помощью (9), получим приемлемое для построения в Maple 11 выражение для скорости волны, в котором углы  $\varphi$  и  $\theta$  пробегают значения в указанных промежутках. Приведем пример этого выражения: `plot3d(f, phi = 0..2*Pi, theta = 0..Pi, coords = spherical).`

Программа позволяет также строить сечения трехмерной волновой поверхности различными плоскостями, в том числе координатными, и указы-

вать направления продольных и поперечных нормалей. Для нахождения данных направлений необходимо приравнять нулю производную функции  $f$  по двум координатам – углам  $\varphi$  и  $\theta$ :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi \partial \theta} = 0. \quad (10)$$

### Примеры применения компьютерной программы

В качестве примера рассмотрим непьезоэлектрический кристалл сапфира ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ), принадлежащего к классу симметрии  $\bar{3}m$  тригональной сингонии, и пьезоэлектрический кристалл ниобата лития ( $\text{LiNbO}_3$ ) из класса симметрии  $3m$  той же сингонии. Все необходимые константы взяты из [9]. На рис. 2–7 приведены примеры построения трехмерных поверхностей фазовых скоростей квазипродольной и двух квазипоперечных упругих волн в этих кристаллах, а также сечения этих поверхностей координатными плоскостями, где стрелками указаны направления распространения чистых мод упругих волн. Числа при осях указывают скорость распространения волн.

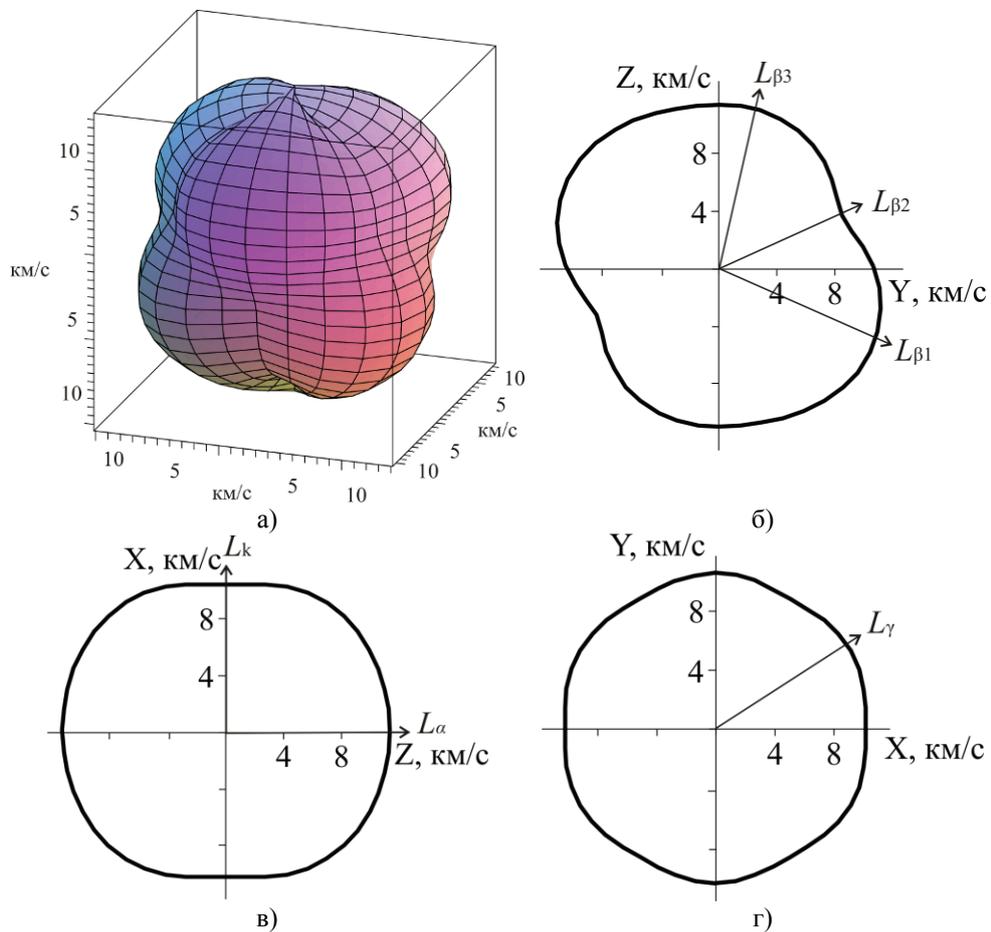


Рис. 2. Поверхность фазовых скоростей продольной волны в сапфире (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), (010) (в) и (001) (г)

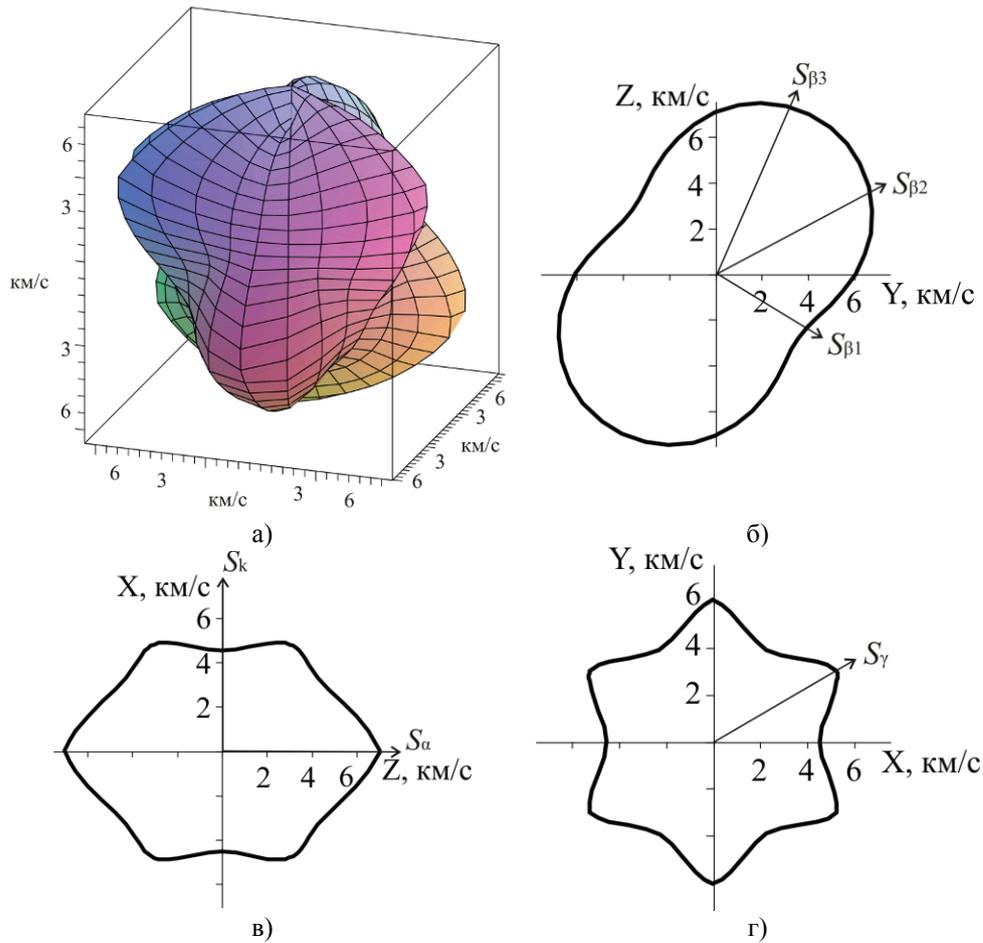


Рис. 3. Поверхность фазовых скоростей первой поперечной волны в сапфире (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), (010) (в) и (001) (г)

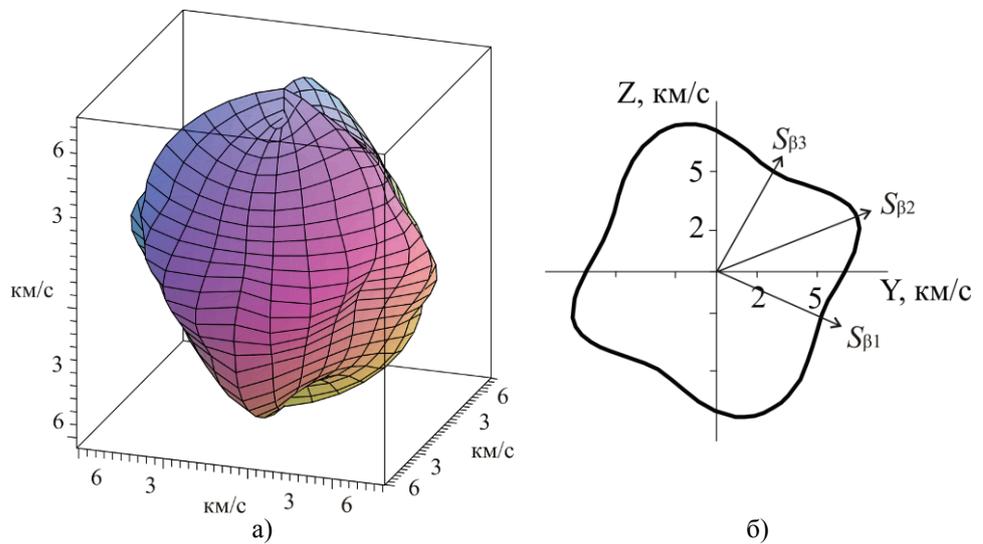


Рис. 4. Поверхность фазовых скоростей второй поперечной волны в сапфире (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), (010) (в) и (001) (г)

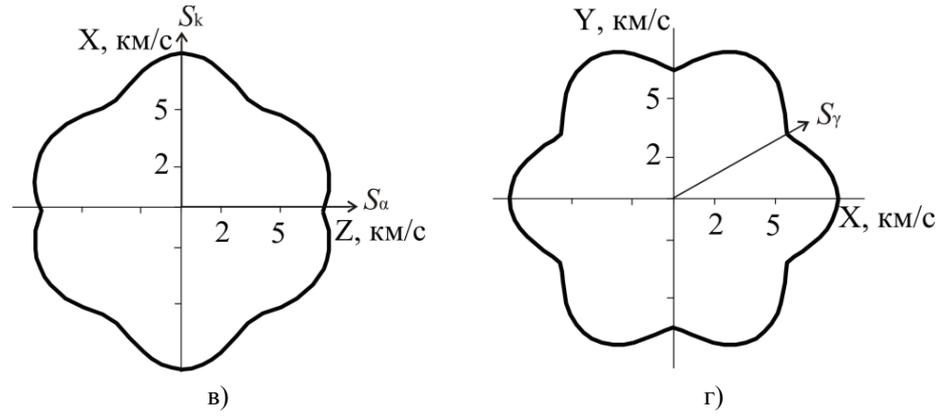


Рис. 4. Окончание

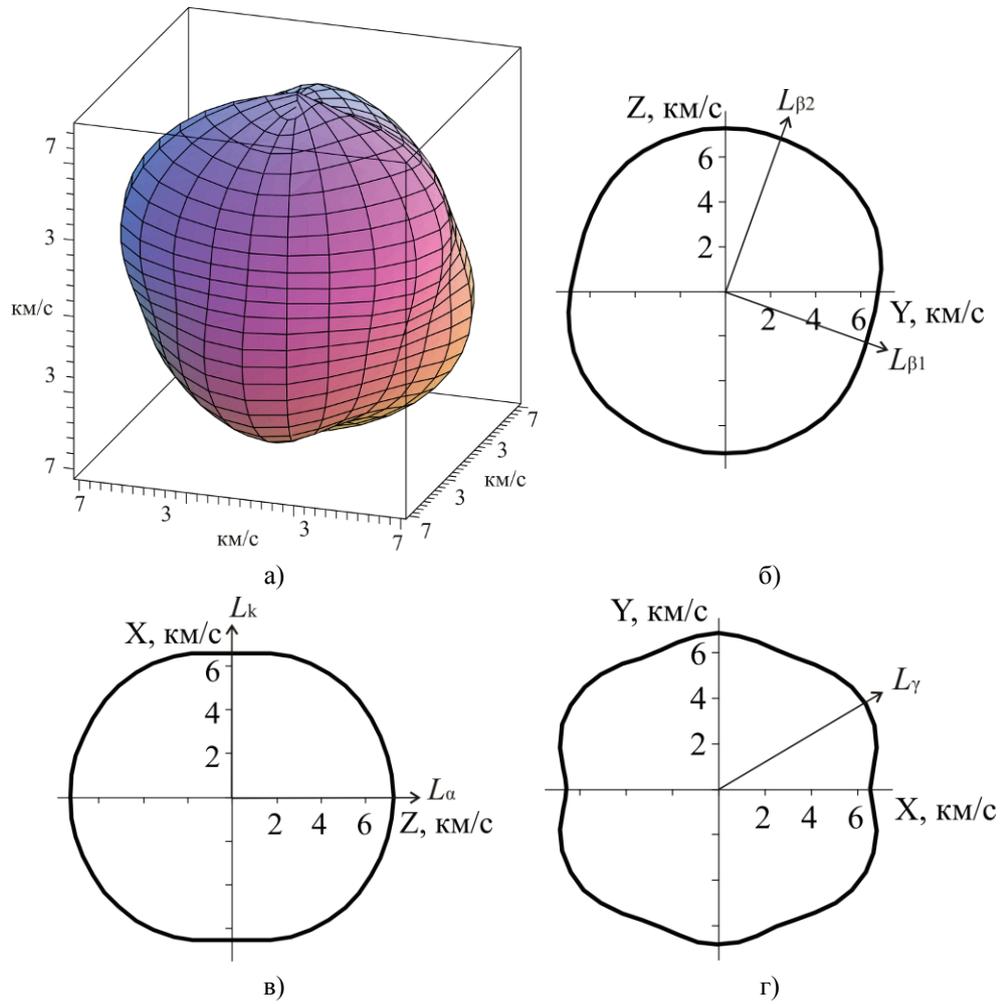


Рис. 5. Поверхность фазовых скоростей продольной волны в ниобате лития (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), 010 (в) и 001 (г)

