

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 1 (33)

2015

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

<i>Романов Д. С., Романова Е. Ю.</i> О единичных проверяющих тестах для схем переключательного типа.....	5
<i>Спиридонов А. О., Карчевский Е. М., Носич А. И.</i> Граничные интегральные уравнения Мюллера в спектральной теории диэлектрических волноводов	24
<i>Алехина М. А., Каргин С. П.</i> Асимптотически оптимальные по надежности схемы в базисе Россера – Туркетта в P_4	37
<i>Ложкин С. А., Коноводов В. А.</i> О сложности формул алгебры логики в некоторых полных базисах, состоящих из элементов с прямыми и итеративными входами	54
<i>Кафтан Д. В.</i> О нижней оценке функции Шеннона длины сертификата повторности булевых функций в одном семействе базисов	68
<i>Геращенко С. И., Геращенко С. М., Кучумов Е. В.</i> Анализ особенностей системы интегродифференциальных уравнений, описывающих состояние медико-биологических объектов с ионным типом проводимости	78
<i>Валовик Д. В., Медведев М. Ю., Смирнов Ю. Г., Цупак А. А.</i> Существование и единственность решения задачи дифракции электромагнитной волны на системе непересекающихся тел и экранов	89
<i>Тактаров Н. Г., Рунова О. А.</i> Распад цилиндрического столба магнитной жидкости с неоднородным пористым ядром	98

ФИЗИКА

<i>Кревчик В. Д., Разумов А. В., Будянский П. С.</i> Диамагнетизм двухэлектронных примесных центров в полупроводниковых квантовых точках	110
<i>Браже Р. А., Савин А. Ф.</i> Математическое моделирование спиральных супракристаллических нанотрубок	120
<i>Браже Р. А., Мефтахутдинов Р. М., Фатхутдинова К. Х.</i> Зонная структура углеродных и кремниевых 2D-супракристаллов	130

Макеева Г. С., Голованов О. А. Электродинамический расчет комплексного коэффициента распространения электромагнитной волны в волноведущей структуре «углеродная нанотрубка – графен» в терагерцовом и инфракрасном диапазонах	140
Панькин Н. А., Мишкин В. П., Окин М. А., Сизачев А. Ф. (Ti,Al)-композиционные материалы, полученные прессованием с последующим спеканием на воздухе. Структура и свойства	156
Силантьев А. В. Димер в модели Хаббарда	168

**UNIVERSITY PROCEEDINGS
VOLGA REGION
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

№ 1 (33)

2015

CONTENT

MATHEMATICS

Romanov D. S., Romanova E. Yu. On single detecting test sets for circuits of switching type	5
Spiridonov A. O., Karchevskiy E. M., Nosich A. I. Muller boundary integral equations in the spectral theory of dielectric waveguides	24
Alekhina M. A., Kargin S. P. Asymptotic reliability-optimal circuits in the Rosser-Turkett basis in P_4	37
Lozhkin S. A., Konovodov V. A. On logic algebra formulas' complexity in some complete bases consisting of elements with both direct and iterative inputs	54
Kaftan D. V. On the lower bound of the Shannon function for read-many certificate length in one base family	68
Gerashchenko S. I., Gerashchenko S. M., Kuchumov E. V. Analysis of special aspects of the integrodifferential equation system describing biomedical objects' condition with ionic conduction	78
Valovik D. V., Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. Existence and unicity of the solution of the diffraction problem for an electromagnetic wave on a system of non-intersecting bodies and screens	89
Taktarov N. G., Runova O. A. Breakup of a cylindrical column of magnetic fluid with a non-homogeneous porous core	98

PHYSICS

Krevchik V. D., Razumov A. V., Budyanskiy P. S. Diamagnetism of dielectronic impurity centers in semiconductor quantum dots	110
Brazhe R. A., Savin A. F. Mathematical modeling of the coiled supracrystalline nanotubes	120
Brazhe R. A., Meftakhutdinov R. M., Fatkhutdinova K. Kh. Band structures of carbon and silicon 2D supracrystals	130
Makeeva G. S., Golovanov O. A. Electrodynamic calculation of a complex coefficient of electromagnetic wave propagation in the waveguiding structure "carbon nanotube - graphene" in terahertz and infrared ranges	140

<i>Pan'kin N. A., Mishkin V. P., Okin M. A., Sigachev A. F.</i>	
(Ti,Al)-composite materials, obtained by pressing with further sintering in the open air. Structure and properties	156
<i>Silant'ev A. V.</i> Dimer in the Hubbard model	168

УДК 519.718

Д. С. Романов, Е. Ю. Романова

О ЕДИНИЧНЫХ ПРОВЕРЯЮЩИХ ТЕСТАХ ДЛЯ СХЕМ ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЬНОГО ТИПА¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Тестирование дискретных моделей схем переключательного типа – это важная теоретическая задача, имеющая практические приложения к тестированию и верификации сверхбольших интегральных схем. В качестве класса управляющих систем в основном рассматривается класс так называемых обобщенных итеративных контактных схем, содержащий внутри себя классические контактные схемы, но допускающий использование суперпозиций. Целью данной работы является демонстрация возможности построения (для произвольной, отличной от константы булевой функции), допускающей короткий единичный проверяющий тест схемы, реализующей или моделирующей эту функцию (в последнем случае схема реализует функцию после подстановки вместо некоторых входных переменных констант).

Материалы и методы. При получении основных результатов использовались методы синтеза схем, основанных на разложении булевой функции в полином Жегалкина.

Результаты. Устанавливается, что для произвольной, отличной от константы булевой функции f , зависящей от n переменных, существуют тестопригодные реализующие функцию f обобщенные итеративные контактные схемы, допускающие: а) единичный проверяющий тест замыкания (размыкания) длины $O(1)$; б) единичный проверяющий тест длины $O(n)$, а также имеются тестопригодные моделирующие функцию f обобщенная итеративная контактная схема и контактная схема, допускающие единичные проверяющие тесты длин $O(1)$.

Ключевые слова: булева функция, контактная схема, обобщенная итеративная контактная схема, проверяющий тест.

D. S. Romanov, E. Yu. Romanova

ON SINGLE DETECTING TEST SETS FOR CIRCUITS OF SWITCHING TYPE

Abstract.

Background. Testing of discrete models of switching-type circuits is an important theoretical problem with applications to testing and verification of VLSI. The article considers a class of so-called generalized iterative switching circuits (GISC). This class consists of classical switching circuits (SC), however, it allows the usage of superpositions. The aim of this work is to demonstrate that for an arbitrary nonconstant Boolean function it is possible to construct a circuit realizing or

¹ Финансирование работы осуществлялось в рамках проектов РФФИ № 15-01-07474-а и № 13-01-00958-а и Государственного задания № 2014/601 от 06.02.2014.

modeling this function (in the latter case the circuit realizes a function after substitution constants instead of some input variables), and allowing a small single detecting test set.

Materials and methods. The authors used circuit design methods based on the Zhegalkin polynomials.

Results. It has been established that for an arbitrary nonconstant Boolean function f depending on n variables there exist testable GISCs realizing f and admitting a) the single fault detecting test set (under homogeneous faults – closures or breakings) of power $O(1)$, b) the single fault detecting test set of power $O(n)$. Moreover, it has proved that for an arbitrary nonconstant Boolean function f depending on n variables there exist testable GISCs and SCs modeling f and admitting the single fault detecting test set of power $O(1)$.

Key words: boolean function, switching circuit, generalized iterative switching circuit, detecting test set.

Введение

В статье устанавливается, что для произвольной, отличной от константы булевой функции $f(x_1, \dots, x_n)$ существуют тестопригодные реализующие функцию $f(x_1, \dots, x_n)$ обобщенные итеративные контактные схемы, допускающие:

- а) единичный проверяющий тест замыкания (размыкания) длины $O(1)$;
- б) единичный проверяющий тест длины $O(n)$.

Также имеются тестопригодные моделирующие функцию f обобщенная итеративная контактная схема и контактная схема, допускающие единичные проверяющие тесты длин $O(1)$.

Все невведенные в работе определения (в частности, связанные с графами и контактными схемами) можно найти в книгах [1, 2]. Определим по аналогии с [2, с. 143–144] понятие обобщенной итеративной контактной схемы. Пусть $\Sigma = \Sigma(x_1, \dots, x_n; a; z_1, \dots, z_m)$ – контактная схема (КС) с входным полюсом a и выходными полюсами $z_1, \dots, z_m$, реализующая систему функций $(f_1(\tilde{x}^n), \dots, f_m(\tilde{x}^n))$ (здесь $f_k(\tilde{x}^n)$ – функция проводимости между входным полюсом a и выходным полюсом z_k , $k = \overline{1; m}$). Пусть контакты переменной x_i не встречаются ни на каких простых цепях, соединяющих входной полюс a с выходным полюсом z_j . Тогда применима операция *присоединения управляющей переменной x_i к выходу z_j* . Эта операция заключается в том, что вершина z_j исключается из числа выходных полюсов (и становится *итеративным полюсом*), ей приписывается символ новой *итеративной переменной u* , все контакты x_i заменяются на контакты u , а все контакты $\bar{x}_i$ заменяются на контакты $\bar{u}$ (переменная x_i перестает быть управляющей переменной в полученной схеме). Новая схема по сравнению со старой реализует между входным полюсом a и выходным полюсом z_k функцию, полученную из $f_k(\tilde{x}^n)$ подстановкой функции $f_j(\tilde{x}^n)$ вместо переменной x_j ($k \in \{1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, m\}$). Аналогично определяется операция присоединения в КС Σ управляющих переменных $x_{i_1}, \dots, x_{i_t}$ к выходам $z_{j_1}, \dots, z_{j_t}$ соответственно, при этом различ-

ные присоединяемые переменные должны присоединяться к различным выходам, и одна переменная может присоединяться лишь к одному выходу. Контакты каждой переменной x_{i_q} не должны встречаться ни на каких простых цепях, соединяющих входной полюс a с выходным полюсом z_{j_q} . Тогда для каждой пары (x_{i_q}, z_{j_q}) ($k = \overline{1; t}$) последовательно применяется операция присоединения управляющей переменной x_{i_q} к выходу z_{j_q} . При этом вершина z_{j_q} исключается из числа выходных полюсов и становится итеративным полюсом, ей приписывается символ новой *итеративной переменной* u_q , все контакты x_{i_q} заменяются на контакты u_q , а все контакты $\bar{x}_{i_q}$ заменяются на контакты $\bar{u}_q$ (переменная x_{i_q} перестает быть управляющей переменной в полученной схеме). Новая схема по сравнению со старой называется *обобщенной итеративной контактной схемой* (ОИКС) Σ' и реализует между входным полюсом a и выходным полюсом z_k функцию, полученную из $f_k(\tilde{x}^n)$ подстановкой функций $f_{j_1}(\tilde{x}^n), \dots, f_{j_t}(\tilde{x}^n)$ вместо переменных $x_{i_1}, \dots, x_{i_t}$ соответственно ($k \in \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{j_1, j_2, \dots, j_t\}$). Функционирование полученной схемы Σ' представляет собой систему булевых функций, реализуемых на ее выходах (т.е. систему функций проводимости между входным полюсом и каждым из выходных полюсов). Всякий объект, который невозможно построить указанным выше способом как обобщенную итеративную контактную схему, не может считаться обобщенной итеративной контактной схемой. В дальнейшем о каждом итеративном полюсе подсхемы, используемом вне подсхемы, мы будем говорить как о *выходном итеративном полюсе подсхемы*. Отметим, что отличие ОИКС от итеративных контактных схем (ИКС) состоит в том, что в ИКС все контакты присоединяемых к выходам управляющих переменных должны быть замыкающими (т.е. они не могут содержать отрицаний). В работе [3] получены асимптотические оценки высокой степени точности для функции Шеннона сложности реализации систем функций с помощью ИКС.

Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция, отличная от константы и зависящая от переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$ ($f \in P_2(n)$), S – двухполюсная КС или двухполюсная ОИКС (с одним входным и одним выходным полюсом; количество внутренних итеративных полюсов в ОИКС может быть произвольным), реализующая функцию f (т.е. функция проводимости между входным и выходным полюсами в схеме S равна функции f). Пусть на схему S действует источник неисправностей U , способный вызывать размыкания и замыкания контактов в схеме. Схема S называется *тестпригодной (относительно обнаружения неисправностей для источника неисправностей U)* тогда и только тогда, когда при любой неисправности схемы S , вызванной действием на нее источника U , полученная вследствие этой неисправности схема S' реализует функцию $f'(\tilde{x}^n)$, не равную f . Обозначим через W множество всех попарно неравных функций, каждая из которых может быть реализована в результате действия на схему S источника неисправностей U (в частности, $f \in W$).

Пусть в схеме S произошла неисправность и в неисправном состоянии схема стала реализовывать функцию $f'(\tilde{x}^n)$. Будем говорить, что данная неисправность в схеме S обнаруживается на наборе $\tilde{\alpha}^n$, если $f'(\tilde{\alpha}) \neq f(\tilde{\alpha})$. Множество T наборов значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$ называется *проверяющим (диагностическим) тестом* для схемы S относительно источника неисправностей U тогда и только тогда, когда для любой функции $f' \in W$ такой, что $f' \neq f$, найдется набор $\tilde{\alpha}$ из T , для которого выполнено неравенство $f'(\tilde{\alpha}) \neq f(\tilde{\alpha})$ (соответственно для любых двух функций f', f'' из W таких, что $f' \neq f''$, найдется набор $\tilde{\alpha}$ из T , для которого выполнено неравенство $f'(\tilde{\alpha}) \neq f''(\tilde{\alpha})$). Количество различных наборов в тесте T называется его *длиной* и обозначается через $l(T)$ или через $|T|$. Тест минимальной длины называется *минимальным*. Тест называется *полным*, если источник неисправностей может повреждать произвольное количество контактов в схеме, и *единичным*, если в схеме может быть поврежден не более чем один контакт. Будем говорить, что двухполюсная схема (КС или ОИКС), реализующая функцию $g(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+d+r})$, *моделирует функцию* $f(x_1, \dots, x_n)$, если существует такой набор булевых констант $(\alpha_1, \dots, \alpha_r)$, что $g(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+d}, \alpha_1, \dots, \alpha_r) = f(x_1, \dots, x_n)$. Минимально возможная величина r при этом называется *входной избыточностью моделирования функции* f схемой S .

Отметим, впрочем, что когда о последовательно-параллельной контактной схеме говорится, что она *моделирует формулу* в базисе $x \& y, x \vee y, \bar{x}$, в которой отрицания висят лишь над символами переменных, то это означает, что индуктивная склейка схемы осуществляется в соответствии с данной формулой; схема при этом реализует функцию, реализуемую формулой, см. [2]

Обозначим через $D_U(S)$ длину минимального проверяющего теста относительно источника неисправностей U в схеме S , через $D_U(f(\tilde{x}^n))$ (через $\hat{D}_U(f(\tilde{x}^n))$) – минимум величины $D_U(S)$ по всем тестопригодным относительно обнаружения неисправностей для источника неисправностей U реализующим (соответственно моделирующим) функцию $f(\tilde{x}^n)$ схемам S . Пусть $\hat{P}_2^n$ – множество всех булевых функций, существенно зависящих от всех своих переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$ (в частности, $\hat{P}_2^0 = \{0, 1\}$). Всюду в дальнейшем будем, не ограничивая общности, считать, что любая не равная тождественно константе функция $f(\tilde{x}^n)$ существенно зависит от всех своих переменных. Через $D_U(n)$ (через $\hat{D}_U(n)$) обозначим *функцию Шеннона* (соответственно, *слабую функцию Шеннона*) длины проверяющего теста относительно источника неисправностей U , т.е. функцию

$$D_U(n) = \max_{f(\tilde{x}^n) \in \hat{P}_2(n)} D_U(f(\tilde{x}^n)),$$

соответственно функцию

$$\hat{D}_U(n) = \max_{f(\tilde{x}^n) \in \hat{P}_2^n(n)} \hat{D}_U(f(\tilde{x}^n)).$$

Аналогично вводится функция Шеннона длины диагностического теста относительно источника неисправностей U . Верхний индекс (КС или ОИКС) в обозначении слабой или обычной функции Шеннона длины теста будет указывать на класс схем.

Первые оценки функций Шеннона длин тестов для контактных схем (которые являются частным случаем ОИКС) появились уже в работе С. В. Яблонского и И. А. Чегис [4]. Фактически, было доказано, что без требования тестопригодности схем функция Шеннона длины единичного диагностического (а, значит, и проверяющего) теста для двухполюсных контактных схем есть $O\left(\frac{2^n}{n}\right)$. Х. А. Мадатяном в работе [5], в частности, установлено,

что точное значение функции Шеннона длины полного диагностического теста для контактных схем равно 2^n , а в работе [6] доказано, что рост функции Шеннона длины единичного проверяющего теста для контактных схем ограничен величиной $O\left(\frac{2^n}{n\sqrt{n}}\right)$. Н. П. Редькиным доказано, что полный проверяющий

тест для контактных схем не обязан содержать все наборы и что соответствующая функция Шеннона не превосходит $\frac{15}{16} \cdot 2^n$ [7]. Им же было установлено [8], что функция Шеннона длины полного проверяющего теста замыкания в контактных схемах есть $O(2^{n/2})$, а также была получена нетривиальная верхняя оценка $O(2^{2n \log_2 n / (1+2 \log_2 n)})$ функции Шеннона длины полного проверяющего теста замыкания в контактных схемах. А. И. Рыбко в работе [9] предложил асимптотически оптимальный метод синтеза (2, 2)-КС таких, что для произвольной булевой функции f от n переменных и при $b = o\left(\sqrt{\frac{n}{\log_2 n}}\right)$ в КС между одной парой полюсов функция f моделируется (с входной избыточностью, не большей $2\left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor + 2$) подсхемой, корректирующей b замыканий, а вторая пара полюсов используется для тестирования так, что схема в целом допускает проверяющий тест замыкания, имеющий длину не более $2\left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor + 2$.

В работе [10] устанавливается, что для произвольной отличной от константы булевой функции $f(x_1, \dots, x_n)$ существует (допускающая единичный проверяющий тест линейной по n длины) тестопригодная схема:

а) трехполюсная контактная схема (с одним входным и двумя выходными полюсами), реализующая систему функций $(f, \bar{f})$;

б) двухполюсная контактная схема, реализующая функцию $f(x_1, \dots, x_n) \oplus x_{n+1}$.

В настоящей работе предлагаются новые верхние оценки обычной и слабой функций Шеннона длины единичного проверяющего теста для ОИКС, демонстрирующие легкотестируемость ОИКС в рамках задачи обнаружения одиночных неисправностей (замыканий или размыканий контактов).

Основными результатами данной статьи являются теоремы 1–4, доказываемые ниже, а также их следствия.

Опишем сначала некоторые двухполюсные КС, которые будут использоваться далее в качестве подсхем двухполюсных ОИКС.

Обозначим через $\Sigma_m(x_1, x_2, \dots, x_m)$ ($m \geq 2$) минимальную построенную по методу каскадов двухполюсную контактную схему счетчика четности $x_1 \oplus x_2 \oplus \dots \oplus x_m$ (см., например, рис. 3.6 в [2, с. 207]). Блоком в этой схеме считается нерасширяемая связная подсхема из контактов, управляемых одной переменной; число блоков указывается нижним индексом в названии схемы, названия блоков суть $B_1, B_2, \dots, B_m$. Блоки не объединяются и не меняют названий при отождествлениях или переименованиях переменных (и даже контактов) в схеме $\Sigma_m(x_1, x_2, \dots, x_m)$. Размыкающие контакты в этой схеме будут считаться изображаемыми горизонтально, а замыкающие – наклонно. Порядок переменных в названии схемы (здесь и далее) определяет, какая переменная участвует в управлении очередного блока в схеме (в дальнейшем будут рассматриваться и схемы, у которых в управлении одним блоком участвуют две переменные, но одна из них будет общей для всех таких блоков, – она будет в названии схемы указываться в конце списка переменных после точки с запятой). Опишем более подробно, как устроен блок B_i для переменной x_i в схеме $\Sigma_m(x_1, x_2, \dots, x_m)$ ($i = \overline{1; m}$). У блока B_i при $i = \overline{2; m-1}$ два входных (левый верхний и левый нижний) и два выходных (правый верхний и правый нижний) полюса. Два замыкающих (наклонных) контакта x_i соединяют левый верхний полюс блока B_i с правым нижним (первый контакт), а левый нижний – с правым верхним (второй контакт). Два размыкающих контакта $\bar{x}_i$ соединяют левый верхний полюс блока с правым верхним (первый контакт – верхний горизонтальный), а левый нижний полюс – с правым нижним (второй контакт – нижний горизонтальный). Блок B_1 таков: его левый (и единственный входной) полюс a' соединяется контактом $\bar{x}_1$ с правым нижним (одним из выходных) полюсом блока B_1 , а контактом x_1 – с правым верхним (вторым из выходных) полюсом блока B_1 . Блок B_m таков: его правый нижний (один из входных) полюс соединяется контактом x_m с левым (и единственным выходным) полюсом b' , а его правый верхний (один из входных) полюс соединяется контактом $\bar{x}_m$ с полюсом b' . Блоки соединяются так: правый верхний (соответственно правый нижний) полюс блока B_i отождествляется с левым верхним (соответственно левым нижним) полюсом блока B_{i+1} ($i = \overline{1, m-1}$). Вершина a' объявляется входным полюсом построенной схемы $\Sigma_m(x_1, x_2, \dots, x_m)$, а вершина b' – ее выходным полюсом. На рис. 1 изображена схема $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ с полюсами a, b' .

Схема $\Sigma'_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3; z_2)$ ($m \geq 1$) получается из схемы $\Sigma_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3)$ следующим образом: все верхние горизонтальные контакты блоков $B_2, \dots, B_{m+1}$ переименовываются в контакты $\bar{z}_2$, все нижние горизонтальные контакты этих блоков инвертируются (и оказываются контактами $x_1, \dots, x_m$), все наклонные контакты этих блоков переименовываются в контакты z_2 , оба контакта блока B_{m+2} инвертируются (и верхний становится контактом z_3 , а нижний – контактом $\bar{z}_3$). Легко видеть, что при $z_1 = z_2 = z_3 = 0$ схема $\Sigma'_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3; z_2)$ моделирует функцию, задаваемую монотонной конъюнкцией $x_1 \& x_2 \& \dots \& x_m$. На рис. 2 изображена схема $\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$ с полюсами a_i, b_i .

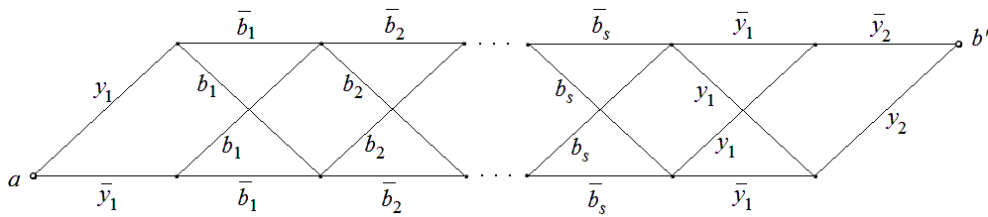


Рис. 1. Схема $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$

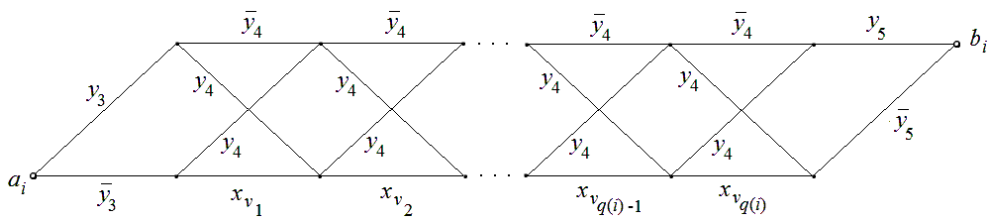


Рис. 2. Схема $\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$

Схема $\Sigma''_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3; z_2)$ ($m \geq 1$) получается из схемы $\Sigma_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3)$ следующим образом: все горизонтальные контакты блоков $B_2, \dots, B_{m+1}$ переименовываются в контакты $\bar{z}_2$, все наклонные контакты этих блоков, соединяющие левый нижний полюс блока с правым верхним, инвертируются (и оказываются контактами $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_m$), остальные наклонные контакты этих блоков переименовываются в контакты z_2 . Легко видеть, что при $z_1 = z_2 = z_3 = 0$ схема $\Sigma''_{m+2}(z_1, x_1, x_2, \dots, x_m, z_3; z_2)$ моделирует функцию, задаваемую отрицанием монотонной конъюнкцией: $\overline{x_1 \& x_2 \& \dots \& x_m} = \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \dots \vee \bar{x}_m$. На рис. 3 изображена схема $\Sigma''_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$ с полюсами a_i, b_i .

Лемма 1. Пусть $1 \leq v_1 < v_2 < \dots < v_q \leq n$. При нечетном q рассмотрим в качестве схем Σ', Σ'' двухполюсные КС $\Sigma'_{q+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_q}, y_5; y_4)$

и $\Sigma''_{q+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_q}, y_5; y_4)$ соответственно, при четном q рассмотрим в качестве схем Σ' , Σ'' двухполюсные КС $\Sigma'_{q+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_q}, y_6; y_4)$ и $\Sigma''_{q+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_q}, y_6; y_4)$ соответственно. Тогда найдутся 8 таких наборов значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n, y_3, y_4, y_5, y_6$ (переменные в наборах следуют в этом порядке, а значения всех переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$ на каждом из наборов совпадают), что:

1) эти наборы образуют единичный проверяющий тест для каждой из схем Σ' , Σ'' ;

2) на каждом из этих наборов проводимости схем Σ' , Σ'' различны, и при этом на четырех из этих наборов проводит схема Σ' и на других четырех из этих наборов проводит схема Σ'' .

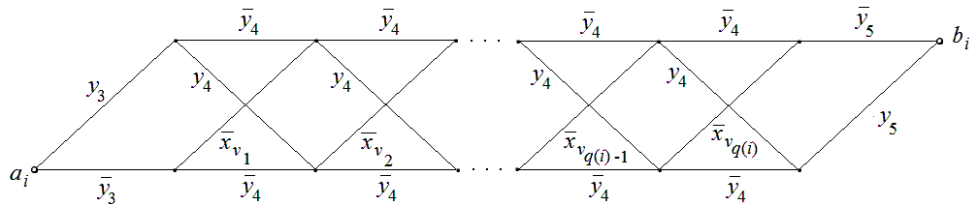


Рис. 3. Схема $\Sigma''_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$

Доказательство. Ввиду простоты рассматриваемых подсхем ограничимся перечислением самих восьми наборов и описанием обнаруживаемых ими одиночных неисправностей в схемах. В каждой из схем Σ' , Σ'' :

а) под цепью Z_1 будем понимать простую проводящую цепь, начинающуюся с контакта $\bar{y}_1$, содержащую все нижние горизонтальные контакты блоков $B_2, \dots, B_{m+1}$ и нижний контакт блока B_{m+2} ;

б) под цепью Z_2 будем понимать простую проводящую цепь, начинающуюся с контакта y_1 , содержащую все верхние горизонтальные контакты блоков $B_2, \dots, B_{m+1}$ и верхний контакт блока B_{m+2} ;

в) под цепью Z_3 будем понимать простую проводящую цепь, начинающуюся с контакта $\bar{y}_1$, состоящую в блоках $B_2, \dots, B_{m+1}$ только из наклонных контактов, а в блоке B_{m+2} содержащую тот контакт, который соединяет лежащий на этой цепи выходной полюс блока B_{m+1} с выходным полюсом схемы;

г) под цепью Z_4 будем понимать простую проводящую цепь, начинающуюся с контакта y_1 , состоящую в блоках $B_2, \dots, B_{m+1}$ только из наклонных контактов, а в блоке B_{m+2} содержащую тот контакт, который соединяет лежащий на этой цепи выходной полюс блока B_{m+1} с выходным полюсом схемы.

В табл. 1 в первом столбце приводятся сами эти наборы, во втором – значения функции проводимости схемы Σ' на этих наборах, в третьем перечисляются виды обнаруживаемых на этих наборах неисправностей схемы Σ' .

Таблица 1

$x_1 \dots x_n y_3 y_4 y_5 y_6$	h'	Обнаруживаемые неисправности
1 ... 1 0 0 0 0	1	размыкания всех контактов цепи Z_1
1 ... 1 1 0 1 1	1	размыкания всех контактов цепи Z_2
0 ... 0 0 1 1 0	1	размыкания всех контактов цепи Z_3
0 ... 0 1 1 0 1	1	размыкания всех контактов цепи Z_4
1 ... 1 1 0 0 0	0	замыкания контактов $\bar{y}_3, y_5, y_6$ и всех наклонных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
1 ... 1 0 0 1 1	0	замыкания контактов $y_3, \bar{y}_5, \bar{y}_6$ и всех наклонных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
0 ... 0 1 1 1 0	0	замыкания контактов $\bar{y}_3, \bar{y}_5, y_6$ и всех горизонтальных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
0 ... 0 0 1 0 1	0	замыкания контактов $y_3, y_5, \bar{y}_6$ и всех горизонтальных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$

Таблица 2 построена аналогично табл. 1, но описывает обнаружение неисправностей схемы Σ'' .

Таблица 2

$x_1 \dots x_n y_3 y_4 y_5 y_6$	h''	Обнаруживаемые неисправности
1 ... 1 0 0 0 0	0	замыкания контактов y_3, y_5, y_6 и всех наклонных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
1 ... 1 1 0 1 1	0	замыкания контактов $\bar{y}_3, \bar{y}_5, \bar{y}_6$ и всех наклонных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
0 ... 0 0 1 1 0	0	замыкания контактов $y_3, \bar{y}_5, y_6$ и всех горизонтальных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
0 ... 0 1 1 0 1	0	замыкания контактов $\bar{y}_3, y_5, \bar{y}_6$ и всех горизонтальных контактов в $B_2, \dots, B_{m+1}$
1 ... 1 1 0 0 0	1	размыкания всех контактов цепи Z_2
1 ... 1 0 0 1 1	1	размыкания всех контактов цепи Z_1
0 ... 0 1 1 1 0	1	размыкания всех контактов цепи Z_4
0 ... 0 0 1 0 1	1	размыкания всех контактов цепи Z_3

Первое утверждение леммы следует теперь из того, что в каждой таблице упомянуты как обнаруживаемые все возможные одиночные неисправности схем Σ' , Σ'' , а второе – из построчного сравнения таблиц. Лемма доказана.