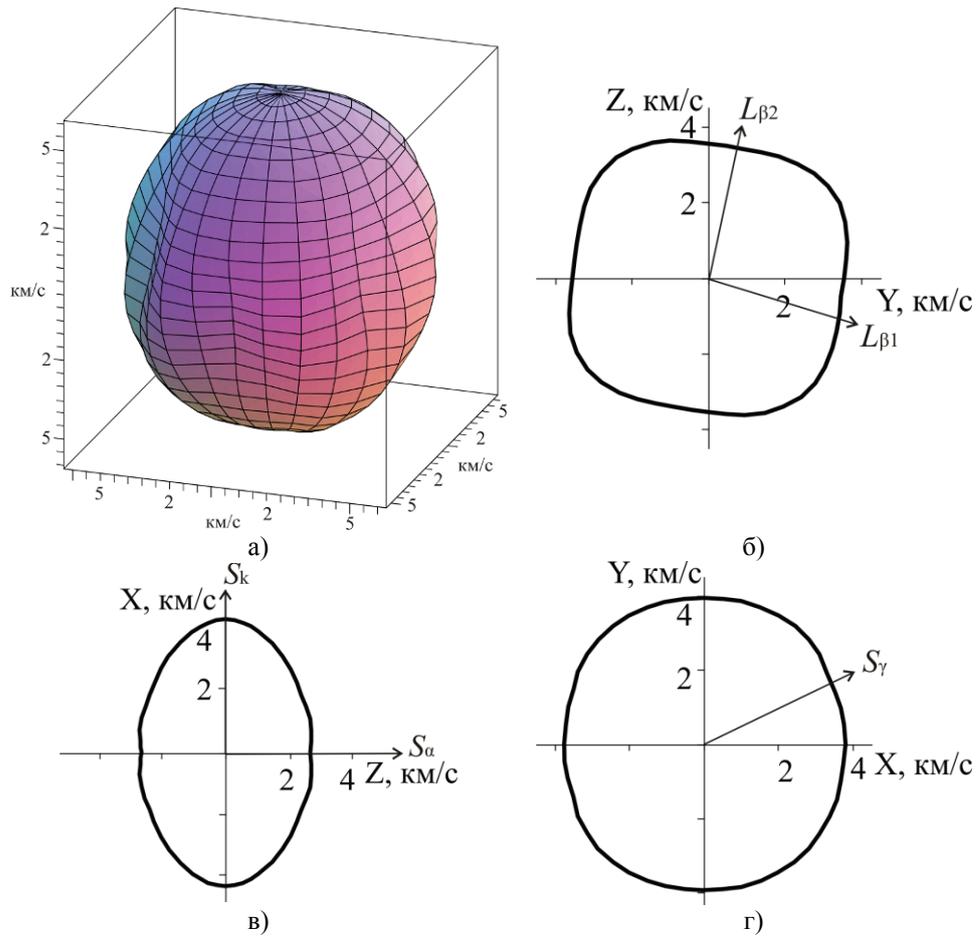


Рис. 6. Поверхность фазовых скоростей первой поперечной волны в ниобате лития (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), 010 (в) и 001 (г)

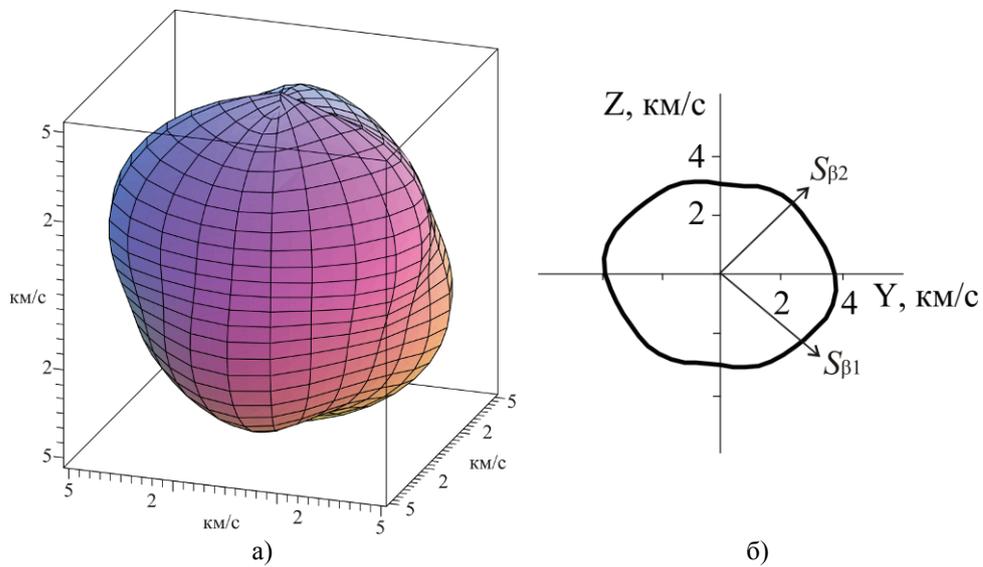


Рис. 7. Поверхность фазовых скоростей второй поперечной волны в ниобате лития (а) и сечения поверхности плоскостями (100) (б), (010) (в) и (001) (г)

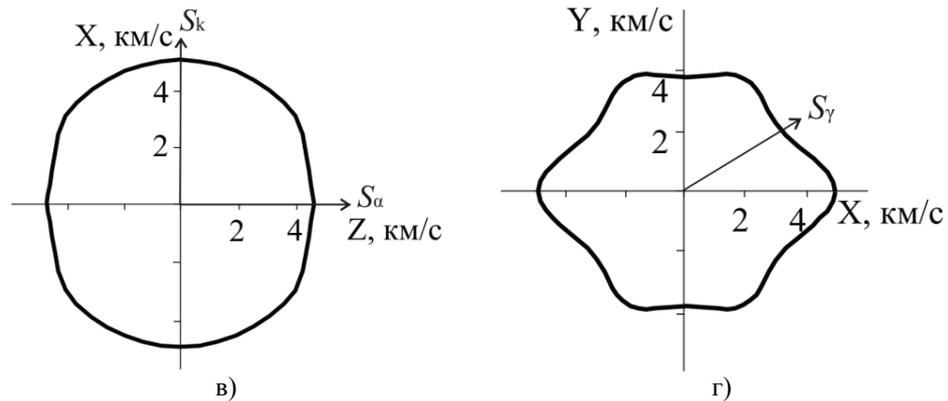


Рис. 7. Окончание

### Заключение

Прежде всего отметим корреляцию в результатах отыскания чисто продольных и чисто поперечных упругих волн в исследованных материалах между предложенным здесь методом и методом диагонализации коэффициентов волнового уравнения, описанным в [1].

Отличительным свойством метода отыскания чистых мод упругих волн из 3D-поверхностей фазовых скоростей является предусмотренная нашей программой возможность вращения в режиме *multimedia* указанных поверхностей с целью лучшего обозрения интересующих нас продольных и поперечных нормалей. При этом мы легко можем оценить величину скорости распространения интересующей нас волны.

Недостатком метода является невозможность в ряде случаев определить поляризацию чисто поперечных волн. В то же время модель, описанная в [1], позволяет точно определить направления распространения и поляризации чистых мод упругих волн, но лишена наглядности.

В совокупности оба метода полностью описывают акустические свойства кристаллов, а разработанные компьютерные программы автоматизируют эту задачу.

### Список литературы

1. Браже, Р. А. Общий метод поиска чистых мод упругих волн в кристаллах / Р. А. Браже, А. И. Кочаев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 3 (15). – С. 115–125.
2. Ting, T. C. T. Longitudinal and transverse waves in anisotropic elastic materials / T.C.T. Ting // Acta Mechanica. – 2006. – V. 185. – P. 147–164.
3. Калитиевский, Н. И. Волновая оптика / Н. И. Калитиевский. – М. : Высш. шк., 1978. – 383 с.
4. Peláez, K. P. Calculation of phase and group angles, slowness surface and ray tracing in transversely isotropic media / K. P. Peláez // Ciencia, Tecnologia y Futuro. – 2006. – V. 3. – P. 41–56.
5. Duarte, M. Slowness surface calculation for different media using the symbolic mathematics language Maple / M. Duarte // Earth Sciences Research Journal. – 2004. – V. 8 (1). – P. 63–67.
6. Laboratory for scientific visual analysis [Электронный ресурс]. – URL : <http://www.sv.vt.edu>.

7. **Christoffel, E. B.** Ueber die Fortpflanzung von Stößen durch elastische feste Körper / E. B. Christoffel // Ann. di matematica pura ed applicata (2). – 1877. – V. 8. – P. 193–243.
8. **Любимов, В. Н.** Учет пьезоэффекта в теории упругих волн для кристаллов различной симметрии / Докл. АН СССР. – 1969. – Т. 186, № 5. – С. 1055–1058.
9. **Блистанов, А. А.** Акустические кристаллы / А. А. Блистанов и др. – М. : Наука, 1982. – 632 с.

---

**Браже Рудольф Александрович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики, Ульяновский государственный  
технический университет

E-mail: brazhe@ulstu.ru

**Brazhe Rudolf Alexandrovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, head of sub-department  
of physics, Ulyanovsk State Technical  
University

**Кочаев Алексей Иванович**

аспирант, Ульяновский государственный  
технический университет

E-mail: a.kochaev@ulstu.ru

**Kochaev Aleksey Ivanovich**

Postgraduate student, Ulyanovsk  
State Technical University

---

УДК 548.0:534

**Браже, Р. А.**

**Метод поиска чистых мод упругих волн в кристаллах из 3D-поверхностей фазовых скоростей** / Р. А. Браже, А. И. Кочаев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 116–125.

## **ВЛИЯНИЕ ДИССИПАТИВНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА ЭНЕРГИЮ СВЯЗИ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ $D^{(-)}$ -СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЕ**

*Аннотация.* В рамках теории о квантовом туннелировании с диссипацией методом потенциала нулевого радиуса исследовано влияние параметров диссипативного туннелирования на среднюю энергию связи квазистационарных  $D^{(-)}$ -состояний, на ширину примесного уровня и фотоионизационные спектры квантовой молекулы.

*Ключевые слова:* квантовая точка, квантовая молекула, диссипативное туннелирование, частота фононной моды, константа взаимодействия с контактной средой, квазистационарные  $D^{(-)}$ -состояния.

*Abstract.* The article investigates influence of the dissipative tunneling parameters on mean binding energy for quasi-stationary  $D^{(-)}$ -states as well as on the width of impure level and photo-ionization spectra in quantum molecule. The investigation is carried out according to the theory of quantum tunneling with dissipation by the method of zero-range potential.

*Key words:* quantum dots, quantum molecule, dissipative tunneling, frequency of phonon mode, constant of interaction with a heat-bath, quasi – stationary  $D^{(-)}$ -state.

### **Введение**

Как известно [1], квазистационарные  $D^{(-)}$ -состояния возникают в случае расположения примесного уровня между дном квантовой точки (КТ) и уровнем энергии ее основного состояния. Интерес к таким  $D^{(-)}$ -состояниям в квантовой молекуле (КМ) (две туннельно-связанные КТ) обусловлен дополнительными возможностями управления энергией связи примесного электрона за счет варьирования параметров диссипативного туннелирования. Действительно, квазистационарные  $D^{(-)}$ -состояния формируются состояниями размерно-квантованной зоны проводимости КТ. При этом влияние прозрачности потенциального барьера проявляется в уширении энергетических уровней зоны проводимости  $\Delta E = \hbar\Gamma_0$  ( $\Gamma_0$  – вероятность диссипативного туннелирования), что приводит к модификации волновой функции  $D^{(-)}$ -состояния и, соответственно, зависимости энергии связи квазистационарных  $D^{(-)}$ -состояний и их оптических свойств от параметров диссипативного туннелирования. Теоретические исследования  $D^{(-)}$ -состояний с примесным уровнем, расположенным ниже дна КТ, выполнены в работе [2].

Настоящая работа посвящена квазистационарным  $D^{(-)}$ -состояниям в КМ. Теоретический подход основан на рассмотрении квантового туннелирования с диссипацией применительно к электронному транспорту в КМ, моделируемой двухъямным осцилляторным потенциалом, с учетом взаимодействия с локальной фононной модой при конечной температуре [3]. Продуктивность такого подхода обусловлена тем, что в пространстве наномасштабов физика и химия электронных процессов имеют много общего и появляется возможность для изучения взаимодействия примесного электрона с контактной средой в рамках науки о квантовом туннелировании с диссипацией.

### 1. Спектр и волновые функции квазистационарных $D^{(-)}$ -состояний

Для описания одноэлектронных состояний в КТ используется потенциал конфайнмента в виде потенциала трехмерного гармонического осциллятора:

$$V_0(x, y, z) = \frac{m^* \omega_0^2 (x^2 + y^2 + z^2)}{2}, \quad (1)$$

где  $m^*$  – эффективная масса электрона;  $\omega_0$  – характерная частота удерживающего потенциала КТ.

Решение соответствующей спектральной задачи с потенциалом (1) хорошо известно:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \omega_0 (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2); \quad (2)$$

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \left( \frac{3}{a_0^3 \pi^2 n_1! n_2! n_3! 2^{n_1+n_2+n_3}} \right)^{-1} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a_0^2}\right) \times \\ \times H_{n_1}\left(\frac{x}{a_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{a_0}\right) H_{n_3}\left(\frac{z}{a_0}\right), \quad (3)$$

где  $n_1 = 0, 1, \dots, n_2 = 0, 1, \dots, n_3 = 0, 1, \dots$  – квантовые числа;  $H_n(x)$  – полиномы Эрмита;  $a_0 = \sqrt{\hbar/(m^* \omega_0)}$  – характерная длина удерживающего потенциала КТ.

Пусть  $D^{(-)}$ -центр расположен в точке  $\vec{R}_a = (x_a, y_a, z_a)$ . Потенциал примеси моделируется потенциалом нулевого радиуса мощностью  $\gamma = 2\pi\hbar^2/(\alpha m^*)$ :

$$V_\delta(\vec{r}; \vec{R}_a) = \gamma \delta(\vec{r} - \vec{R}_a) \left[ 1 + (\vec{r} - \vec{R}_a) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right], \quad (4)$$

где  $\alpha$  определяется энергией  $E_i$  связанного состояния этого же  $D^{(-)}$ -центра в объемном полупроводнике;  $\delta(x)$  – дельта-функция Дирака.

В приближении эффективной массы волновая функция  $\Psi_\lambda^{QD}(\vec{r}; \vec{R}_a)$   $D^{(-)}$ -состояния в КТ с параболическим потенциальным профилем удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\left( E_\lambda - \hat{H}^{QD} \right) \Psi_\lambda^{QD}(\vec{r}; \vec{R}_a) = V_\delta(\vec{r}; \vec{R}_a) \Psi_\lambda^{QD}(\vec{r}; \vec{R}_a), \quad (5)$$

где  $E_\lambda = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m^*}$  – собственные значения оператора Гамильтона  $\hat{H}^{QD}$ .

Одноэлектронная функция Грина  $G(\vec{r}, \vec{r}_1; E_\lambda)$  к уравнению Шредингера (5), соответствующая источнику в точке  $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$  и энергии  $E_\lambda > 0$  (примесный уровень расположен выше дна КТ), запишется в виде

$$G(\vec{r}, \vec{r}_1; E_\lambda) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{\Psi_{n_1, n_2, n_3}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_1, n_2, n_3}(\vec{r})}{(E_\lambda - E_n - i\hbar\Gamma_0)}. \quad (6)$$

Используя известную процедуру метода потенциала нулевого радиуса [2], получим дисперсионное уравнение электрона, локализованного на  $D^{(-)}$ -центре в КТ:

$$\alpha = \frac{2\pi\hbar^2}{m^*} \left( \hat{T} G \right) (\vec{R}_a, \vec{R}_a; E_\lambda). \quad (7)$$

Далее необходимо получить аналитически замкнутое выражение для одноэлектронной функции Грина. Используя явный вид одночастичных волновых функций  $\Psi_{n_1, n_2, n_3}(\vec{r})$ , для функции Грина в (6) будем иметь

$$G(\vec{r}, \vec{R}_a; E_\lambda) = \frac{1}{(a_0\sqrt{\pi})^3} \exp\left(-\frac{r^2 + R_a^2}{2a_0^2}\right) \sum_{n_1, n_2, n_3} \frac{H_{n_1}\left(\frac{x}{a_0}\right) H_{n_1}\left(\frac{x_a}{a_0}\right)}{2^{n_1!} n_1!} \times \\ \times \frac{H_{n_2}\left(\frac{y}{a_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{y_a}{a_0}\right)}{2^{n_2!} n_2!} \times \frac{H_{n_2}\left(\frac{y}{a_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{y_a}{a_0}\right)}{2^{n_2!} n_2!} \times \frac{H_{n_3}\left(\frac{z}{a_0}\right) H_{n_3}\left(\frac{z_a}{a_0}\right)}{2^{n_3!} n_3!} \times \\ \times [E_\lambda - \hbar\omega_0(n_1 + n_2 + n_3 + 3/2) - i\hbar\Gamma_0]^{-1}. \quad (8)$$

Суммирование в (8) по квантовым числам  $n_1, n_2, n_3$  можно выполнить, воспользовавшись формулой Мелера [4]:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z}{2}\right)^2 \frac{H_n(x) H_n(y)}{n!} = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left(\frac{2xyz - (x^2 + y^2)z^2}{1-z^2}\right). \quad (9)$$

В результате получим

$$G(\vec{r}, \vec{R}_a; \varepsilon_\lambda) = -\frac{1}{(a_0\sqrt{\pi})^3 \varepsilon_0} \exp\left(-\frac{r^2 + R_a^2}{2a_0^2}\right) \int_0^\infty dt \exp\left[-\left(-\varepsilon_\lambda + \frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0}\right)t\right] \times \\ \times (1 - \exp[-2t])^{-\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{\exp(-2t)(r^2 + R_a^2) - 2\exp(-t)(\vec{r}, \vec{R}_a)}{a_0^2(1 - \exp[-2t])}\right], \quad (10)$$

где  $\varepsilon_0 = \hbar\omega_0$ ,  $\varepsilon_\lambda = \frac{E_\lambda}{\varepsilon_0}$ .

Для выделения в (10) расходящейся части воспользуемся интегралом Вебера [4]:

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} \frac{dt}{t\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{r^2}{2t} - \beta t\right) = \frac{1}{2\pi r} \exp(-r\sqrt{2\beta}). \quad (11)$$

В результате будем иметь

$$G(\vec{r}, \vec{R}_a; \varepsilon_\lambda) = -\frac{1}{(a_0\sqrt{\pi})^3 \varepsilon_0} \left( \frac{a_0}{2\pi|r-R_a|} \exp\left[-\sqrt{-2\varepsilon_\lambda + 3 + \frac{2i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0}} \frac{|r-R_a|}{a_0}\right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{\infty} dt \exp\left[-\left(-\varepsilon_\lambda + \frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0}\right)t\right] \times \left[ \frac{\exp\left(-\frac{R_a^2}{a_0^2} \frac{1-\exp(-t)}{1+\exp(-t)}\right)}{2^{-3/2} (1-\exp[-2t])^{3/2}} - \frac{1}{t\sqrt{t}} \right] \right). \quad (12)$$

Подставляя (12) в (7), получим

$$\sqrt{-\eta^2 + \frac{3}{2}\beta^{-1} + 4i\Gamma_0^*} = \eta_i - \sqrt{\frac{2}{\beta\pi}} \int_0^{\infty} dt \exp\left[-\left(-\beta\eta^2 + \frac{3}{2} + 4i\Gamma_0^*\beta\right)t\right] \times \\ \times \left( \frac{1}{2t\sqrt{t}} - \frac{1}{[1-\exp(-2t)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{R_a^{*2}}{2\beta} \frac{1-\exp(-t)}{1+\exp(-t)}\right] \right), \quad (13)$$

где  $\eta^2 = E_\lambda / E_d$ ,  $\eta_i = \sqrt{E_i / E_d}$ ,  $\beta = R_0^* / (4\sqrt{U_0^*})$ ,  $R_0^* = 2R_0 / a_d$ ,  $U_0^* = U_0 / E_d$ ,  $R_a^* = R_a / a_d$ ,  $\Gamma_0^* = \hbar\Gamma_0 / (4E_d)$ ;  $E_d$  и  $a_d$  – эффективная боровская энергия и радиус соответственно.

Расчет вероятности диссипативного туннелирования  $\Gamma_0$  сводится к следующему [3]. Так как состояние реакционной системы в среде характеризуется многомерной потенциальной поверхностью, возникает проблема выделения координаты туннелирования. Вводится так называемый адиабатический потенциал вдоль координаты туннелирования. Определяется вероятность туннелирования электрона в единицу времени в квазиклассическом приближении с учетом диссипации. Далее в одноинстантонном приближении вычисляется квазиклассическое действие  $S_B$  как функция температуры и параметров потенциала, находится траектория  $q_B(\tau)$  (инстантон), минимизирующая функцию действия  $S_B$ . Предэкспоненциальный множитель  $B_0$  определяется вкладом траекторий, близко расположенных от инстантона. В приближении идеального инстантонного газа вероятность туннелирования  $\Gamma_0$  можно представить в виде  $\Gamma_0 = B_0 \exp(-S_B)$ , где  $B_0$  определяется как [3]

$$B^* = \frac{E_d}{\hbar} \frac{2\sqrt{U_0^*}(1+b^*)\sqrt{\varepsilon_T^*}}{\sqrt{\pi}} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left\{ \frac{A^* \left[ \beta_1^* \operatorname{ch} \left( \frac{\beta_1^*}{2} \right) - 1 \right] + D^* \left[ \beta_2^* \operatorname{ch} \left( \frac{\beta_2^*}{2} \right) - 1 \right]}{\left\{ A^* \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left( \frac{\beta_1^*}{2} - \tilde{\tau}_{01}^* \right)}{\operatorname{sh} \left( \frac{\beta_1^*}{2} \right)} - 1 \right] + D^* \left[ \frac{\beta_2^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left( \frac{\beta_2^*}{2} - \tilde{\tau}_{02}^* \right)}{\operatorname{sh} \left( \frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} + \right. \\
 & \left. \frac{A^* \left[ 1 - \frac{\beta_1^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} - \tilde{\tau}_{01}^* \right]}{\operatorname{sh} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \right]} \right] + D^* \left[ \frac{\beta_2^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left( \frac{\beta_2^*}{2} - \tilde{\tau}_{02}^* \right)}{\operatorname{sh} \left( \frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right]}{\left\{ A^* \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} - \tilde{\tau}_{01}^* \right]}{\operatorname{sh} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \right]} - 1 \right] + D^* \left[ \frac{\beta_2^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left( \frac{\beta_2^*}{2} - \tilde{\tau}_{02}^* \right)}{\operatorname{sh} \left( \frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}}}, \right. \\
 & \left. \left\{ A^* \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} - \tilde{\tau}_{01}^* \right]}{\operatorname{sh} \left[ \frac{\beta_1^*}{2} \right]} - 1 \right] + D^* \left[ \frac{\beta_2^*}{2} \frac{\operatorname{ch} \left( \frac{\beta_2^*}{2} - \tilde{\tau}_{02}^* \right)}{\operatorname{sh} \left( \frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (14)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 A^* &= \omega_0^2 \frac{A}{2\gamma_1} = \frac{2\varepsilon_L^* a^{*2} - \gamma_{\delta p}^{(-)}}{(\gamma_{\delta p}^{(-)} - \gamma_{\delta p}^{(+)})\gamma_{\delta p}^{(-)}}, \quad D^* = \omega_0^2 \frac{D}{2\gamma_1} = \frac{2\varepsilon_L^* a^{*2} - \gamma_{\delta p}^{(+)}}{(\gamma_{\delta p}^{(-)} - \gamma_{\delta p}^{(+)})\gamma_{\delta p}^{(+)}} \\
 \beta_1^* &= \sqrt{\gamma_1} \beta = \frac{\sqrt{2}\sqrt{U_0^*}}{a^* \varepsilon_T^*} \sqrt{\gamma_{\delta p}^{(-)}}, \quad \beta_2^* = \sqrt{\gamma_2} \beta = \frac{\sqrt{2}\sqrt{U_0^*}}{a^* \varepsilon_T^*} \sqrt{\gamma_{\delta p}^{(+)}}, \\
 \tilde{\tau}_{01}^* &= 2\sqrt{\gamma_1} \tau_0 = \sqrt{\gamma_{\delta p}^{(-)}} \tau_0^* \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{\tau}_{02}^* = 2\sqrt{\gamma_2} \tau_0 = \sqrt{\gamma_{\delta p}^{(+)}} \tau_0^* \frac{1}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned}$$

Выражение для  $S_B$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 S &= a^* \sqrt{U_0^*} \left\{ \frac{1}{2} (b^* + 1)(3 - b^*) \tau_0^* - \frac{(b^* + 1)^2 (\tau_0^*)^2}{2\beta^*} - \frac{(b^* + 1)^2}{2\tilde{\gamma}} \times \left\{ \frac{(1 - \tilde{x}_2')}{\sqrt{\tilde{x}_1'}} \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \left[ \operatorname{cth} \left( \beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'} \right) - \frac{1}{\operatorname{sh} \left( \beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'} \right)} \left\{ \operatorname{ch} \left( (\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}_1'} \right) - \operatorname{ch} \left( \beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'} \right) \right\} \right] + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \operatorname{ch}\left((\beta^* - \tau_0^{*'})\sqrt{\tilde{x}'_1}\right) - \frac{(1 - \tilde{x}'_1)}{\sqrt{\tilde{x}'_2}} \left[ \operatorname{cth}\left(\beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2}\right) - \frac{1}{\operatorname{sh}\left(\beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2}\right)} \times \right. \\
& \left. \times \left\{ \operatorname{ch}\left((\beta^* - \tau_0^{*'})\sqrt{\tilde{x}'_2}\right) - \operatorname{ch}\left(\beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2}\right) \right\} + \operatorname{ch}\left((\beta^* - \tau_0^{*'})\sqrt{\tilde{x}'_2}\right) \right] \Bigg\}, \quad (15)
\end{aligned}$$

$$\text{где } \tau_0^{*'} = \operatorname{arcsch}\left(\frac{1-b^*}{1+b^*} \operatorname{sh}\beta^*\right) + \beta^*; \quad b^* = \frac{b}{a}; \quad \beta^* = \frac{\sqrt{U_0^*}}{a^* \varepsilon_T^*}; \quad \varepsilon_T^* = \frac{kT}{E_d};$$

$$\tilde{\gamma}' = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^{*4} a^{*2}}{4\varepsilon_L^{*2} U_0^*}\right)^2 - \frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}}; \quad \varepsilon_c^* = \frac{\hbar\sqrt{c}}{E_d}; \quad \varepsilon_L^* = \frac{\hbar\omega_L}{E_d};$$

$$\tilde{x}'_1 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^{*4} a^{*2}}{4\varepsilon_L^{*2} U_0^*} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^{*4} a^{*2}}{4\varepsilon_L^{*2} U_0^*}\right)^2 - \frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}} \right];$$

$$\tilde{x}'_2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^{*4} a^{*2}}{4\varepsilon_L^{*2} U_0^*} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\varepsilon_c^{*4} a^{*2}}{4\varepsilon_L^{*2} U_0^*}\right)^2 - \frac{\varepsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}} \right].$$

При численном решении дисперсионного уравнения (13) было учтено, что  $\bar{E} = \operatorname{Re} \tilde{E}_\lambda$ ,  $\Delta E = 2 \operatorname{Im} \tilde{E}_\lambda$ , где  $\bar{E}$  – средняя энергия связи квазистационарного  $D^{(-)}$ -состояния;  $\Delta E$  – ширина примесного уровня;  $\tilde{E}_\lambda$  – комплексный корень уравнения (13).

На рис. 1 показана зависимость средней энергии связи  $D^{(-)}$ -состояния  $\bar{E}$  и ширины уровня в КТ на основе *InSb* от координаты  $R_a$  для различных значений параметров диссипативного туннелирования  $\varepsilon_T^* = kT/E_d$ ,  $\varepsilon_c^* = \hbar\sqrt{c}/E_d$  и  $\varepsilon_L^* = \hbar\omega_L/E_d$ , определяющих соответственно температуру, константу взаимодействия с контактной средой и частоту фононной моды. Как видно из рис. 1,а, с ростом температуры происходит уменьшение величины  $\bar{E}$ , при этом ширина примесного уровня растет (см. рис. 2,а). Это связано с тем, что с ростом параметра  $\varepsilon_T^*$  увеличивается вероятность туннелирования  $\Gamma_0$ , а следовательно, уменьшается время жизни  $\tau$  примесного электрона ( $\Gamma_0 = 1/\tau$ ).

Аналогичная ситуация имеет место и с ростом параметра  $\varepsilon_L^*$  (см. рис. 1,б и рис. 2,б). С увеличением «вязкости» контактной среды (см. рис. 1,в) величина  $\bar{E}$  растет за счет уменьшения вероятности туннелирования (см. рис. 2,в).