Теорема 1. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция, отличная от константы. Тогда функцию $f(\tilde{x}^n)$ можно реализовать тестопригодной двух-полюсной ОИКС, допускающей:

а) единичный проверяющий тест размыкания, имеющий длину, не превосходящую 7;

б) единичный проверяющий тест замыкания, имеющий длину, не превосходящую 4.

Доказательство. Докажем утверждение пункта а. Построим для отличной от константы булевой функции $f(\tilde{x}^n)$ реализующую ее ОИКС Σ_f с одним входным и одним выходным полюсами следующим образом. Пусть в полиноме Жегалкина для функции f имеется s отличных от констант слагаемых $K_1, K_2, \dots, K_s$, являющихся монотонными конъюнкциями, а сам полином Жегалкина можно привести к виду $K_1 \oplus K_2 \oplus \dots \oplus K_s \oplus \beta_0$, где $\beta_0 \in \{0, 1\}$.

Для каждого слагаемого K_i ($i = \overline{1, s}$) полинома Жегалкина функции f строится своя подсхема $S(K_i)$ с входным полюсом a_i и выходным итеративным полюсом b_i . Пусть $K_i = x_{v_1} x_{v_2} \dots x_{v_{q(i)}}$, где $1 \leq v_1 < v_2 < \dots < v_{q(i)} \leq n$. Тогда КС $S(K_i)$ моделирует формулу $x_{v_1} x_{v_2} \dots x_{v_{q(i)}}$ и представляет собой цепочку замыкающих контактов.

Схема $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ с входным полюсом a_{s+1} и выходным итеративным полюсом b_{s+1} также является подсхемой ОИКС Σ_f .

Наконец, при $\beta_0 = 0$ (при $\beta_0 = 1$) к схеме Σ_f добавляется подсхема S с входным полюсом a_{s+2} и выходным полюсом b , моделирующая формулу $b_{s+1} \bar{y}_2 \vee \bar{b}_{s+1} y_2$ (соответственно моделирующая формулу $b_{s+1} y_2 \vee \bar{b}_{s+1} \bar{y}_2$).

Отметим, что у построенных подсхем $S(K_1), \dots, S(K_s), \Sigma_{s+3}(y_1, c_1, c_2, \dots, c_s, y_1, y_2)$, S пока нет попарно общих вершин. Для построения схемы Σ_f остается отождествить все входные полюсы $a_1, \dots, a_s, a_{s+1}, a_{s+2}$ во входной полюс a схемы Σ_f , а выходным полюсом этой схемы объявить полюс b . Легко видеть, что ОИКС Σ_f при отсутствии в ней неисправностей реализует функцию, равную f (переменные y_1, y_2 являются фиктивными).

Основная идея дальнейшего доказательства сводится к тому, что все одиночные размыкания контактов в подсхемах $S(K_1), S(K_2), \dots, S(K_s)$ схемы Σ_f обнаруживаются на одном наборе, а для обнаружения размыканий в двух оставшихся подсхемах достаточно добавить наборы, количество которых не превосходит константы.

Будем считать все двоичные наборы длины $n+2$ (в рамках дальнейшего доказательства теоремы) наборами значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2$, идущих в этом порядке.

Случай 1. Пусть s – четное число. Положим $\tilde{\alpha}_1 = (\tilde{1}^n, 0, 1)$, $\tilde{\alpha}_2 = (\tilde{1}^n, 1, 1)$, $\tilde{\alpha}_3 = (\tilde{0}^n, 0, 1)$, $\tilde{\alpha}_4 = (\tilde{0}^n, 1, 1)$. Пусть $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ – такой набор

значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$, что $f(\tilde{\alpha}) = \beta_0 \oplus 1$ (такой набор существует, так как функция f отлична от константы). Определим $\tilde{\alpha}_5 = (\tilde{\alpha}, 1, 0)$, $\tilde{\alpha}_6 = (\tilde{\alpha}, 0, 0)$.

Оказывается, на наборе $\tilde{\alpha}_1$ обнаруживаются все одиночные размыкания контактов в подсхемах $S(K_1), S(K_2), \dots, S(K_s)$ схемы Σ_f . Действительно, допустим, произошло размыкание какого-то контакта в подсхеме $S(K_i)$. На наборе $\tilde{\alpha}_1$ при отсутствии неисправностей на всех итеративных полюсах всех этих подсхем были единицы, при возникновении же указанного размыкания появится нуль на выходном итеративном полюсе неисправной подсхемы $S(K_i)$. В результате на наборе $\tilde{\alpha}_1$ на выходном итеративном полюсе подсхемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ и на выходе схемы Σ_f окажутся неверные значения, так что неисправность будет обнаружена.

Каждому из наборов $\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_6$ соответствует простая проводящая цепь в подсхеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$, соединяющая входной и итеративный выходной полюсы этой подсхемы, причем этими шестью цепями покрываются все контакты подсхемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$, так что на указанных шести наборах обнаруживаются все одиночные размыкания контактов в $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$. Заметим, что наборы $\tilde{\alpha}_5, \tilde{\alpha}_6$ нужны для обнаружения размыканий контактов, смежных с верхней левой вершиной блока B_{s+3} .

Для обнаружения размыканий в подсхеме S достаточно двух наборов. При $\beta_0 = 0$ это наборы $\tilde{\alpha}_5$ и $\tilde{\alpha}_7 = (\tilde{\alpha}, 1, 1)$, а при $\beta_0 = 1$ это наборы $\tilde{\alpha}_2$ и $\tilde{\alpha}_8 = (\tilde{0}^n, 0, 0)$. Видно, что семи наборов всегда достаточно.

Случай 2. Пусть s – нечетное число. Положим $\tilde{\alpha}_1 = (\tilde{1}^n, 0, 0)$, $\tilde{\alpha}_2 = (\tilde{1}^n, 1, 0)$, $\tilde{\alpha}_3 = (\tilde{0}^n, 0, 1)$, $\tilde{\alpha}_4 = (\tilde{0}^n, 1, 1)$.

На наборе $\tilde{\alpha}_1$ обнаруживаются все одиночные размыкания контактов в подсхемах $S(K_1), S(K_2), \dots, S(K_s)$ схемы Σ_f (как и в случае 1). Каждому из наборов $\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_4$ соответствует простая проводящая цепь в подсхеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$, соединяющая входной и итеративный выходной полюсы этой подсхемы, причем этими четырьмя цепями покрываются все контакты подсхемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$, так что на указанных четырех наборах обнаруживаются все одиночные размыкания контактов в $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$. Для обнаружения размыканий в подсхеме S достаточно двух наборов. При $\beta_0 = 0$ это наборы $\tilde{\alpha}_1$ и $\tilde{\alpha}_5 = (\tilde{1}^n, 1, 1)$, а при $\beta_0 = 1$ это наборы $\tilde{\alpha}_3$ и $\tilde{\alpha}_6 = (\tilde{0}^n, 0, 0)$. Видно, что пяти наборов достаточно. Утверждение пункта а доказано.

Доказательство утверждения пункта б аналогично доказательству утверждения пункта а. Вместо полинома Жегалкина функцию f нужно представить в виде суммы (по модулю два) различных монотонных дизъюнкций положительных рангов и константы β_0 (такое представление, очевидно,

получается применением принципа двойственности к полиному Жегалкина двойственной к f функции и последующими элементарными преобразованиями). Пусть $f = D_1 \oplus D_2 \oplus \dots \oplus D_s \oplus \beta_0$, где $D_1, D_2, \dots, D_s$, – упомянутые монотонные дизъюнкции. Отличие устройства схемы Σ_f в пункте б от схемы Σ_f в пункте а лишь в том, что каждая из подсхем $S(D_1), \dots, S(D_s)$, в отличие от подсхем $S(K_1), \dots, S(K_s)$ из пункта а, представляет собой пучок параллельных замыкающих контактов, а не цепочку последовательных.

Случай 1. Пусть s – четное число. Положим $\tilde{\alpha}_1 = (\tilde{1}^n, 0, 0)$, $\tilde{\alpha}_2 = (\tilde{0}^n, 0, 0)$. Пусть $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ – такой набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$, что $f(\tilde{\alpha}) = \beta_0 \oplus 1$ (такой набор существует, так как функция f отлична от константы). Определим $\tilde{\alpha}_3 = (\tilde{\alpha}, 1, 1)$. На наборе $\tilde{\alpha}_2$ обнаруживаются все одиночные замыкания контактов в подсхемах $S(D_1), S(D_2), \dots, S(D_s)$ схемы Σ_f . На наборах $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2, \tilde{\alpha}_3$ обнаруживаются все одиночные замыкания контактов в $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$. Заметим, что набор $\tilde{\alpha}_3$ нужен для обнаружения замыкания размыкающего контакта блока B_{s+3} . Для обнаружения замыканий в подсхеме S достаточно двух наборов. При $\beta_0 = 0$ это наборы $\tilde{\alpha}_2$ и $\tilde{\alpha}_4 = (\tilde{0}^n, 0, 1)$, а при $\beta_0 = 1$ это наборы $\tilde{\alpha}_3$ и $\tilde{\alpha}_4 = (\tilde{\alpha}, 1, 0)$. Видно, что четырех наборов всегда достаточно.

Случай 2. Пусть s – нечетное число. Положим $\tilde{\alpha}_1 = (\tilde{1}^n, 1, 1)$, $\tilde{\alpha}_2 = (\tilde{0}^n, 0, 0)$, $\tilde{\alpha}_3 = (\tilde{0}^n, 1, 1)$, $\tilde{\alpha}_4 = (\tilde{0}^n, 0, 1)$. На наборе $\tilde{\alpha}_2$ обнаруживаются все одиночные замыкания контактов в подсхемах $S(D_1), S(D_2), \dots, S(D_s)$ схемы Σ_f . На наборах $\tilde{\alpha}_1, \tilde{\alpha}_2$ обнаруживаются все одиночные замыкания контактов в $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$. Для обнаружения замыканий в подсхеме S достаточно двух наборов. При $\beta_0 = 0$ это наборы $\tilde{\alpha}_2$ и $\tilde{\alpha}_3$, а при $\beta_0 = 1$ это наборы $\tilde{\alpha}_1$ и $\tilde{\alpha}_4$. Видно, что трех наборов достаточно. Теорема 1 доказана.

Следствие. Пусть $U^{cl,1}$ – источник одиночных замыканий контактов, а $U^{br,1}$ – источник одиночных размыканий контактов. Тогда при любом натуральном n справедливы оценки:

$$D_{U^{cl,1}}^{ОИКС}(n) \leq 4, \quad D_{U^{br,1}}^{ОИКС}(n) \leq 7.$$

Из доказательства теоремы 1 вытекает важная для дальнейших построений лемма.

Лемма 2. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция, отличная от константы, а ее полином Жегалкина можно привести к виду $K_1 \oplus K_2 \oplus \dots \oplus K_s \oplus \beta_0$, где $\beta_0 \in \{0, 1\}$, а $K_1, K_2, \dots, K_s$ – различные монотонные конъюнкции. Пусть функцию f моделирует некоторая двухполюсная ОИКС $\hat{\Sigma}_f$ с входным полюсом a и выходным полюсом b , между полюсом a

и каждым итеративным полюсом b_i ($i = \overline{1; s}$) построена схема, моделирующая функцию, представимую конъюнкцией K_i при нулевых значениях дополнительных переменных, а двухполюсная схема $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ с входным полюсом a и выходным полюсом b является подсхемой схемы $\hat{\Sigma}_f$. Тогда для обнаружения одиночных неисправностей (размыканий и замыканий) в схеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ достаточно девяти наборов.

Доказательство сразу вытекает из того, что, рассуждения об обнаружении замыкания контакта в подсхеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ в доказательстве пункта б теоремы 1 дословно переносятся на подсхему $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ схемы $\hat{\Sigma}_f$, так что для обнаружения замыкания достаточно трех наборов, а для обнаружения размыкания контакта в подсхеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ схемы $\hat{\Sigma}_f$ (как и в подсхеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ схемы Σ_f) достаточно шести наборов. Пусть $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ – такой набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$, что $f(\tilde{\alpha}) = \beta_0 \oplus 1$ (такой набор существует, так как функция f отлична от константы). Приведем получающиеся тесты, перечисляя входящие в них наборы в более естественном порядке (порядок переменных в наборе таков: $x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2$).

Случай 1. Пусть s – четное число. Тогда единичный проверяющий тест для подсхемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ имеет вид $T_s^* = \{(\tilde{0}^n, 0, 0), (\tilde{0}^n, 0, 1), (\tilde{0}^n, 1, 1), (\tilde{1}^n, 0, 0), (\tilde{1}^n, 0, 1), (\tilde{1}^n, 1, 1), (\tilde{\alpha}, 0, 0), (\tilde{\alpha}, 1, 0), (\tilde{\alpha}, 1, 1)\}$.

Случай 2. Пусть s – нечетное число. Тогда единичный проверяющий тест для подсхемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ имеет вид $T_s^* = \{(\tilde{0}^n, 0, 0), (\tilde{0}^n, 0, 1), (\tilde{0}^n, 1, 1), (\tilde{1}^n, 0, 0), (\tilde{1}^n, 1, 0), (\tilde{1}^n, 1, 1)\}$. Лемма доказана.

Теорема 2. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция, отличная от константы. Тогда функцию $f(\tilde{x}^n)$ можно реализовать тестопригодной ОИКС, допускающей единичный проверяющий тест длины, не превосходящей $4n + 8$.

Доказательство. В статье [10] в доказательстве пункта 2 теоремы 1 была построена двухполюсная КС $\Sigma_{\hat{f}}$, реализующая функцию $\hat{f} = f \oplus x_{n+1}$ и допускающая единичный проверяющий тест длины не более $4n + 8$, причем среди наборов теста имелись наборы, на которых:

а) функция $\hat{f}$ обращается в 0 и переменная x_{n+1} равна 0 (назовем такой набор $\tilde{\gamma}_1$);

б) функция $\hat{f}$ обращается в 0 и переменная x_{n+1} равна 1 (назовем такой набор $\tilde{\gamma}_2$);

в) функция $\hat{f}$ обращается в 1 и переменная x_{n+1} равна 0 (назовем такой набор $\tilde{\gamma}_3$);

г) функция $\hat{f}$ обращается в 1 и переменная x_{n+1} равна 1 (назовем такой набор $\tilde{\gamma}_4$).

Будем считать схему $\Sigma_{\hat{f}}$ подсхемой ОИКС Σ_f , полагая, что входной полюс $\Sigma_{\hat{f}}$ – это входной полюс a схемы Σ_f , а выходной полюс $\Sigma_{\hat{f}}$ – это итеративный полюс b_1 . Добавим еще контактную подсхему S с входным полюсом a и выходным полюсом b , моделирующую формулу $b_1 \bar{x}_{n+1} \vee \bar{b}_1 x_{n+1}$ и не имеющую с $\Sigma_{\hat{f}}$ иных общих вершин, кроме входного полюса. Полученная ОИКС Σ_f реализует между полюсами a и b функцию f и допускает единичный проверяющий тест длины не более $4n+8$, так как все одиночные неисправности подсхемы $\Sigma_{\hat{f}}$ обнаруживаются на наборах теста, описанного в доказательстве пункта 2 теоремы 1 в [10], а все одиночные неисправности подсхемы S обнаруживаются на наборах $\tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2, \tilde{\gamma}_3, \tilde{\gamma}_4$. Теорема 2 доказана.

Следствие. Пусть U^1 – источник одиночных неисправностей контактов (замыканий или размыканий). Тогда при любом натуральном n справедлива оценка

$$D_{U^1}^{\text{ОИКС}}(n) \leq 4n + 8.$$

Теорема 3. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция. Тогда функцию $f(\tilde{x}^n)$ можно смоделировать тестопригодной двухполюсной ОИКС $\hat{\Sigma}_f$, допускающей единичный проверяющий тест, имеющий длину, не превосходящую 11, и при этом входная избыточность моделирования функции f этой схемой не превосходит 5.

Доказательство. Если функция f – константа, то искомая ОИКС $\hat{\Sigma}_f$ имеет вид контакта переменной y_1 . Построим для отличной от константы булевой функции $f(\tilde{x}^n)$ моделирующую ее ОИКС $\hat{\Sigma}_f$ с одним входным и одним выходным полюсом следующим образом. Пусть в полиноме Жегалкина для функции f имеется s отличных от констант слагаемых $K_1, K_2, \dots, K_s$, являющихся монотонными конъюнкциями, а сам полином Жегалкина можно привести к виду $K_1 \oplus K_2 \oplus \dots \oplus K_s \oplus \beta_0$, где $\beta_0 \in \{0, 1\}$. Для каждого слагаемого $K_i = x_{v_1} x_{v_2} \dots x_{v_{q(i)}}$ ($i = \overline{1, s}, 1 \leq v_1 < v_2 < \dots < v_{q(i)} \leq n$) полинома Жегалкина функции f строится в соответствии с леммой 1 своя подсхема $\hat{S}(K_i)$, имеющая при нечетном $q(i)$ вид $\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$ и при четном $q(i)$ вид $\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_6; y_4)$, с входным полюсом a_i и выходным итеративным полюсом b_i . Входные полюсы этих подсхем отождествляются во входной полюс a схемы и к схеме добавляется еще в соответствии с условием леммы 2 двухполюсная подсхема

$\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$. Искомая ОИКС $\hat{\Sigma}_f$ получена. Единичный проверяющий тест для нее строится на основании лемм 1, 2 с учетом того, что один и тот же набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6$ (идущих в этом порядке) может использоваться и как набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n, y_3, y_4, y_5, y_6$ из леммы 1, и как набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n, y_1, y_2$ из леммы 2. Приведем итоговые единичные проверяющие тесты. Пусть s – четное число. Пусть $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ – такой набор значений переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$, что $f(\tilde{\alpha}) = \beta_0 \oplus 1$ (такой набор существует, так как функция f отлична от константы). Тогда единичный проверяющий тест для схемы $\hat{\Sigma}_f$ имеет вид

$$T_s = \{(\tilde{0}^n, 0, 0, 0, 1, 1, 0), (\tilde{0}^n, 0, 1, 1, 1, 0, 1), (\tilde{0}^n, 1, 1, 1, 1, 1, 0), (\tilde{0}^n, 0, 0, 0, 1, 0, 1),$$

$$(\tilde{1}^n, 0, 0, 0, 0, 0, 0), (\tilde{1}^n, 0, 1, 1, 0, 1, 1), (\tilde{1}^n, 1, 1, 1, 0, 0, 0), (\tilde{1}^n, 0, 0, 0, 0, 1, 1),$$

$$(\tilde{\alpha}, 0, 0, 0, 0, 0, 0), (\tilde{\alpha}, 1, 0, 0, 0, 0, 0), (\tilde{\alpha}, 1, 1, 0, 0, 0, 0)\} \text{ (достаточно 11 наборов).}$$

Пусть теперь s – нечетное число. Тогда единичный проверяющий тест для схемы $\hat{\Sigma}_f$ имеет вид

$$T_s = \{(\tilde{0}^n, 0, 0, 0, 1, 1, 0), (\tilde{0}^n, 0, 1, 1, 1, 0, 1), (\tilde{0}^n, 1, 1, 1, 1, 1, 0),$$

$$(\tilde{0}^n, 0, 0, 0, 1, 0, 1), (\tilde{1}^n, 0, 0, 0, 0, 0, 0), (\tilde{1}^n, 1, 0, 1, 0, 1, 1),$$

$$(\tilde{1}^n, 1, 1, 1, 0, 0, 0), (\tilde{1}^n, 0, 0, 0, 0, 1, 1)\} \text{ (достаточно 8 наборов).}$$

Теорема доказана.

Замечание. Входную избыточность моделирования функции f можно уменьшить до 4 (не увеличивая длину теста), если добавить к схеме $\hat{\Sigma}_f$ под-схему S из доказательства теоремы 1, перенеся выход всей схемы в выходной полюс подсхемы S .

Следствие. Пусть U^1 – источник одиночных неисправностей контактов (замыканий или размыканий). Тогда при любом целом неотрицательном n справедлива оценка: $\hat{D}_{U^1}^{\text{ОИКС}}(n) \leq 11$.

Теорема 4. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная булева функция. Тогда функцию $f(\tilde{x}^n)$ можно смоделировать тестопригодной двухполюсной КС $\hat{\Sigma}_f^*$, допускающей единичный проверяющий тест, имеющий длину, не превосходящую 35, и при этом входная избыточность моделирования функции f этой схемой не превосходит 5.

Доказательство. Если функция f – константа, то искомая КС $\hat{\Sigma}_f^*$ имеет вид контакта переменной y_1 . Построим для отличной от константы

булевой функции $f(\tilde{x}^n)$ моделирующую ее КС $\hat{\Sigma}_f^*$ с одним входным и одним выходным полюсом следующим образом. Пусть в полиноме Жегалкина для функции f имеется s отличных от констант слагаемых $K_1, K_2, \dots, K_s$, являющихся монотонными конъюнкциями, а сам полином Жегалкина можно привести к виду $K_1 \oplus K_2 \oplus \dots \oplus K_s \oplus \beta_0$, где $\beta_0 \in \{0, 1\}$. Для каждого слагаемого $K_i = x_{v_1} x_{v_2} \dots x_{v_{q(i)}}$ ($i = \overline{1, s}$, $1 \leq v_1 < v_2 < \dots < v_{q(i)} \leq n$) полинома Жегалкина функции f строятся в соответствии с леммой 1:

а) схема $\hat{S}'(K_i)$, имеющая при нечетном $q(i)$ вид

$$\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$$

и при четном $q(i)$ вид

$$\Sigma'_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_6; y_4),$$

б) схема $\hat{S}''(K_i)$, имеющая при нечетном $q(i)$ вид

$$\Sigma''_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_5; y_4)$$

и при четном $q(i)$ вид

$$\Sigma''_{q(i)+2}(y_3, x_{v_1}, x_{v_2}, \dots, x_{v_{q(i)}}, y_6; y_4).$$

В построенной в соответствии с условием леммы 2 двухполюсной схеме $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ с входным полюсом a и выходным полюсом b каждый контакт b_i заменяется на двухполюсную подсхему $\hat{S}'(K_i)$, а каждый контакт $\bar{b}_i$ заменяется на двухполюсную подсхему $\hat{S}''(K_i)$ ($i = \overline{1, s}$). При такой замене блок B_i схемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ превращается в гиперблок B_i новой схемы. Искомая КС $\hat{\Sigma}_f^*$ получена. Она моделирует функцию f (достаточно положить $y_2 = \beta_0$, $y_3 = y_4 = y_5 = y_6 = 0$). Единичный проверяющий тест для нее строится на основании лемм 1, 2. Возьмем восемь наборов из доказательства леммы 1 и заменим каждый из них на 4 набора, добавив произвольные значения переменных y_1, y_2 (обозначим составленное множество из 32 наборов через $\tilde{T}$). Пользуясь тем, что по лемме 2 на каждом из полученных 32 наборов у всех подсхем $\hat{S}'(K_i)$ проводимости одинаковые и отличны от проводимостей всех подсхем $\hat{S}''(K_i)$, проводимость между входными и выходными полюсами в гиперблоках (и сохранившихся блоках B_1, B_{s+2}, B_{s+3}) схемы $\hat{\Sigma}_f^*$, будет такой же, как при тех же значениях y_1, y_2 на наборах, где все значения переменных $x_1, \dots, x_n$ одинаковы. В блоках B_1, B_{s+2}, B_{s+3} на указанных наборах обнаруживаются все одинаковые неисправности контактов, кроме размыканий трех контактов, инци-

дентных верхнему входному полюсу блока B_{s+3} и замыкания нижнего контакта B_{s+3} при четном s . Добавим к $\tilde{T}$ наборы $(\tilde{\alpha}, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$, $(\tilde{\alpha}, 1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $(\tilde{\alpha}, 1, 1, 0, 0, 0, 0)$, чтобы ликвидировать этот недостаток. Полученное множество T из 35 наборов образует единичный проверяющий тест для схемы $\hat{\Sigma}_f^*$. Действительно, рассмотрим сначала ситуацию, когда разомкнут вследствие неисправности некоторый контакт (назовем его z) в одной из подсхем S'' (вида $\hat{S}'(K_i)$ или $\hat{S}''(K_i)$). В T в силу леммы 2 существуют наборы, на которых подсхема S'' проводит и в ней имеется простая проводящая между ее полюсами цепь, проходящая через контакт z . Среди этих наборов есть такой, на котором вся схема $\hat{\Sigma}_f^*$ при отсутствии неисправностей проводит и при этом имеется простая проводящая цепь между полюсами схемы, проходящая через полюсы подсхемы S'' . На этом наборе обнаруживается размыкание контакта z . Пусть теперь этот же контакт z в подсхеме S'' замкнут вследствие неисправности. В T в силу леммы 2 существуют наборы, на которых подсхема S'' не проводит между своими полюсами, но при замыкании контакта z в ней возникает проводящая между ее полюсами цепь. Среди этих наборов есть такой, на котором вся схема $\hat{\Sigma}_f^*$ не проводит. Это, однако, предполагает, что в гиперблоках $B_2, \dots, B_{s+1}$ в силу свойств схемы $\Sigma_{s+3}(y_1, b_1, b_2, \dots, b_s, y_1, y_2)$ и подсхем $\hat{S}'(K_i)$, $\hat{S}''(K_i)$ от двух входных полюсов гиперблока B_2 к двум выходным полюсам гиперблока B_{s+1} ведут две не имеющие общих контактов проводящие цепи так, что при возникновении проводимости между полюсами S'' во всей схеме $\hat{\Sigma}_f^*$ возникает проводимость. На этом-то наборе и обнаруживается замыкание контакта z . Теорема доказана.

Следствие. Пусть U^1 – источник одиночных неисправностей контактов (замыканий или размыканий). Тогда при любом целом неотрицательном n справедлива оценка: $\hat{D}_{U^1}^{KC}(n) \leq 35$.

Авторы выражают благодарность профессору С. А. Ложкину за обсуждение работы и ценные замечания.

Список литературы

1. **Редькин, Н. П.** Надежность и диагностика схем / Н. П. Редькин. – М. : Изд-во МГУ, 1992. – 192 с.
2. **Ложкин, С. А.** Лекции по основам кибернетики / С. А. Ложкин. – М. : МАКС Пресс, 2004. – 256 с.
3. **Ложкин, С. А.** Асимптотические оценки высокой степени точности для сложности реализации систем функций итеративными контактными схемами / С. А. Ложкин, А. В. Кондратов // Прикладная математика и информатика. – Вып. 21. – М. : МАКС Пресс, 2005. – С. 102–110.
4. **Чегис, И. А.** Логические способы контроля работы электрических схем / И. А. Чегис, С. В. Яблонский // Труды МИАН СССР. – 1958. – Т. LI. – С. 270–360.

5. **Мадатян, Х. А.** Полный тест для неповторных контактных схем / Х. А. Мадатян // Проблемы кибернетики. – Вып. 23. – М. : Наука, 1970. – С. 103–118.
6. **Мадатян, Х. А.** Построение единичных тестов для контактных схем / Х. А. Мадатян // Сборник работ по математической кибернетике. – М. : ВЦ АН СССР, 1981. – С. 77–86.
7. **Редькин, Н. П.** О полных проверяющих тестах для контактных схем / Н. П. Редькин // Методы дискретного анализа в исследовании экстремальных структур. – Вып. 39. – Новосибирск : Изд-во ИМ СО АН СССР, 1983. – С. 80–87.
8. **Редькин, Н. П.** О проверяющих тестах замыкания и размыкания / Н. П. Редькин // Методы дискретного анализа в оптимизации управляющих систем. – Вып. 40. – Новосибирск : Изд-во ИМ СО АН СССР, 1983. – С. 87–99.
9. **Рыбко, А. И.** О контактных схемах, корректирующих замыкания и допускающих контроль / А. И. Рыбко // Математические вопросы кибернетики. – Вып. 1. – М. : Наука, 1988. – С. 168–190.
10. **Романов, Д. С.** О синтезе контактных схем, допускающих короткие проверяющие тесты / Д. С. Романов // Ученые записки Казанского университета. Сер. Физико-математические науки. – 2014. – Т. 156, кн. 3. – С. 110–115.

References

1. Red'kin N. P. *Nadezhnost' i diagnostika skhem* [Reliability and diagnostics of circuits]. Moscow: Izd-vo MGU, 1992, 192 p.
2. Lozhkin S. A. *Leksii po osnovam kibernetiki* [Lectures on basic cybernetics]. Moscow: MAKSS Press, 2004, 256 p.
3. Lozhkin S. A., Kondratov A. V. *Prikladnaya matematika i informatika* [Applied mathematics and informatics]. Issue 21. Moscow: MAKSS Press, 2005, pp. 102–110.
4. Chegis I. A., Yablonskiy S. V. *Trudy MIAN SSSR* [Proceedings of Steklov Mathematical Institute of the USSR Academy of Sciences]. 1958, vol. LI, pp. 270–360.
5. Madatyan Kh. A. *Problemy kibernetiki* [Problems of cybernetics]. Issue 23. Moscow: Nauka, 1970, pp. 103–118.
6. Madatyan Kh. A. *Sbornik rabot po matematicheskoy kibernetike* [Collected works on mathematical cybernetics]. Moscow: VTs AN SSSR, 1981, pp. 77–86.
7. Red'kin N. P. *Metody diskretnogo analiza v issledovanii ekstremal'nykh struktur* [Methods of discrete analysis in research of extreme structures]. Issue 39. Novosibirsk: Izd-vo IM SO AN SSSR, 1983, pp. 80–87.
8. Red'kin N. P. *Metody diskretnogo analiza v optimizatsii upravlyayushchikh system* [Methods of discrete analysis in optimization of control systems]. Issue 40. Novosibirsk: Izd-vo IM SO AN SSSR, 1983, pp. 87–99.
9. Rybko A. I. *Matematicheskie voprosy kibernetiki* [Mathematical problems of cybernetics]. Issue 1. Moscow: Nauka, 1988, pp. 168–190.
10. Romanov D. S. *Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Ser. Fiziko-matematicheskie nauki* [Proceedings of Kazan University. Series: physical and mathematical sciences]. 2014, vol. 156, bk. 3, pp. 110–115.