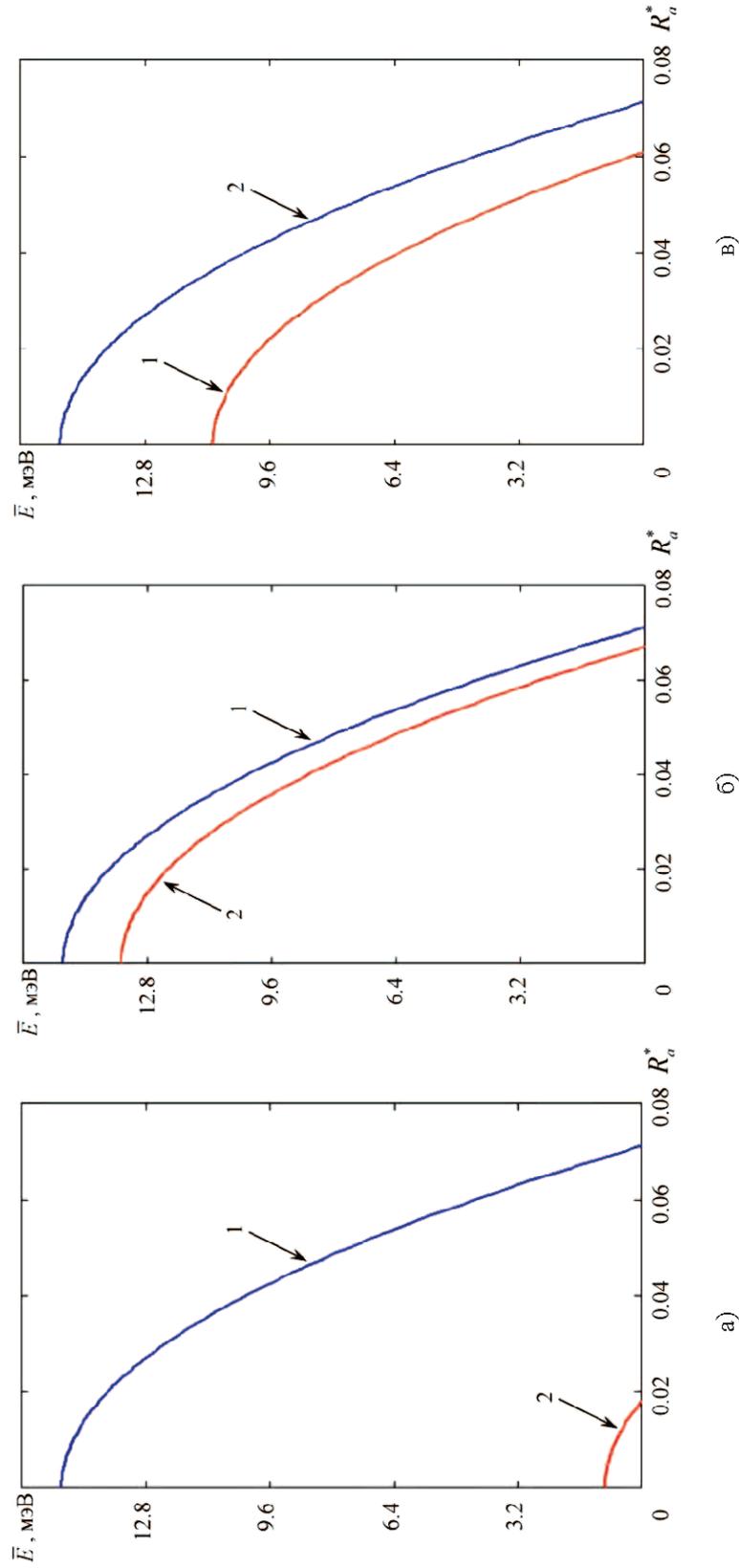


Рис. 1. Зависимость средней энергии связи  $D^{(-)}$ -состояния  $\bar{E}$  от координат  $R_a^* = R_a / a_d$  при  $|E_i| = 1,38 \cdot 10^{-2}$  эВ,  $R_0 = 70$  нм,  $U_0 = 0,42$  эВ: а – для различных значений параметра  $\epsilon_T^*$  ( $\epsilon_L^* = 1, \epsilon_C^* = 1$ ): 1 –  $\epsilon_T^* = 1, 2 - \epsilon_T^* = 4$ ; б – для различных значений параметра  $\epsilon_L^*$ : 1 –  $\epsilon_L^* = 1, 2 - \epsilon_L^* = 4$ ; в – для различных значений параметра  $\epsilon_C^*$ : 1 –  $\epsilon_C^* = 1, 2 - \epsilon_C^* = 4$

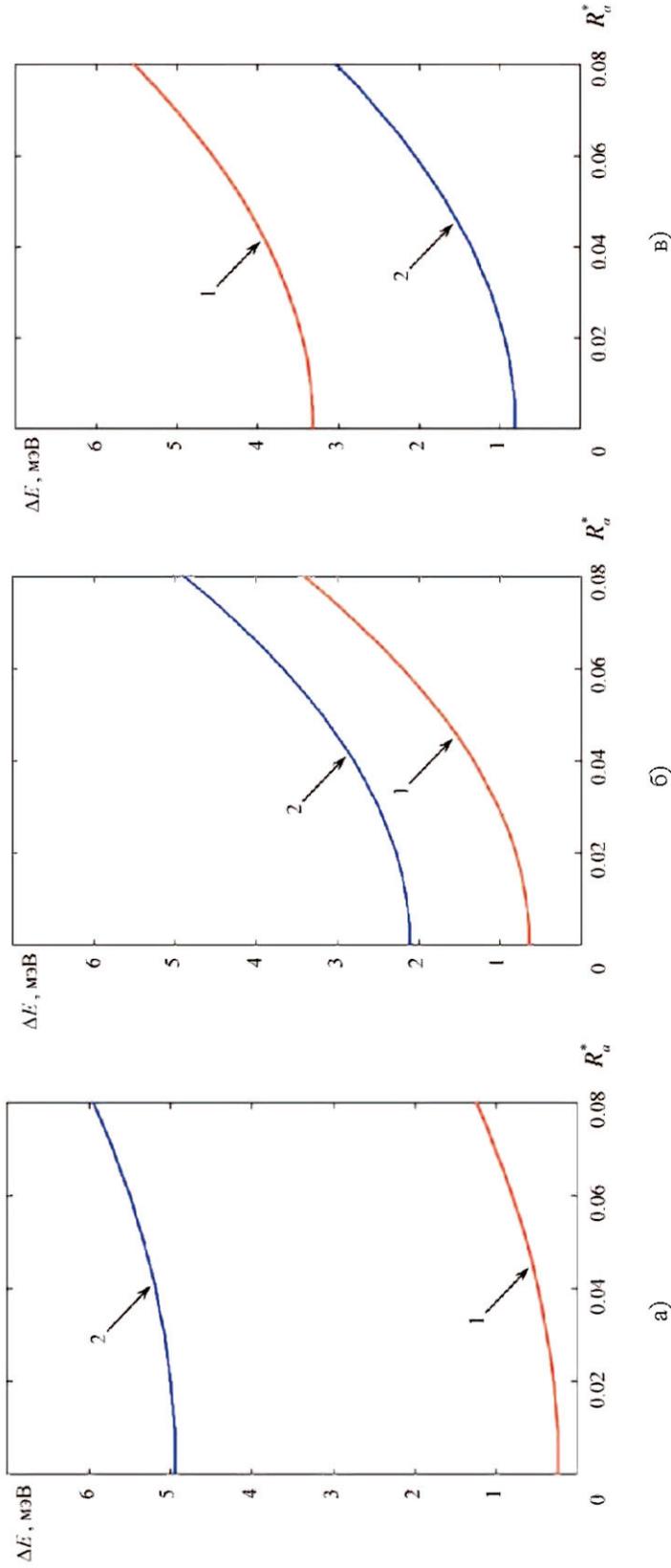


Рис. 2. Зависимость ширины примесного уровня  $\Delta E$  от координат  $R_a^* = R_a / a_d$  при  $|E_i| = 1,38 \cdot 10^{-2}$  эВ,  $R_0 = 70$  нм,  $U_0 = 0,42$  эВ:  
 а – для различных значений параметра  $\epsilon_T^*$  ( $\epsilon_L^* = 1, \epsilon_C^* = 1$ ): 1 –  $\epsilon_T^* = 1, 2 - \epsilon_T^* = 4$ ; б – для различных значений параметра  $\epsilon_L^*$ : 1 –  $\epsilon_L^* = 1, 2 - \epsilon_L^* = 4$ ; в – для различных значений параметра  $\epsilon_C^*$ : 1 –  $\epsilon_C^* = 1, 2 - \epsilon_C^* = 4$

Волновая функция  $D^{(-)}$ -состояния в КТ с параболическим потенциалом конфайнмента согласно (12) имеет следующий вид:

$$\Psi_{\lambda}(\vec{r}, \vec{R}_a) = C^{QD} \pi^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r^2 + R_a^2}{2a_0^2}\right) \int_0^{\infty} dt \exp\left[-\left(-\varepsilon_{\lambda} + \frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0}\right)t\right] \times \\ \times (1 - \exp[-2t])^{-\frac{3}{2}} \exp\left[-\frac{\exp(-2t)(r^2 + R_a^2) - 2\exp(-t)(\vec{r}, \vec{R}_a)}{a_0^2(1 - \exp[-2t])}\right], \quad (16)$$

где  $C^{QD}$  задается выражением вида

$$C^{QD} = \left[ 2\sqrt{\pi}a_0^3 \frac{\Gamma\left(\frac{7}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} + \frac{\varepsilon_{\lambda}}{2}\right) \left[\left(\frac{3}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_{\lambda}}{2}\right)\right]}{\left(\frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0} - \varepsilon_{\lambda}\right)^2} \times \right. \\ \left. \times \frac{\left(\Psi\left(\frac{1}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_{\lambda}}{2}\right) - \Psi\left(\frac{7}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_{\lambda}}{2}\right)\right) + 1}{\Gamma\left(\frac{1}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_{\lambda}}{2}\right)} \right]^{-1/2},$$

где  $\Psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$  – логарифмическая производная гамма-функции Эйлера.

## 2. Расчет спектров фотоионизации $D^{(-)}$ -центра в квантовой молекуле

Рассмотрим процесс фотоионизации  $D^{(-)}$ -центра в КМ в условиях диссипативного туннелирования. Вероятность соответствующего оптического перехода электрона определяется как

$$P_{f\lambda}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n |M_{f\lambda}|^2 \frac{\hbar\Gamma_0}{(E_f - E_{\lambda})^2 + \hbar^2\Gamma_0^2}, \quad (17)$$

где  $M_{f\lambda}$  – матричный элемент рассматриваемого оптического перехода  $\lambda \rightarrow f$ :

$$M_{f\lambda} = \langle \Psi_{fn\ell m} | \hat{H}_{\text{int}} | \Psi_{\lambda} \rangle. \quad (18)$$

Эффективный гамильтониан взаимодействия с полем световой волны  $\hat{H}_{\text{int}}$ , характеризуемой волновым вектором  $\vec{q}$  и единичным вектором поляризации  $\vec{e}_{\lambda}$ , запишется следующим образом:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\alpha^*}{m^*2\omega}} I_0 \exp(i\vec{q}\vec{r}) \left( \vec{e}_{\lambda} \hat{p} \right), \quad (19)$$

где  $\lambda_0 = E_{eff} / E_0$  – коэффициент локального поля, учитывающий увеличение амплитуды оптического перехода за счет того, что эффективное локальное поле  $D^{(-)}$ -центра  $E_{eff}$  превышает среднее макроскопическое поле в кристалле  $E_0$ ;  $\alpha^* = |e|^2 / (4\pi\epsilon_0\sqrt{\epsilon}\hbar c)$  – постоянная тонкой структуры с учетом статической относительной диэлектрической проницаемости  $\epsilon$ ;  $c$  – скорость света в вакууме;  $I_0$  – интенсивность света;  $\omega$  – частота поглощаемого излучения;  $|e|$  – абсолютное значение электрического заряда электрона.

Волновая функция начального состояния  $\Psi_\lambda$  для централизованного случая ( $R_a^* = (0, 0, 0)$ ) запишется как

$$\Psi_\lambda(\vec{r}) = C \left( \frac{r^2}{a_0^2} \right)^{\frac{3}{4}} \exp\left( \frac{r^2}{a_0^2} \right) \Gamma\left( \frac{1}{2} \left[ -\epsilon_\lambda + \frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\epsilon_0} \right] \right) W_{\frac{\epsilon_\lambda + i\hbar\Gamma_0}{2\epsilon_0}, \frac{1}{4}} \left( \frac{r^2}{a_0^2} \right), \quad (20)$$

где  $C = \frac{1}{2} C^{QD} \pi^{-\frac{3}{2}}$ ;  $W_{\alpha, \beta}(x)$  – функция Уиттекера [4].

Волновая функция конечного состояния  $\Psi_{fn\ell m}$  имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi_{fn\ell m}(r, \theta, \varphi) = & C_{n\ell} \left( \frac{r}{a_0} \right)^\ell \exp\left( -\frac{r^2}{a_0^2} \right) \frac{\Gamma\left( \ell + \frac{3}{2} \right)}{\Gamma\left( \ell + \frac{3}{2} + n \right)} \times \\ & \times L_n^{\ell + \frac{1}{2}} \left( \frac{r^2}{a_0^2} \right) \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) \exp(im\varphi), \end{aligned} \quad (21)$$

где  $P_\ell^m(\cos\theta)$  – присоединенные функции Лежандра первого рода;  $L_n^\beta(x)$  – обобщенные полиномы Лагерра;  $C_{n\ell} = \sqrt{2n! \Gamma\left( \ell + n + \frac{3}{2} \right) / \left( a_0^3 \Gamma\left( \ell + \frac{3}{2} \right) \right)}$  – множитель нормировки;  $r, \theta, \varphi$  – сферические координаты;  $n, \ell, m$  – радиальное, орбитальное и магнитное квантовые числа соответственно.

С учетом (19)–(21) для  $M_{f\lambda}$  будем иметь

$$\begin{aligned} M_{f\lambda} = & i\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^*}{\omega}} I_0 (E_f - E_\lambda) C C_{n\ell} \frac{\Gamma\left( \ell + \frac{3}{2} \right)}{\Gamma\left( \ell + n + \frac{3}{2} \right)} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \int_0^\infty dt \times \\ & \times (1 - \exp[-2t])^{-\frac{3}{2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi \left( \frac{r}{a_0} \right)^\ell \exp\left( -\frac{r^2}{a_0^2} \right) L_n^{\ell + \frac{1}{2}} \left( \frac{r^2}{a_0^2} \right) \times \end{aligned}$$

$$\times \exp(-\varepsilon_a t) \exp\left(-\frac{r^2 \exp(-2t)}{a_0^2 (1 - \exp[-2t])}\right) (\vec{e}_\lambda \vec{r}) P_\ell^m(\cos\theta) \exp(-im\varphi), \quad (22)$$

где  $E_f = E_{n\ell} = \hbar\omega_0 \left(2n + \ell + \frac{3}{2}\right)$ .