Романов Дмитрий Сергеевич

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра математической
кибернетики, Московский
государственный университет
имени М. В. Ломоносова (Россия,
г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: romanov@cs.msu.ru

Romanov Dmitriy Sergeevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of mathematical
cybernetics, Moscow State University
named after M. V. Lomonosov
(1 Leninskie gory street, Moscow, Russia)

Романова Елена Юрьевна

кандидат педагогических наук, доцент,
кафедра прикладной математики,
Российский государственный
социальный университет (Россия,
г. Москва, ул. Вильгельма Пика, 4, стр. 1)

E-mail: klenar2001@mail.ru

Romanova Elena Yur'evna

Candidate of pedagogical sciences,
associate professor, sub-department
of applied mathematics, Russian State
Social University (building 1, 4 Wilgelma
Pika street, Moscow, Russia)

УДК 519.718

Романов, Д. С.

О единичных проверяющих тестах для схем переключающего типа / Д. С. Романов, Е. Ю. Романова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 5–23.

ГРАНИЧНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ МЮЛЛЕРА В СПЕКТРАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Граничные интегральные уравнения Мюллера широко используются для теоретического и численного анализа самых разных спектральных задач математической теории дифракции. Они применялись и для вычисления поверхностных собственных волн однородных слабонаправляющих диэлектрических волноводов без потерь. Цель настоящей работы – разработать методику их применения для поиска не только поверхностных, но и вытекающих волн таких волноводов, а также исследовать с их помощью качественные свойства спектра.

Материалы и методы. Исследование качественных свойств спектра проведено методами теории регуляризации задач о собственных волнах открытых волноводов. Сведение исходной задачи к спектральной задаче для системы интегральных уравнений проведено методами теории потенциала. Дальнейший анализ основан на известных результатах об изолированности характеристических значений фредгольмовой голоморфной оператор-функции при наличии в области ее голоморфности хотя бы одной регулярной точки, и о поведении характеристических значений такой оператор-функции, как функций неспектральных параметров.

Результаты. Доказано, что исходная задача для уравнения Гельмгольца на плоскости эквивалентна нелинейной спектральной задаче для граничных интегральных уравнений Мюллера с вполне непрерывным оператором. Доказано, что характеристическое множество построенной операторзначной функции может состоять лишь из изолированных точек на соответствующей поверхности Римана. Каждое характеристическое значение непрерывно зависит от неспектральных параметров и может появляться и исчезать лишь на границе этой поверхности.

Выводы. Разработанная методика применения граничных интегральных уравнений Мюллера может успешно применяться для решения спектральных задач теории диэлектрических волноводов, а именно для поиска поверхностных вытекающих собственных волн, а также для исследования качественных свойства спектра.

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

А. О. Spiridonov, Е. М. Karchevskiy, А. I. Nosich

MULLER BOUNDARY INTEGRAL EQUATIONS IN THE SPECTRAL THEORY OF DIELECTRIC WAVEGUIDES

¹ Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности.

Abstract.

Background. Muller boundary integral equations are widely used for theoretical and numerical analysis of various spectral problems of the mathematical theory of diffraction. They are also used for calculation of superficial own waves of homogeneous weakly guiding dielectric waveguides without losses. The aim of the work is to develop a method of using the latter for searching of both superficial and leaky waves of such waveguides, and also to research qualitative spectral properties.

Materials and methods. The research of qualitative spectral properties was carried out using the methods of the theory of regularization of problems of open waveguides' own waves. Reduction of the initial problem to a spectral problem for the system of integral equations was carried out by the potential theory methods. The further analysis is based on the known results on isolation of characteristic values of the Fredholm holomorphic operator-function with the presence of at least one regular point in the area of its holomorphy, and on behavior of characteristic values of such operator-function as a function of non-spectral parameters.

Results. It is proved that the initial problem for the surface Helmholtz equation is equivalent to a nonlinear spectral problem for Muller boundary integral equations with a quite continuous operator. It is proved that the characteristic set of the built operator-value function may consist of only isolated points on the corresponding Riemann surface. Each characteristic value continuously depends on nonspectral parameters and may occur and disappear on the boundary of this surface.

Cocnclusions. The developed technique of Muller boundary integral equations application may be successfully implemented for solving spectral problems of the theory of dielectric waveguides, namely for searching superficial leaky own waves, as well as for researching qualitative spectral properties.

Key words: propagation of electromagnetic waves in waveguides, eigenvalue problem, integral equations.

Введение

Граничные интегральные уравнения Мюллера [1] являются надежным инструментом теоретического и численного анализа самых разных спектральных задач математической теории дифракции (см., напр., статью [2] и обзор литературы в этой работе). Они применялись и для вычисления поверхностных собственных волн однородных слабонаправляющих диэлектрических волноводов без потерь [3, 4]. В настоящей работе мы используем их для поиска не только поверхностных, но и вытекающих волн [5] таких волноводов, а также исследуем качественные свойства спектра методами теории регуляризации задач о собственных волнах открытых волноводов [6, 7]. Доказывается, что исходная задача для уравнения Гельмгольца на плоскости эквивалентна нелинейной спектральной задаче для граничных интегральных уравнений Мюллера с вполне непрерывным оператором. Доказывается, что характеристическое множество построенной операторзначной функции может состоять лишь из изолированных точек на соответствующей поверхности Римана. Каждое характеристическое значение непрерывно зависит от несpectральных параметров и может появляться и исчезать лишь на границе этой поверхности.

1. Постановка задачи и локализация спектра

Сформулируем, следуя [8, с. 38], задачу о собственных волнах цилиндрического диэлектрического волновода с произвольным контуром попереч-

ного сечения и постоянной диэлектрической проницаемостью, близкой к диэлектрической проницаемости окружающей среды. Пусть область поперечного сечения волновода Ω_i на плоскости R^2 ограничена дважды непрерывно дифференцируемым контуром Γ (рис. 1). Диэлектрическая проницаемость ε является кусочно-постоянной функцией, а именно равна константе ε_i в области $\bar{\Omega}_i$, а в области $\Omega_e = R^2 \setminus \bar{\Omega}_i$ – константе ε_e . Пусть $0 < \varepsilon_e < \varepsilon_i$. Будем считать, что постоянная распространения β – неизвестный комплексный параметр, $k > 0$ – заданное продольное волновое число. В скалярном приближении слабонаправляющего волновода задача сводится [8] к отысканию таких значений параметра β , при которых существуют нетривиальные решения уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + \chi_i^2 u = 0, \quad x \in \Omega_i, \quad (1)$$

$$\Delta u + \chi_e^2 u = 0, \quad x \in \Omega_e, \quad (2)$$

удовлетворяющие условиям сопряжения

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

где

$$\chi_i = \sqrt{k^2 \varepsilon_i - \beta^2}, \quad \chi_e = \sqrt{k^2 \varepsilon_e - \beta^2},$$

$\partial u / \partial \nu$ – производная по нормали к контуру Γ , внешней относительно области Ω_i ; $u^+(u^-)$ – предельное значение функции u извне (изнутри) контура Γ .

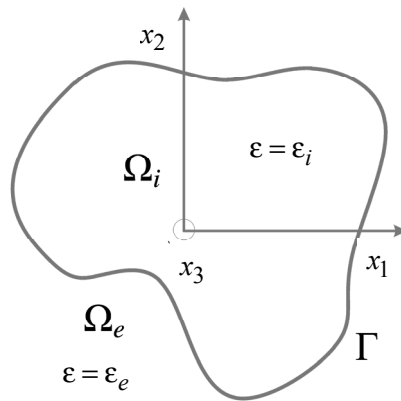


Рис. 1. Поперечное сечение волновода

Будем предполагать, что функция u удовлетворяет на бесконечности парциальным условиям излучения, т.е. при $|x| \geq R_0$ представима в виде абсолютно и равномерно сходящегося ряда

$$u(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l H_l^{(1)}(\chi_e r) e^{il\varphi},$$

где $x_1 = r \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \varphi$; $H_l^{(1)}$ – функции Ханкеля первого рода порядка l .

Обозначим буквой U множество функций, непрерывных и непрерывно дифференцируемых в $\bar{\Omega}_i$ и $\bar{\Omega}_e$, дважды непрерывно дифференцируемых в Ω_i и Ω_e , удовлетворяющих условию (4). Будем предполагать, что постоянные распространения β принадлежат множеству Λ – пересечению римановых поверхностей Λ_i и Λ_e функций $\ln \chi_+(\beta)$ и $\ln \chi_e(\beta)$, соответственно

$$\Lambda = \Lambda_i \cap \Lambda_e. \quad (4)$$

Строение поверхности Λ_e подробно рассмотрено в [7]. Строение поверхности Λ_i абсолютно аналогично. Обозначим

$$\Lambda_0^{(1)} = \Lambda_{i0}^{(1)} \cap \Lambda_{e0}^{(1)}$$

пересечение главных («физических») листов этих поверхностей, определяемых условиями:

$$-\pi/2 < \arg \chi_i(\beta) < 3\pi/2, \quad \operatorname{Im}(\chi_i(\beta)) \geq 0, \quad \beta \in \Lambda_{i0}^{(1)},$$

$$-\pi/2 < \arg \chi_e(\beta) < 3\pi/2, \quad \operatorname{Im}(\chi_e(\beta)) \geq 0, \quad \beta \in \Lambda_{e0}^{(1)}.$$

Обозначим вещественную ось листа $\Lambda_0^{(1)}$ символом $R_0^{(1)}$, пусть

$$G = \{\beta \in R_0^{(1)} : k^2 \varepsilon_e < \beta^2 < k^2 \varepsilon_i\}.$$

Ненулевую функцию $u \in U$ будем называть собственной функцией задачи о собственных волнах слабонаправляющего волновода, отвечающей собственному значению $\beta \in \Lambda$, если выполнены условия (1)–(3).

Сформулируем известный результат о локализации собственных значений этой задачи.

Теорема 1. На листе $\Lambda_0^{(1)}$ собственные значения задачи (1)–(3) могут лежать лишь в области G .

Доказательство этого утверждения приведено в монографии [7, с. 40]. Вещественным $\beta \in G$ соответствуют поверхностные волны (u экспоненциально убывает при $r \rightarrow \infty$). Комплексным $\beta \in \Lambda_0^{(2)}$ отвечают вытекающие волны (тогда $\operatorname{Im} \chi_e(\beta) < 0$ и функция u экспоненциально возрастает при $r \rightarrow \infty$). Теорема 1 обобщает результаты [5] о локализации спектра собственных волн слабонаправляющего диэлектрического волновода кругового сечения, полученные на основе анализа характеристического уравнения метода разделения переменных.

2. Граничные интегральные уравнения Мюллера

Сведем задачу (1)–(3) методами теории потенциалов к спектральной задаче для интегральной оператор-функции. Большинство результатов теории потенциалов, которые мы будем использовать, являются классическими и хорошо известны. Их можно найти, например, в книгах [9, 10]. Менее традиционно изучение поведения потенциалов на бесконечности как функций, удовлетворяющих парциальным условиям излучения. Аналогичные построения содержатся в монографиях [8, 11].

Введем в рассмотрение функции

$$G_i(\beta; x, y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\chi_i(\beta)|x - y|), \quad (5)$$

$$G_e(\beta; x, y) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(\chi_e(\beta)|x - y|), \quad (6)$$

здесь

$$|x - y| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2}, \quad (7)$$

параметр β предполагается комплексным, принадлежащим множеству Λ , определенному формулой (4).

Функции (5), (6) удовлетворяют уравнениям

$$\Delta G_i(\beta; x, y) + \chi_i^2(\beta) G_i(\beta; x, y) = 0, \quad (8)$$

$$\Delta G_e(\beta; x, y) + \chi_e^2(\beta) G_e(\beta; x, y) = 0, \quad (9)$$

как функции переменной x при любой фиксированном $y \neq x$. Они имеют логарифмическую особенность при $y = x$. С помощью теоремы сложения Графа [12, с. 201] легко показать, что функция $G_e(\beta; x, y)$ при любых $\beta \in \Lambda$ и $y \in R^2$ удовлетворяет условию (4), поскольку

$$G_e(\beta; x, y) = \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\chi_e r(y)) e^{-il\varphi(y)} H_l^{(1)}(\chi_e r(x)) e^{il\varphi(x)}. \quad (10)$$

Аналогичному условию удовлетворяет функция $G_i(\beta; x, y)$, определенная формулой (5):

$$G_i(\beta; x, y) = \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(\chi_i r(y)) e^{-il\varphi(y)} H_l^{(1)}(\chi_i r(x)) e^{il\varphi(x)}. \quad (11)$$

Поэтому функции (5), (6) можно называть функциями Грина для уравнений Гельмгольца (8), (9), удовлетворяющими на бесконечности парциальным условиям излучения. Отметим, что, в отличие от функций (5), (6), другая пара фундаментальных решений уравнений Гельмгольца (8), (9), а именно функции

$$\frac{i}{4}H_0^{(2)}(\chi_i(\beta)|x-y|) \text{ и } \frac{i}{4}H_0^{(2)}(\chi_e(\beta)|x-y|),$$

где $H_0^{(2)}$ – функция Ханкеля второго рода нулевого порядка, парциальным условиям излучения (10), (11) не удовлетворяют.

Лемма 1. Если u – собственная функция задачи (1)–(3), отвечающая собственному значению $\beta \in \Lambda$, то

$$u(x) = - \int_{\Gamma} \left(u^-(y) \frac{\partial G_i(\beta; x, y)}{\partial v(y)} - G_i(\beta; x, y) \frac{\partial u^-(y)}{\partial v(y)} \right) dl(y), \quad x \in \Omega_i, \quad (12)$$

$$u(x) = \int_{\Gamma} \left(u^+(y) \frac{\partial G_e(\beta; x, y)}{\partial v(y)} - G_e(\beta; x, y) \frac{\partial u^+(y)}{\partial v(y)} \right) dl(y), \quad x \in \Omega_e. \quad (13)$$

Доказательство. Для доказательства равенства (12) надо применить в области Ω_i вторую формулу Грина к функции Грина G_i и собственной функции u , отвечающей собственному значению $\beta \in \Lambda$. В справедливости формулы (13) легко убедиться аналогичным методом. При этом надо использовать известное равенство [13, с. 35]:

$$\int_{\Gamma_R} \left[\frac{\partial u(y)}{\partial r(y)} G_e(\beta; x, y) - \frac{\partial G_e(\beta; x, y)}{\partial r(y)} u(y) \right] dl(y) = 0, \quad R \geq R_0.$$

Оно верно для любого $\beta \in \Lambda$ и функции $u \in U$, удовлетворяющей условию (4). Здесь Γ_R – окружность радиуса R с центром в начале координат. Лемма доказана.

Устремим в интегральных представлениях (12), (13) точку x к контуру Γ с двух разных сторон. Используем предельные свойства потенциалов простого и двойного слоя. Здесь и далее под производной по нормали будем понимать правильную нормальную производную. Получим следующие равенства при $x \in \Gamma$:

$$u^-(x) = - \int_{\Gamma} u^-(y) \frac{\partial G_i(x, y)}{\partial v(y)} dl(y) + \frac{1}{2} u^-(x) + \int_{\Gamma} G_i(x, y) \frac{\partial u^-(y)}{\partial v(y)} dl(y), \quad (14)$$

$$u^+(x) = \int_{\Gamma} u^+(y) \frac{\partial G_e(x, y)}{\partial v(y)} dl(y) + \frac{1}{2} u^+(x) - \int_{\Gamma} G_e(x, y) \frac{\partial u^+(y)}{\partial v(y)} dl(y). \quad (15)$$

Обозначим

$$u(x) = u^+(x) = u^-(x), \quad v(x) = \frac{\partial u^+(x)}{\partial v(x)} = \frac{\partial u^-(x)}{\partial v(x)}, \quad x \in \Gamma. \quad (16)$$

Сложим почленно равенства (14), (15) и используем (16), получим

$$u(x) + \int_{\Gamma} u(y) \left(\frac{\partial G_i(x, y)}{\partial v(y)} - \frac{\partial G_e(x, y)}{\partial v(y)} \right) dl(y) -$$

$$-\int_{\Gamma} v(y)(G_i(x, y) - G_e(x, y))dl(y) = 0, \quad x \in \Gamma. \quad (17)$$

Вычислим производную по нормали от левой и правой частей интегральных представлений (12), (13):

$$\frac{\partial u(x)}{\partial v(x)} = -\int_{\Gamma} u^-(y) \frac{\partial^2 G_i(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} dl(y) + \int_{\Gamma} \frac{G_i(x, y)}{\partial v(x)} \frac{\partial u^-(y)}{\partial v(y)} dl(y), \quad x \in \Omega_i, \quad (18)$$

$$\frac{\partial u(x)}{\partial v(x)} = \int_{\Gamma} u^+(y) \frac{\partial^2 G_e(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} dl(y) - \int_{\Gamma} \frac{G_e(x, y)}{\partial v(x)} \frac{\partial u^+(y)}{\partial v(y)} dl(y), \quad x \in \Omega_e. \quad (19)$$

Устремим в формулах (18), (19) точку x к контуру Γ с двух разных сторон. Используем предельные свойства нормальных производных потенциалов простого и двойного слоя. Получим следующие равенства:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^-(x)}{\partial v(x)} &= -\int_{\Gamma} u^-(y) \frac{\partial^2 G_i(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} dl(y) + \\ &+ \int_{\Gamma} \frac{G_i(x, y)}{\partial v(x)} \frac{\partial u^-(y)}{\partial v(y)} dl(y) + \frac{1}{2} \frac{\partial u^-}{\partial v}(x), \quad x \in \Gamma; \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^+(x)}{\partial v(x)} &= \int_{\Gamma} u^+(y) \frac{\partial^2 G_e(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} dl(y) - \\ &- \int_{\Gamma} \frac{G_e(x, y)}{\partial v(x)} \frac{\partial u^+(y)}{\partial v(y)} dl(y) + \frac{1}{2} \frac{\partial u^+}{\partial v}(x), \quad x \in \Gamma. \end{aligned} \quad (21)$$

Сложим почленно равенства (20) и (21), используем (16), получим

$$\begin{aligned} v(x) + \int_{\Gamma} u(y) \left(\frac{\partial^2 G_i(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} - \frac{\partial^2 G_e(x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} \right) dl(y) - \\ - \int_{\Gamma} v(y) \left(\frac{G_i(x, y)}{\partial v(x)} - \frac{G_e(x, y)}{\partial v(x)} \right) dl(y) = 0, \quad x \in \Gamma. \end{aligned} \quad (22)$$

Система граничных интегральных уравнений (17), (22) называется системой Мюллера. Запишем ее в следующем виде:

$$u(x) + \int_{\Gamma} K_{1,1}(\beta; x, y) u(y) dl(y) - \int_{\Gamma} K_{1,2}(\beta; x, y) v(y) dl(y) = 0, \quad x \in \Gamma; \quad (23)$$

$$v(x) + \int_{\Gamma} K_{2,1}(\beta; x, y) u(y) dl(y) - \int_{\Gamma} K_{2,2}(\beta; x, y) v(y) dl(y) = 0, \quad x \in \Gamma, \quad (24)$$

здесь

$$K_{1,1}(\beta; x, y) = \frac{\partial G_i(\beta; x, y)}{\partial v(y)} - \frac{\partial G_e(\beta; x, y)}{\partial v(y)}, \quad (25)$$

$$K_{1,2}(\beta; x, y) = G_i(\beta; x, y) - G_e(\beta; x, y); \quad (26)$$

$$K_{2,1}(\beta; x, y) = \frac{\partial^2 G_i(\beta; x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} - \frac{\partial^2 G_e(\beta; x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)}, \quad (27)$$

$$K_{2,2}(\beta; x, y) = \frac{G_i(\beta; x, y)}{\partial v(x)} - \frac{G_e(\beta; x, y)}{\partial v(x)}. \quad (28)$$

Изучим особенности ядер (25)–(28) при совпадении аргументов x и y . Вычислим нормальные производные функций Грина:

$$\frac{\partial G_{i/e}(\beta; x, y)}{\partial v(y)} = \frac{i}{4} \chi_{i/e} H_1^{(1)}(\chi_{i/e} |x-y|) \frac{((x-y) \cdot v(y))}{|x-y|}; \quad (29)$$

$$\frac{\partial G_{i/e}(\beta; x, y)}{\partial v(x)} = -\frac{i}{4} \chi_{i/e} H_1^{(1)}(\chi_{i/e} |x-y|) \frac{((x-y) \cdot v(x))}{|x-y|}; \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 G_{i/e}(\beta; x, y)}{\partial v(x) \partial v(y)} = & -\frac{i \chi_{i/e}^2}{4} H_2^{(1)}(\chi_{i/e} |x-y|) \frac{((x-y) \cdot v(y))((x-y) \cdot v(x))}{|x-y|^2} + \\ & + \frac{i \chi_{i/e}}{4} H_1^{(1)}(\chi_{i/e} |x-y|) \frac{(v(x) \cdot v(y))}{|x-y|}. \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь $(a \cdot b)$ – стандартное скалярное произведение векторов a и b в пространстве R^2 . Хорошо известно [14], что если кривая имеет непрерывную кривизну, то

$$\lim_{|x-y| \rightarrow 0} \frac{((x-y) \cdot v(x))}{|x-y|^2} = \frac{\xi}{2}, \quad (32)$$

где ξ – кривизна кривой в точке x . Используя равенства (29)–(31), предел (32), а также известные асимптотические свойства функций Ханкеля [12], легко доказать следующую лемму.

Лемма 2. При любом $\beta \in \Lambda$ ядра (25), (26), (28) не имеют особенности при совпадении аргументов x и y , а именно

$$\lim_{|x-y| \rightarrow 0} K_{1,1}(\beta; x, y) = \lim_{|x-y| \rightarrow 0} K_{2,2}(\beta; x, y) = 0,$$

$$\lim_{|x-y| \rightarrow 0} K_{1,2}(x, y) = \frac{\ln \chi_e - \ln \chi_i}{2\pi}.$$

При любом $\beta \in \Lambda$ ядро (27) имеет логарифмическую особенность при совпадении аргументов x и y , точнее, при $|x-y| \rightarrow 0$ справедливо следующее асимптотическое представление:

$$K_{2,1}(x, y) \approx \frac{i(\chi_i^2 - \chi_e^2)}{8} + \frac{\chi_e^2 \ln \chi_e - \chi_i^2 \ln \chi_i}{4\pi} + \frac{\chi_e^2 - \chi_i^2}{4\pi} \left[\ln |x - y| - \ln 2 - \psi(1) - \frac{1}{2} \right],$$

где ψ – пси-функция.

3. Дискретность характеристического множества и зависимость характеристических значений от параметров

Пусть C – пространство функций, непрерывных на контуре Γ , с нормой

$$\|u\|_C = \max_{x \in \Gamma} |u(x)|.$$

Для каждого $\beta \in \Lambda$ определим интегральные операторы

$$B_{i,j}(\beta) : C \rightarrow C, \quad i, j = 1, 2,$$

с помощью следующих равенств:

$$(B_{i,j}(\beta)u)(x) = \int_{\Gamma} K_{i,j}(\beta; x, y)u(y)dl(y), \quad x \in \Gamma.$$

Здесь, как и прежде, через $K_{i,j}$, $j = 1, 2$, обозначены ядра (25)–(28) системы интегральных уравнений Мюллера (23), (24). В предыдущем пункте мы доказали, что лишь ядро $K_{2,1}$ имеет логарифмическую особенность при совпадении аргументов, все остальные ядра непрерывны. Хорошо известно [15], что интегральные операторы с такими ядрами являются вполне непрерывными в пространстве C .

Запишем теперь систему (23), (24) в виде операторного уравнения

$$A(\beta)w = (I + B(\beta))w = 0, \quad (33)$$

где $w = (u, v)^T$, $u, v \in C$; вполне непрерывный оператор $B : W \rightarrow W$, $W = C \times C$, определен при помощи равенства

$$Bw = \begin{bmatrix} B_{1,1} & -B_{1,2} \\ B_{2,1} & -B_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix},$$

символом I обозначен единичный оператор.

Теорема 2. Положим $R_+ = \{x \in R : x > 0\}$. При каждом фиксированном $(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) \in \Lambda \times R_+^3$ оператор $A(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) : W \rightarrow W$ фредгольмов. При каждом фиксированном $(k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) \in R_+^3$ оператор-функция $A(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e)$ голоморфна по $\beta \in \Lambda$. Оператор-функция $A(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e)$ непрерывна по переменным $(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) \in \Lambda \times R_+^3$.

Доказательство. При любом $(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) \in \Lambda \times R_+^3$ оператор $A(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e)$ фредгольмов в силу полной непрерывности оператора $B(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e)$. Рассуждая аналогично [16, с. 459], можно показать, что опера-

тор-функция $A(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e)$ голоморфна по $\beta \in \Lambda$ и непрерывна по $(\beta; k, \varepsilon_i, \varepsilon_e) \in \Lambda \times R_+^3$. Теорема доказана.

Ненулевой элемент $w \in W$ будем называть собственной функцией оператор-функции $A(\beta)$, отвечающей характеристическому значению $\beta \in \Lambda$, если выполнено уравнение (33). Характеристическим множеством оператор-функции $A(\beta)$ будем называть множество чисел $\beta \in \Lambda$, для которых оператор $A(\beta)$ не имеет ограниченного обратного в W (это множество называют также сингулярным). Будем обозначать его символом $\sigma(A)$. Обозначим множество регулярных точек оператора $A(\beta)$ через $\rho(A) = \Lambda \setminus \sigma(A)$.

Изучим качественные свойства характеристического и регулярного множеств оператор-функции $A(\beta)$. С этой целью прежде всего докажем полную спектральную эквивалентность задач (1)–(3) и (33).

Теорема 3. Если функция $w = (u_0, v_0)^T \in W$ является собственной функцией оператор-функции $A(\beta)$, отвечающей характеристическому значению $\beta_0 \in \Lambda$, то функция u , определяемая равенствами (12), (13), где

$$\beta = \beta_0, \quad u^+ = u^- = u_0, \quad \frac{\partial u^+}{\partial \nu} = \frac{\partial u^-}{\partial \nu} = v_0, \quad (34)$$

является собственной функцией задачи (1)–(3), отвечающей собственному значению β_0 . Любая собственная функция $u \in U$ задачи (1)–(3), отвечающая собственному значению $\beta_0 \in \Lambda$, может быть представлена в виде (12), (13). При этом функция

$$w = \left(u^+, \frac{\partial u^+}{\partial \nu} \right)^T = \left(u^-, \frac{\partial u^-}{\partial \nu} \right)^T \quad (35)$$

является собственной функцией оператор-функции $A(\beta)$, отвечающей характеристическому значению β_0 .

Доказательство. Предположим, что $w = (u_0, v_0)^T \in W$ является собственной функцией оператор-функции $A(\beta)$, отвечающей характеристическому значению $\beta_0 \in \Lambda$. Построим функцию u по формулам (12), (13) и (34). Хорошо известно [10], что такая функция не равна тождественно нулю, удовлетворяет требуемым свойствам гладкости, а также уравнениям Гельмгольца (1) и (2). Ясно, что условия сопряжения (3) выполнены. С помощью теоремы сложения Графа [12, с. 201] легко показать, что функция u удовлетворяет условию (4). Итак, функция u является собственной функцией задачи (1)–(3), отвечающей собственному значению β_0 . Обратное утверждение теоремы сразу вытекает из леммы 1 и построения оператор-функции $A(\beta)$. Следует заметить лишь, что любая функция w вида (35), где $u \in U$, принадлежит W . Теорема доказана.

Теорема 4. Регулярное множество оператор-функции $A(\beta)$, определенной в (33), не пусто, а именно $\Lambda_0 \setminus G \subset \rho(A)$. Характеристическое множе-

ство $\sigma(A)$ оператор-функции $A(\beta)$ может состоять лишь из изолированных точек, являющихся характеристическими значениями оператор-функции $A(\beta)$. Каждое ее характеристическое значение β непрерывно зависит от параметров $(k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty) \in R_+^3$. Кроме того, с изменением $(k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty) \in R_+^3$ характеристические значения оператор-функции $A(\beta)$ могут появляться и исчезать только на границе множества Λ , т.е. в точках $\pm kn_+, \pm kn_\infty$ и на бесконечности.

Доказательство. В силу фредгольмовости оператора $A(\beta)$ при каждом фиксированном $(\beta; k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty) \in \Lambda \times R_+^3$ (установленной в теореме 2), теоремы 1 о локализации собственных значений задачи (1)–(3) и теоремы 3 о связи решений задач (1)–(3) и (33) оператор $A(\beta; k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty)$ обратим для любых значений $(\beta; k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty) \in (\Lambda_0 \setminus G) \times R_+^3$. Таким образом, справедливость настоящей теоремы следует из свойств оператор-функции $A(\beta; k, \varepsilon_+, \varepsilon_\infty)$, установленных в теореме 2, теоремы И. Ц. Гохберга, М. Г. Крейна [17] об изолированности характеристических значений фредгольмовой голоморфной оператор-функции $A(\beta)$ при наличии в области ее голоморфности хотя бы одной регулярной точки, теоремы S. Steinberg [18] о поведении характеристических значений такой оператор-функции в зависимости от изменения вещественного параметра k в случае, если оператор-функция является совместно непрерывной функцией β и k . Отметим, что теорема S. Steinberg справедлива для частного случая (который как раз и рассматривается нами), когда оператор-функция $A(\beta, k)$ имеет вид $A(\beta, k) = I + B(\beta, k)$, где оператор $B(\beta, k)$ вполне непрерывен. Теорема доказана.

Список литературы

1. **Muller, C.** Grundprobleme der Mathematischen Theorie Elektromagnetischer Schwingungen / C. Muller. – Berlin : Springer, 1957. – 345 p.
2. Spectra, thresholds, and modal fields of a kite-shaped microcavity laser / E. I. Smotrova, V. Tsvirkun, I. Gozhyk, C. Lafargue, C. Ulysse, M. Lebental, A. I. Nosich // J. Opt. Soc. Am. B. – 2013. – Vol. 30, № 6. – P. 1732–1742.
3. **Eyges, L.** Modes of dielectric waveguides of arbitrary cross sectional shape / L. Eyges, P. Gianino, P. Wintersteiner // J. Opt. Soc. Am. – 1979. – Vol. 69, № 9. – P. 1226–1235.
4. **Wang, L.** Modal analysis of homogeneous optical waveguides by the boundary integral formulation and the Nystroem method / L. Wang, J. A. Cox, A. Friedman // J. Opt. Soc. Am. A. – 1998. – Vol. 15, № 1. – P. 92–100.
5. **Снайдер, А.** Теория оптических волноводов / А. Снайдер, Дж. Лав. – М. : Радио и связь, 1987. – 656 с.
6. **Karchevskii, E.** Methods of analytical regularization in the spectral theory of open waveguides (invited paper) / E. Karchevskii, A. Nosich // Proceedings of International Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory. Dnipropetrovsk, Ukraine, 2014. – P. 39–45.
7. **Kartchevski, E. M.** Mathematical analysis of the generalized natural modes of an inhomogeneous optical fiber / E. M. Kartchevski, A. I. Nosich, G. W. Hanson // SIAM J. Appl. Math. – 2005. – Vol. 65, № 6. – P. 2033–2048.

8. **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.
9. **Бицадзе, А. В.** Некоторые классы уравнений в частных производных / А. В. Бицадзе. – М. : Наука, 1981. – 448 с.
10. **Колтон, Д.** Методы интегральных уравнений в теории рассеяния / Д. Колтон, Р. Кресс. – М. : Мир, 1987. – 312 с.
11. **Shestopalov, Yu. V.** Logarithmic integral equations in electromagnetics. / Yu. V. Shestopalov, Yu. G. Smirnov, E. V. Chernokozhin. – VSP, 2000. – 117 p.
12. **Никифоров, А. Ф.** Основы теории специальных функций / А. Ф. Никифоров, В. Б. Уваров. – М. : Наука, 1974. – 303 с.
13. **Ильинский, А. С.** Применение методов спектральной теории в задачах распространения волн / А. С. Ильинский, Ю. В. Шестопалов. – М. : Изд-во МГУ, 1989. – 184 с.
14. **Тихонов, А. Н.** Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Изд-во МГУ, 1999. – 799 с.
15. **Kress, R.** Linear integral equations / R. Kress. – New York : Springer-Verlag, 1999. – 365 p.
16. **Като, Т.** Теория возмущений линейных операторов. / Т. Като. – М. : Мир, 1972. – 740 с.
17. **Гохберг, И. Ц.** Основные положения о дефектных числах, корневых числах и индексах линейных операторов. / И. Ц. Гохберг, М. Г. Крейн // Успехи математических наук. – 1957. – Т. 12, № 2. – С. 44–118.
18. **Steinberg, S.** Meromorphic families of compact operators / S. Steinberg // Arch. Rat. Mech. Anal. – 1968. – Vol. 31, № 5. – P. 372–379.

References

1. Muller C. *Grundprobleme der Mathematischen Theorie Elektromagnetischer Schwingungen* [Grundproblems the Mathematical theory Elektromagnetischer vibrations]. Berlin: Springer, 1957, 345 p.
2. Smotrova E. I., Tsvirkun V., Gozhyk I., Lafargue C., Ulysse C., Lebental M., Nosich A. I. *J. Opt. Soc. Am. B.* 2013, vol. 30, no. 6, pp. 1732–1742.
3. Eyges L., Gianino P., Wintersteiner P. *J. Opt. Soc. Am.* 1979, vol. 69, no. 9, pp. 1226–1235.
4. Wang L., Cox J. A., Friedman A. *J. Opt. Soc. Am. A.* 1998, vol. 15, no. 1, pp. 92–100.
5. Snayder A., Lav Dzh. *Teoriya opticheskikh volnovodov* [Theory of optical waveguides]. Moscow: Radio i svyaz', 1987, 656 p.
6. Karchevskii E., Nosich A. *Proceedings of International Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory*. Dnipropetrovsk, Ukraine, 2014, pp. 39–45.
7. Kartchevski E. M., Nosich A. I., Hanson G. W. *SIAM J. Appl. Math.* 2005, vol. 65, no. 6, pp. 2033–2048.
8. Dautov R. Z., Karchevskiy E. M. *Metod integral'nykh uravneniy i tochnye nelokal'nye granichnye usloviya v teorii dielektricheskikh volnovodov* [Method of integral equations and precise nonlocal boundary conditions in the theory of dielectric waveguides]. Kazan: Kazan. gos. un-t, 2009, 271 p.
9. Bitsadze A. V. *Nekotorye klassy uravneniy v chastnykh proizvodnykh* [Some equation classes in partial derivatives]. Moscow: Nauka, 1981, 448 p.
10. Kolton D., Kress R. *Metody integral'nykh uravneniy v teorii rasseyaniya* [Methods of integral equations in the scattering theory]. Moscow: Mir, 1987, 312 p.
11. Shestopalov Yu. V., Smirnov Yu. G., Chernokozhin E. V. *Logarithmic integral equations in electromagnetics*. VSP, 2000, 117 p.

12. Nikiforov A. F., Uvarov V. B. *Osnovy teorii spetsial'nykh funktsiy* [Basic theory of special functions]. Moscow: Nauka, 1974, 303 p.
 13. Il'inskiy A. S., Shestopalov Yu. V. *Primenenie metodov spektral'noy teorii v zadachakh rasprostraneniya voln* [Application of spectral theory methods in the wave propagation problems]. Moscow: Izd-vo MGU, 1989, 184 p.
 14. Tikhonov A. N., Samarskiy A. A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of mathematical physics]. Moscow: Izd-vo MGU, 1999, 799 p.
 15. Kress R. *Linear integral equations*. New York: Springer-Verlag, 1999, 365 p.
 16. Kato T. *Teoriya vozmushcheniy lineynykh operatorov* [Theory of linear operators' disturbance]. Moscow: Mir, 1972, 740 p.
 17. Gokhberg I. Ts., Kreyn M. G. *Uspekhi matematicheskikh nauk* [Progress of mathematical sciences]. 1957, vol. 12, no. 2, pp. 44–118.
 18. Steinberg S. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 1968, vol. 31, no. 5, pp. 372–379.
-

Спиридонов Александр Олегович
аспирант, Казанский (Приволжский)
федеральный университет (Россия,
г. Казань, ул. Кремлевская, 18)
E-mail: sasha_ens@mail.ru

Spiridonov Aleksandr Olegovich
Postgraduate student, Kazan (Volga region)
Federal University (18 Kremlevskaya
street, Kazan, Russia)

Карчевский Евгений Михайлович
доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра прикладной
математики, Казанский (Приволжский)
федеральный университет (Россия,
г. Казань, ул. Кремлевская, 18)
E-mail: sasha_ens@mail.ru

Karchevskiy Evgeniy Mikhaylovich
Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of applied mathematics, Kazan
(Volga region) Federal University
(18 Kremlevskaya street, Kazan, Russia)

Носич Александр Иосифович
доктор физико-математических наук,
профессор, лаборатория микро- и нано-
оптики, Институт радиофизики
и электроники Национальной
академии наук Украины (Украина,
г. Харьков, ул. Академика Проскуры, 12)
E-mail: sasha_ens@mail.ru

Nosich Aleksandr Iosifovich
Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, laboratory of micro
and nanooptics, Institute of Radio Physics
and Electronics of the National Academy
of Sciences of Ukraine (12 Akademika
Proskury street, Kharkov, Ukraine)

УДК 517.9
Спиридонов, А. О.

Граничные интегральные уравнения мюллера в спектральной теории диэлектрических волноводов / А. О. Спиридонов, Е. М. Карчевский, А. И. Носич // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 24–36.

М. А. Алехина, С. П. Каргин

**АСИМПТОТИЧЕСКИ ОПТИМАЛЬНЫЕ ПО НАДЕЖНОСТИ
СХЕМЫ В БАЗИСЕ РОССЕРА – ТУРКЕТТА В P_4 ¹****Аннотация.**

Актуальность и цели. Многозначная логика предоставляет широкие возможности для разработки различных алгоритмов во многих областях. Она позволяет уменьшить как вычислительную сложность, так и размеры, число соединений в различных арифметико-логических устройствах, повысить плотность размещения элементов на схемах, найти альтернативные методы решения задач. Уже сейчас многозначная логика с успехом применяется при решении многих задач и во множестве технических разработок. Среди них различные арифметические устройства, системы искусственного интеллекта и обработки данных, обработки сложных цифровых сигналов и т.д. Определенный интерес представляет задача исследования надежности функционирования схем в полном конечном базисе из k -значных функций ($k \geq 3$). Задача построения надежных схем в произвольном полном базисе из трехзначных функций (т.е. при $k = 3$) решена в диссертации О. Ю. Барсуковой. Цель работы – построить асимптотически оптимальные по надежности схемы в базисе Россера – Туркетта при $k = 4$.

Результаты. Найдена схема, которую можно использовать для повышения надежности исходных схем, получено рекуррентное соотношение для ненадежностей исходной схемы и предлагаемой схемы. Описан метод синтеза надежных схем, получена верхняя оценка ненадежности схем. Описан класс функций K , содержащий почти все четырехзначные функции, и доказана нижняя оценка ненадежности схем, реализующих функции из этого класса. Для функции из класса K построена схема, верхняя и нижняя оценки ненадежности которой асимптотически равны.

Выводы. Почти любую функцию четырехзначной логики можно реализовать асимптотически оптимальной по надежности схемой.

Ключевые слова: функции четырехзначной логики, ненадежные функциональные элементы, синтез схем из ненадежных элементов.

М. А. Alekhina, S. P. Kargin

**ASYMPTOTIC RELIABILITY-OPTIMAL CIRCUITS
IN THE ROSSER-TURKETT BASIS IN P_4** **Abstract.**

Background. The multivalued logic offers ample opportunities for various algorithms development in multiple fields. It allows to decrease both the computational complexity and the magnitude, a number of connections in various arithmetic and logic units, to increase the density of gate placement on circuits, to find alternative methods of problem solving. Already nowadays the multivalued logic is successfully applied for solution of multiple problems and in many technological developments. The latter include various arithmetical devices, systems of artificial intelligence and data processing, complex digital signal processing etc. The research of reliability of circuit functioning in the complete finite basis from k -valued functions

¹ Исследование выполнено при поддержке РФФИ (проект № 14-01-00273).

($k \geq 3$) is of certain interest. The problem of reliable circuit building in a random complete basis from three-valued functions (i.e. $k = 3$) has been solved in the thesis work by O.Yu. Barsukova. The aim of the work is to build asymptotically reliability-optimal circuits in the Rosser-Turkett basis at $k = 4$.

Results. The authors found a circuit that may be used to increase the reliability of initial circuits, obtained a recurrent correlation for unreliabilities of the initial circuit and the estimated circuit. The researchers described the method of reliable circuits synthesis, obtained the upper estimate of circuit unreliability. The article describes K class functions, containing almost all four-valued functions, proves the lower estimate of circuit unreliability, realizing function of the said class. For the K class functions the authors built a circuit, the lower and upper estimates of which are asymptotically equal.

Conclusions. Almost any function of four-valued logic may be realized by an asymptotically reliability-optimal circuit.

Key words: four-valued logic functions, unreliable functional gates, synthesis of circuits composed of unreliable gates.

Введение

В современной технике и математике в подавляющем большинстве случаев используется двузначная логика. Это исторически сложившееся положение предопределено ее сравнительной простотой и сделало ее применение предпочтительным (в сравнении с другими логическими системами) с технической и экономической точек зрения. Основные модельные объекты, работающие на основе двузначной логики (например, схемы из ненадежных элементов [1–3], неветвящиеся программы [4]) на данный момент являются хорошо изученными. Однако сложность решаемых задач, а следовательно и технических устройств, постоянно возрастает.

Многозначная логика предоставляет более широкие возможности для разработки различных алгоритмов во многих областях. Она позволяет уменьшить как вычислительную сложность, так и размеры, число соединений в различных арифметико-логических устройствах, повысить плотность размещения элементов на схемах, найти альтернативные методы решения задач.

Уже сейчас многозначная логика с успехом применяется при решении многих задач и во множестве технических разработок. Среди них различные арифметические устройства, системы искусственного интеллекта и обработки данных, обработка сложных цифровых сигналов и т.д.

В работе [5] описан функционально полный в P_3 базис, в котором на компромиссной основе согласованы математические и технические (МДП-техники) требования и интересы; а также рассмотрены некоторые аспекты синтеза электронных схем в этом базисе. В работе [6] построен функционально полный в P_4 базис, реализуемый в МОП-структурах. В работе [7] описаны свойства четырехзначных функций, схемы которых можно использовать для повышения надежности исходных схем, и изложен соответствующий метод синтеза.

Таким образом, определенный интерес представляет задача исследования надежности функционирования схем в полном конечном базисе из k -значных функций ($k \geq 3$). Задача построения надежных схем в произвольном полном базисе из трехзначных функций (т.е. $k = 3$) решена в диссертации

О. Ю. Барсуковой [8], а в работе [9] решена задача синтеза асимптотически оптимальных по надежности схем в базисе Россера – Туркетта при $k = 3$.

Цель данной работы – построить асимптотически оптимальные по надежности схемы в базисе Россера – Туркетта при $k = 4$.

Постановка задачи

Пусть $n \in \mathbb{N}$, а P_4 – множество всех функций четырехзначной логики, т.е. функций $f(x_1, \dots, x_n) : \{0, 1, 2, 3\}^n \rightarrow \{0, 1, 2, 3\}$. Рассмотрим реализацию функций из множества P_4 схемами из ненадежных функциональных элементов в базисе Россера – Туркетта $\{0, 1, 2, 3, J_0(x_1), J_1(x_1), J_2(x_1), J_3(x_1), \min\{x_1, x_2\}, \max\{x_1, x_2\}\}$ ($\min\{x_1, x_2\}$ будем также обозначать через $\&$, а $\max\{x_1, x_2\}$ – через $\vee$ [10]).

Будем считать, что схема из ненадежных элементов реализует функцию $f(\tilde{x}^n)$ ($\tilde{x}^n = (x_1, \dots, x_n)$), если при поступлении на входы схемы набора $\tilde{a}^n$ при отсутствии неисправностей в схеме на ее выходе появляется значение $f(\tilde{a}^n)$.

Пусть схема S реализует функцию $f(\tilde{x}^n)$, $\tilde{a}^n$ – произвольный входной набор схемы S , $f(\tilde{a}^n) = \tau$. Обозначим через $P_i(S, \tilde{a}^n)$ вероятность появления значения i ($i \in \{0, 1, 2, 3\}$) на выходе схемы S при входном наборе $\tilde{a}^n$, а через $P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n)$ – вероятность появления ошибки на выходе схемы S при входном наборе $\tilde{a}^n$. Ясно, что

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) = P_{\tau+1}(S, \tilde{a}^n) + P_{\tau+2}(S, \tilde{a}^n) + P_{\tau+3}(S, \tilde{a}^n),$$

в выражениях $\tau+1$, $\tau+2$ и $\tau+3$ сложение осуществляется по $\text{mod } 4$.

Например, если входной набор $\tilde{a}^n$ схемы S такой, что $f(\tilde{a}^n) = 0$, то вероятность появления ошибки на этом наборе равна

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq 0}(S, \tilde{a}^n) = P_1(S, \tilde{a}^n) + P_2(S, \tilde{a}^n) + P_3(S, \tilde{a}^n).$$

Ненадежностью схемы S , реализующей функцию $f(\tilde{x}^n)$, будем называть число $P(S)$, равное наибольшей из вероятностей появления ошибки на выходе схемы S . Надежность схемы S равна $1 - P(S)$.

Предполагается, что элементы схемы независимо друг от друга с вероятностью ϵ ($\epsilon \in (0, 1/6)$) подвержены инверсным неисправностям на выходах, т.е. каждый базисный элемент с функцией $\varphi(\tilde{x}^k)$ ($k \in \{1, 2\}$) на любом входном наборе $\tilde{a}^k$ таком, что $\varphi(\tilde{a}^k) = \tau$, с вероятностью ϵ выдает значение $\tau+1 \pmod{4}$, с вероятностью ϵ выдает значение $\tau+2 \pmod{4}$ и с вероятностью ϵ выдает значение $\tau+3 \pmod{4}$. Очевидно, что ненадежность любого базисного элемента равна 3ϵ , а надежность – $(1 - 3\epsilon)$.

Рекуррентное соотношение

Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – функция из P_4 , а S – любая схема, реализующая функцию f . Покажем, каким образом по схеме S построить схему, которая реализует ту же функцию f , но, возможно (при некоторых условиях на $P(S)$), более надежно. Для этого возьмем четыре экземпляра схемы S и соединим их выходы со входами базисного элемента E , реализующего функцию $\&$. Полученную схему назовем схемой D . Далее возьмем два экземпляра схемы D и соединим их выходы со входами базисного элемента E , реализующего функцию $\vee$. Новую схему обозначим $\psi(S)$. Нетрудно проверить, что $\psi(S)$ реализует ту же функцию f .

В теореме 1 найдено рекуррентное соотношение для ненадежностей схем S и $\psi(S)$.

Теорема 1. Пусть f – произвольная функция из P_4 , S – любая схема, реализующая f , а $P(S)$ – ненадежность схемы S . Тогда схема $\psi(S)$ реализует функцию f с ненадежностью $P(\psi(S))$, удовлетворяющей неравенству $P(\psi(S)) \leq 9\epsilon + 36\epsilon P(S) + 6P^2(S)$.

Доказательство. Пусть f – произвольная функция. Без ограничения общности можно считать, что f зависит от переменных $x_1, \dots, x_n$. Пусть S – любая схема, реализующая f , $\tilde{a}^n$ – произвольный набор, $f(\tilde{a}^n) = \tau$. Обозначим через p вероятность появления ошибки $P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n)$ на выходе схемы S (т.е. $p = P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n)$) и найдем вероятность ошибки на выходе схемы $\psi(S)$ на этом же наборе, учитывая, что ненадежность подсхемы из трех элементов (двух конъюнкторов и одного дизъюнктора) не более 9ϵ :

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(\psi(S), \tilde{a}^n) \leq (1-p)^4 \cdot 9\epsilon + 4p(1-p)^3 \cdot 9\epsilon + \sum_{i=2}^4 C_4^i (1-p)^{4-i} p^i.$$

Найдем верхнюю оценку выражения

$$\sum_{i=2}^4 C_4^i (1-p)^{4-i} p^i :$$

$$\sum_{i=2}^4 C_4^i (1-p)^{4-i} p^i = 6p^2(1-2p+p^2) + 4p^3(1-p) + p^4 = 6p^2 - 8p^3 + 3p^4 \leq 6p^2$$

при всех $p \in [0, 1]$.

Тогда

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(\psi(S), \tilde{a}^n) \leq 9\epsilon + 36p\epsilon + 6p^2.$$

Следовательно, $P(\psi(S)) \leq 9\epsilon + 36\epsilon P(S) + 6P^2(S)$.

Теорема 1 доказана.

Используя теорему 1, получим верхнюю оценку ненадежности схем.

Верхняя оценка ненадежности схем

Лемма 1. При любом $n \in \mathbb{N}$ любую функцию $f(x_1, \dots, x_k, \dots, x_n)$ можно представить следующим образом:

1) при $k = 1$:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = J_0(x_1) \& f(0, x_2, \dots, x_n) \vee J_1(x_1) \& f(1, x_2, \dots, x_n) \vee \\ \vee J_2(x_1) \& f(2, x_2, \dots, x_n) \vee J_3(x_1) \& f(3, x_2, \dots, x_n);$$

2) при $k \in \{2, \dots, n-1\}$:

$$f(x_1, \dots, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, \dots, x_n) = J_0(x_k) \& f(x_1, \dots, x_{k-1}, 0, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ \vee J_1(x_k) \& f(x_1, \dots, x_{k-1}, 1, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee J_2(x_k) \& f(x_1, \dots, x_{k-1}, 2, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ \vee J_3(x_k) \& f(x_1, \dots, x_{k-1}, 3, x_{k+1}, \dots, x_n);$$

3) при $k = n$:

$$f(x_1, \dots, x_{n-1}, x_n) = J_0(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0) \vee J_1(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 1) \vee \\ \vee J_2(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2) \vee J_3(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 3).$$

Теорема 2. Любую функцию $f \in P_4$ можно реализовать такой схемой D' , что при всех $\varepsilon \in (0, 1/1000]$ верно неравенство $P(D') \leq 11\varepsilon$.

Доказательство. Индукция по числу n переменных функции $f(\tilde{x}^n)$.

1. Докажем утверждение для $n = 1$, т.е. для всех возможных функций $f(x)$, зависящих от одной переменной x . Представим функцию $f(x)$ в первой форме: $f(x) = J_0(x) \& f(0) \vee J_1(x) \& f(1) \vee J_2(x) \& f(2) \vee J_3(x) \& f(3)$.

Чтобы промоделировать эту формулу схемой (обозначим ее S'), потребуется не более 15 элементов. Поэтому ненадежность $P(S')$ схемы S' удовлетворяет неравенству: $P(S') \leq 45\varepsilon$.

По схеме S' построим схему $\psi(S')$. Используя теорему 1 и условие $\varepsilon \leq 1/1000$, оценим ненадежность схемы $\psi(S')$:

$$P(\psi(S')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 45\varepsilon^2 + 6 \cdot 45^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 13770\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{13770}{1000} \varepsilon \leq 23\varepsilon.$$

По схеме $\psi(S')$ построим схему $\psi^2(S')$. Используя теорему 1 и условие $\varepsilon \leq 1/1000$, оценим ненадежность схемы $\psi^2(S')$:

$$P(\psi^2(S')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 23\varepsilon^2 + 6 \cdot 23^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 1680\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{1680}{1000} \varepsilon \leq 10,68\varepsilon \leq 11\varepsilon.$$

Таким образом, для $n = 1$ теорема верна.

2. Пусть утверждение теоремы верно для функций $f(\tilde{x}^{n-1})$ с числом переменных $(n-1)$. Докажем, что оно верно для функций $f(\tilde{x}^n)$. Разложим функцию $f(x_1, \dots, x_{n-1}, x_n)$ по переменной x_n , используя лемму 1:

$$f(x_1, \dots, x_{n-1}, x_n) = J_0(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0) \vee J_1(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 1) \vee \\ \vee J_2(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2) \vee J_3(x_n) \& f(x_1, \dots, x_{n-1}, 3).$$

Используя это разложение, построим схему C , реализующую функцию $f(\tilde{x}^n)$, причем S_0 – схема, реализующая функцию $f_0 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0)$, S_1 – схема, реализующая функцию $f_1 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 1)$; S_2 – схема, реализующая функцию $f_2 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2)$; S_3 – схема, реализующая функцию $f_3 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 3)$.

В схеме C выделим подсхему A , состоящую из 11 элементов, выход которой является выходом схемы C , а на входы подаются значения x_n , $f_0 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0)$, $f_1 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 1)$, $f_2 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2)$ и $f_3 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 3)$.

Выделенная подсхема A состоит из 11 элементов, поэтому ее ненадежность $P(A) \leq 33\varepsilon$. Функции $f_0 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 0)$, $f_1 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 1)$, $f_2 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2)$ и $f_3 = f(x_1, \dots, x_{n-1}, 3)$ по индуктивному предположению можно реализовать такими схемами S_0, S_1, S_2 и S_3 соответственно, что ненадежность каждой из них не больше 11ε .

Если схема A исправна, то для реализации f она использует значение одной из схем, реализующих функции f_0, f_1, f_2 и f_3 . Поэтому

$$P(C) \leq P(A) + 11\varepsilon \leq 33\varepsilon + 11\varepsilon = 44\varepsilon.$$

По схеме C построим схему $\psi(C)$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi(C)$, учитывая, что $\varepsilon \leq \frac{1}{1000}$:

$$P(\psi(C)) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 44\varepsilon^2 + 6 \cdot 44^2\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 13200\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{13200}{1000}\varepsilon \leq 22,2\varepsilon.$$

По схеме $\psi(C)$ построим схему $\psi^2(C)$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi^2(C)$, учитывая, что $\varepsilon \leq \frac{1}{1000}$:

$$P(\psi^2(C)) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 22,2\varepsilon^2 + 6 \cdot (22,2)^2\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 3757\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{3757}{1000}\varepsilon \leq 12,8\varepsilon.$$

По схеме $\psi^2(C)$ построим схему $\psi^3(C)$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi^3(C)$, учитывая, что $\varepsilon \leq 1/1000$:

$$P(\psi^3(C)) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 12,8\varepsilon^2 + 6 \cdot (12,8)^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 1444\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{1444}{1000}\varepsilon \leq 11\varepsilon.$$

Следовательно, схема $\psi^3(C)$ – искомая схема D' .

Теорема 2 доказана.

Теорема 3. Любую функцию $f \in P_4$ можно реализовать такой схемой D' , что $P(D'') \leq 9\varepsilon + 954\varepsilon^2$ при всех $\varepsilon \in (0, 1/1000]$.

Доказательство. По теореме 2 любую функцию f можно реализовать схемой D' с ненадежностью $P(D') \leq 11\varepsilon$. По схеме D' построим схему $\psi(D')$ и оценим ее ненадежность по теореме 1, учитывая, что $\varepsilon \leq \frac{1}{1000}$:

$$P(\psi(D')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 11\varepsilon^2 + 6 \cdot 11^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 1122\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{1122}{1000}\varepsilon \leq 10,122\varepsilon.$$

По схеме $\psi(D')$ построим схему $\psi^2(D')$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi^2(D')$, учитывая, что $\varepsilon \leq 1/1000$:

$$P(\psi^2(D')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 10,122\varepsilon^2 + 6 \cdot (10,122)^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 979,13\varepsilon^2 \leq 9,98\varepsilon.$$

По схеме $\psi^2(D')$ построим схему $\psi^3(D')$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi^3(D')$, учитывая, что $\varepsilon \leq 1/1000$:

$$P(\psi^3(D')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 9,98\varepsilon^2 + 6 \cdot (9,98)^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 957\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + \frac{957}{1000}\varepsilon \leq 9,957\varepsilon.$$

По схеме $\psi^3(D')$ построим схему $\psi^4(D')$. Воспользуемся соотношением из теоремы 1 и оценим ненадежность схемы $\psi^4(D')$, учитывая, что $\varepsilon \leq 1/1000$:

$$P(\psi^4(D')) \leq 9\varepsilon + 36 \cdot 9,957\varepsilon^2 + 6 \cdot (9,957)^2 \varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 953,31\varepsilon^2 \leq 9\varepsilon + 954\varepsilon^2.$$

Следовательно, схема $\psi^4(D')$ – искомая схема D'' .

Теорема 3 доказана.

Из теоремы 3 следует, что любую функцию из P_4 можно реализовать схемой, ненадежность которой асимптотически (при $\varepsilon \rightarrow 0$) не больше 9ε .

Нижняя оценка ненадежности схем

Для получения нижних оценок ненадежности схем используется теорема 4.

Теорема 4. Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – произвольная функция, которая принимает четыре значения 0, 1, 2, 3; S – любая схема, ее реализующая. Пусть подсхема

A схемы S содержит выход схемы S и реализует функцию $\varphi(\tilde{y}^m)$ с ненадежностью $P(A) \leq 1/2$. Пусть $p_0 = \min_{\tilde{b}_0^m} P_{\varphi(\tilde{b}_0^m) \neq 0}(A, \tilde{b}_0^m)$, где $\tilde{b}_0^m$ такой входной набор схемы A , что $\varphi(\tilde{b}_0^m) = 0$; $p_1 = \min_{\tilde{b}_1^m} P_{\varphi(\tilde{b}_1^m) \neq 1}(A, \tilde{b}_1^m)$, где $\tilde{b}_1^m$ такой входной набор схемы A , что $\varphi(\tilde{b}_1^m) = 1$; $p_2 = \min_{\tilde{b}_2^m} P_{\varphi(\tilde{b}_2^m) \neq 2}(A, \tilde{b}_2^m)$, где $\tilde{b}_2^m$ такой входной набор схемы A , что $\varphi(\tilde{b}_2^m) = 2$; $p_3 = \min_{\tilde{b}_3^m} P_{\varphi(\tilde{b}_3^m) \neq 3}(A, \tilde{b}_3^m)$, где $\tilde{b}_3^m$ такой входной набор схемы A , что $\varphi(\tilde{b}_3^m) = 3$.