В силу сферической симметрии рассматриваемой задачи для оптических переходов в дипольном приближении действует обычное правило отбора: переходы идут из основного  $s$ -состояния примесного центра в возбужденные  $p$ -состояния КТ. В результате для (22) получим

$$\begin{aligned} M_{f\lambda} &= i\lambda_0 \pi a_0^3 \sqrt{\frac{8\alpha^*}{3\omega}} I_0 (E_f - E_\lambda) C C_{n1} \times \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right)} \int_0^\infty dt \exp(-\varepsilon_a t) (1 - \exp[-2t])^{\frac{3}{2}} \times \\ &\times \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n + \frac{3}{2}}{n - k} \frac{1}{k!} \int_0^\infty dr \left(\frac{r}{a_0}\right)^{2k+4} \exp\left(-\frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp\left(-\frac{r^2 \exp(-2t)}{a_0^2 (1 - \exp[-2t])}\right), \quad (23) \end{aligned}$$

где было учтено, что

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^n (-1)^k \binom{n + \alpha}{n - k} \frac{x^k}{k!}. \quad (24)$$

После вычисления интегралов в (23) для  $|M_{f\lambda}|^2$  получим

$$\begin{aligned} |M_{f\lambda}|^2 &= \frac{2\alpha^* \lambda_0^2 I_0}{12^3 \sqrt{\pi\omega}} E_0^2 a_0^2 \left| \frac{n! \left(2n + \frac{5}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0} - \varepsilon_\lambda\right)^2 \left(\frac{3}{2} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{\varepsilon_0} - \varepsilon_\lambda\right)^2}{\Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{7}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} + \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right)} \times \right. \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right) \Gamma^2\left(\frac{3}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right)}{\left(\frac{3}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right) \left[\Psi\left(\frac{1}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right) - \Psi\left(\frac{7}{4} + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right) + 1\right]} \times \\ &\times \left. \left[ \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2k+3)!! \Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right) \Gamma(k+2)}{k! 2^k (n-k)! \Gamma\left(k + \frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{11}{4} + k + \frac{i\hbar\Gamma_0}{2\varepsilon_0} - \frac{\varepsilon_\lambda}{2}\right)} \right]^2 \right|. \quad (25) \end{aligned}$$

Вероятность рассматриваемого оптического перехода определится как

$$P_{f\lambda}(\omega) = P_0 X^{-1} \sum_{n=0}^N \frac{\mu_n n!}{\left(2n + \frac{5}{2} - 2\xi_n X\right)^2 + 4\mu_n^2} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4} + i\mu_n - \xi_n\right)}{\Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{7}{4} + i\mu_n + \xi_n\right)} \right| \times$$

$$\times \frac{\left[ \left(2n + \frac{5}{2} + 2i\mu_n - 2\xi_n\right) \left(\frac{3}{2} + 2i\mu_n - 2\xi_n\right) \Gamma\left(\frac{3}{2} + i\mu_n - \xi_n\right) \right]^2}{\left(\frac{3}{4} + i\mu_n - \xi_n\right) \left[ \Psi\left(\frac{1}{4} + i\mu_n - \xi_n\right) - \Psi\left(\frac{7}{4} + i\mu_n - \xi_n\right) + 1 \right]} \times$$

$$\times \left[ \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2k+3)!! \Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right) \Gamma(k+2)}{k! 2^k (n-k)! \Gamma\left(k + \frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{11}{4} + k + i\mu_n - \xi_n\right)} \right]^2, \quad (26)$$

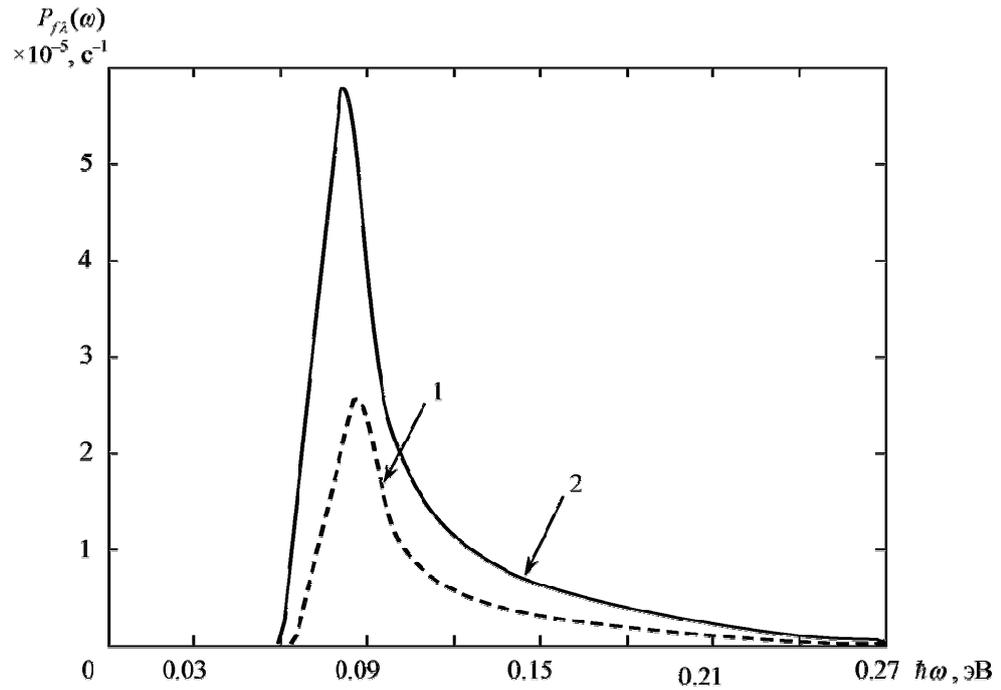
где  $P_0 = \frac{\sqrt{\pi} \alpha^* \lambda_0^2}{48} I_0 a_d^2$ ,  $X = \frac{\hbar \omega}{E_d}$ ,  $\mu_n = 2\Gamma_0^* \beta$ ,  $\xi_n = \frac{1}{2} \eta^2 \beta$ ,  $N = [C]$  – целая часть числа

$$C = \frac{2\beta(X + \eta^2) - 5}{4}.$$

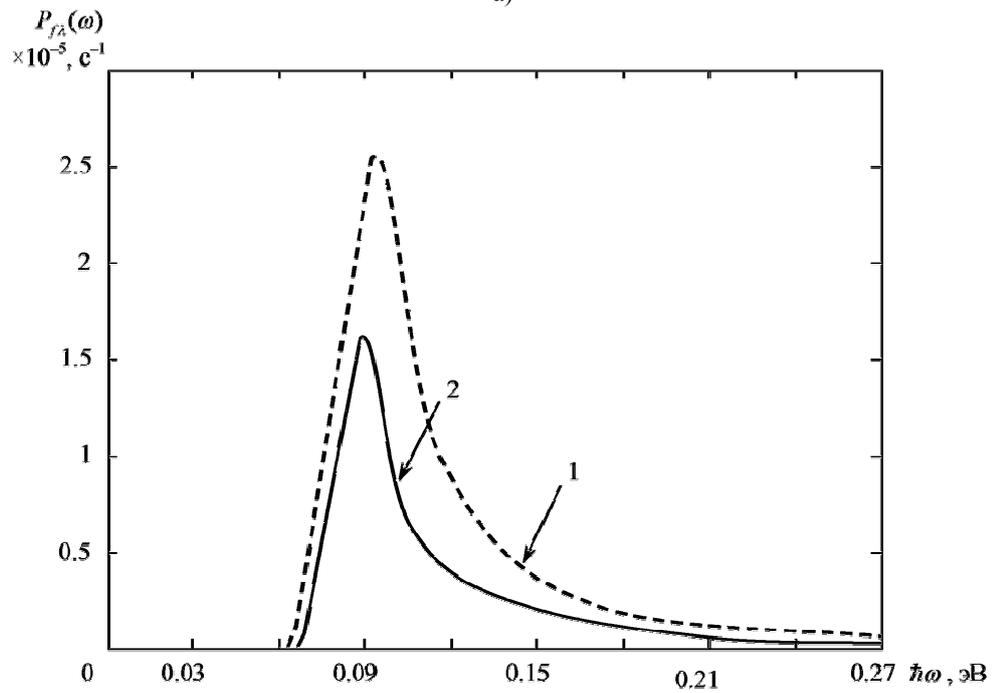
На рис. 3 представлена спектральная зависимость вероятности фотоионизации  $D^{(-)}$ -центра в КМ для различных значений параметров  $\varepsilon_T^*$ ,  $\varepsilon_C^*$ , рассчитанная с помощью формулы (26).

Как видно из рис. 3,а, уменьшение средней энергии связи  $\bar{E}$  квазистационарного  $D^{(-)}$ -состояния с ростом  $\varepsilon_T^*$  сопровождается увеличением вероятности фотоионизации  $D^{(-)}$ -центра, в то время как рост «вязкости» контактной среды (параметр  $\varepsilon_C^*$ ) (см. рис. 3,б) приводит к уменьшению величины  $P_{f\lambda}(\omega)$  за счет увеличения времени жизни примесного электрона.

Таким образом, в работе продемонстрировано существенное влияние параметров диссипативного туннелирования на среднюю энергию связи и фотоионизационные спектры квазистационарных  $D^{(-)}$ -состояний в КМ. Показано, что следствием прозрачности потенциального барьера является конечное время жизни примесного электрона, которое уменьшается с ростом вероятности диссипативного туннелирования. Выявлена высокая чувствительность фотоионизационных спектров к температуре и константе взаимодействия с контактной средой. Полученные результаты открывают определенные перспективы для управления квазистационарными примесными состояниями в массиве туннельно-связанных квантовых точек.



а)



б)

Рис. 3. Спектральная зависимость вероятности фотоионизации  $D^{(-)}$ -центра в КМ при  $|E_i| = 1,38 \cdot 10^{-2}$  эВ,  $R_0 = 70$  нм,  $U_0 = 0,42$  эВ: а – для различных значений параметра  $\epsilon_T^*$  ( $\epsilon_L^* = 1$ ,  $\epsilon_C^* = 1$ ): 1 –  $\epsilon_T^* = 1$ , 2 –  $\epsilon_T^* = 4$ ; б – для различных значений параметра  $\epsilon_C^*$ : 1 –  $\epsilon_C^* = 1$ , 2 –  $\epsilon_C^* = 4$

## Список литературы

1. **Кревчик, В. Д.** Анизотропия магнитооптического поглощения комплексов «квантовая точка – примесный центр» / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, Р. В. Зайцев // ФТП. – 2002. – Т. 36, № 10. – С. 1225–1232.
2. **Кревчик, В. Д.** Примесное поглощение света в структурах с квантовыми точками / В. Д. Кревчик, Р. В. Зайцев // ФТТ. – 2001. – Т. 43, № 3. – С. 504–507.
3. **Жуковский, В. Ч.** Изучение управляемости диссипативного туннелирования в системах взаимодействующих квантовых молекул / В. Ч. Жуковский и др. // Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2007. – № 2. – С. 10–14.
4. **Бейтмен, Г.** Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтмен, А. Эрдейн. – М. : Наука, 1973. – Т. 1, 2.

**Кревчик Владимир Дмитриевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики, Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Krevchik Vladimir Dmitrievich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head sub-department  
of physics, Penza State University

**Калинина Алла Владимировна**

аспирант, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Kalinina Alla Vladimirovna**

Postgraduate student,  
Penza State University

**Калинин Евгений Николаевич**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра общей физики,  
Пензенский государственный  
педагогический университет  
им. В. Г. Белинского

E-mail: kalinin\_en@mail.ru

**Kalinin Evgeny Nikolaevich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of general physics,  
Penza State Pedagogical University  
named after V. G. Belinsky

**Семенов Михаил Борисович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра физики, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Semenov Mikhail Borisovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, sub-department  
of physics, Penza State University

УДК 539.23; 539.216.1; 537.311.322

**Кревчик, В. Д.**

**Влияние диссипативного туннелирования на энергию связи и оптические свойства квазистационарных  $D^{(-)}$ -состояний в квантовой молекуле** / В. Д. Кревчик, А. В. Калинина, Е. Н. Калинин, М. Б. Семенов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 126–139.

*В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, Ю. Г. Смирнов,  
Р. В. Зайцев, В. А. Рудин, П. В. Кревчик, З. А. Гаврина*

## **ВЛИЯНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЫ НА 2D-ТУННЕЛЬНЫЕ БИФУРКАЦИИ В УСЛОВИЯХ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ**

*Аннотация.* Теоретически исследуется влияние температуры, внешнего электрического поля и диэлектрической матрицы на наличие 2D-туннельных бифуркаций в системе АСМ/СТМ – металлическая КТ или в квантовой молекуле. Для указанных управляющих параметров построена фазовая диаграмма смены режимов туннелирования и выявлено, что режим 2D-туннельных бифуркаций может наблюдаться для экспериментально реализуемых значений относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды – термостата.

*Ключевые слова:* 2D-туннельная бифуркация, теория диссипативного туннелирования, квантовая молекула, система АСМ/СТМ.

*Abstract.* The article theoretically investigates the influence of temperature, external electric field and dielectric matrix on 2D tunnel bifurcations in a system of AFM/STM – metallic QD or in a quantum molecule. The article also shows a phase diagram compiled to display the tunnel mode changes for above-mentioned controlling parameters. It has been revealed, that the impact of 2D tunnel bifurcations can be observed for experimentally realizable values of relative dielectric permittivity of the heat – bath matrix.

*Key words:* 2D tunnel bifurcation, theory of dissipative tunneling, quantum molecule, system of AFM/STM.

### **Введение**

В системах различной природы: в ряде макрокластерных структур, в биомолекулах типа порфиринов, в некоторых двумерных низкотемпературных адиабатических химических реакциях (например, для димеров 7-азаиндола), в различных мезоскопических системах [1–15] – весьма важным оказывается изучение двумерной туннельной диссипативной динамики взаимодействующих зарядов, движущихся по параллельным или антипараллельным «координатам реакции». Впервые в рамках науки о квантовом туннелировании с диссипацией особенности двумерной туннельной динамики были изучены на примере взаимодействующих контактов Джозефсона [1]. Был обнаружен эффект «бифуркации» двумерных туннельных траекторий и прослежена возможность визуализации этого эффекта в виде излома на соответствующей токовой зависимости. В некотором смысле «аналогичная» бифуркация наблюдалась в системах типа порфиринов, хотя и оказалась неустойчивой [4–6]. Макроскопическая визуализация этого эффекта проявлялась в изломе на температурной зависимости (при достаточно низких температурах) скорости соответствующей химической реакции. Учитывая возможности современных нанотехнологий в создании искусственных двумерных структур с заданными свойствами, интерес к изучению двумерных туннельных бифуркаций, позволяющих визуализировать смену механизма туннельного переноса взаимодействующих зарядов, значительно возрос [4–6]. В системе совмещенного АСМ/СТМ – металлическая квантовая точка (КТ) удалось экспери-

ментально пронаблюдать на туннельной ВАХ теоретически предсказанный ранее режим  $2D$ -бифуркаций для КТ из коллоидного золота [15]. Важным вопросом при этом является выявление экспериментально реализуемого диапазона значений относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды – термостата, допускающего режим  $2D$ -бифуркаций. Теоретическому исследованию этого вопроса и посвящена настоящая работа.

### Постановка задачи

Мы исследуем одновременный перенос двух частиц, которые слабо взаимодействуют друг с другом. Если взаимодействие отсутствует, любая из частиц движется независимо в своем собственном двухъямном потенциале. Мы изучим влияние взаимодействия частиц на смену режима туннелирования с синхронного на асинхронный (эффект  $2D$ -бифуркации) как функцию связи со средой во внешнем электрическом поле.

Выберем энергии потенциала каждой частицы  $U(q_1)$  и  $U(q_2)$  в следующем виде:

$$U(q_1) = \frac{\omega^2 (q_1 + a)^2}{2} \theta(-q_1) + \left[ -\Delta I + \frac{\omega^2 (q_1 - b)^2}{2} \right] \theta(q_1);$$

$$U(q_2) = \frac{\omega^2 (q_2 + a)^2}{2} \theta(-q_2) + \left[ -\Delta I + \frac{\omega^2 (q_2 - b)^2}{2} \right] \theta(q_2), \quad (1)$$

где  $\theta$  – единичная функция Хевисайда;  $q_1, q_2$  – координаты частиц;  $\Delta I$  – параметр асимметрии потенциала в двухъямном потенциале.