Тогда вероятности ошибок на выходе схемы S удовлетворяют неравенствам:

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq 0}(S, \tilde{a}^n) \geq p_0, \text{ если } f(\tilde{a}^n) = 0;$$

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq 1}(S, \tilde{a}^n) \geq p_1, \text{ если } f(\tilde{a}^n) = 1;$$

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq 2}(S, \tilde{a}^n) \geq p_2, \text{ если } f(\tilde{a}^n) = 2;$$

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq 3}(S, \tilde{a}^n) \geq p_3, \text{ если } f(\tilde{a}^n) = 3.$$

Доказательство. Пусть $\tilde{a}^n$ такой входной набор схемы S , что $f(\tilde{a}^n) = 0$. В зависимости от набора $\tilde{a}^n$ и неисправностей в схеме на входы схемы A поступает некоторый набор длины m с компонентами из множества $\{0, 1, 2, 3\}$. Обозначим множество всех таких наборов через $M(\tilde{a}^n)$. Разобьем множество $M(\tilde{a}^n)$ на подмножества $M_i(\tilde{a}^n) = \{\tilde{c}^m \mid \varphi(\tilde{c}^m) = i\}$, $i \in \{0, 1, 2, 3\}$. Обозначим через $v_i(\tilde{a}^n)$ вероятность появления на входах схемы A набора из множества $M_i(\tilde{a}^n)$. Очевидно, что

$$v_i(\tilde{a}^n) \geq 0 \text{ и } v_0(\tilde{a}^n) + v_1(\tilde{a}^n) + v_2(\tilde{a}^n) + v_3(\tilde{a}^n) = 1.$$

Найдем вероятность $P_0(S, \tilde{a}^n)$ появления 0 на выходе схемы S :

$$\begin{aligned} P_0(S, \tilde{a}^n) &\leq v_0(\tilde{a}^n)(1 - p_0) + v_1(\tilde{a}^n)P(A) + v_2(\tilde{a}^n)P(A) + v_3(\tilde{a}^n)P(A) = \\ &= (1 - v_1(\tilde{a}^n) - v_2(\tilde{a}^n) - v_3(\tilde{a}^n))(1 - p_0) + (v_1(\tilde{a}^n) + v_2(\tilde{a}^n) + v_3(\tilde{a}^n))P(A) = \\ &= 1 - p_0 - (v_1(\tilde{a}^n) + v_2(\tilde{a}^n) + v_3(\tilde{a}^n))(1 - p_0 - P(A)). \end{aligned}$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе схемы S удовлетворяет неравенству

$$\begin{aligned}
P_{f(\tilde{a}^n) \neq 0}(S, \tilde{a}^n) &\geq p_0 + \left(v_1(\tilde{a}^n) + v_2(\tilde{a}^n) + v_3(\tilde{a}^n) \right) (1 - p_0 - P(A)) \geq \\
&\geq p_0 + \left(v_1(\tilde{a}^n) + v_2(\tilde{a}^n) + v_3(\tilde{a}^n) \right) (1 - 2P(A)) \geq p_0,
\end{aligned}$$

поскольку $P(A) \leq 1/2$.

Аналогично проверяются три других неравенства из формулировки теоремы.

Теорема 4 доказана.

Следствие 1. $P(S) \geq \max\{p_0, p_1, p_2, p_3\}$.

Пусть f – функция, которая принимает четыре значения: 0, 1, 2, 3. Пусть S – любая схема, реализующая функцию f , и пусть в схеме S можно выделить подсхему D , которая имеет один вход, содержит выход схемы S и реализует либо тождественную функцию y , либо $y+1 \pmod{4}$, либо $y+2 \pmod{4}$, либо $y+3 \pmod{4}$, т.е. реализует некоторую функцию $y+j \pmod{4}$, $j \in \{0,1,2,3\}$. Обозначим через C подсхему, получаемую из схемы S удалением подсхемы D .

Будем говорить, что схема C *надежнее* схемы S (и получается из схемы S удалением подсхемы D), если выполнено неравенство $P(C) < P(S)$.

Пусть $f(\tilde{x}^n)$ – функция, которая принимает четыре значения 0, 1, 2, 3.

Схему S , реализующую функцию $f(\tilde{x}^n)$, будем называть *bc-схемой*, если из нее нельзя получить более надежную схему удалением подсхемы, реализующей некоторую функцию $y+j \pmod{4}$, $j \in \{0,1,2,3\}$, т.е. либо тождественную функцию y , либо $y+1 \pmod{4}$, либо $y+2 \pmod{4}$, либо $y+3 \pmod{4}$.

Обозначим через $h(\tilde{x}^n)$ функцию, которую реализует схема C , а через w_i , $i \in \{0,1,2,3\}$, – вероятность появления ошибки на выходе схемы D при поступлении на ее вход значения i . Очевидно, что $f(\tilde{x}^n) = h(\tilde{x}^n) + j \pmod{4}$.

Справедлива теорема 5.

Теорема 5. Пусть схема S , ненадежность которой равна $P(S)$, реализует функцию f и является *bc-схемой*. Пусть в схеме S можно выделить подсхему D , имеющую один вход, содержащую выход схемы и реализующую некоторую функцию $y+j \pmod{4}$, $j \in \{0,1,2,3\}$, с такими вероятностями ошибок w_0, w_1, w_2, w_3 , что $0 < w_0 + w_1 + w_2 + w_3 < 1$. Тогда верно неравенство

$$\min \left\{ \frac{w_i}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3} \right\} \leq P(S),$$

где минимум берется по $i \in \{0,1,2,3\}$.

Доказательство (от противного). Пусть для функции f выполнены условия теоремы. Без ограничения общности можно считать, что функция f зависит от n переменных $x_1, \dots, x_n$, т.е. $f = f(\tilde{x}^n)$. Пусть подсхема D реали-

зует некоторую функцию $y + j$ ($j \in \{0, 1, 2, 3\}$), а схема C , получаемая из схемы S удалением подсхемы D , реализует функцию $h(\tilde{x}^n)$. Тогда для функций $f(\tilde{x}^n)$, $h(\tilde{x}^n)$ и числа j верно равенство $h(\tilde{x}^n) + j = f(\tilde{x}^n)$.

Допустим, что утверждение теоремы неверно, тогда при всех $i \in \{0, 1, 2, 3\}$ верно неравенство $\frac{w_i}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3} > P(S)$, из которого получаем соотношение

$$\frac{w_i}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3} - w_i = \frac{w_i(1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3)}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3} > P(S) - w_i.$$

Следовательно,

$$\frac{w_i}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3} > \frac{P(S) - w_i}{1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3}. \quad (1)$$

Пусть $\tilde{a}^n$ – произвольный входной набор схемы S , пусть $f(\tilde{a}^n) = \tau$ и $h(\tilde{a}^n) = u$. Тогда $\tau = u + j \pmod{4}$. Найдем вероятность $P_\tau(S, \tilde{a}^n)$ появления τ на выходе схемы S :

$$\begin{aligned} P_\tau(S, \tilde{a}^n) &= P_u(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u) + P_{u+1}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+1) + \\ &+ P_{u+2}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+2) + P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+3) = \\ &= P_u(C, \tilde{a}^n)(1 - w_\tau) + P_{u+1}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+1) + \\ &+ P_{u+2}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+2) + P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+3) = \\ &= (1 - P_{u+1}(C, \tilde{a}^n) - P_{u+2}(C, \tilde{a}^n) - P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)) = \\ &= (1 - w_\tau) + P_{u+1}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+1) + P_{u+2}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+2) + \\ &+ P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)P_\tau(D, u+3) = 1 - w_\tau + P_{u+1}(C, \tilde{a}^n)(w_\tau + P_\tau(D, u+1) - 1) + \\ &+ P_{u+2}(C, \tilde{a}^n)(w_\tau + P_\tau(D, u+2) - 1) + P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)(w_\tau + P_\tau(D, u+3) - 1). \end{aligned}$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе схемы S равна:

$$\begin{aligned} P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) &= w_\tau + P_{u+1}(C, \tilde{a}^n)(1 - w_\tau - P_\tau(D, u+1)) + \\ &+ P_{u+2}(C, \tilde{a}^n)(1 - w_\tau - P_\tau(D, u+2)) + P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)(1 - w_\tau - P_\tau(D, u+3)) \geq \\ &\geq w_\tau + (1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3)(P_{u+1}(C, \tilde{a}^n) + P_{u+2}(C, \tilde{a}^n) + P_{u+3}(C, \tilde{a}^n)) = \\ &= w_\tau + (1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3)P(C), \end{aligned}$$

т.е. верно неравенство

$$P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) \geq w_\tau + (1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3)P(C). \quad (2)$$

Из соотношения (2) следует неравенство:

$$\frac{P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) - w_\tau}{1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3} \geq P(C). \quad (3)$$

Учитывая (3) и (1), имеем

$$P(C) \leq \frac{P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) - w_\tau}{1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3} \leq \frac{P(S) - w_\tau}{1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3} < \frac{w_\tau}{w_0 + w_1 + w_2 + w_3}.$$

Тогда

$$-P(C)(w_0 + w_1 + w_2 + w_3) > -w_\tau. \quad (4)$$

Из неравенства (2), учитывая (4), следует

$$\begin{aligned} P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) &\geq w_\tau + P(C)(1 - w_0 - w_1 - w_2 - w_3) = \\ &= w_\tau + P(C) - P(C)(w_0 + w_1 + w_2 + w_3) > w_\tau + P(C) - w_\tau = P(C), \end{aligned}$$

т.е. $P_{f(\tilde{a}^n) \neq \tau}(S, \tilde{a}^n) > P(C)$. Следовательно, $P(S) > P(C)$, что противоречит условию.

Теорема 5 доказана.

Обозначим через $K(n)$ множество таких функций четырехзначной логики, зависящих от переменных $x_1, \dots, x_n$ ($n \geq 3$), что каждая из этих функций принимает все три значения 0, 1, 2, 3 и не представима ни в виде $x_k \vee h(\tilde{x}^n)$, ни в виде $x_k \& h(\tilde{x}^n)$, ($k \in \{1, 2, \dots, n\}$, $h(\tilde{x}^n)$ – произвольная функция четырехзначной логики). Пусть $K = \bigcup_{n=3}^{\infty} K(n)$.

Утверждение 1. $|K(n)| \geq 4^{4^n} - 2n4^{3 \cdot 4^{n-1}} - 4 \cdot 3^{4^n}$.

Доказательство. Сначала найдем число функций, представимых в виде $x_k \& h(\tilde{x}^n)$, ($k \in \{1, 2, \dots, n\}$, $h(\tilde{x}^n)$ – произвольная функция четырехзначной логики). Для этого разложим функцию $x_k \& h(\tilde{x}^n)$ по переменной x_k , используя лемму 1:

$$\begin{aligned} x_k \& h(\tilde{x}^n) &= J_0(x_k) \& 0 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 0, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ &\vee J_1(x_k) \& 1 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 1, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ &\vee J_2(x_k) \& 2 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 2, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ &\vee J_3(x_k) \& 3 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 3, x_{k+1}, \dots, x_n) = \\ &= J_1(x_k) \& 1 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 1, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \end{aligned}$$

$$\vee J_2(x_k) \& 2 \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 2, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee$$

$$\vee J_3(x_k) \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 3, x_{k+1}, \dots, x_n).$$

Тогда число функций, представимых в виде $x_k \& h(\tilde{x}^n)$, не больше $n4^{4^{n-1}} \cdot 4^{4^{n-1}} \cdot 4^{4^{n-1}} = n4^{3 \cdot 4^{n-1}}$.

Теперь найдем число функций, представимых в виде $x_k \vee h(\tilde{x}^n)$, $k \in \{1, 2, \dots, n\}$, $h(\tilde{x}^n)$ – произвольная функция четырехзначной логики. Для этого разложим функцию $x_k \vee h(\tilde{x}^n)$ по переменной x_k , используя лемму 1:

$$\begin{aligned} x_k \vee h(\tilde{x}^n) &= J_0(x_k) \& [0 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 0, x_{k+1}, \dots, x_n)] \vee \\ &\vee J_1(x_k) \& [1 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 1, x_{k+1}, \dots, x_n)] \vee \\ &\vee J_2(x_k) \& [2 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 2, x_{k+1}, \dots, x_n)] \vee \\ &\vee J_3(x_k) \& [3 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 3, x_{k+1}, \dots, x_n)] = \\ &= J_0(x_k) \& h(x_1, \dots, x_{k-1}, 0, x_{k+1}, \dots, x_n) \vee \\ &\vee J_1(x_k) \& [1 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 1, x_{k+1}, \dots, x_n)] \vee \\ &\vee J_2(x_k) \& [2 \vee h(x_1, \dots, x_{k-1}, 2, x_{k+1}, \dots, x_n)] \vee J_3(x_k). \end{aligned}$$

Тогда число функций, представимых в виде $x_k \vee h(\tilde{x}^n)$, не больше, чем $n4^{4^{n-1}} \cdot 4^{4^{n-1}} \cdot 4^{4^{n-1}} = n4^{3 \cdot 4^{n-1}}$.

Таким образом, число функций, представимых в виде $x_k \& h(\tilde{x}^n)$ или $x_k \vee h(\tilde{x}^n)$, не больше, чем $2n4^{3 \cdot 4^{n-1}}$.

Наконец, рассмотрим функции, принимающие не больше трех значений из множества $\{0, 1, 2, 3\}$. Очевидно, их число не больше $C_4^3 \cdot 3^{4^n} = 4 \cdot 3^{4^n}$. Заметим, что среди этих функций содержатся все константы 0, 1, 2, 3.

Следовательно, число функций, не принадлежащих классу $K(n)$, не больше $2n4^{3 \cdot 4^{n-1}} + 4 \cdot 3^{4^n}$. Поэтому $|K(n)| \geq 4^{4^n} - 2n4^{3 \cdot 4^{n-1}} - 4 \cdot 3^{4^n}$.

Утверждение 1 доказано.

Из утверждения 1 следует, что класс $K(n)$ содержит почти все функции

четырехзначной логики из $P_4(n)$, поскольку $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2n4^{3 \cdot 4^{n-1}} + 4 \cdot 3^{4^n}}{4^{4^n}} = 0$.

Справедлива теорема о нижней оценке ненадежности схем, реализующих функции из класса K .

Теорема 6. Пусть функция $f \in K$. Тогда для любой схемы S , реализующей f , при $\varepsilon \in (0, 1/1000]$ верно неравенство $P(S) \geq 9\varepsilon - 33\varepsilon^2 + 36\varepsilon^3$.

Доказательство. Пусть функция $f \in K$, пусть S – любая схема, реализующая f . Заметим, что схема S содержит хотя бы три элемента.

Для ненадежности $P(S)$ схемы S верно одно из двух неравенств: либо $P(S) > 9\epsilon + 954\epsilon^2$ (тогда утверждение теоремы верно), либо $P(S) \leq 9\epsilon + 954\epsilon^2$.

Пусть $P(S) \leq 9\epsilon + 954\epsilon^2$. Без ограничения общности схему S можно считать *bc-схемой* (иначе будем удалять из схемы S подсхемы, реализующие либо тождественную функцию y , либо функцию $y+1$, либо функцию $y+2$, либо функцию $y+3$, и получать более надежные схемы, реализующие функции $f + \text{const}$ до тех пор, пока не получим *bc-схему* S'' , для которой и проведем дальнейшие рассуждения, заменив S на S'').

Обозначим через E_1 функциональный элемент, выход которого является выходом схемы S , и в зависимости от приписанных ему базисных функций рассмотрим следующие варианты.

1. Пусть элементу E_1 приписана функция $\&$. Поскольку $f \in K$, входы элемента E_1 соединены не с полюсами, а с выходами некоторых элементов E_2 и E_3 .

1.1. Пусть элементы E_2 и E_3 различны. Обозначим через D подсхему, состоящую из элементов E_1 , E_2 и E_3 . Пусть входной набор схемы D таков, что при отсутствии неисправностей в схеме D на ее выходе появляется значение 3 (такой набор найдется, поскольку $f \in K$).

1.1.1. Пусть выход элемента E_2 не соединен со входом элемента E_3 и выход элемента E_3 не соединен со входом элемента E_2 . Вычислим вероятность появления 3 на выходе схемы D по формуле полной вероятности и получим: $(1-3\epsilon)^3 + 2 \cdot 3\epsilon(1-3\epsilon)\epsilon + (3\epsilon)^2\epsilon = 1 - 9\epsilon + 33\epsilon^2 - 36\epsilon^3$.

Тогда вероятность появления ошибки на выходе подсхемы D равна $p_3 = 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

1.1.2. Пусть выход одного из элементов, например E_2 , соединен со входом другого элемента E_3 .

1.1.2.1. Пусть элементу E_3 приписана функция $J_3(x)$ или константа 3 (иначе значение 3 не появится на выходе схемы D), или же элементу E_3 приписана функция двух переменных ($\&$ или $\vee$) и оба входа элемента E_3 соединены с выходом элемента E_2 . Вероятность появления значения 3 на выходе схемы D в этих случаях равна

$$(1-3\epsilon) \left[(1-3\epsilon)^2 + 3\epsilon \cdot \epsilon \right] + 3\epsilon \cdot \epsilon = 1 - 9\epsilon + 33\epsilon^2 - 36\epsilon^3.$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе подсхемы D равна $p_3 = 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

1.1.2.2. Пусть элементу E_3 приписана функция $\&$ или $\vee$, но только один из входов элемента E_3 соединен с выходом элемента E_2 . Вероятность появления значения 3 на выходе схемы D в этих случаях равна

$$(1-3\epsilon)\left[(1-3\epsilon)^2 + 3\epsilon \cdot \epsilon\right] + 3\epsilon \cdot \epsilon = 1-9\epsilon + 33\epsilon^2 - 36\epsilon^3.$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе подсхемы D равна $p_3 = 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

1.2. Пусть элементы E_2 и E_3 совпадают, т.е. оба входа элемента E_1 соединены с выходом элемента E_2 . Обозначим через D подсхему, состоящую из элемента E_1 . Очевидно, что схема D реализует тождественную функцию, а вероятности появления ошибок на выходе схемы D равны: $w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = 3\epsilon$. По теореме 5 справедливо неравенство $3\epsilon/(12\epsilon) \leq 9\epsilon + 954\epsilon^2$, что неверно, поскольку при $\epsilon \leq 1/1000$ верно неравенство: $1/4 > 9\epsilon > 9\epsilon + 954\epsilon^2$.

Полученное противоречие означает, что рассматриваемая схема не может быть подсхемой *bc*-схемы S .

2. Пусть элементу E_1 приписана функция $\vee$. Поскольку $f \in K$, входы элемента E_1 соединены не с полюсами, а с выходами некоторых элементов E_2 и E_3 .

2.1. Пусть элементы E_2 и E_3 различны. Обозначим через D подсхему, состоящую из элементов E_1 , E_2 и E_3 . Пусть входной набор схемы D таков, что при отсутствии неисправностей в схеме D на ее выходе появляется значение 0 (такой набор найдется, поскольку $f \in K$).

2.1.1. Пусть выход элемента E_2 не соединен со входом элемента E_3 и выход элемента E_3 не соединен со входом элемента E_2 . Вычислим вероятность появления 0 на выходе схемы D по формуле полной вероятности и получим: $(1-3\epsilon)^3 + 2 \cdot 3\epsilon(1-3\epsilon)\epsilon + (3\epsilon)^2\epsilon = 1-9\epsilon + 33\epsilon^2 - 36\epsilon^3$. Тогда вероятность ошибки на выходе подсхемы D равна $p_0 = 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\epsilon - 33\epsilon^2 + 36\epsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

2.1.2. Пусть выход одного из элементов, например E_2 , соединен со входом другого элемента E_3 .

2.1.2.1. Пусть элементу E_3 приписана одна из функций $J_i(x)$, $i \in \{1, 2, 3\}$ или константа 0 (иначе значение 0 не появится на выходе схемы D), или же элементу E_3 приписана функция двух переменных ($\&$ или $\vee$) и оба входа элемента E_3 соединены с выходом элемента E_2 . Вероятность появления значения 0 на выходе схемы D в этих случаях равна

$$(1-3\epsilon)\left[(1-3\epsilon)^2 + 3\epsilon \cdot \epsilon\right] + 3\epsilon \cdot \epsilon = 1-9\epsilon + 33\epsilon^2 - 36\epsilon^3.$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе подсхемы D равна $p_0 = 9\varepsilon - 33\varepsilon^2 + 36\varepsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\varepsilon - 33\varepsilon^2 + 36\varepsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

2.1.2.2. Пусть элементу E_3 приписана функция $\&$ или $\vee$, но только один из входов элемента E_3 соединен с выходом элемента E_2 . Вероятность появления значения 0 на выходе схемы D в этих случаях равна

$$(1 - 3\varepsilon) \left[(1 - 3\varepsilon)^2 + 3\varepsilon \cdot \varepsilon \right] + 3\varepsilon \cdot \varepsilon = 1 - 9\varepsilon + 33\varepsilon^2 - 36\varepsilon^3.$$

Тогда вероятность появления ошибки на выходе подсхемы D равна $p_0 = 9\varepsilon - 33\varepsilon^2 + 36\varepsilon^3$. По теореме 4 получаем неравенство $P(S) \geq 9\varepsilon - 33\varepsilon^2 + 36\varepsilon^3$, т.е. утверждение теоремы верно.

2.2. Пусть элементы E_2 и E_3 совпадают, т.е. оба входа элемента E_1 соединены с выходом элемента E_2 . Обозначим через D подсхему, состоящую из элемента E_1 . Очевидно, что схема D реализует тождественную функцию, а вероятности появления ошибок на выходе схемы D равны: $w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = 3\varepsilon$. По теореме 5 справедливо неравенство $3\varepsilon / (12\varepsilon) \leq 9\varepsilon + 954\varepsilon^2$, что неверно, поскольку при $\varepsilon \leq 1/1000$

$$1/4 > 9\varepsilon > 9\varepsilon + 954\varepsilon^2.$$

Полученное противоречие означает, что рассматриваемая схема не может быть подсхемой *bc-схемы* S .

3. Пусть элементу E_1 приписана любая из функций $J_i(x)$ или константа j ($i, j \in \{0, 1, 2, 3\}$). Тогда схема S реализует либо функцию, принимающую только два значения 0 и 2, либо константу j , что противоречит условию $f \in K$.

Теорема 6 доказана.

Следовательно, любая схема, реализующая функцию $f \in K$, функционирует с ненадежностью, которая асимптотически (при $\varepsilon \rightarrow 0$) не меньше 9ε . Это означает, что схема, реализующая функцию $f \in K$ и удовлетворяющая условиям теоремы 3, является асимптотически оптимальной по надежности и функционирует с ненадежностью, асимптотически равной 9ε при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Выводы

1. Любую функцию из P_4 можно реализовать схемой, функционирующей с ненадежностью, асимптотически (при $\varepsilon \rightarrow 0$) не больше 9ε (теорема 3).

2. Любую функцию из класса K (содержащего почти все функции из P_4) нельзя реализовать схемой с ненадежностью, асимптотически (при $\varepsilon \rightarrow 0$) меньше 9ε (теорема 6).

3. Схема, реализующая функцию $f \in K$ и удовлетворяющая условиям теоремы 3, является асимптотически оптимальной по надежности и функционирует с ненадежностью, асимптотически равной 9ε при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Таким образом, в базисе Россера – Туркетта:

1) любую функцию четырехзначной логики можно реализовать схемой, ненадежность которой асимптотически (при $\varepsilon \rightarrow 0$) не больше 9ε ;

2) для почти любой функции такая схема является асимптотически оптимальной по надежности и функционирует с ненадежностью, асимптотически равной 9ε при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Список литературы

1. **Васин, А. В.** О базисах, в которых асимптотически оптимальные схемы функционируют с ненадежностью 5ε / А. В. Васин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 1 (13). – С. 64–79.
2. **Алехина, М. А.** О ненадежности схем из ненадежных функциональных элементов при однотипных константных неисправностях на выходах элементов / М. А. Алехина // Дискретная математика. – 1993. – Т. 5, № 2. – С. 59–74.
3. **Alekhina, M. A.** Synthesis and complexity of asymptotically optimal circuits with unreliable gates / M. A. Alekhina // Fundamenta Informaticae. – 2010. – Vol. 104 (3). – P. 219–225.
4. **Грабовская, С. М.** О надежности неветвящихся программ с ненадежным оператором условной остановки в произвольном полном конечном базисе / С. М. Грабовская // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 3 (19). – С. 52–60.
5. **Виноградов, Ю. А.** О синтезе трехзначных МДП-схем / Ю. А. Виноградов // Математические вопросы кибернетики : сб. ст. – Вып. 3. – М. : Наука, 1991. – С. 187–198.
6. **Виноградов, Ю. А.** О синтезе четырехзначных квазикомплементарных МОП-схем / Ю. А. Виноградов // Математические вопросы кибернетики : сб. ст. – Вып. 8. – М. : Наука, 1999. – С. 298–300.
7. **Алехина, М. А.** О синтезе схем из ненадежных элементов в P_4 / М. А. Алехина, С. П. Каргин // Известия высших учебных заведений. Физико-математические науки. – 2014. – № 4 (32). – С. 47–56.
8. **Барсукова, О. Ю.** Синтез надежных схем, реализующих функции двужанной и трехзначной логик : дис. ... канд. физ.-мат. наук / Барсукова О. Ю. – Пенза, 2014. – 87 с.
9. **Алехина, М. А.** Оценки ненадежности схем в базисе Россера – Туркетта / М. А. Алехина, О. Ю. Барсукова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 1 (29). – С. 5–19.
10. **Яблонский, С. В.** Введение в дискретную математику / С. В. Яблонский. – М. : Высш. шк., 2001. – 384 с.

References

1. Vasin A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2010, no. 1 (13), pp. 64–79.
2. Alekhina M. A. *Diskretnaya matematika* [Discrete mathematics]. 1993, vol. 5, no. 2, pp. 59–74.
3. Alekhina M. A. *Fundamenta Informaticae*. 2010, vol. 104 (3), pp. 219–225.
4. Grabovskaya S. M. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 3 (19), pp. 52–60.

5. Vinogradov Yu. A. *Matematicheskie voprosy kibernetiki: sb. st.* [Mathematical problems of cybernetics]. Issue 3. Moscow: Nauka, 1991, pp. 187–198.
6. Vinogradov Yu. A. *Matematicheskie voprosy kibernetiki: sb. st.* [Mathematical problems of cybernetics]. Issue 8. Moscow: Nauka, 1999, pp. 298–300.
7. Alekhina M. A., Kargin S. P. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2014, no. 4 (32), pp. 47–56.
8. Barsukova O. Yu. *Sintez nadezhnykh skhem, realizuyushchikh funktsii dvuznachnoy i trekhznachnoy logik: dis. kand. fiz.-mat. nauk* [Synthesis of reliable circuits, realizing functions of two-valued and three-valued logic: dissertation to apply for the degree of the candidate of physical and mathematical sciences]. Penza, 2014, 87 p.
9. Alekhina M. A., Barsukova O. Yu. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2014, no. 1 (29), pp. 5–19.
10. Yablonskiy S. V. *Vvedenie v diskretnuyu matematiku* [Introduction into discrete mathematics]. Moscow: Vyssh. shk., 2001, 384 p.

Алехина Марина Анатольевна

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующая кафедрой
дискретной математики, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: alehina@pnzgu.ru

Alekhina Marina Anatol'evna

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of discrete mathematics, Penza State
University (40 Krasnaya street, Penza,
Russia)

Каргин Степан Павлович

аспирант, Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: dm@pnzgu.ru

Kargin Stepan Pavlovich

Postgraduate student, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

УДК 519.718

Алехина, М. А.

Асимптотически оптимальные по надежности схемы в базисе Россера – Туркетта в P_4 / М. А. Алехина, С. П. Каргин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 37–53.

О СЛОЖНОСТИ ФОРМУЛ АЛГЕБРЫ ЛОГИКИ В НЕКОТОРЫХ ПОЛНЫХ БАЗИСАХ, СОСТОЯЩИХ ИЗ ЭЛЕМЕНТОВ С ПРЯМЫМИ И ИТЕРАТИВНЫМИ ВХОДАМИ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. В математической кибернетике одной из основных задач является задача синтеза управляющих систем, заключающаяся в построении схемы из заданного класса, реализующая заданную функцию алгебры логики. При решении этой задачи часто требуется учитывать различного рода ограничения на структуру и параметры управляющих систем. Такие ограничения часто более точно описывают реальные вычисления и имеют физическую интерпретацию. Кроме того, исследования сложности реализаций булевых функций в моделях с ограничениями и влияний параметров ограничений на эту сложность представляют большой теоретический интерес. Рассматриваемое в данной работе ограничение относится к способам соединения элементов в схеме. Входы элементов схем делятся на два типа – прямые и итеративные. Итеративные входы служат для присоединения к ним выходов других элементов, а прямые входы являются входами схем. Задача синтеза в этой модели рассматривается для случая формул, т.е. схем без ветвлений выходов элементов. Целью данной работы является получение асимптотики функции Шеннона для сложности формул в классе полных базисов, итеративное замыкание которых содержит класс монотонных функций. В таких базисах, как было получено ранее, порядок роста этой функции является «стандартным» для булевых формул, однако константа в асимптотике была неизвестна.

Материалы и методы. В работе, в частности, приводится модификация известного ранее оптимального метода синтеза формул с использованием техники моделирования функций алгебры логики на компонентах специальных разбиений множеств наборов булева куба.

Результаты. Получена асимптотика функции Шеннона для сложности формул алгебры логики в полных базисах с прямыми и итеративными переменными, итеративное замыкание которых содержит класс монотонных функций. Указан также способ нахождения константы в этой асимптотике.

Выводы. Установленные результаты позволяют сделать вывод о существовании асимптотики функции Шеннона для формул в отдельных классах базисов с прямыми и итеративными переменными, где порядок этой функции «стандартный» и совпадает с порядком роста соответствующей функции для класса булевых формул в обычных полных базисах.

Ключевые слова: булевы формулы, прямые и итеративные переменные, синтез, сложность, функция Шеннона.

S. A. Lozhkin, V. A. Konovodov

ON LOGIC ALGEBRA FORMULAS' COMPLEXITY IN SOME COMPLETE BASES CONSISTING OF ELEMENTS WITH BOTH DIRECT AND ITERATIVE INPUTS

¹ Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 15-01-07474-а.

Abstract.

Background. One of the main problems in mathematical cybernetics is the problem of control systems synthesis, consisting in building of a circuit from a given class that will realize a given Boolean function. At solving of the problem one often needs to take into account various limitations of control systems' structure and parameters. Such limitations often describe real calculations more precisely and have a physical interpretation. Moreover, the studies of the complexity of realization of Boolean functions in models with limitations and the effects of limitation parameters are of great theoretical interest. In the present work the limitation is associated with methods of gates connection in a circuit. Circuit elements' inputs are divided into 2 types – direct and iterative. Iterative inputs are used for connection of other elements' outputs to them, and direct inputs serve as circuits' inputs. The synthesis problem in this model is considered for a case of formulas, i.e. circuits without elements' inputs branching. The aim of the work is to obtain asymptotics of the Shannon function for the complexity of the formulas in the class of complete bases, whose iterative closure contains the class of monotonic functions. In such bases, as it has been previously obtained, the order of growth of this function is "standard" for Boolean formulas, however, the constant in the asymptotics hasn't been revealed.

Materials and methods. In this work in particular the authors show the modification of the previously known optimal method of formulas synthesis using the technique of logic-algebra functions modeling by variables on components of special partitions of multiple sets of the Boolean cube.

Results. The authors revealed an asymptotic behavior of the Shannon function for the complexity of Boolean formulas in complete bases with direct and iterative variables, whose iterative closure contains the class of all monotonic functions. The method of finding the constant in the asymptotics was also specified.

Conclusions. The established results allow to conclude about the existence of the asymptotic behavior of the Shannon function for formulas in separate classes of bases with direct and iterative variables, where the order of this function is "standard", and coincides with the order of growth of the corresponding functions for a class of Boolean formulas in regular full bases.

Key words: Boolean formulae, direct and iterative variables, synthesis, complexity, Shannon function.

Введение

Рассматривается задача оптимальной по сложности реализации произвольных функций алгебры логики формулами над конечным полным базисом A , элементы которого имеют как прямые, так и итеративные входы. Данная задача синтеза решается в рамках модели [1], которая предполагает, что при построении формулы или схемы над базисом A прямые входы его элементов могут присоединяться только к ее входам или константам 0, 1, а их итеративные входы, кроме того, – к выходам других элементов. При этом изучается сложность самых «сложных» или «типичных» функций алгебры логики (далее – просто функций), исследуется асимптотическое поведение функции Шеннона $\mathcal{L}_A(n)$ для сложности формул над A , реализующих функции от n «прямых» переменных.

Напомним, что согласно [2] для произвольного базиса A рассматриваемого вида аналогичная $\mathcal{L}_A(n)$ функция Шеннона для сложности схем из функциональных элементов асимптотически равна $\hat{\rho}_A \cdot 2^n / n$, где

$\hat{\rho}_A$ – некоторая константа, определяемая базисом A . В работе [3] было показано, что функция Шеннона $\mathcal{L}_A(n)$, $n=1,2,\dots$, имеет порядок роста $2^n / \log n$, если итеративное замыкание базиса A , т.е. множество тех функций от итеративных переменных, которые можно реализовать формулами над A , содержит класс монотонных функций. Кроме того, в [3] было установлено, что в любом другом случае всегда найдется базис A' с таким же, как и у базиса A , итеративным замыканием, для которого функция Шеннона $\mathcal{L}_{A'}(n)$ имеет порядок роста 2^n .

Основным результатом данной работы является доказательство того, что в случае произвольного базиса A , итеративное замыкание которого содержит класс монотонных функций, функция Шеннона $\mathcal{L}_A(n)$ асимптотически равна $\rho_A \cdot \frac{2^n}{\log n}$, где ρ_A – константа, определяемая базисом A .

Указан также способ нахождения константы ρ_A по базису A .

1. Основные определения и результаты

Пусть $X = \{x_1, x_2, \dots\}$ и $Y = \{y_1, y_2, \dots\}$ – счетные множества булевых переменных, причем переменные из множества X (из Y) будем называть *прямыми* (соответственно, *итеративными*). Для каждого множества переменных Z обозначим через $P_2(Z)$ множество всех функций, зависящих от переменных из Z . Функции, не имеющие общих существенных переменных, будем называть *независимыми*.

На множестве $P_2(X \cup Y)$ согласно [1] определим следующие операции суперпозиции:

- 1) переименование (с отождествлением) прямых переменных;
- 2) подстановка констант 0, 1 вместо переменных;
- 3) переименование (без отождествления) итеративных переменных;
- 4) подстановка одной из двух независимых функций вместо итеративной переменной другой функции;
- 5) замена итеративных переменных прямыми переменными;
- 6) отождествление итеративных переменных.

Пусть $A \subseteq P_2(X \cup Y)$ – некоторое конечное множество базисных функций. В соответствии с введенными операциями суперпозиции будем рассматривать одновыходные схемы из функциональных элементов (в дальнейшем – просто схемы) над базисом A , в которых:

- прямые входы любого элемента либо присоединяются к входам схемы, либо являются константными входами (вход называется константным, если вместо него в базисный элемент подставлена константа 0 или 1);
- итеративные входы любого элемента либо присоединяются к выходам других элементов, либо присоединяются к входам схемы, либо являются константными входами;
- неконстантным входам схемы сопоставлены некоторые переменные из множества X .

Под формулами будем понимать те одновыходные схемы, в которых выход любого элемента либо поступает на вход ровно одного (другого) элемента, либо является выходом схемы.

Систему функций A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, будем называть *полной*, если для любой функции f , $f \in P_2(X)$, существует формула над A указанного вида, реализующая функцию f .

Рассмотрим произвольный базис $A = \{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_b\}$, $A \subseteq P_2(X \cup Y)$. Будем считать, что каждый элемент ε_i , $i = 1, \dots, b$, имеет вес L_i и k_i входов, при этом k'_i из них прямые, а $k''_i = k_i - k'_i$ – итеративные. *Приведенным весом* элемента ε_i , $i = 1, \dots, b$, такого, что $k_i > 1$, назовем величину

$$\rho_i = \frac{L_i}{k_i - 1}.$$

Без ограничения общности будем считать, что $k''_i = 0$ для всех $i = b', \dots, b$, где $1 \leq b' \leq b$, при этом базис A разбивается на два множества:

$$A' = \{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{b'}\}, \quad A'' = \{\varepsilon_{b'+1}, \dots, \varepsilon_b\},$$

во втором из которых все входы каждого элемента прямые.

Сложностью $\mathcal{L}(\mathcal{F})$ формулы $\mathcal{F}$ в базисе A будем называть сумму весов всех входящих в нее элементов. Функцией Шеннона $\mathcal{L}_A(n)$ для сложности формул в базисе A , как обычно, будем называть максимальное значение $\mathcal{L}_A(f)$ среди всех функций f , $f \in P_2(\{x_1, \dots, x_n\})$, где $\mathcal{L}_A(f)$ – минимальная сложность формулы из рассматриваемого класса, реализующей функцию f .

Пусть $A \subseteq P_2(X \cup Y)$. Множество тех функций, которые можно получить из функций системы A в результате применения операций суперпозиции 1–6, описанных выше, обозначим через $[A]$. Множество всех функций множества $[A]$, зависящих только от итеративных переменных, обозначим

$$\delta(A) = [A] \cap P_2(Y)$$

и будем называть *итеративным замыканием* базиса A [1, 3]. Введение оператора δ позволяет классифицировать все системы функций от прямых и итеративных переменных по их итеративным замыканиям. Множество $\delta(A)$ представляет собой «обычный» замкнутый класс (см., например, [4]) в $P_2(Y)$, содержащий константы, и поэтому совпадает с одним из классов системы

$$\Delta = \{B, I, O, D, K, L, M, P_2(Y)\},$$

где $B = \{0, 1\}$, $I = Y \cup B$, $O = I \cup \{\bar{y} : y \in Y\}$, класс D (класс K) содержит константы и дизъюнкции (соответственно конъюнкции) переменных Y , а классы L и M состоят из линейных и монотонных функций от переменных Y соответственно.

Как уже отмечалось, в [3] показано, что для любой системы функций A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, такой, что $\delta(A) \in \{M, P_2(Y)\}$, справедливо соотношение

$$L_A(n) = \Theta\left(\frac{2^n}{\log n}\right),$$

а для каждого δ , $\delta \in \{I, O, D, K, L\}$, существует базис A такой, что $\delta(A) = \delta$, и при этом

$$L_A(n) = \Theta(2^n).$$

Назовем *макроблоком* в базисе A схему из функциональных элементов в этом базисе, состоящую из одного элемента $\varepsilon_j \in A'$, $j \in \{1, \dots, b'\}$, такого, что $k_j'' \geq 1$, и m , $0 \leq m \leq k_j'' - 1$, элементов $\varepsilon_{i_1}, \dots, \varepsilon_{i_m} \in A''$, где $i_1, \dots, i_m \in \{b' + 1, \dots, b\}$, выходы которых подаются на итеративные входы элемента ε_j .

Прямыми входами макроблока будем считать входы элементов $\varepsilon_{i_1}, \dots, \varepsilon_{i_m}$, а также все свободные (т.е. те, на которые не подаются выходы других элементов макроблока) входы элемента ε_j , кроме одного из его итеративных входов, который будем считать единственным итеративным входом макроблока.

Таким образом, макроблок M имеет сложность $\mathcal{L}_M = L_j + L_{i_1} + \dots + L_{i_m}$, а число его входов равно $k_M = k_{i_1} + \dots + k_{i_m} + k_j - m$. Приведенным *весом* макроблока M назовем величину

$$\rho_M = \frac{\mathcal{L}_M}{k_M - 1}.$$

Макроблок M указанного вида назовем *каноническим*, если $m = k_j'' - 1$ и $i_1 = \dots = i_m$ или $m = 0$ во введенных выше обозначениях. Макроблок над базисом A назовем *минимальным*, если он имеет минимальный приведенный вес среди всех макроблоков в этом базисе.

Определим приведенный вес ρ_A базиса A следующим образом:

1. Если минимальный приведенный вес элементов базиса A достигается на элементе ε_j , имеющем хотя бы один итеративный вход, то положим $\rho_A = \rho_j$.

2. Если минимальный приведенный вес элементов базиса A достигается только на элементах, у которых все входы прямые, а M – канонический макроблок в этом базисе с минимальным приведенным весом, то положим $\rho_A = \rho_M$.

Из работы [1] следует, что базис A , каждый элемент которого имеет не более одного итеративного входа, не является полным.

Основным результатом настоящей работы является следующее утверждение.

Теорема. Пусть A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, – конечный полный базис функций такой, что $\delta(A) \in \{P_2(Y), M\}$. Тогда при $n = 1, 2, \dots$ справедливо соотношение¹

$$\mathcal{L}_A(n) \sim \rho_A \frac{2^n}{\log n}.$$

3. Доказательство нижней оценки теоремы

Лемма 1. Для любого базиса существует канонический макроблок, являющийся в нем минимальным.

Доказательство. Пусть M – произвольный минимальный макроблок в базисе A , который состоит из элементов $\varepsilon_j, \varepsilon_{i_1}, \dots, \varepsilon_{i_m}$, где $j \in \{1, \dots, b'\}$, $m \in \{0, \dots, k_j'' - 1\}$, $i_1, \dots, i_m \in \{b' + 1, \dots, b\}$. Сначала докажем, что найдется такой индекс p , $p \in \{i_1, \dots, i_m\}$, что макроблок M' , полученный из макроблока M заменой всех элементов $\varepsilon_{i_1}, \dots, \varepsilon_{i_m}$ на элемент ε_p , имеет приведенный вес $\rho_{M'} = \rho_M$. Для этого достаточно доказать справедливость неравенства

$$\rho_M = \frac{L_j + L_{i_1} + \dots + L_{i_m}}{k_{i_1} + \dots + k_{i_m} + k_j - m - 1} \geq \frac{L_j + mL_p}{k_j - 1 + m(k_p - 1)} = \rho_{M'}$$

для некоторого p , $p \in \{i_1, \dots, i_m\}$. Предположим противное, пусть для всех p , $p \in \{i_1, \dots, i_m\}$, выполняется неравенство

$$\rho_M < \rho_{M'},$$

что эквивалентно

$$L_j m(k_p - 1) + (k_j - 1 + m(k_p - 1)) \sum_{t=1}^m L_{i_t} < L_p m(k_j - 1) + (L_j + mL_p) \sum_{t=1}^m (k_{i_t} - 1).$$

Просуммировав последнее неравенство для всех p , $p \in \{i_1, \dots, i_m\}$, получим противоречие, что доказывает существование определенного выше макроблока M' .

Заметим далее, что если рассмотреть функцию

$$r(m) = \frac{L_j + mL_p}{k_j - 1 + m(k_p - 1)},$$

¹ Асимптотическое равенство $a(n) \sim b(n)$ означает одновременное выполнение асимптотических неравенств $a(n) \leq b(n)$ и $b(n) \leq a(n)$, где запись $a(n) \leq b(n)$ означает, что $a(n) \leq (1 + o(1))b(n)$ при $n \rightarrow \infty$. Все логарифмы в настоящей работе рассматриваются по основанию 2.

задающую приведенный вес макроблока M' в зависимости от m как функцию действительного аргумента m на отрезке $[0, k_j'' - 1]$, то такая функция будет непрерывной, ограниченной и монотонной функцией на этом отрезке, а это означает, что ее минимум достигается на одном из концов этого отрезка. При $m \in \{0, k_j'' - 1\}$ соответствующий макроблок M'' , который отличается от M' количеством m элементов с прямыми входами, имеет приведенный вес $\rho_{M''} \leq \rho_{M'} \leq \rho_M$ и при этом является каноническим. Лемма доказана.

Нижнюю оценку в теореме докажем при помощи мощностного метода. Пусть $\Psi_A(\mathcal{L}, n)$ – число попарно неэквивалентных формул в базисе A , реализующих функции от n прямых переменных и имеющих сложность не более $\mathcal{L}$.

Лемма 2. Пусть A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, – конечный полный базис функций такой, что $\delta(A) \in \{P_2(Y), M\}$. Тогда

$$L_A(n) \geq \rho_A \frac{2^n}{\log n}.$$

Доказательство. Рассмотрим произвольную формулу $\mathcal{F}$ в базисе A , реализующую функцию от n прямых переменных $\tilde{x}_n = (x_1, \dots, x_n)$. Пусть эта формула содержит n_i элементов ε_i для всех $i = 1, \dots, b$. Тогда ранг этой формулы

$$R(\mathcal{F}) = \sum_{i=1}^b n_i(k_i - 1) + 1,$$

а ее сложность

$$\mathcal{L}(\mathcal{F}) = \sum_{i=1}^b n_i L_i.$$

Покажем сначала, что

$$L(\mathcal{F}) \geq \rho_A R(\mathcal{F}) - O(1) \quad (1)$$

при больших значениях $R(\mathcal{F})$. Рассмотрим два случая.

Случай 1. Среди элементов с минимальным приведенным весом есть элементы, имеющие хотя бы один итеративный вход. Пусть ε_j – один из таких элементов, $j \in \{1, \dots, b\}$. Тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathcal{F}) &= \sum_{i \in \{1, \dots, b\} \setminus \{j\}} n_i L_i + n_j L_j = \\ &= \sum_{i \in \{1, \dots, b\} \setminus \{j\}} n_i L_i - \frac{1}{k_j - 1} \left(R(\mathcal{F}) - \sum_{i \in \{1, \dots, b\} \setminus \{j\}} n_i(k_i - 1) - 1 \right) \cdot L_i = \end{aligned}$$

$$= \sum_{i \in \{1, \dots, b\} \setminus \{j\}} n_i (L_i - \rho_j (k_i - 1)) + \rho_j R(\mathcal{F}) - \rho_j \geq \rho_j \cdot R(\mathcal{F}) - O(1),$$

поскольку для всех $i = 1, \dots, b$ справедливо неравенство $(L_i - \rho_j (k_i - 1)) \geq 0$ в силу минимальности приведенного веса элемента ε_j .

Заметим, что оценка $\mathcal{L}(\mathcal{F}) = \rho_j \cdot R(\mathcal{F})$ достигается на формуле, целиком состоящей из элементов ε_j .

Случай 2. Все элементы минимального приведенного веса имеют только прямые входы. Формула $\mathcal{F}$ представима в виде

$$\mathcal{F}(\tilde{x}_n) = \mathcal{F}'\left(\tilde{x}_n, \varphi_{j_1}(\tilde{x}_n), \dots, \varphi_{j_p}(\tilde{x}_n)\right),$$

где $\mathcal{F}'$ – формула, реализующая функцию из $P_2(X \cup Y)$ в базисе A' , а $j_1, \dots, j_p \in \{b' + 1, \dots, b\}$. Построим формулу $\mathcal{G}$, представляющую собой цепь

из $n' = \sum_{i=1}^{b'} n_i$ макроблоков $M_1, \dots, M_{n'}$ и состоящую из тех же самых

элементов, что и формула $\mathcal{F}$. Элементы с прямыми входами в таком случае должны быть произвольно подсоединены к свободным итеративным входам такой формулы. Заметим, что $\mathcal{L}(\mathcal{F}) = \mathcal{L}(\mathcal{G})$ и $R(\mathcal{F}) = R(\mathcal{G})$. Рассмотрим формулу $\mathcal{G}$ как формулу в базисе из макроблоков $M_1, \dots, M_{n'}$, тогда, аналогично случаю 1, сложность такой формулы не менее, чем $\rho_M R(\mathcal{G}) - O(1)$, где M – макроблок из $M_1, \dots, M_{n'}$ с наименьшим приведенным весом. Таким образом, в силу леммы 1 в этом случае оценка (1) также справедлива и достигается на формуле, целиком состоящей из минимальных канонических для базиса A макроблоков.

Число попарно неэквивалентных формул ранга R в базисе A , реализующих функции от n прямых переменных, не превосходит $(cn)^R$, поэтому в силу (1)

$$\Psi_A(\mathcal{L}, n) \leq (cn)^{\frac{1}{\rho_A} \mathcal{L}}.$$

Так как

$$\Psi_A(\mathcal{L}_A(n), n) \geq 2^{2^n},$$

то при достаточно больших n справедливо утверждение леммы.

2. Доказательство верхней оценки теоремы

Формулу $\mathcal{F}$, в записи которой переменная z , $z \in X \cup Y$, встречается только один раз, будем называть *бесповторной по переменной z* .

Из работы [5] и леммы о немонотонной функции (см, например, [4]) следует, что для любого базиса A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, такого, что

$\delta(A) \in \{P_2(Y), M\}$, существуют неповторные по своим существенным переменным формулы $\mathcal{F}_{\&}$, $\mathcal{F}_{\vee}$, $\mathcal{F}_{\neg}$, реализующие функции $y_1 \cdot y_2$, $y_1 \vee y_2$, $\bar{x}_1$ соответственно.

Обозначим через μ_n мультиплексорную функцию порядка n , $n \geq 1$, определяемую равенством

$$\mu_n(x_1, \dots, x_n, y_0, \dots, y_{2^n-1}) = \bigvee_{\sigma_1, \dots, \sigma_n \in B} x_1^{\sigma_1} \dots x_n^{\sigma_n} y_{v(\sigma_1, \dots, \sigma_n)},$$

где $v(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ – число, двоичная запись которого совпадает с набором $(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, для всех i , $i = 0, \dots, 2^n - 1$, а $x^\sigma = x\sigma \vee \bar{x}\bar{\sigma}$, $\sigma \in B$. Переменные $y_0, \dots, y_{2^n-1}$ этой функции будем называть *информационными*.

Лемма 3 [5]. Существует неповторная по информационным переменным формула $\mathcal{F}_{\mu_n}$ в базисе $\{y_1 \cdot y_2, y_1 \vee y_2, \bar{x}_1\}$, реализующая мультиплексорную функцию порядка n со сложностью $O(2^n)$.

Пусть $\varphi(z_1, \dots, z_N)$ – функция, существенно зависящая от всех своих переменных из множества $\{z_1, \dots, z_N\} \subseteq X \cup Y$. Множество функций G , $G \subseteq P_2(Z)$, где $Z \subseteq P_2(X \cup Y)$, $|Z| = m$, называется [5] *φ -универсальным множеством порядка m* , если любая функция g , $g \in P_2(Z)$, может быть представлена в виде $g = \varphi(g_1, \dots, g_N)$, где $g_i \in G$ для всех i , $i = 1, \dots, N$. Справедливо следующее утверждение.

Лемма 4 [5]. Для любых натуральных чисел s , m , N , удовлетворяющим условию

$$s \cdot N \geq 2^m,$$

и для любой функции $\varphi(z_1, \dots, z_N)$ существует φ -универсальное множество G порядка m такое, что

$$|G| \leq N \cdot 2^s.$$

Множество наборов δ , $\delta \subseteq B^q$, будем называть *m -регулярным множеством наборов* куба B^q , если $m < q$, $|\delta| = 2^m$, и все префиксы длины m наборов из δ различны. Пусть $\Delta = (\delta_1, \dots, \delta_{2^{q-m}})$ – разбиение куба B^q на m -регулярные подмножества. Будем говорить, что разбиение Δ *моделирует* функции из множества G , $G \subseteq P_2(Z)$, где $Z \subseteq P_2(X \cup Y)$, $|Z| = m$, с помощью булевых переменных или их отрицаний тогда и только тогда, когда для любой функции g , $g \in G$, и для каждого i , $i = 1, \dots, 2^{q-m}$, существует переменная x_j , где $1 \leq j \leq q$, и константа σ , $\sigma \in B$, такие, что $g \equiv x_j^\sigma$ на компоненте δ_i . При этом компонента δ_i считается «хорошей» компонентой, если для каждой такой функции g указанное свойство

выполняется при $\sigma = 1$. В противном случае соответствующую компоненту будем называть «плохой».

Лемма 5 [6]. Для любого множества G , $G \subseteq P_2(Z)$, где $Z \subseteq P_2(X \cup Y)$, $|Z| = m$, и для любого q , $q \geq m + 3|G|$, существует разбиение $\Delta = (\delta_1, \dots, \delta_{2^{q-m}})$ куба B^q на m -регулярные подмножества, моделирующие все функции из G с помощью булевых переменных или их отрицаний, и такое, что доля «плохих» компонент в нем не превосходит $(e_1)^{q-m}$, где e_1 – абсолютная константа, $e_1 < 1$.

Лемма 6. Пусть A , $A \subseteq P_2(X \cup Y)$, – конечный полный базис функций такой, что $\delta(A) \in \{P_2(Y), M\}$. Тогда для любой функции f , $f \in P_2(\{x_1, \dots, x_n\})$, существует формула $\mathcal{F}_f$ в этом базисе, реализующая эту функцию, и такая, что

$$\mathcal{L}(\mathcal{F}) \leq \rho_A \frac{2^n}{\log n}.$$

Доказательство. Пусть M – минимальный канонический макроблок в базисе A . В случае, когда минимальный приведенный вес элементов базиса достигается на некотором элементе ε_j , $j \in \{1, \dots, b\}$, имеющем хотя бы один итеративный вход, положим $M = \varepsilon_j$.

Пусть, далее, натуральные параметры m , q , s , N и p таковы, что

$$1 \leq m < q < n, \quad s \cdot N \geq 2^m, \quad p \cdot (k_M - 1) + 1 = N,$$

где k_M – число входов M , и пусть $x' = (x_1, \dots, x_q)$, $x'' = (x_{q+1}, \dots, x_n)$.

Рассмотрим произвольную формулу $\mathcal{F}_1$, состоящую из p блоков M . Как обычно, выходы любого блока могут подсоединяться только к итеративным входам других блоков. Считая все входы этой формулы прямыми, обозначим реализуемую формулой $\mathcal{F}_1$ функцию как φ . Заметим, что

$$\mathcal{L}(\mathcal{F}_1) = \rho_A \cdot N.$$

Рассмотрим функцию $d(y_1, \dots, y_N) = y_1 \vee \dots \vee y_N$, эта функция, как было указано выше, реализуема неповторной по всем своим переменным формулой $\mathcal{F}_\vee^{(N)}$ в базисе A сложности $O(N)$. Построим по лемме 4 φ -универсальное множество G_1 порядка m и d -универсальное множество G_2 порядка m так, что функции из этих множеств зависят от одних и тех же переменных $(x_1, \dots, x_m)$, и при этом

$$|G_1 \cup G_2| \leq 2 \cdot N \cdot 2^s.$$

Положим $q = m + 3|G|$, где $G = G_1 \cup G_2$, и построим по лемме 5 разбиение $\Delta = (\delta_1, \dots, \delta_{2^{q-m}})$ куба B^q на m -регулярные компоненты,

в котором доля «плохих» компонент не превосходит e_1^{q-m} , $e_1 < 1$, и которое моделирует все функции из множества G с помощью переменных или их отрицаний.

Заметим, что при любом i , $i \in \{1, \dots, 2^{q-m}\}$, любая функция $g \in P_2(x')$ совпадает на множестве δ_i в силу его m -регулярности с одной из функций от переменных $(x_1, \dots, x_m)$, и поэтому, с одной стороны, в силу ϕ -универсальности множества G_1 функция g совпадает на δ_i с суперпозицией вида $\phi(g_1^{(1)}, \dots, g_1^{(N)})$, внутренние функции которой принадлежат G_1 , а с другой стороны, в силу d -универсальности множества G_2 , функция g на δ_i может быть представлена в виде дизъюнкции $g_2^{(1)} \vee \dots \vee g_2^{(N)}$ функций из G_2 . Из свойств разбиения Δ следует, что на «хороших» компонентах δ_i указанная функция g совпадает с формулой $\phi(x_{j_1}, \dots, x_{j_N})$, где каждая переменная x_{j_v} моделирует на δ_i функцию $g_1^{(v)}$ при всех v , $v \in \{1, \dots, N\}$. Кроме того, на «плохих» компонентах δ_i функция g представима в виде $x_{t_1}^{\sigma_1} \vee \dots \vee x_{t_N}^{\sigma_N}$, где каждая функция $g_2^{(v)}$ моделируется на δ_i при помощи $x_{t_v}^{\sigma_v}$ при всех v , $v \in \{1, \dots, N\}$.

Таким образом, на «хороших» компонентах разбиения Δ указанная функция $g \in P_2(x')$ реализуется формулой

$$\mathcal{F}_1(x_{j_1}, \dots, x_{j_N}), \quad (2)$$

а на «плохих» компонентах этого разбиения она допускает реализацию формулой

$$\mathcal{F}_v^{(N)}(x_{t_1}^{\sigma_1}, \dots, x_{t_N}^{\sigma_N}), \quad (3)$$

которая имеет сложность $O(N)$ в силу линейной сложности формулы $\mathcal{F}_v^{(N)}$ в базисе A и возможности реализовать прямое отрицание в этом базисе.

Рассмотрим следующее дизъюнктивное разложение функции $f(x', x'')$ по переменным группы x'' и его последующую модификацию на основе разбиения Δ :

$$f(x', x'') = \bigvee_{\sigma'' \in B^{n-q}} K_{\sigma''}(x'') f(x', \sigma'') = \bigvee_{i=1}^{2^{q-m}} \chi_i(x') \bigvee_{\sigma'' \in B^{n-q}} K_{\sigma''}(x'') f(x', \sigma''),$$

где $\sigma'' = (\sigma_{q+1}, \dots, \sigma_n)$, $K_{\sigma''}(x'') = x_{q+1}^{\sigma_{q+1}} \dots x_n^{\sigma_n}$, а $\chi_i(x')$ – характеристическая функция компоненты δ_i , $i \in \{1, \dots, 2^{q-m}\}$, т.е. функция, равная 1 только на наборах множества δ_i .

Согласно этому разложению построим формулу

$$\mathcal{F}_{f'} = \bigvee_{i=1}^{2^{q-m}} \mathcal{A}_i(x') \cdot \mathcal{F}_{\mu_{n-q}} \left(x'', \Phi_0^{(i)}(x'), \dots, \Phi_{2^{n-q}-1}^{(i)}(x') \right),$$

где для каждого i , $i \in \{1, \dots, 2^{q-m}\}$, формула $\mathcal{A}_i(x')$ – совершенная дизъюнктивная нормальная форма, реализующая функцию $\chi_i(x')$, а формула $\Phi_j^{(i)}(x')$, $j \in \{0, \dots, 2^{n-q}-1\}$, реализует функцию $f(x', \sigma'')$ при $v(\sigma'') = j$ и имеет вид (2) в случае, когда компонента δ_i «хорошая» и (3) иначе.

Искомая формула $\mathcal{F}_f$ получается из формулы $\mathcal{F}'_f$ заменой элементов $y_1 \cdot y_2$, $y_1 \vee y_2$, $\bar{x}_1$ соответствующими им неповторными формулами $\mathcal{F}_{\&}$, $\mathcal{F}_{\vee}$, $\mathcal{F}_{\neg}$. Заметим, что при этом итеративное отрицание не потребуется, так как в формуле $\mathcal{F}'_f$ все отрицания стоят над переменными.

Выберем значения параметров, удовлетворяющие всем введенным ограничениям, и оценим сложность построенной формулы $\mathcal{F}_f$. Положим

$$m = \lceil 2 \log \log n \rceil, \quad s = \lceil \log n - 3 \log \log n \rceil,$$

и пусть N – минимальное натуральное число, удовлетворяющее введенным ограничениям. Заметим, что при этом

$$q = m + 3 \mid G \mid \leq m + 6N \cdot 2^s = O\left(\frac{n}{\log^2 n}\right).$$

Сложность реализации всех дизъюнктивных нормальных форм $\mathcal{A}_i(x')$ не превосходит

$$O(2^q \cdot q) = O\left(\frac{2^n}{\log^2 n}\right),$$

так как каждая функция $\chi_i(x')$ обращается в единицу на 2^m наборах. Сложность реализации формулы $\mathcal{F}_{\mu_{n-q}}$ не превосходит согласно лемме 3

$$O(2^{n-q}) = O\left(\frac{2^n}{\log^2 n}\right).$$

Основная сложность формулы $\mathcal{F}_f$ – сложность реализации всех подформул вида $\Phi_j^{(i)}(x')$ на «хороших» компонентах разбиения Δ , она не превосходит величины

$$\rho_A \cdot N \cdot 2^{q-m} \cdot 2^{n-q} \sim \rho_A \cdot \frac{2^n}{\log n}.$$

Сложность всех аналогичных подформул для «плохих» компонент не больше, чем

$$O(N) \cdot 2^{n-m} \cdot (e_1)^{q-m} = O\left(\frac{2^n}{\log^2 n}\right).$$

Таким образом, $\mathcal{L}(\mathcal{F}_f) \sim \rho_A \cdot \frac{2^n}{\log n}$, что доказывает лемму.