При введении взаимодействия между частицами в диполь-дипольном приближении выбираем  $V_{\text{int}}$  в форме гармонического потенциала «притяжения»:

$$V_{\text{int}} = -\frac{\alpha (q_1 - q_2)^2}{2}. \quad (2)$$

Функция потенциальной энергии взаимодействия может быть представлена в виде ряда по степеням параметра  $\frac{(q_{1t} - q_{2t})^2}{R_0^2}$ , где  $q_{1t}$  и  $q_{2t}$  – координаты туннелирования;  $R_0$  – расстояние между «каналами» туннелирования. Для кулоновского отталкивания частиц в среде ( $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная;  $\epsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость) получим

$$V_{\text{rep}} = \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0 |R|} = \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0 [R_0^2 + (q_{1t} - q_{2t})^2]^{1/2}} \approx \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0 R_0} - \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0 R_0} \cdot \frac{(q_{1t} - q_{2t})^2}{R_0^2}. \quad (3)$$

Следовательно,

$$\alpha = \frac{e^2}{\epsilon \epsilon_0 R_0^3}. \quad (4)$$

Отрицательная гармоническая потенциальная энергия (второе слагаемое в разложении) появляется, следовательно, как эффективное притягивающее взаимодействие, хотя потенциал остается все время отталкивающим. Этот отрицательный вклад уменьшает отталкивающий потенциал от его максимального значения в  $R_0$ . Постоянная составляющая  $U(R_0) = \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0 R_0}$  может

быть включена в определение потенциальных энергий отдельных частиц  $U(q_1)$  и  $U(q_2)$ . Влияние электрического поля можно учесть через перенормировку параметров  $a = \tilde{a} = a_0 + \frac{|e|E}{\omega_0^2}$ ,  $b = \tilde{b} = b_0 - \frac{|e|E}{\omega_0^2}$ .

Для 2D-параллельного переноса с учетом взаимодействия частиц и перенормировки параметров потенциала во внешнем электрическом поле мы получим перенормированный потенциал в виде

$$U_p(q_1, q_2) = \frac{2\tilde{U}_p(q_1, q_2)}{\omega^2} = (q_1 + a)^2 \theta(-q_1) + \left[ -(b^2 - a^2) + (q_1 - b)^2 \right] \theta(q_1) + \\ + (q_2 + a^2) \theta(-q_2) + \left[ -(b^2 - a^2) + (q_2 - b)^2 \right] \theta(q_2) - \frac{\alpha^*}{2} (q_1 - q_2)^2. \quad (5)$$

Мы предполагаем, что две частицы независимо взаимодействуют с гармоническим термостатом. Такое взаимодействие рассматривается в билинейном приближении. Динамика среды описывается осцилляторным гамильтонианом (при этом мы используем систему единиц с  $\hbar = 1$ ,  $k_B = 1$  и массами осцилляторов, равными 1):

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_i (P_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2). \quad (6)$$

Каждая из туннелирующих частиц (электронов или эффективных зарядов) взаимодействует с осцилляторным термостатом следующим образом:

$$V_{p-ph}^{(1)}(q_1, Q_i) = q_1 \sum_i C_i Q_i, \quad V_{p-ph}^{(2)}(q_2, Q_i) = q_2 \sum_i C_i Q_i. \quad (7)$$

Как и в работе [3], мы интересуемся вероятностью переноса в единицу времени или, строго говоря, только ее экспоненциальной частью, которая может быть записана в форме Лангера:

$$\Gamma = 2T \frac{\text{Im} Z}{\text{Re} Z}. \quad (8)$$

Для вычисления  $\Gamma$  удобно представить статистическую сумму  $Z$  в форме интеграла по траекториям [1–8]

$$Z = \prod_i \int Dq_1 Dq_2 DQ_i \exp[-S\{q_1, q_2, Q_i\}]. \quad (9)$$

Здесь  $S$  обозначает подбарьерное действие для всей системы. Мнимая часть  $\text{Im} Z$  появляется благодаря распадности энергетических уровней в ис-

ходной яме потенциальной энергии. Справедливость этого приближения требует, чтобы диссипация была бы достаточно сильной, так что реализуется только некогерентный распад [3].

Интеграл (9) может быть взят по фоновым координатам [3], в результате

$$S\{q_1, q_2\} = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau \left[ \frac{1}{2} q_1^2 + \frac{1}{2} q_2^2 + V(q_1, q_2) + \int_{-\beta/2}^{\beta/2} d\tau' D(\tau - \tau') [q_1(\tau) + q_2(\tau)] \times [q_1(\tau') + q_2(\tau')] \right], \quad (10)$$

где

$$D(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} D(v_n) \exp(i v_n \tau), \quad (11)$$

$\beta = \hbar / (k_B T)$  – обратная температура (ниже мы предполагаем, что  $\hbar = 1$  и  $k_B = 1$ ),  $v_n = 2\pi n / \beta$  является мацубаровской частотой;

$$D(v_n) = - \sum_i \frac{C_i^2}{\omega_i^2 + v_n^2} - \sum_i \frac{C_i^2}{\omega_i^2} + \xi_n. \quad (12)$$

Траектория, которая минимизирует евклидово действие  $S$ , может быть найдена из уравнений движения. Моменты времен  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , в которые частицы проходят вершины барьера, определяются из следующих уравнений:

$$q_1(\tau_1) = 0, \quad q_2(\tau_2) = 0. \quad (13)$$

В случае параллельно туннелирующих частиц (потенциальная энергия (5)), результирующее евклидово действие задается следующим образом:

$$S = 2a(a+b)(\tau_1 + \tau_2)\omega^2 - \frac{1}{\beta}\omega^2(a+b)^2(\tau_1 + \tau_2)^2 - \frac{\omega^4(a+b)^2(\tau_1 - \tau_2)^2}{(\omega^2 - 2\alpha)\beta} - \frac{2\omega^4(a+b)^2}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{(\sin^2 v_n \tau_1 + \sin^2 v_n \tau_2)}{v_n^2(v_n^2 + \omega^2 + \xi_n)} + \frac{(\sin v_n \tau_1 - \sin v_n \tau_2)^2}{v_n^2(v_n^2 + \omega^2 - 2\alpha)} \right], \quad (14)$$

где  $\xi_n$  определяется соотношением (12).

Ниже мы используем следующие обозначения:

$$\varepsilon = \varepsilon^* \omega = (\tau_1 - \tau_2) \omega, \quad \tau = 2\tau^* \omega = (\tau_1 + \tau_2) \omega, \quad \beta^* = \beta \omega / 2,$$

$$\alpha^* = 2\alpha / \omega^2, \quad b^* = b / a,$$

и предполагаем, что  $b > a$ . В отсутствие взаимодействия с осцилляторами среды, т.е. при  $\xi_n = 0$ , действие (14) как функция параметров  $\varepsilon$  и  $\tau$  принимает вид

$$S = \frac{(a+b)^2 \omega}{2} \left\{ \frac{4a\tau}{a+b} - \frac{\tau}{a+b} \left( 1 + \frac{1}{1-\alpha^*} \right) + \frac{(\tau-|\varepsilon|)\alpha^*}{1-\alpha^*} + \coth \beta^* - \right. \\ \left. - \sinh^{-1} \beta^* \left[ \cosh(\beta^* - \tau) \cosh \varepsilon + \cosh(\beta^* - \tau) - \cosh(\beta^* - |\varepsilon|) \right] - \right. \\ \left. - (1-\alpha^*)^{-3/2} \left( -\coth(\beta\sqrt{1-\alpha^*}) + \sinh^{-1}(\beta\sqrt{1-\alpha^*}) \right) \times \right. \\ \left. \times \left\{ \cosh \left[ (\beta^* - \tau)\sqrt{1-\alpha^*} \right] \left[ \cosh(\varepsilon\sqrt{1-\alpha^*}) - 1 \right] + \cosh \left[ (\beta^* - |\varepsilon|)\sqrt{1-\alpha^*} \right] \right\} \right\}. \quad (15)$$

Как только траектория найдена, уравнения (13) могут быть представлены в следующей форме:

$$\sinh \varepsilon \left[ \cosh \tau \coth \beta^* - \sinh \tau - \coth \beta^* \right] + \\ + \frac{1}{1-\alpha^*} \sinh(\varepsilon\sqrt{1-\alpha^*}) \left[ \cosh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) \times \right. \\ \left. \times \coth(\beta^*\sqrt{1-\alpha^*}) - \sinh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) + \coth(\beta^*\sqrt{1-\alpha^*}) \right] = 0; \\ 3 - \frac{4}{1+b^*} - \frac{1}{1-\alpha^*} + \cosh \varepsilon \left[ \sinh \tau \coth \beta^* - \cosh \tau - 1 \right] + \sinh \tau \coth \beta^* - \cosh \tau + \\ + \frac{1}{1-\alpha^*} \cosh(\varepsilon\sqrt{1-\alpha^*}) \left[ \sinh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) \coth(\beta^*\sqrt{1-\alpha^*}) - \cosh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) + 1 \right] - \\ - \frac{1}{1-\alpha^*} \left[ \sinh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) \coth(\beta^*\sqrt{1-\alpha^*}) - \cosh(\tau\sqrt{1-\alpha^*}) \right] = 0. \quad (16)$$

Как было проанализировано нами в работе [3], решение этой системы и позволяет выявить бифуркацию  $2D$ -туннельных траекторий, т.е. при определенном значении температуры  $\beta^*$ , либо параметра асимметрии потенциала, связанного с величиной приложенного электрического поля  $b^* = b/a$ , либо коэффициента взаимодействия  $\alpha^* = 2\alpha/\omega^2$  (где  $\alpha = \frac{e^2}{\varepsilon\varepsilon_0 R_0^3}$  зависит, в част-

ности, от относительной диэлектрической проницаемости среды; проблема изучения  $2D$ -бифуркаций с диссипацией при изменении параметра  $\varepsilon$  может представлять отдельный интерес). Численный анализ системы (16) позволяет также выявить тонкую структуру перехода в окрестности точки бифуркации, а именно режим квантовых биений для параллельного переноса туннелиру-

ющих частиц. В итоге вероятность  $2D$ -туннелирования с экспоненциальной точностью определяется как  $\Gamma = \exp(-S)$ , где  $S$  задается выражением (15) с учетом решения системы (16). Поскольку нас интересует качественное сравнение с имеющимися туннельными ВАХ для системы «игла кантилевера – нанокластер из золота», мы интересуемся зависимостью  $\Gamma$  от параметра асимметрии  $b^* = b/a$ . Результат сравнения этой теоретической кривой с экспериментальной ВАХ приведен в работе [15]. Но необходимо учесть, что в целом мы рассматриваем две области изменения электрического поля: при положительном напряжении с реализацией режима  $2D$ -бифуркации; при отрицательном напряжении с достижением симметричного потенциала, что в случае синхронного туннельного переноса по параллельным координатам дает в удвоенном предэкспоненциальном факторе особенность типа единичного пика в этом случае.

Условия применимости рассматриваемой модели обусловлены приближением разреженного газа пар «инстантон – антиинстантон» и обсуждались в [2–8]. В рассматриваемой модели может происходить подавление кулоновских эффектов, если стартовая энергия частицы в КТ существенно превышает энергию кулоновского отталкивания:  $U_0 \gg \frac{e^2}{a_0 + b_0}$ .

Таким образом, обобщая результаты работ [3, 15], мы приходим к качественному сравнению теоретических кривых для вероятности диссипативного  $2D$ -туннелирования как функции приложенного электрического поля с учетом точки бифуркации (при положительном напряжении) и наличия единичного пика в случае симметричного потенциала (при отрицательном напряжении) с отдельными экспериментальными ВАХ для системы «игла платинированного кантилевера – квантовая точка (нанокластер из золота)», полученными группой соавторов из Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского. Эти результаты приведены в работе [15]

Экспериментальная реализация  $2D$ -бифуркаций рассматривалась в структурах с диэлектрической матрицей, относительная диэлектрическая проницаемость которой лежала в диапазоне от 1,5 до 4. Для теоретического обоснования возможности наблюдения  $2D$ -бифуркаций при таких параметрах среды была построена фазовая диаграмма реализации  $2D$ -бифуркаций в зависимости от температуры, величины электрического поля (точнее перенормированного параметра асимметрии потенциала, слабо нелинейно зависящего от величины поля) и величины относительной диэлектрической проницаемости среды. Соответствующая фазовая диаграмма представлена на рис. 1.

Аналогичная фазовая диаграмма, где в качестве одного из управляющих параметров вместо относительной диэлектрической проницаемости выбирается параметр взаимодействия туннелирующих частиц  $\alpha$ , представлена на рис. 2.

Соответствующие плоские сечения фазовых диаграмм для зависимостей влияния относительной диэлектрической проницаемости среды представлены на рис. 3 и 4. На рис. 5 представлена зависимость вероятности туннелирования от величины относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды при различных значениях внешнего электрического поля. Из этих рисунков видно, что с ростом поля диапазон значений относительной

диэлектрической проницаемости, при которых реализуется режим  $2D$ -туннельных бифуркаций в пределе слабой диссипации, значительно возрастает.

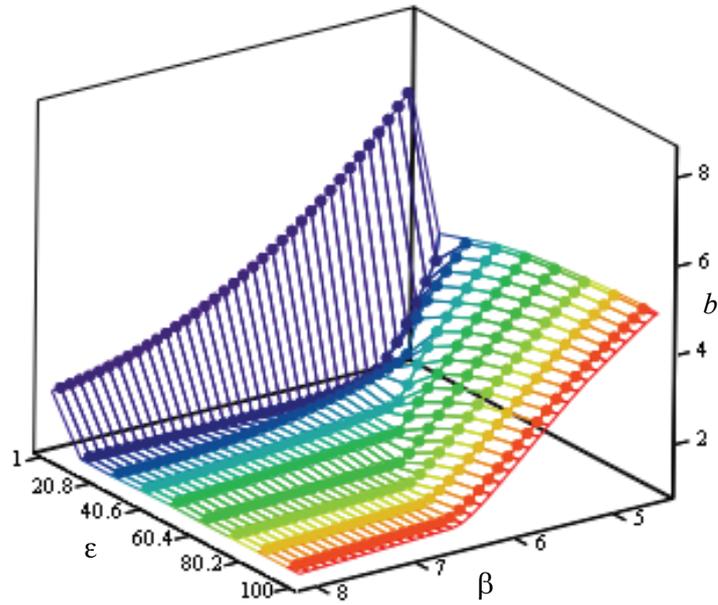


Рис. 1. Фазовая диаграмма реализации  $2D$ -бифуркаций относительно параметров температуры, величины электрического поля и относительной диэлектрической проницаемости среды

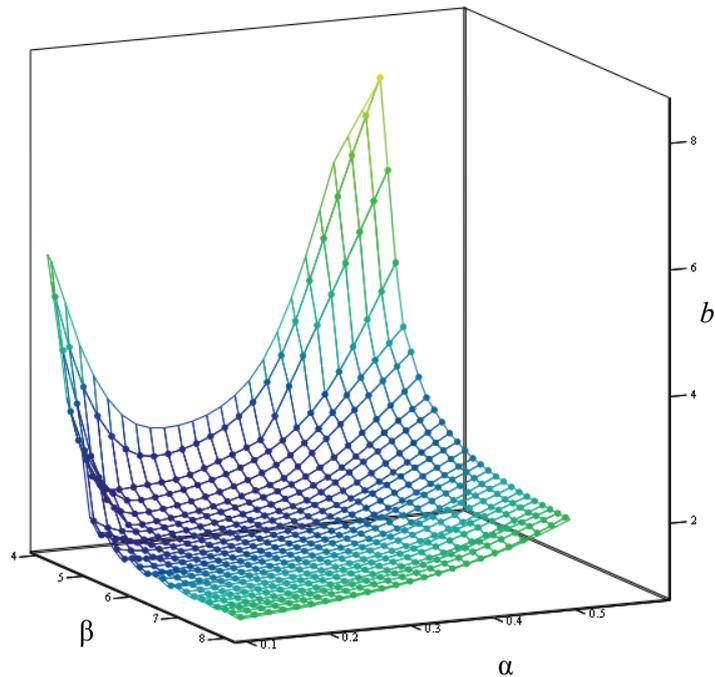


Рис. 2. Фазовая диаграмма реализации  $2D$ -бифуркаций относительно параметров температуры, величины электрического поля и параметра взаимодействия туннелирующих частиц

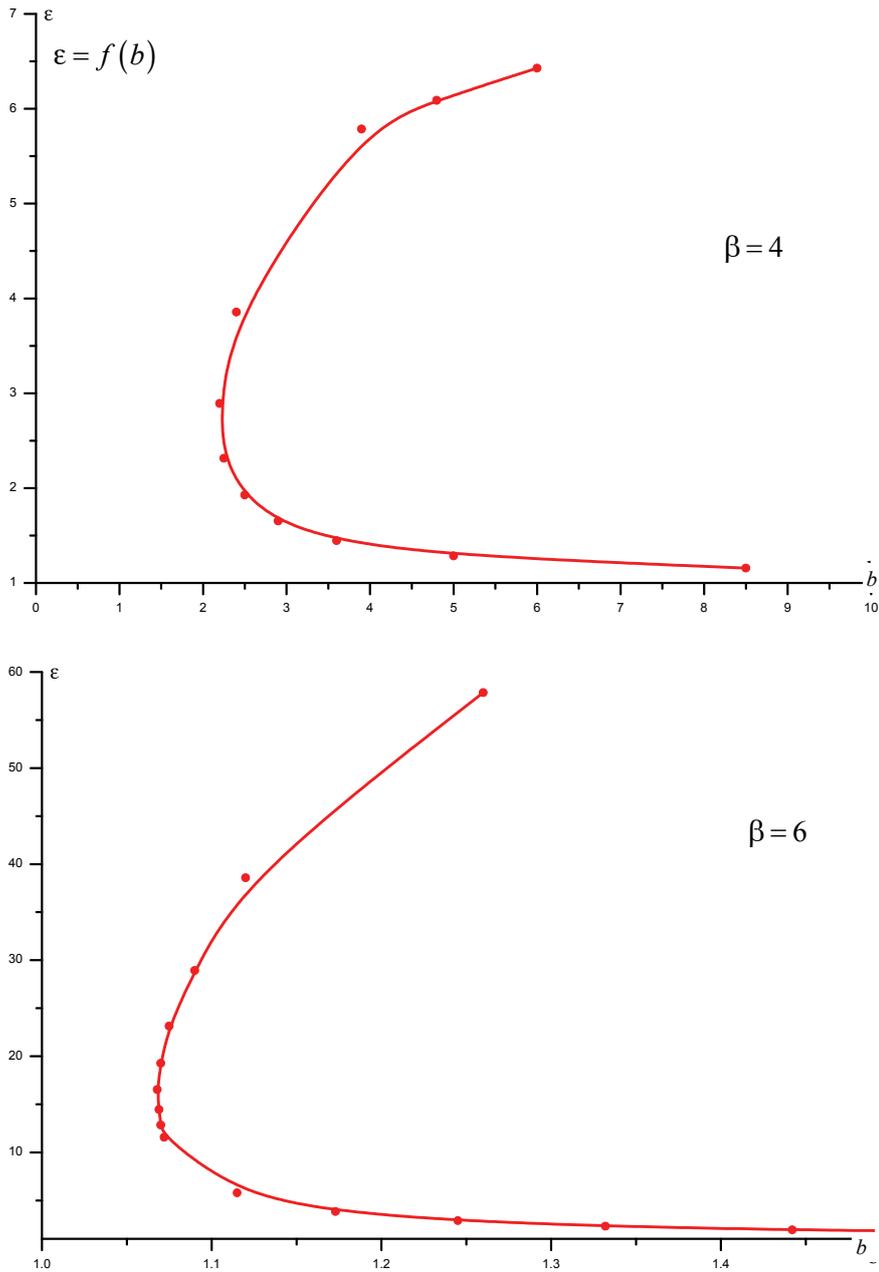


Рис. 3. Плоские сечения фазовой диаграммы  $2D$ -бифуркаций в переменных относительной диэлектрической проницаемости и внешнего электрического поля при различных значениях обратной температуры

На рис. 6 представлена зависимость вероятности диссипативного туннелирования от величины обратной температуры. Видно, что с понижением температуры при некотором критическом значении происходит смена режима туннелирования с синхронного на асинхронный (соответствующая критическая точка определяет режим  $2D$ -бифуркации).

На рис. 7. представлена зависимость вероятности туннелирования от величины относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды–

термостата, при этом демонстрируется ограниченный диапазон значений относительной диэлектрической проницаемости, в котором реализуется асинхронный туннельный перенос и режим  $2D$ -бифуркаций.

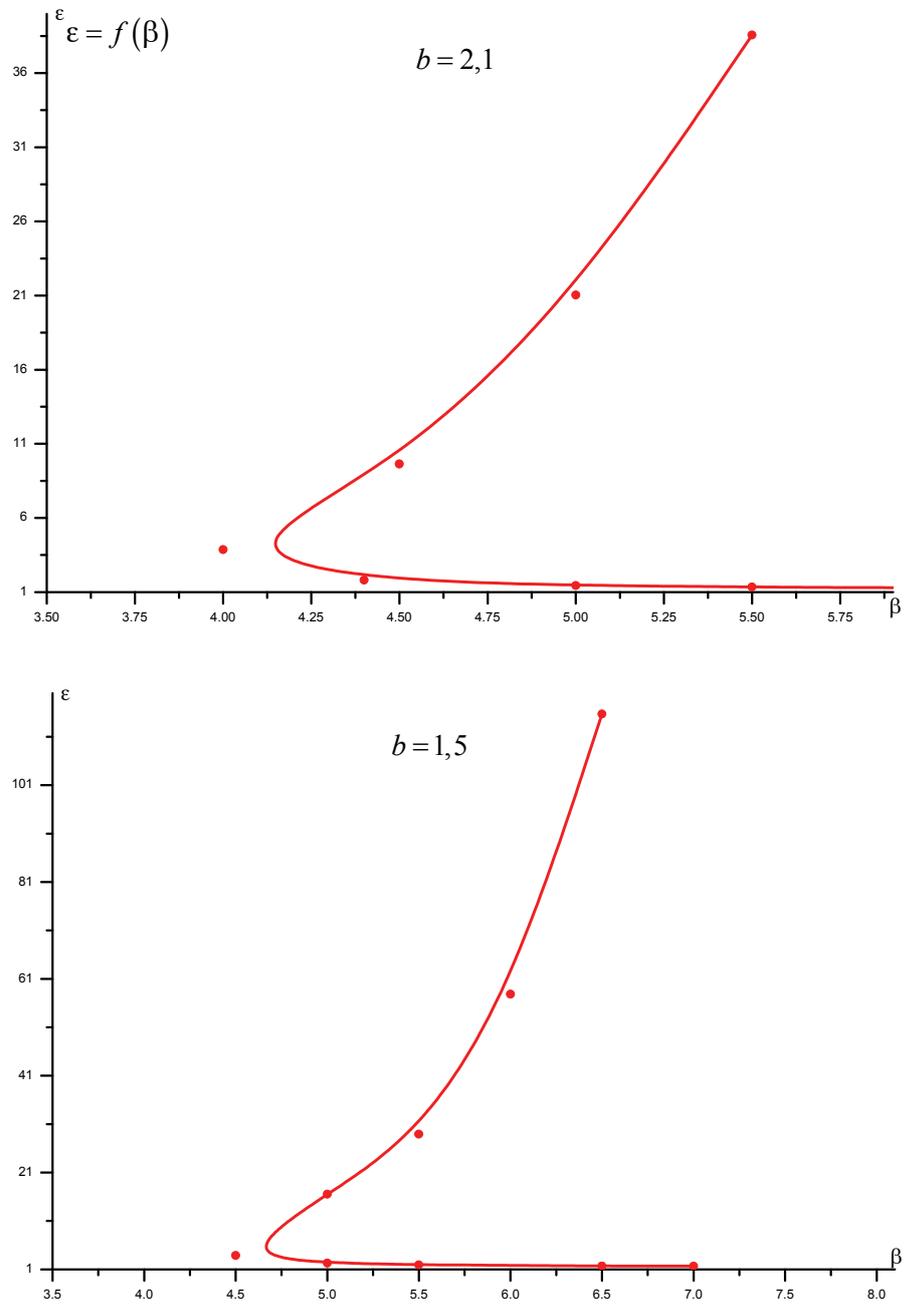


Рис. 4. Плоские сечения фазовой диаграммы  $2D$ -бифуркаций в переменных относительной диэлектрической проницаемости и обратной температуры при различных значениях параметра асимметрии потенциала, слабо нелинейно зависящего от внешнего электрического поля

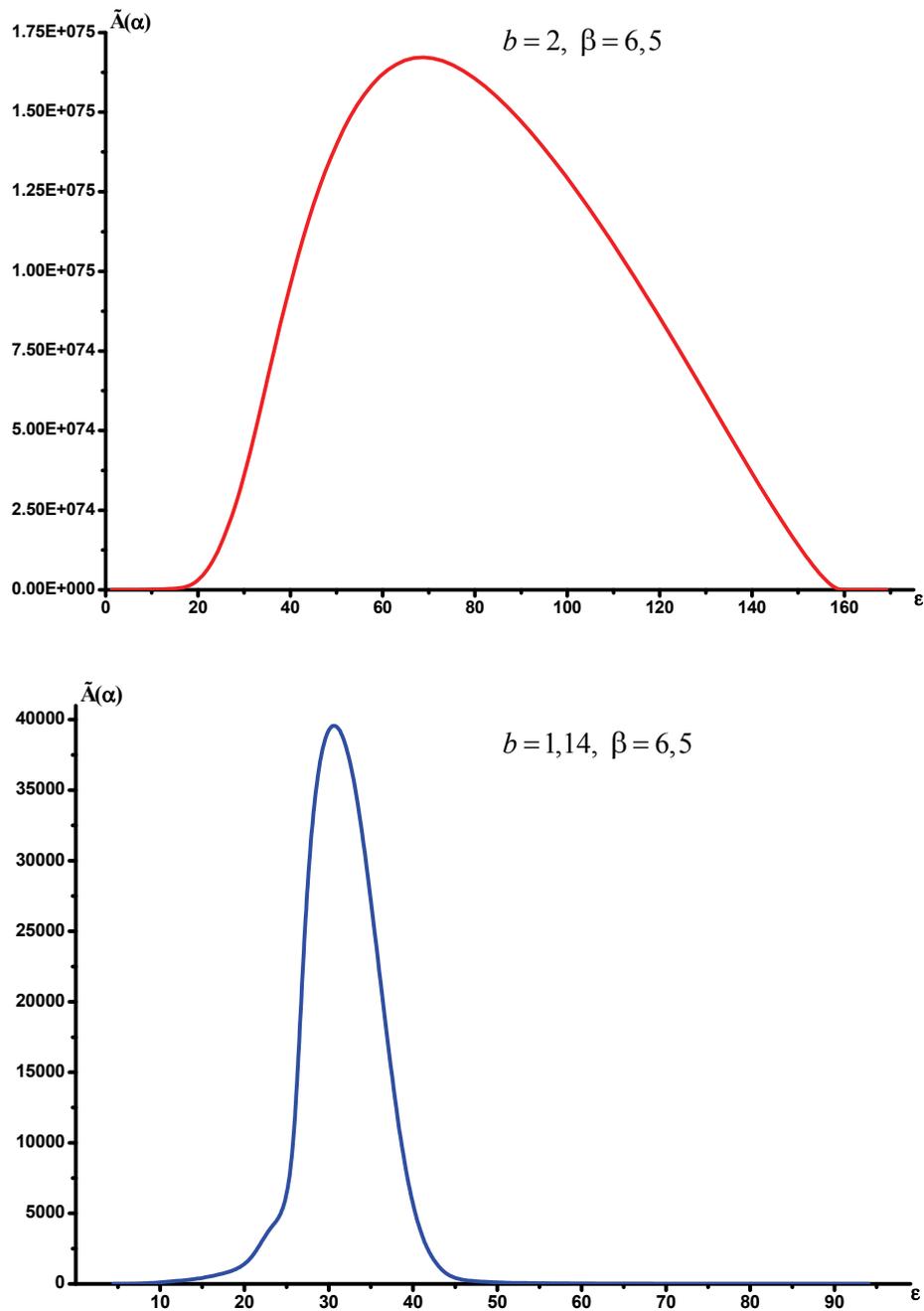


Рис. 5. Зависимость вероятности туннелирования от величины относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды при различных значениях внешнего электрического поля

Таким образом, выявлена существенная роль относительной диэлектрической проницаемости среды на эффект  $2D$ -бифуркаций при определенных значениях температуры и внешнего электрического поля, а также показано, что эффект  $2D$ -бифуркаций возможен при экспериментально реализуемых значениях относительной диэлектрической проницаемости от 1,5 до 4.