Теорема следует из лемм 2 и 5.

Список литературы

1. **Ложкин, С. А.** О полноте и замкнутых классах функций алгебры логики с прямыми и итеративными переменными / С. А. Ложкин // Вестник Московского университета. Сер. 15. Вычислительная математика и кибернетика. – 1999. – № 3. – С. 35–41.
2. **Ложкин, С. А.** О сложности реализации функций алгебры логики схемами и формулами, построенными из функциональных элементов с прямыми и итеративными входами / С. А. Ложкин // Дискретные модели в теории управляющих систем : тр. III Междунар. конф. (Красновидово, 22–28 июня 1998 г.). – М. : Диалог-МГУ, 1998. – С. 72–73.
3. **Коноводов, В. А.** Некоторые особенности задачи синтеза булевых формул в полных базисах с прямыми и итеративными входами / В. А. Коноводов // Ученые записки Казанского университета. Сер. Физико-математические науки. – 2014. – Т. 156, № 3. – С. 76–83.
4. **Яблонский, С. В.** Введение в дискретную математику / С. В. Яблонский. – М. : Наука, 1986. – 384 с.
5. **Ложкин, С. А.** Лекции по основам кибернетики. – М. : МАКС Пресс, 2004. – 256 с.
6. **Ложкин, С. А.** О синтезе формул, сложность и глубина которых не превосходят асимптотически наилучших оценок высокой степени точности / С. А. Ложкин // Вестник Московского университета. Сер. 1. Математика и механика. – 2007. – № 3. – С. 19–25.

References

1. Lozhkin S. A. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Ser. 15: Vychislitel'naya matematika i kibernetika* [Bulletin of Moscow State University. Series 15: Calculus mathematics and cybernetics]. 1999, no. 3, pp. 35–41.
2. Lozhkin S. A. *Diskretnye modeli v teorii upravlyayushchikh sistem: tr. III Mezhdunar. konf. (Krasnovidovo, 22–28 iyunya 1998 g.)* [Discrete models in the theory of control systems: proceedings of III International conference. (Krasnovidovo, 22–28 June 1998)]. Moscow: Dialog-MGU, 1998, pp. 72–73.
3. Konovodov V. A. *Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Ser. Fiziko-matematicheskie nauki* [Proceedings of Kazan University. Series: Physical and mathematical sciences]. 2014, vol. 156, no. 3, pp. 76–83.
4. Yablonskiy S. V. *Vvedenie v diskretnuyu matematiku* [Introduction into discrete mathematics]. Moscow: Nauka, 1986, 384 p.
5. Lozhkin S. A. *Leksii po osnovam kibernetiki* [Lectures on basic cybernetics]. Moscow: MAK Press, 2004, 256 p.
6. Lozhkin S. A. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Ser. 1: Matematika i mekhanika* [Bulletin of Moscow University. Series 1: Mathematics and mechanics]. 2007, no. 3, pp. 19–25.

Ложкин Сергей Андреевич

доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра математической
кибернетики, Московский
государственный университет
имени М. В. Ломоносова (Россия,
г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: lozhkin@cs.msu.ru

Lozhkin Sergey Andreevich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of mathematical cybernetics, Moscow
State University named after
M. V. Lomonosov (1 Leninskie gory
street, Moscow, Russia)

Коноводов Владимир Александрович

аспирант, Московский
государственный университет
имени М. В. Ломоносова (Россия,
г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: vkonovodov@gmail.com

Konovodov Vladimir Aleksandrovich

Postgraduate student, Moscow State
University named after M. V. Lomonosov
(1 Leninskie gory street, Moscow, Russia)

УДК 519-714.

Ложкин, С. А.

О сложности формул алгебры логики в некоторых полных базисах, состоящих из элементов с прямыми и итеративными входами / С. А. Ложкин, В. А. Коноводов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 54–67.

О НИЖНЕЙ ОЦЕНКЕ ФУНКЦИИ ШЕННОНА ДЛИНЫ СЕРТИФИКАТА ПОВТОРНОСТИ БУЛЕВЫХ ФУНКЦИЙ В ОДНОМ СЕМЕЙСТВЕ БАЗИСОВ

Аннотация.

Актуальность и цели. В связи с развитием информатики и цифровой техники актуальным является исследование различных свойств булевых функций. Одним из важных свойств является возможность представления функции в заданном базисе формулой без повторения переменных (бесповторной формулой). Функции, которые можно так представить (бесповторные функции в данном базисе), можно рассматривать как класс «простых» функций в данном базисе. В статье рассматривается следующая задача: для заданной функции требуется найти такой набор строк (сертификат), с помощью которого можно проверить ее повторность в предэлементарном базисе, содержащем функцию семейства дискриминаторных, зависящую от s переменных. Целью данной работы является улучшение нижней оценки функции Шеннона длины сертификата повторности в этом базисе.

Материалы и методы. Используется метод разнозначных матриц и удачный подбор функции с высокой нижней оценкой длины сертификата повторности.

Результаты и выводы. Показано, что сертификат повторности функции n переменных, равной единице только на нулевом и единичном наборах, в этом базисе имеет длину не менее $n/2 - s + 1$. Таким образом улучшена известная нижняя оценка n/s функции Шеннона длины сертификата повторности в этом базисе.

Ключевые слова: бесповторная функция, сертификат повторности, семейство дискриминаторных функций, разнозначная матрица.

D. V. Kaftan

ON THE LOWER BOUND OF THE SHANNON FUNCTION FOR READ-MANY CERTIFICATE LENGTH IN ONE BASE FAMILY

Abstract.

Background. The research of various properties of Boolean functions is an actual problem in connection with the progress of informatics and digital technology. The ability of a function to be represented in a given basis via a formula without replication of variables (a read-once formula) is an important one. The class of functions having this ability may be regarded as a class of “simple” functions in this basis. The author considers a problem of finding a read-many certificate for an arbitrary Boolean function in the extended elementary basis with a discriminator function of s variables. The object of the article is to improve the lower bound of the Shannon function for read-once certificate length in this basis.

Materials and methods. The method named “the matrix of various values” is applied in this paper to a well-selected read-many function with a high lower bound of a read-many certificate.

Results and conclusion. The author shows that the length of s read-many certificate of a function, which equals to 1 only on the sets $(0, \dots, 0)$ and $(1, \dots, 1)$, is not

less than $n/2 - s + 1$ in this basis. Thus, the researcher has improved the known lower bound n/s of Shannon function for the certificate length in this basis.

Key words: read-once function, read-many certificate, discriminator function, matrix of various values.

Булева функция $f(x_1, \dots, x_n)$, представимая (не представимая) формулой без повторения переменных (*бесповторной формулой*) в некотором базисе, называется *бесповторной (повторной)* в этом базисе. Множество n -мерных булевых наборов S назовем *сертификатом повторности* функции f в базисе B , если для любой бесповторной в базисе B функции h существует набор $x \in S$, такой что $f(x) \neq h(x)$.

Преобразованиями обобщенной однотипности называются замены переменной или самой функции на ее отрицание и перестановка переменных. Функции, получаемые друг из друга конечным числом преобразований обобщенной однотипности, называются обобщенно однотипными.

Длиной сертификата повторности назовем количество наборов в нем.

Функцией Шеннона [1] длины сертификата повторности функций в базисе B называется наибольшая длина сертификата повторности среди повторных в B функций n переменных.

Строку или столбец, состоящие из одних единиц (нулей), будем называть единичными (нулевыми). Обозначим через e_i строку с одной единицей в i -й позиции.

Будем называть наследственными базисы, которые содержат все подфункции каждой лежащей в них функции.

Далее рассматриваются только наследственные базисы.

Повторная функция в базисе B называется слабоповторной, если любая ее подфункция бесповторна в этом базисе. В. А. Стеценко [2] получил все пять семейств слабоповторных функций в элементарном базисе $B_0 = \{\&, \vee, \neg\}$ с точностью до обобщенной однотипности:

$$f_d^s = x_1(\bar{x}_2 \vee x_3 \cdot \dots \cdot x_s) \vee \bar{x}_2 \cdot \dots \cdot \bar{x}_s, \quad s \geq 3,$$

$$f_t^s = x_1 \cdot \dots \cdot x_s \vee \bar{x}_1 \cdot \dots \cdot \bar{x}_s, \quad s \geq 2,$$

$$f_m^s = x_1(x_2 \vee \dots \vee x_s) \vee x_2 \cdot \dots \cdot x_s, \quad s \geq 3,$$

$$f_4 = x_1(x_2 \vee x_3) \vee x_3 x_4,$$

$$f_5 = x_1(x_3 x_4 \vee x_5) \vee x_2(x_3 \vee x_4 x_5).$$

Семейство f_d^s называется также семейством дискриминаторных функций.

Рассмотрим семейство базисов $B_d^s = \{\&, \vee, \neg, f_d^s\}$. Обозначим через $T_s(n)$ функцию Шеннона [1] длины сертификата повторности в базисе B_d^s . В работах [3, 4] исследуется длина сертификата повторности в других базисах. Известно [5], что $T_s(n) \geq n/s$. Покажем, что имеет место следующая оценка:

Теорема. При $n > 2s - 4$ верно

$$T_s(n) \geq \frac{n}{2} - s + 3.$$

Известно [5], что функция f_t^n является повторной в базисе B_d^s и для доказательства ее повторности в этом базисе достаточно предъявить не более $n + 2$ наборов – множество $\{(0, \dots, 0), (1, \dots, 1), e_1, \dots, e_n\}$.

Докажем, что функцию f_t^n нельзя отличить от всех бесповторных в B_d^s функций, равных единице на нулевом и единичном наборах, предъявив менее $\frac{n}{2} - s + 3$ наборов. Для этого используем метод разнозначных матриц [6]. Назовем 0–1 матрицу разнозначной, если все ее строки различны, и она не имеет ни нулевых, ни единичных строк. Будем говорить, что функция $f(x_1, \dots, x_n)$ моделирует разнозначную матрицу M размерности $k \times n$, если $f(0, \dots, 0) = f(1, \dots, 1) = 1$ и $f(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = 0$ для любой строки $\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ матрицы M .

Будем говорить, что строка имеет 0-преобладание, если в ней количество нулей больше или равно количеству единиц, в противном случае будем говорить, что строка имеет 1-преобладание. В строке с 0-преобладанием (1-преобладанием) значение 0 (соответственно 1) будем называть обычным, а значение 1 (соответственно 0) – особым.

Опишем процедуру разбиения столбцов разнозначной матрицы, которая содержит строки обоих типов.

Процедура 1

Дано: разнозначная матрица M с $n > 2s - 4$ столбцами и $k < \frac{n}{2} - s + 1$

строками, имеющая и строки с 0-преобладанием, и строки с 1-преобладанием. Таким образом, в матрице содержится не менее двух строк. Не ограничивая общности, пусть первая строка матрицы имеет 0-преобладание, а вторая – 1-преобладание. Пусть C – множество всех столбцов матрицы. Получим из него три множества C_1, C_2, C_3 столбцов, а множество всех строк матрицы разобьем на два множества строк R_1, R_2 согласно следующей процедуре:

(1) Положим $C_1 = C_2 = C_3 = R_1 = R_2 = \emptyset$.

(2) До тех пор, пока в C_3 меньше $s - 2$ столбца и пока не кончились строки, последовательно рассмотрим каждую строку, начиная с первой. Добавим рассматриваемую строку в R_1 . Возможны четыре случая:

(а) Строка имеет 1-преобладание и не имеет нулей на столбцах из C_3 . Тогда у нее есть нуль на каком-то столбце из C . Переместим этот столбец из C в C_3 .

(б) Строка имеет 0-преобладание, у нее нет единиц ни на одном столбце из C_3 или C_3 пусто. Тогда в C есть столбец, на котором она равна единице. Переместим его из C в C_3 .

(с) C_3 непусто, строка имеет 0-преобладание и у нее есть единица на каком-то столбце из C_3 . Тогда в C есть столбец, на котором она равна нулю, так как $(s-2)$ столбца – это меньше половины всех столбцов, а на строке с 0-преобладанием не менее половины столбцов равны нулю. Переместим его из C в C_3 .

(d) Во всех остальных случаях ничего не делаем.

Таким образом, за t рассмотренных строк мы добавили не более t столбцов.

(3) Если закончились строки и $|C_3| < s-2$, то переместим еще несколько произвольных столбцов из C в C_3 , чтобы в C_3 стало $(s-2)$ столбца.

(4) Обозначим $x_1, \dots, x_{s-2}$ столбцы из C_3 . Если остались нерассмотренные строки, то для каждой из них сделаем следующее: если у строки есть особенное значение на каком-то столбце из C , то переместим его из C в C_3 . Если особые значения у строки есть только на столбцах $x_1, \dots, x_{s-2}$, то добавим эту строку в R_1 . Таким образом, $|C_3| \leq k$.

(5) Добавим в R_2 все строки матрицы, не вошедшие в R_1 .

(6) Первая рассмотренная в пункте (2) строка имеет 0-преобладание. Тогда она равна единице на каком-то из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$ согласно случаю (b) этапа (2). Строка содержит больше половины нулей, а на предыдущих шагах из C было удалено меньше половины столбцов: $n - |C_3| \geq n - k > \frac{n}{2}$, поэтому существует хотя бы один столбец в C , на котором она равна нулю. Переместим его из C в C_1 .

(7) Рассмотрим последовательно строки из R_1 , имеющие 1-преобладание. Строка содержит больше половины единиц, а на предыдущих шагах из C было удалено меньше половины столбцов: $n - |C_3| - 1 \geq n - k - 1 > \frac{n}{2}$, поэтому остался хотя бы один столбец с единицей либо в C_2 , либо в C . Если таких столбцов нет в C_2 , то таковой найдется в C . Переместим его из C в C_2 .

(8) Рассмотрим последовательно все остальные строки из R_1 , не рассмотренные на этапах (6), (7). Они имеют 0-преобладание. Если у рассматриваемой строки нет нулей ни на каком столбце из C_1 , то либо в C существует хотя бы один столбец с нулем в этой строке, либо в C остались только столбцы с единицами в этой строке. Если первое, то переместим столбец с нулем в этой строке из C в C_1 , если второе – то переместим любой столбец из C в C_2 .

Заметим, что множества C_1 и C_2 непусты, так как на этапе (6) для первой строки матрицы один столбец добавлен в C_1 , а для второй строки на этапе (7) один столбец добавлен в C_2 . Так как для каждой строки из R_1 было взято не более одного столбца, то $|C_1| + |C_2| \leq |R_1|$. Процедура окончена.

Опишем две процедуры разбиения столбцов разнозначной матрицы, все строки которой имеют одинаковое преобладание.

Процедура 2

Дано: разнозначная матрица M с $n > 2s - 4$ столбцами и $k < \frac{n}{2} - s + 1$ строками, имеющими 0-преобладание. Пусть C – множество всех столбцов матрицы. Получим из него два множества C_1, C_2 столбцов и множество строк R_1 согласно следующей процедуре:

- (1) Положим $C_1 = C_2 = \emptyset$.
- (2) Обозначим первые $(s - 2)$ столбца матрицы $x_1, \dots, x_{s-2}$.
- (3) Последовательно для каждой строки, равной нулю на всех этих столбцах, сделаем следующее. Так как матрица разнозначная и C_1 пусто, то либо в C_2 , либо в C есть столбец с единицей в этой строке. Если такого нет в C_2 , то переместим один такой столбец из C в C_2 .
- (4) Последовательно для каждой строки, у которой есть единица на каком-то из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$, сделаем следующее. Так как количество строк с нулями во всех этих столбцах не превосходит общего количества строк, то количество выбранных на предыдущем этапе столбцов меньше половины всех столбцов матрицы. Поэтому либо в C , либо в C_1 у рассматриваемой строки существует столбец, на котором она равна нулю. Если такого нет в C_1 , то переместим один такой столбец из C в C_1 .
- (5) Если C_1 или C_2 пусто, то добавим туда любой столбец из C . Это возможно, так как количество выбранных столбцов не превосходит k , а значит, меньше n .
- (6) Отметим, что в пунктах (3), (4) мы рассмотрели все строки. Положим R_1 равным множеству всех строк.

Процедура окончена.

Процедура 3

Дано: разнозначная матрица M с $n > 2s - 4$ столбцами и $k < \frac{n}{2} - s + 1$ строками, имеющими 1-преобладание. Пусть C – множество всех столбцов матрицы. Получим из него два множества C_1, C_2 столбцов и множество строк R_1 согласно следующей процедуре:

- (1) Положим $C_1 = C_2 = \emptyset$.
- (2) Обозначим первые $(s - 2)$ столбца матрицы $x_1, \dots, x_{s-2}$.
- (3) Последовательно для каждой строки, равной единице на всех этих столбцах, сделаем следующее. Так как матрица разнозначная и C_2 пусто, то либо в C_1 , либо в C есть столбец с нулем в этой строке. Если такого нет в C_1 , то переместим один такой столбец из C в C_1 .
- (4) Последовательно для каждой строки, у которой есть нуль на каком-то из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$, сделаем следующее. Так как количество строк

с единицами во всех этих столбцах не превосходит общего количества строк, то количество выбранных на предыдущем этапе столбцов меньше половины всех столбцов матрицы. Поэтому либо в C , либо в C_2 у рассматриваемой строки существует столбец, на котором она равна единице. Если такого нет в C_2 , то переместим один такой столбец из C в C_2 .

(5) Если C_1 или C_2 пусто, то добавим туда любой столбец из C . Это возможно, так как количество выбранных столбцов не превосходит k , а значит, меньше n .

(6) Отметим, что в пунктах (3), (4) мы рассмотрели все строки. Положим R_1 равным множеству всех строк.

Процедура окончена.

Пусть $x_{i_1}, \dots, x_{i_l}$ – столбцы из C_1 , а $x_{i_{l+1}}, \dots, x_{i_m}$ – столбцы из C_2 .

Обозначим

$$\begin{aligned} g(x_{i_1}, \dots, x_{i_l}, x_{i_{l+1}}, \dots, x_{i_m}, x_1, \dots, x_{s-2}) = \\ = f_d^s(x_{i_1} \cdot \dots \cdot x_{i_l}, x_{i_{l+1}} \vee \dots \vee x_{i_m}, x_1, \dots, x_{s-2}). \end{aligned}$$

Покажем, какими свойствами обладают множества C_1, C_2, R_1 и функция g после применения любой из этих процедур:

Утверждение 1. Либо R_1 – множество всех строк матрицы, либо $|R_1| \geq s-2$.

Доказательство. В процедурах 2 и 3 на этапе (6) множество R_1 приравнивается множеству всех строк.

Множество всех строк, рассмотренных на этапе (2) процедуры 1, содержится в R_1 . Если на этом этапе закончились строки, то R_1 – множество всех строк матрицы. Если этот этап закончился при $|C_3| = s-2$, то $|R_1| \geq s-2$, так как за t рассмотренных на этом этапе строк мы добавили не более t столбцов.

Утверждение 2. Функция g равна нулю на множестве R_1 .

Доказательство. Если матрица содержит только строки с 0-преобладанием, то для любой строки из R_1 возможны два варианта:

1) она равна нулю на всех столбцах $x_1, \dots, x_{s-2}$. Следовательно, на этапе (3) процедуры 2 в C_2 оказался столбец, в котором она равна единице. Следовательно, функция g равна нулю;

2) она равна единице на каком-то из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$. Тогда на этапе (4) процедуры 2 в C_1 оказался столбец, в котором она равна нулю. Следовательно, функция g равна нулю.

Если матрица содержит только строки с 1-преобладанием, то для любой строки из R_1 возможны два варианта:

1) она равна единице на всех столбцах $x_1, \dots, x_{s-2}$. Тогда на этапе (3) процедуры 3 в C_1 оказался столбец, в котором она равна нулю. Следовательно, функция g равна нулю;

2) она равна нулю на каком-то из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$. Тогда на этапе (4) процедуры 3 в C_2 оказался столбец, в котором она равна единице. Следовательно, функция g равна нулю.

Если матрица содержит строки обоих видов, то для любой строки из R_1 возможны три варианта:

1) строка имеет 0-преобладание и равна нулю на каком-то столбце из C_1 . Тогда согласно случаю (b) этапа (2) процедуры 1 и этапу (4) на одной из позиций $x_1, \dots, x_{s-2}$ есть единица. Следовательно, функция g равна нулю;

2) строка имеет 0-преобладание и на каждом столбце из C_1 строка равна единице. Согласно случаю (c) этапа (2) процедуры 1 она равна нулю на каком-то столбце из $x_1, \dots, x_{s-2}$. На этапе (8) процедуры 1 в C_2 был добавлен столбец с единицей в этой строке. Следовательно, функция g равна нулю;

3) строка имеет 1-преобладание. Тогда на этапе (7) процедуры 1 в C_2 был добавлен столбец, который равен единице в этой строке. Согласно случаю (a) на этапе (2) и этапу (4), в этой строке на одной из позиций $x_1, \dots, x_{s-2}$ есть нуль. Следовательно, g равна нулю на этой строке.

Утверждение доказано.

Утверждение 3. Функция g равна нулю либо на всех строках матрицы, либо не менее чем на $\frac{|C_1| + |C_2| + s - 2}{2}$ строках.

Доказательство. Согласно утверждению 1 R_1 либо является множеством всех строк матрицы, либо $R_1 \geq s - 2$. В первом случае согласно утверждению 2 функция g равна нулю на всех строках матрицы.

Пусть R_1 не является множеством всех строк матрицы. Тогда $|C_1| + |C_2| \leq |R_1|$, так как на этапах (6), (8) процедуры 1 для каждой строки из R_1 было взято не более одного столбца. Так как $R_1 \geq s - 2$, то $|C_1| + |C_2| + s - 2 \leq |R_1| + s - 2 \leq 2|R_1|$, следовательно,

$$|R_1| \geq \frac{|C_1| + |C_2| + s - 2}{2}.$$

Утверждение доказано.

Утверждение 4. Удаление столбцов из множества $C_1 \cup C_2 \cup \{x_1, \dots, x_{s-2}\}$ и строк, на которых g равна нулю, не приводит к образованию нулевых или единичных строк.

Доказательство. Функция g может быть не равна нулю только на каких-то строках из множества R_2 после применения процедуры 1, так как иначе по утверждению 3 множество R_1 – это множество всех строк матрицы. Рассмотрим любую строку из R_2 . Возможны два варианта:

1) все ее значения на столбцах $x_1, \dots, x_{s-2}$ обычные. Тогда множества C_1 и C_2 не пересекаются с C_3 , так как каждый столбец перемещался только

один раз из C в одно из этих множеств. На этапе (4) процедуры 1 в C_3 был добавлен столбец с особым значением в этой строке, поэтому строка имеет особое значение на каком-то столбце из C_3 , отличном от $x_1, \dots, x_{s-2}$;

2) строка имеет особое значение на одном из столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$. Тогда строка, так же как в предыдущем случае, имеет особое значение на каком-то столбце из C_3 , отличном от $x_1, \dots, x_{s-2}$, иначе оказалась бы в R_1 .

Таким образом, у строки есть столбец с особым значением, не лежащий в $C_1 \cup C_2 \cup \{x_1, \dots, x_{s-2}\}$.

Всего удаляется не более половины столбцов:

$$n - (s - 2) - |C_2| - |C_1| \geq n - s + 2 - k > \frac{n}{2},$$

поэтому существует хотя бы один столбец с обычным значением, не лежащий в $C_1 \cup C_2 \cup \{x_1, \dots, x_{s-2}\}$. Тогда при удалении столбцов $C_1 \cup C_2 \cup \{x_1, \dots, x_{s-2}\}$ в этой строке останется хотя бы одно особое значение и хотя бы одно обычное, т.е. строка будет разнозначной. Таким образом, удаление из матрицы строк, на которых g равна нулю, не приводит к образованию нулевых или единичных строк. Утверждение доказано.

Из утверждения 3 следует

Утверждение 5. Если R_1 – множество всех строк матрицы, то функция g ее моделирует.

Лемма 1. Для любой разнозначной матрицы M с $n > 2s - 4$ столбцами и $k < \frac{n}{2} - s + 1$ строками всегда найдется неповторная в B_d^s функция, моделирующая эту матрицу и равная единице на нулевом и единичном наборах.

Доказательство. Базис индукции. Пусть $2s - 4 < n \leq 4s - 8$. Применив к матрице одну из процедур 1–3, получим множества C_1, C_2, R_1 и функцию g . Количество строк в матрице меньше $s - 2$. Следовательно, R_1 – множество всех строк матрицы, и по утверждению 5 функция g ее моделирует. Следовательно, g будет искомой функцией. Заметим, что количество переменных функции g не превосходит $2s - 4$, так как $|C_1| + |C_2|$ не превосходит $|R_1|$.

Индуктивный переход. Пусть $n > 4s - 8$ и для всех $n' < n$ (где $n' > 2s - 4$) утверждение леммы выполнено. Применив к матрице одну из процедур 1–3, получим множества C_1, C_2, R_1 и функцию g . Тогда возможны два варианта:

1) R_1 является множеством всех строк матрицы. Тогда по утверждению 5 функция g моделирует матрицу M и является искомой функцией;

2) R_1 не является множеством всех строк матрицы. Получим матрицу M' из матрицы M удалением всех строк, на которых g равна нулю, столбцов из множеств C_1, C_2 и столбцов $x_1, \dots, x_{s-2}$. Склеим одинаковые

строки, если таковые имеются. Покажем, что полученная матрица M' удовлетворяет условиям леммы. Действительно, M' имеет $k' = k - |R_1|$ строк и $n' = n - (|C_1| + |C_2| + s - 2)$ столбцов, для которых выполнено условие

$$\begin{aligned} k' = k - |R_1| &\leq k - \frac{|C_1| + |C_2| + s - 2}{2} < \frac{n}{2} - s + 1 - \frac{|C_1| + |C_2| + s - 2}{2} = \\ &= \frac{n - (|C_1| + |C_2| + s - 2)}{2} - s + 1 < \frac{n'}{2} - s + 1. \end{aligned}$$

Согласно утверждению 4 удаление этих столбцов и строк не приводит к образованию нулевых или единичных строк, поэтому полученная матрица разностная. Следовательно, по предположению индукции, существует неповторная в B_d^s функция $g'(y_1, \dots, y_{n'})$, моделирующая матрицу M' . Тогда функция $g \cdot g'$ моделирует матрицу M . Действительно, на нулевом и единичном наборах обе функции равны единице, а на всех остальных наборах равна нулю либо g (по утверждению 2), либо g' (по предположению индукции). Таким образом, функция $g \cdot g'$ является искомой. Лемма доказана.

Лемма 2. Пусть $n > 2s - 4$ и $k < \frac{n}{2} - s + 3$. Тогда для произвольных k наборов функции $f_t^n(x_1, \dots, x_n)$ существует неповторная в B_d^s функция $g(x_1, \dots, x_n)$, совпадающая с f_t^n на этих наборах.

Доказательство. Пусть A – множество из k наборов функции $f_t^n(x_1, \dots, x_n)$. Если среди них нет нулевого или единичного набора, то f_t^n совпадает на A с одной из функций $x_1 \cdot \dots \cdot x_n$ или $\bar{x}_1 \cdot \dots \cdot \bar{x}_n$. Если A содержит и нулевой, и единичный набор, то матрица M , составленная из остальных наборов A , является разностной матрицей размера $(k - 2) \times n$, где $k - 2 < \frac{n}{2} - s + 1$, и удовлетворяет условию леммы 1. Следовательно, существует неповторная в B_d^s функция $g(x_1, \dots, x_n)$, совпадающая с f_t^n на A . Лемма доказана.

Из леммы 2 следует утверждение теоремы.

Список литературы

1. **Shannon, C. E.** A symbolic analysis of relay and switching circuits / C. E. Shannon // Trans. – 1938. – AIEE 57. – P. 713–723.
2. **Стеценко, В. А.** О предположенных базисах в P_2 / В. А. Стеценко // Математические вопросы кибернетики. – Вып. 4. – М. : Физматлит, 1992. – С. 139–177.
3. **Chistikov, D.** Certificates of Non-Membership for Classes of Read-Once Functions / D. Chistikov, V. Fedorova, A. Voronenko // Fundamenta Informaticae. – 2014. – № 132 (1). – P. 63–77.
4. **Вороненко, А. А.** Повторность булевых функций в элементарном базисе / А. А. Вороненко, В. С. Федорова, Д. В. Чистиков // Известия вузов. Математика. – 2011. – № 11. – С. 72–77.

5. **Вороненко, А. А.** О функции Шеннона для длины сертификата повторности булевых функций в одном семействе базисов / А. А. Вороненко // Вестник Московского университета. Сер. 15. Вычислительная математика и кибернетика. – 2013. – № 4. – С. 45–47.
6. **Вороненко, А. А.** О сложности доказательства повторности булевых функций в бинарном базисе / А. А. Вороненко // Прикладная дискретная математика. – 2011. – № 3 (13). – С. 12–16.

References

1. Shannon C. E. *Trans.* 1938, AIEE 57, pp. 713–723.
2. Stetsenko V. A. *Matematicheskie voprosy kibernetiki* [Mathematical problems of cybernetics]. Issue 4. Moscow: Fizmatlit, 1992, pp. 139–177.
3. Chistikov D., Fedorova V., Voronenko A. *Fundamenta Informaticae*. 2014, no. 132 (1), pp. 63–77.
4. Voronenko A. A., Fedorova V. S., Chistikov D. V. *Izvestiya vuzov. Matematika* [University proceedings. Mathematics]. 2011, no. 11, pp. 72–77.
5. Voronenko A. A. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Ser. 15. Vychislitel'naya matematika i kibernetika* [Bulletin of Moscow University. Series 15. Calculus mathematics and cybernetics]. 2013, no. 4, pp. 45–47.
6. Voronenko A. A. *Prikladnaya diskretnaya matematika* [Applied discrete mathematics]. 2011, no. 3 (13), pp. 12–16.