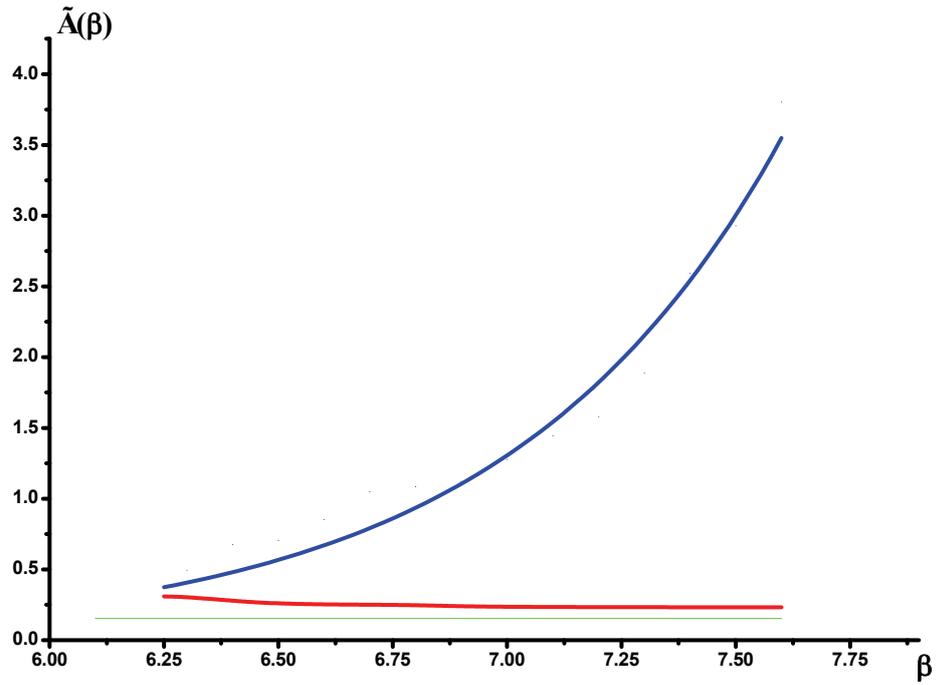


Рис. 6. Зависимость вероятности туннелирования от величины обратной температуры при фиксированном значении относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды

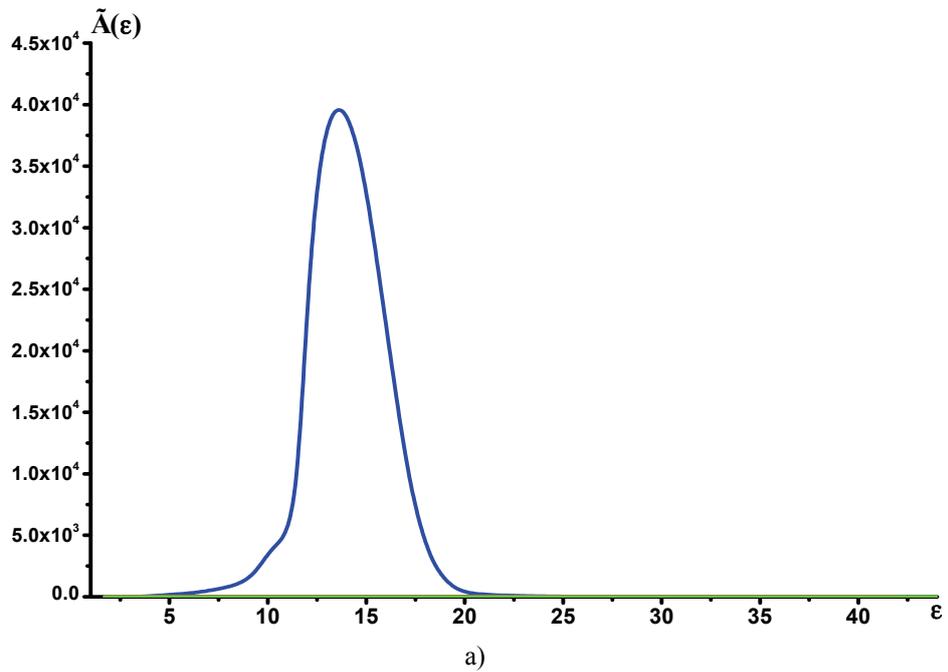


Рис. 7. Зависимость вероятности туннелирования от величины относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды: а – кривая демонстрирует реализацию режима  $2D$ -бифуркаций (асинхронный туннельный перенос); б – кривая отвечает синхронному туннельному переносу

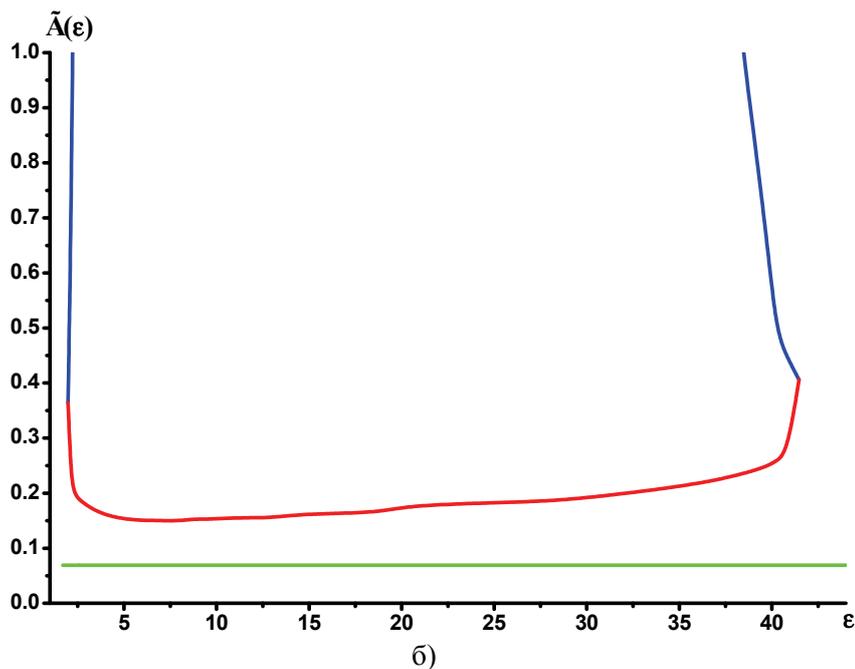


Рис. 7. Окончание

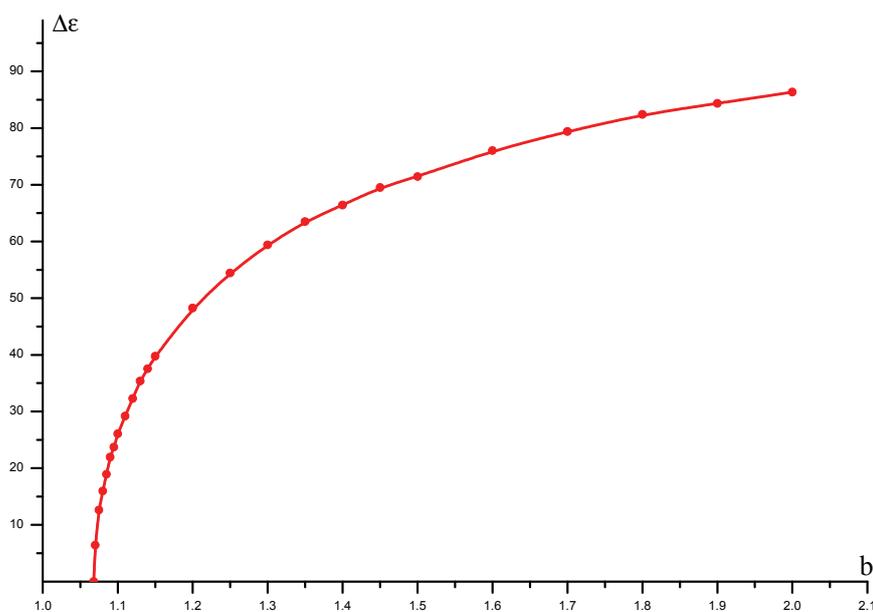


Рис. 8. Зависимость диапазона значений относительной диэлектрической проницаемости матрицы среды–термостата, в котором реализуется режим  $2D$ -туннельных бифуркаций, от величины напряженности внешнего электрического поля

#### Список литературы

1. **Ивлев, Б. И.** Распад метастабильных состояний при наличии близких подбарьерных траекторий / Б. И. Ивлев, Ю. Н. Овчинников // ЖЭТФ. – 1987. – Т. 93, № 2 (8). – С. 668–679.

2. **Dakhnovskii, Yu. I.** Tunneling of two interacting particles: Transition between separate and cooperative tunneling / Yu. I. Dakhnovskii, M. B. Semenov // *J. Chem. Phys.* – 1989. – V. 91, № 12. – P. 7606–7611.
3. **Aringazin, A. K.** Two-dimensional tunnel correlations with dissipation / A. K. Aringazin et al. // *Physical Review B.* – 2003. – V. 68. – P. 155426-1–155426-12.
4. **Benderskii, V. A.** Competing tunneling trajectories in a 2D potential with variable topology as a model for quantum bifurcations / V. A. Benderskii et al. // *Phys. Rev. E.* – 2003. – V. 67. – P. 026102.
5. Transfer processes in low-dimensional systems : коллективная моногр. [memorial collection of articles, dedicated to prof. A. A. Ovchinnikov and A. I. Larkin's memory. Publication of this book was supported by Nobel prize winner – 2003. prof. A. J. Leggett] / под ред. Ю. И. Дахновского, В. Д. Кревчика, В. Я. Кривнова, М. Б. Семенова, К. Yamamoto. – Токио, Japan : UT Research Institute Press, 2005. – 690 p.
6. Принципы управляемой модуляции низкоразмерных структур : монография / А. А. Овчинников и др. – М. : Изд-во УНЦ ДО, 2003. – 510 с.
7. **Жуковский, В. Ч.** Изучение управляемости туннелирования в структурах типа «квантовая точка – квантовая яма» или «квантовая молекула» / В. Ч. Жуковский и др. // *Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия.* – 2006. – Вып. 3. – С. 24–27.
8. **Жуковский, В. Ч.** Изучение управляемости диссипативного туннелирования в системах взаимодействующих квантовых молекул / В. Ч. Жуковский и др. // *Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия.* – 2007. – Вып. 2. – С. 10–14.
9. **Овчинников, Ю. Н.** Проводимость гранулированных металлических пленок / Ю. Н. Овчинников // *ЖЭТФ.* – 2007. – Т. 131, № 2. – С. 286–290.
10. **Ullien, D.** The effect of the number of parallel DNA molecules on electric charge transport through “standing DNA” / D. Ullien, H. Cohen, D. Porath // *Nanotechnology.* – 2007. – V. 18, № 42. – P. 424015(1–4).
11. **Louis, A. A.** Atomic tunneling from a Scanning-Tunneling or Atomic-Force Microscope tip: Dissipative quantum effects from phonons / A. A. Louis, J. P. Sethna // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – V. 74, № 8. – P. 1363-1366.
12. **Yanagi, H.** Nanofabrication of gold particles in glass films by AFM-assisted local reduction / H. Yanagi, T. Ohno // *Langmuir.* – 1999. – V. 15, № 14. – P. 4773–4776.
13. **Вычков, А. М.** 0.4 and 0.7 conductance anomalies in quantum point contacts / A. M. Vyckov, T. M. Stace // *Nanotechnology.* – 2007. – V. 18. – P. 185403-1–185403-5.
14. **Антонов, Д. А.** Резонансное туннелирование электронов через нанокластеры, сформированные в стабилизированном диоксиде циркония методом ионной имплантации / Д. А. Антонов и др. // *Вестник ННГУ. Серия «Физика твердого тела».* – 2007. – № 3. – С. 55–60.
15. **Жуковский, В. Ч.** Управляемое диссипативное туннелирование во внешнем электрическом поле / В. Ч. Жуковский и др. // *Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия.* – 2009. – Вып. 1. – С. 27–31.

---

**Кревчик Владимир Дмитриевич**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики, Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Krevchik Vladimir Dmitrievich**  
Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of physics, Penza State University

**Семенов Михаил Борисович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра физики,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Semenov Mikhail Borisovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, sub-department  
of physics, Penza State University

**Смирнов Юрий Геннадьевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
математики и суперкомпьютерного  
моделирования, Пензенский  
государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

**Smirnov Yury Gennadyevich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of mathematics and supercomputer  
modeling, Penza State University

**Зайцев Роман Владимирович**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра физики,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Zaytsev Roman Vladimirovich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of physics,  
Penza State University

**Рудин Вадим Александрович**

студент, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Rudin Vadim Alexandrovich**

Student, Penza State University

**Кревчик Павел Владимирович**

студент, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Krevchik Pavel Vladimirovich**

Student, Penza State University

**Гаврина Зоя Алексеевна**

соискатель, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Gavrina Zoya Alekseevna**

Applicant, Penza State University

---

УДК 539.2:541.117

**Кревчик, В. Д.**

**Влияние диэлектрической матрицы на 2D-туннельные бифуркации в условиях внешнего электрического поля / В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, Ю. Г. Смирнов, Р. В. Зайцев, В. А. Рудин, П. В. Кревчик, З. А. Гаврина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 1 (17). – С. 140–153.**

## **Вниманию авторов!**

Редакция журнала «Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки» приглашает специалистов опубликовать на его страницах оригинальные статьи, содержащие новые научные результаты в области математики, физики, механики, а также обзорные статьи по тематике журнала.

Статьи, ранее опубликованные, а также принятые к опубликованию в других журналах, редколлегией не рассматриваются.

Редакция принимает к рассмотрению статьи, подготовленные с использованием текстового редактора Microsoft Word for Windows версий не выше 2003.

Необходимо представить статью в электронном виде (VolgaVuz@mail.ru, дискета 3,5", CD-диск) и дополнительно на бумажном носителе в двух экземплярах.

Оптимальный объем рукописи 10–14 страниц формата А4. Основной шрифт статьи – Times New Roman, 14 pt через полуторный интервал. Тип файла в электронном виде – RTF.

Статья **обязательно** должна сопровождаться индексом УДК, краткой аннотацией и ключевыми словами **на русском и английском языках**.

Рисунки и таблицы должны быть размещены в тексте статьи и представлены в виде отдельных файлов (растровые рисунки в формате TIFF, BMP с разрешением 300 dpi, векторные рисунки в формате Corel Draw с минимальной толщиной линии 0,75 pt). Рисунки должны сопровождаться подрисуночными подписями.

Формулы в тексте статьи выполняются в редакторе формул Microsoft Word Equation, версия 3.0 и ниже. Символы греческого и русского алфавита должны быть набраны прямо, нежирно; латинского – курсивом, нежирно; обозначения векторов и матриц прямо, жирно; цифры – прямо, нежирно. Наименования химических элементов набираются прямо, нежирно. Эти же требования **необходимо** соблюдать и в рисунках. Допускается вставка в текст специальных символов (с использованием шрифтов Symbol).

В списке литературы **нумерация источников** должна соответствовать **очередности ссылок** на них в тексте ([1], [2], ...). Номер источника указывается в квадратных скобках. В списке указывается:

- для книг – фамилия и инициалы автора, название, город, издательство, год издания, том, количество страниц;
- для журнальных статей, сборников трудов – фамилия и инициалы автора, название статьи, полное название журнала или сборника, серия, год, том, номер, выпуск, страницы;
- для материалов конференций – фамилия и инициалы автора, название статьи, название конференции, время и место проведения конференции, город, издательство, год, страницы.

В конце статьи допускается указание наименования программы, в рамках которой выполнена работа, или наименование фонда поддержки.

К материалам статьи **должна** прилагаться информация для заполнения учетного листа автора: фамилия, имя, отчество, место работы и должность, ученая степень, ученое звание, адрес, контактные телефоны (желательно сотовые), e-mail.

Плата с аспирантов за публикацию рукописей не взимается.

Рукопись, полученная редакцией, не возвращается.

Редакция оставляет за собой право проводить редакторскую и доредакторскую правку текстов статей, не изменяющую их основного смысла, без согласования с автором.

**Статьи, оформленные без соблюдения приведенных выше требований, к рассмотрению не принимаются.**