Кафтан Дарья Владимировна

аспирант, Московский государственный
университет имени М. В. Ломоносова
(Россия, г. Москва, Ленинские горы, 1)

E-mail: blond.programmist@gmail.com

Kaftan Daria Vladimirovna

Postgraduate student, Moscow State
University named after M. V. Lomonosov
(1 Leninskie gory street, Moscow, Russia)

УДК 517.718.7

Кафтан, Д. В.

О нижней оценке функции Шеннона длины сертификата повторности булевых функций в одном семействе базисов / Д. В. Кафтан // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 68–77.

АНАЛИЗ ОСОБЕННОСТЕЙ СИСТЕМЫ ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ СОСТОЯНИЕ МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ С ИОННЫМ ТИПОМ ПРОВОДИМОСТИ

Аннотация.

Актуальность и цели. Актуальность построения и изучения свойств систем нелинейных интегродифференциальных уравнений характеризуется их возможностью описывать сложные физико-химические (медико-биологические) диссипативные структуры, т.е. так называемые тьюринговые модели. Важным частным случаем таких моделей являются медико-биологические объекты с ионным типом проводимости. Особый практический интерес представляет мониторинг состояния данных объектов в контексте новых возможностей для медицинского исследования и анализа. Многое из направлений мониторинга и исследования математически формулируется в виде обратной коэффициентной задачи. Целью данной работы является теоретический анализ особенностей системы интегродифференциальных уравнений, построенной в ранних работах с учетом специфики моделирования состояния медико-биологических объектов с ионным типом проводимости, а также формулировки обратных задач на их основе.

Материалы и методы. Для выделения особенностей рассматриваемой системы нелинейных интегродифференциальных уравнений использовался теоретический и практический материал экспериментальных методов аналитической химии на основе электрохимического анализа (хронопотенциометрия, вольтамперометрия, полярография и т.д.). Учитывалась специфика геометрии электрохимической ячейки (электродов, объемов систем, специальных структур) и режимов процессов измерения, а также протекающих электрохимических реакций. При изучении вопросов моделирования диссипативных структур рассмотрено асимптотическое приближение в виде стационарного случая системы исследуемых уравнений в геометрии плоского конденсатора. Особенности постановки обратной задачи для системы интегродифференциальных уравнений указаны в терминах стандартной теории некорректных задач.

Результаты. Проанализирована связь особенностей специфичной геометрии электрохимических ячеек с ключевым интегральным слагаемым системы нелинейных интегродифференциальных уравнений. Обоснована роль исследуемой системы в объединении различных электрохимических и электрофизических эффектов, разбитых за счет существенной локализации их в геометрии электрохимической ячейки. Указаны недостатки моделирования на основе системы для непрерывной среды: нельзя естественным образом ввести процессы сорбции и десорбции частиц на поверхности электродов. Предложен способ, позволяющий частично обойти этот недостаток, а также описать зарядовую структуру в объеме электрода и его взаимодействие с ионами электролита. Составлена система с краевыми условиями для простой

двухкомпонентной реакции $O + ze^- \xrightleftharpoons[k_e]{\bar{k}_e} R$, включая стационарный случай,

с учетом нелинейных членов.

Выводы. Одним из важных составляющих в системе уравнений является интегральный член на основе функции Грина, даже упрощенный вид которого

позволяет учесть наличие двойного электрического слоя возле поверхности электрода. Его более точное и строгое построение в перспективе связывает систему интегродифференциальных уравнений с эффектом сорбции-десорбции и взаимодействия внутренней структуры электрода с ионами и молекулами электролита. Построенная система уравнений на основе простых примеров химической реакции и геометрии электрохимической ячейки показала, что стационарный предел является случаем диссипативных структур, которые нельзя получить с применением простых линейных уравнений из классического курса электрохимии. Обратная задача для исследуемой системы ставится в стандартной формулировке, однако имеется особенность в виде наличия интегралов в форме Фредгольма, а не с сингулярными и гиперсингулярными ядрами, как следовало из общей функции Грина.

Ключевые слова: система интегродифференциальных уравнений, математическое моделирование, электрохимическая реакция, электрохимическая ячейка, нелинейные диссипативные структуры, обратная задача.

S. I. Gerashchenko, S. M. Gerashchenko, E. V. Kuchumov

ANALYSIS OF SPECIAL ASPECTS OF THE INTEGRODIFFERENTIAL EQUATION SYSTEM DESCRIBING BIOMEDICAL OBJECTS' CONDITION WITH IONIC CONDUCTION

Abstract.

Background. The topicality of building and researching the features of the nonlinear integrodifferential equation systems is characterized by their ability to describe complex physicochemical (biomedical) dissipative structures, i.e. the so-called Turing's models. Biomedical objects with ionic conduction are an important special case of these models. The status monitoring of that objects for the purpose of obtaining new abilities for the medical trial and analysis is a special practical interest. Many ways of monitoring and researching are expressed by the inverse coefficient problem. The goal of this article is to theoretically analyze special aspects of the integrodifferential equation system, which have been introduced in the previous papers with respect to particular characteristics of status modeling of biomedical objects with ionic conduction, and to formulate the inverse problems on the basis thereof.

Materials and methods. Theoretical and practical facts of the experimental methods of analytic chemistry based on the electrochemical analysis (chronopotentiometry, voltammetry, polarography etc.) were used to understand the special aspects of the nonlinear integrodifferential equation system. Specifics of the geometry of an electrochemical cell (electrodes, volumes of systems, special structures) and measure procedure modes, as well as electrochemical reactions were taken into account. The asymptotic approach in the form of a stationary case of researching the equation system with plane condenser geometry was examined in the studies of problems of dissipative structures modeling. The specifics of the inverse problems formulation by means of the integrodifferential equation system were determined in terms of the standard incorrect problem theory.

Results. A link between the aspects of specific electrochemical cell geometry and a key integral item from the nonlinear integrodifferential equation system were analyzed. The contribution of researching the equation system into unification of different electrochemical and physical phenomena, separated by significant localiza-

tion thereof in electrochemical cell geometry, was established. The authors determined the drawbacks of modeling by the equation system for continuous environment: it is impossible to naturally conduct the processes of sorption and desorption on electrode surface. The authors suggested a method which makes it possible to partially evade the drawback and also to describe the electrode volume charge texture and its mutual effect with electrolyte ions. The equation system for a simple

two-component reaction $O + ze^- \xrightleftharpoons[k_e]{\bar{k}_e} R$ with boundary conditions and nonlinear members was comprised including a stationary case.

Conclusions. One of the most important terms of the equation system is the integral members based on the Green's function, even the simplified form of which could describe the double-electric layer near the electrode surface. Its more precise and strict building, in perspective, links the integrodifferential equation system with the phenomenon of sorption-desorption and interaction of the electrode bulk with ions and molecules into electrolyte. The built system, based on simple cases of chemical reaction and electrochemical cell geometry, showed that the stationary limit is a case of dissipation structures which can't be obtained by means of elementary linear equations from the classical course of electrochemistry. The inverse problem for the system under investigation is formulated in a standard form except that there is a special aspect in the shape of availability of an integral in the Fredholm's form, not with singular and weakly singular as it complies with the standard form of the Green's kernel.

Key words: system of integrodifferential equations, mathematical modeling, electrochemical reaction, electrochemical cell, nonlinear dissipative structures, inverse problem.

В работах [1, 2] была построена замкнутая математическая модель, выражаемая системой нелинейных интегродифференциальных уравнений в частных производных следующего вида:

$$\begin{aligned} z_i F \frac{\partial c_i}{\partial t} + z_i F u_i \left\{ \vec{\nabla} c_i \cdot \left[\frac{4\pi}{\epsilon} F \iiint_V \vec{\nabla} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \left(\sum_{k=1}^N z_k c_k(t, \mathbf{r}') \right) d\mathbf{r}' + \mathbf{E}(\mathbf{r}) \right] + \right. \\ \left. + c_i \frac{4\pi}{\epsilon} F \left(\sum_{k=1}^N z_k c_k \right) \right\} - \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{k=1}^N D_{ik} \vec{\nabla} c_k \right) + z_i F \vec{\nabla} \cdot (c_i \mathbf{v}_C) = \\ = z_i F \sum_{k=1}^B \alpha_{i,k} \kappa_{VGi,k} \prod_l c_l^{\vartheta_{l,k}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $i = \overline{1, N}$ – количество компонент (веществ), участвующих в электрохимических процессах переноса заряда; z_i – заряд ионов (валентность) i -го вещества; F – постоянная Фарадея ($F = 96485,3$ Кл/моль); c_i – молярная концентрация ионов i -го вещества, u_i – абсолютные подвижности носителей заряда i -го вещества; $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ – функция Грина, выражаемая с помощью ньютонова потенциала $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\vec{\nabla} \varphi_{Эл}$ ($\varphi_{Эл}$ – потенциал, получаемый из гра-

ничных условий на электродах); D_{ik} – матрица электрохимических коэффициентов диффузии i -го вещества; χ_i – изменение (рождения/исчезновения) массы m_i i -й компоненты смеси в единицу времени на единицу объема за счет химической реакции или ионизации; $k = \overline{1, B}$ – количество химических реакций; $\alpha_{i,k}$ – стехиометрический коэффициент i -го компонента в k -й химической реакции; $\kappa_{VGi,k}$ – константа скорости i -го компонента в k -й химической реакции; ϑ_i – порядок реакции i -го компонента в k -й химической реакции. В статье [3] авторами была проведена проверка на адекватность выводов модели (1), где было показано, что из этой системы естественно следует понятие двойного электрического слоя возле поверхности электрода. В работе [4] были получены аналитические выражения и построенные на них численные результаты с помощью моделирования тестовой задачи в геометрии простой структуры типа плоского полупространства, полностью совпавшие с классическими формулами электрохимического анализа [5].

Анализ особенностей системы (1) при моделировании электрохимической ячейки

Сразу необходимо отметить, что электрохимическая ячейка не представляет собой какой-то конкретной стандартной (общепринятой) структуры, а имеет большую вариацию по конструктиву и схемам измерительного процесса [5–7]. Например, электроды – индикаторный (рабочий), сравнения, вспомогательный и т.д. – могут существенно отличаться по размерам и форме с целью увеличения плотности тока и напряженности электрического поля вблизи, а также снижения вносимых искажений. В качестве индикаторного электрода может выступать капля ртути для постоянного обновления поверхности электрода и ее высокого качества, а электродом сравнения может служить газ водород на поверхности платины. В общем случае под электродом понимается граница раздела фаз, на которой происходит смена направленного движения электронов на направленное движение ионов и наоборот.

Все это усложняет требование нужной точности вычисления производной функции Грина $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ в интеграле для потенциала системы (1) при моделировании работы электрохимической ячейки в конкретной геометрии [3]. Собственно точность моделирования зарядовой структуры электрохимической ячейки в первую очередь зависит от того, насколько удачно и адекватно аппроксимирована функция Грина для соответствующего объемного интеграла. Этому способствует то, что при проведении практических работ экспериментаторы стараются подобрать электроды наиболее простой формы для упрощения процессов анализа и интерпретации полученных данных [5, 7].

Наиболее простой вариант электрохимической ячейки представляет собой конденсатор с электролитом в качестве диэлектрической прослойки между обкладками. Для цилиндрической геометрии электродов такой ячейки производную функции Грина и соответствующий интеграл можно аналитически упростить до одномерного, что и будет показано ниже на конкретном примере.

Еще одной особенностью электрохимической ячейки является локализация процессов диффузии и химических превращений. Это приводит к тому,

что система (1) распадается на ряд более простых уравнений, описывающий тот или иной тип физико-химического явления. В то же время это накладывает более жесткие требования к точности вычисления интеграла с производной функции Грина, так как его влияние носит существенный характер именно у границы электрода, а не вдали, где геометрические особенности электростатического поля сглаживаются. Если же процессы в электрохимической ячейке ограничиваются временем не более 1 мин, то конвекционный член $\vec{\nabla} \cdot (c_i \mathbf{v}_C)$ в системе (1) можно не учитывать. В противоположность этому для сильно конвекционного процесса – вращающийся электрод – система (1) для постоянного воздействия быстро стремится к стационарному решению $\partial c_i / \partial t = 0$.

Далее для замедленной (необратимой) реакции разряда-ионизации характерно минимальное влияние диффузии частиц из электролита, так как она успевает подвести реагенты к электроду и отвести продукты реакции. Поэтому такие электрохимические процессы описываются на уровне связи плотности тока через ячейку и потенциалов на электродах

$$j(\eta) = j_0 \exp\left(\frac{\beta z F}{RT} \eta\right),$$

где j_0 – ток обмена на индикаторном электроде; β – коэффициент переноса; z – число электронов, участвующих в электрохимической реакции; η – перенапряжение на межфазной границе; T – абсолютная температура; R – универсальная газовая постоянная.

В противоположном случае, когда скорость химической реакции значительно превышает скорость диффузионного транспорта (хорошо обратимый процесс), тогда работа в электрохимической ячейке описывается на уровне миграции частиц в электролите, потенциалы на электродах при этом удовлетворяют уравнению Нернста [5–7]. К этому описанию может добавиться наличие в ячейке ионных мембран.

Собственно указанная специфика как раз и позволяет составлять курс аналитической электрохимии в виде отдельных описаний элементов процесса диффузии, связи потенциала на межфазовой границе с плотностью тока через электрод, актов химической реакции в объеме электролита и на поверхности электрода и т.д. Такой подход также дополняется рядом соотношений термодинамики химических процессов, позволяющих заполнить пробелы в интерпретации поведения заряженных частиц и связать разные области электрохимической ячейки.

Преимущество системы (1) заключается в объединении большей части этих явлений, что позволяет идти при анализе электрохимических процессов от общего к частному и не упустить какого-либо важного составляющего звена при моделировании.

Необходимо отметить, что система (1) не учитывает явлений сорбции на поверхности или в объеме электродов. Это связано с тем, что, несмотря на наличие описаний механизмов физической или химической абсорбции/адсорбции, на практике используются эмпирические или полуэмпирические выражения для связи массы сорбата с парциальным давлением или кон-

центрации в жидкой среде. Формальное место в уравнениях системы (1) процессов сорбции должно находиться в выражении, связанном с взаимодействием частиц электролита с частицами электрода, и определяться с помощью законов квантовой химии, а в динамике ансамблей – с помощью теории перколяций [8]. Поэтому в рамках континуальной модели ввести эти составляющие в систему (1) было невозможно. Как альтернатива этому, возможно введение нового «сорта» частиц, получающихся в результате квазихимических реакций «сорбции» и «десорбции» и существенно локализованных вблизи поверхности электрода. Но для системы (1) это всего лишь приведет к дополнительному уравнению и останется в рамках той же методологической парадигмы.

Для некоторых типов электродов, например состоящих из химически неактивных, но проводящих (полупроводниковых) материалов, в их объеме могут также возникать специфические зарядовые структуры, вроде электронно-дырочных двойных электрических слоев. Для системы (1) это опять же приведет к дополнительным уравнениям, описывающим новые «сорты» частиц (электроны, дырки) в области электрода и связанные на границе раздела фаз с другими уравнениями общими условиями взаимодействия заряженных частиц. То есть опять же данная специфика решается в рамках модели (1). Кстати, этот подход также является способом учета нелинейного влияния двойного электрического слоя, включая адсорбированные атомы и ионы, на потенциал электродов $\Phi_{Эл}$, генерируемый в приэлектродном пространстве электрохимической ячейки.

Моделирование нелинейных диссипативных структур

Далее рассмотрим пример того, как в рамках системы (1) описываются диссипативные структуры в электрохимической ячейке, вроде автоволновых химических процессов [9], формулируемые более общими уравнениями неразрывности и законами сохранения вещества.

Пусть на индикаторном электроде протекает реакция, в которой окисленная форма O принимает z электронов и превращается в восстановленную форму R по следующей схеме:



где $\bar{k}_e$, k_e – константы скорости гетерогенного переноса заряда в катодном и в анодном процессах соответственно.

Выберем геометрию плоского круглого конденсатора. В этом случае, пренебрегая неоднородностями поля на краях электродов, решение системы (1) должно зависеть только от одной пространственной переменной $c_i = c_i(x, t)$, где ось x перпендикулярна плоскости электрода, центр которого находится в начале координат $x \equiv 0$.

В силу вида реакции (2) система (1) для индикаторного электрода будет состоять из двух уравнений относительно окисленной формы O и восстановленной формы R , т.е. $N = 2$. Обозначим соответствующие концентрации че-

рез c_O и c_R . В приближении невозмущенного краевыми эффектами потенциала взаимодействующих заряженных частиц электролита [3] система уравнений будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial c_R}{\partial t} - \tilde{D}_R \frac{\partial^2 c_R}{\partial x^2} = -u_R \frac{\partial c_R}{\partial x} \cdot \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] - c_R \frac{4\pi}{z_R \epsilon} (z_R c_R + z_O c_O), \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_O}{\partial t} - \tilde{D}_O \frac{\partial^2 c_O}{\partial x^2} = -u_O \frac{\partial c_O}{\partial x} \cdot \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] - c_O \frac{4\pi}{z_O \epsilon} (z_R c_R + z_O c_O), \quad (4)$$

где

$$d_x = d(x, t) = F \int_0^l (x - x') g(x - x') (z_O c_O(t, x') + z_R c_R(t, x')) dx',$$

$$g(x - x') = 2\pi \left(1 / \sqrt{(x - x')^2 + r_e^2} - 1 / |x - x'| \right);$$

r_e – радиус электрода; l – расстояние между обкладками-электродами.

Начальные условия для простоты выбираются однородными с момента $t = 0$, т.е. $c_R(0, x) = c_{R0}$ и $c_O(0, x) = c_{O0}$. Такой выбор, вообще говоря, означает, что двойной электрический слой в начальный момент отсутствует $d_x(x, 0) = 0$, так как электролит в целом должен быть электронейтральным, т.е. $z_R c_{R0} + z_O c_{O0} = 0$. Это не соответствует действительной ситуации, так как, например, при проведении хронопотенциометрического анализа первый этап электрохимического процесса заключается в зарядке двойного электрического слоя. Однако в дальнейшем будет рассматриваться стационарный случай в смысле устойчивого состояния равновесия, поэтому эта неточность не принципиальна.

Краевые условия можно составить с учетом закона непрерывности протекания заряда через электрохимическую ячейку:

– для уравнения (3):

$$\frac{\partial c_R(t, 0)}{\partial x} - \frac{u_R}{\tilde{D}_R} \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] c_R(t, 0) = -\frac{j_R}{z_R F \tilde{D}_R} \theta(t),$$

$$\frac{\partial c_R(t, l)}{\partial x} - \frac{u_R}{\tilde{D}_R} \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] c_R(t, l) = \frac{j_R}{z_R F \tilde{D}_R} \theta(t);$$

– для уравнения (4):

$$\frac{\partial c_O(t, 0)}{\partial x} - \frac{u_O}{\tilde{D}_O} \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] c_O(t, 0) = \frac{j_O}{z_O F \tilde{D}_O} \theta(t),$$

$$\frac{\partial c_O(t, l)}{\partial x} - \frac{u_O}{\tilde{D}_O} \left[\frac{4\pi}{\epsilon} d_x + E_x \right] c_O(t, l) = -\frac{j_O}{z_O F \tilde{D}_O} \theta(t).$$

Здесь $j_R = zF\bar{k}_e c_R$, $j_O = zF\bar{k}_e c_O$, $z = z_O - z_R$. Как указывалось выше, будем рассматривать установившийся процесс равновесия в ячейке, т.е. когда функциональная зависимость от времени отсутствует, а общая плотность тока через ячейку $j = j_O + j_R \equiv 0$ и напряжение электрического поля $E_x \equiv 0$.

Для стационарного случая уравнения (3), (4) можно уже представить в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\tilde{D}_R \frac{d^2 c_R}{dx^2} - u_R d_0 \frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{dc_R}{dx} - \frac{4\pi}{z_R \varepsilon} (z_R c_R + z_O c_O) c_R = 0, \quad (5)$$

$$\tilde{D}_O \frac{d^2 c_O}{dx^2} - u_O d_0 \frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{dc_O}{dx} - \frac{4\pi}{z_O \varepsilon} (z_R c_R + z_O c_O) c_O = 0, \quad (6)$$

где $d_0 = d_0(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} d(x, t)$, со следующими краевыми условиями:

– для уравнения (5):

$$\frac{dc_R(0)}{dx} = - \left(\frac{4\pi}{\varepsilon} u_R d_0(0) + \bar{k}_e \right) \frac{c_R(0)}{\tilde{D}_R},$$

$$\frac{dc_R(l)}{dx} = - \left(\frac{4\pi}{\varepsilon} d_0 u_R(l) - \bar{k}_e \right) \frac{c_R(l)}{\tilde{D}_R};$$

– для уравнения (6):

$$\frac{dc_O(0)}{dx} = - \left(\frac{4\pi}{\varepsilon} u_O d_0(0) - \bar{k}_e \right) \frac{c_O(0)}{\tilde{D}_O},$$

$$\frac{dc_O(l)}{dx} = - \left(\frac{4\pi}{\varepsilon} u_O d_0(l) + \bar{k}_e \right) \frac{c_O(l)}{\tilde{D}_O}.$$

Если интерпретировать переменную x не как пространственную, а как временную, то можно увидеть, что система (5), (6) представляет собой два связанных нелинейных осциллятора. Не исключено, что для некоторых значений параметров электролита и электрохимической реакции (2) вполне могут существовать решения системы (5), (6) аperiodической и квазипериодические пространственной структуры, соответствующие известным примерам тьюринговых систем из химии и биофизики.

Если же флуктуации концентраций реагентов от начальных значений c_{R0} и c_{O0} достаточно малы, чтобы считать интегральный член $d(t) \approx 0$, а приближения $c_O^2 \approx 2c_O$ и $c_R^2 \approx 2c_R$ верными, то система (5), (6) редуцируется к полностью линейной системе с линейными краевыми условиями по типу упругих сил. Предварительный математический анализ показывает, что у линеаризованной системы аperiodических или квазипериодических пространственных структур быть не может. Этот результат коррелирует с тем известным фактом, что сложные стохастические и квазистохастические пространственно-временные образования, характерные для тьюринговых систем, яв-

ляются результатом действия нелинейности вдали от точек равновесия линеаризованных систем [9].

О постановке обратной задачи на основе системы (1)

Даже на примере упрощенной системы (5), (6) для реакции (2) видно, что обратная задача представляет собой существенные трудности как из-за наличия нелинейности, так и благодаря интегральному члену.

Очевидно, что возможности получить полностью аналитическое решение для обратной задачи даже в виде (5), (6), а тем более (1), фактически нет, поэтому определяющую роль при решении обратной задачи в данном случае играют приближенные или численные методы, такие как проекционные сеточные или бессеточные методы на основе минимизации нелинейного функционала погрешности решения [10–12].

Для системы (1) и (5), (6) подойдут формулировки всех обратных задач (эволюционных, краевых, коэффициентных и т.д.) [13].

Кажется, что для системы (1) не следует ожидать повышенную неустойчивость по сравнению с обратными задачами для систем нелинейных уравнений в частных производных, так как несмотря на то, что в рассматриваемые уравнения и краевые условия для них входят интегралы, последние являются сингулярными и слабосингулярными, т.е. имеют обратный ограниченный оператор, хотя и не являющийся всюду непрерывным. Поэтому при их численном решении вполне можно было бы применять классические методы регуляризации некорректных задач (методы Тихонова, Морозова, Иванова, Лаврентьева и т.д.) [13, 14].

Однако для системы (5), (6) данный интеграл, несмотря на наличие сингулярного ядра $g(x - x')$, не является сингулярным, а оказывается фредгольмовским интегралом типа свертки. Аналогичная ситуация наблюдается и в примере с полуплоскостью [4] при разложении функции Грина в ряд. Поэтому данный интеграл может увеличить неустойчивость возможных обратных задач и для их регуляризации потребуется отдельный анализ.

Список литературы

1. **Геращенко, С. И.** Вопросы моделирования электрохимических методов и средств контроля динамики воспалительных процессов / С. И. Геращенко, С. М. Геращенко, Е. В. Кучумов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 3 (15). – С. 165–172.
2. **Геращенко, С. М.** Построение замкнутой математической модели электрохимических методов и средств оценки состояния биологических объектов / С. М. Геращенко // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 2 (18). – С. 90–97.
3. Анализ и проверка адекватности выводов замкнутой системы интегродифференциальных уравнений, описывающих работу электрохимической ячейки / С. И. Геращенко, С. М. Геращенко, Е. В. Кучумов, Н. О. Голотенков, М. В. Маркулева, С. П. Кравцова, Н. В. Шпенглер // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – № 3 (23). – С. 47–58.
4. **Геращенко, С. И.** Моделирование тестовой задачи на основе замкнутой системы интегродифференциальных уравнений, описывающих работу электрохимической ячейки / С. И. Геращенко, С. М. Геращенко, Е. В. Кучумов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – № 4 (24). – С. 115–124.

5. **Захаров, М. С.** Хронопотенциметрия (Методы аналитической химии) / М. С. Захаров, В. И. Баканов, В. В. Пнев. – М. : Химия, 1978. – 200 с.
6. **Феттер, К.** Электрохимическая кинетика / К. Феттер – М. : Химия, 1967. – 856 с.
7. **Гороховская, В. И.** Практикум по электрохимическим методам анализа : учеб. пособие для студентов вузов / В. И. Гороховская, В. М. Гороховский. – М. : Высшая школа, 1983. – 192 с.
8. **Тарасевич, Ю. Ю.** Перколяция: теория, приложения, алгоритмы : учеб. пособие / Ю. Ю. Тарасевич. – М. : Едиториал УРСС, 2002. – 112 с.
9. **Васильев, В. А.** Автоволновые процессы / В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно ; под ред. Д. С. Чернавского. – М. : Наука, 1987. – 240 с.
10. **Беллман, Р.** Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи / Р. Беллман, Р. Калаба. – М. : Мир, 1968. – 184 с.
11. **Дэннис, Дж.** Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений / Дж. Дэннис, Р. Шнабель. – М. : Мир, 1988. – 440 с.
12. **Горбаченко, В. И.** Обучение сетей радиальных базисных функций методом доверительных областей для решения уравнения Пуассона / В. И. Горбаченко, М. В. Жуков // Информационные технологии. – 2013. – № 9. – С. 65–70.
13. **Самарский, А. А.** Численные методы решения обратных задач математической физики : учеб. пособий / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – Изд. 3-е. – М. : Изд-во ЛКИ, 2009. – 480 с.
14. **Ягола, А. Г.** Обратные задачи и методы их решения. Приложения к геофизике / А. Г. Ягола, В. Янфей, И. Э. Степанова, В. Н. Титаренко. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 216 с.

References

1. Gerashchenko S. I., Gerashchenko S. M., Kuchumov E. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2010, no. 3 (15), pp. 165–172.
2. Gerashchenko S. M. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 2 (18), pp. 90–97.
3. Gerashchenko S. I., Gerashchenko S. M., Kuchumov E. V., Golotenkov N. O., Markuleva M. V., Kravtsova S. P., Shpengler N. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 3 (23), pp. 47–58.
4. Gerashchenko S. I., Gerashchenko S. M., Kuchumov E. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 4 (24), pp. 115–124.
5. Zakharov M. S., Bakanov V. I., Pnev V. V. *Khronopotentsiometriya (Metody analiticheskoy khimii)* [Chronopotentiometry]. Moscow: Khimiya, 1978, 200 p.
6. Fetter K. *Elektrokhimicheskaya kinetika* [Electrochemical kinetics]. Moscow: Khimiya, 1967, 856 p.
7. Gorokhovskaya V. I., Gorokhovskiy V. M. *Praktikum po elektrokhimicheskim metodam analiza: ucheb. posobie dlya studentov vuzov* [Tutorial on electrochemical analysis methods: tutorial for university students]. Moscow: Vysshaya shkola, 1983, 192 p.
8. Tarasevich Yu. Yu. *Perkolyatsiya: teoriya, prilozheniya, algoritmy: ucheb. posobie* [Percolation: theory, applications, algorithms: tutorial]. Moscow: Editorial URSS, 2002, 112 p.
9. Vasil'ev V. A., Romanovskiy Yu. M., Yakhno V. G. *Avtovolnovye protsessy* [Autowave processes]. Moscow: Nauka, 1987, 240 p.

10. Bellman R., Kalaba R. *Kvazilinearizatsiya i nelineynye kraevye zadachi* [Quasilinear and nonlinear boundary problems]. Moscow: Mir, 1968, 184 p.
11. Dennis Dzh., Shnabel' R. *Chislennyye metody bezuslovnoy optimizatsii i resheniya nelineynykh uravneniy* [Numerical methods of unconstrained optimization and solution of nonlinear equations]. Moscow: Mir, 1988, 440 p.
12. Gorbachenko V. I., Zhukov M. V. *Informatsionnye tekhnologii* [Information technologies]. 2013, no. 9, pp. 65–70.
13. Samarskiy A. A., Vabishchevich P. N. *Chislennyye metody resheniya obratnykh zadach matematicheskoy fiziki: ucheb. posobiye* [Numerical methods of solution of inverse problems of mathematical physics: tutorial]. Moscow: Izd-vo LKI, 2009, 480 p.
14. Yagola A. G., Yanfey V., Stepanova I. E., Titarenko V. N. *Obratnye zadachi i metody ikh resheniya. Prilozheniya k geofizike* [Inverse problems and methods of solution thereof. Applications in geophysics]. Moscow: Binom. Laboratoriya znaniy, 2014, 216 p.

Геращенко Сергей Иванович

доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой медицинской
кибернетики и информатики,
Медицинский институт, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: sgerash@inbox.ru

Gerashchenko Sergey Ivanovich

Doctor of engineering sciences, professor,
head of sub-department of medical
cybernetics and informatics, Medical
Institute, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Геращенко Сергей Михайлович

доктор технических наук, профессор,
кафедра медицинской кибернетики
и информатики, Медицинский институт,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: sgerash@inbox.ru

Gerashchenko Sergey Mikhailovich

Doctor of engineering sciences, professor,
sub-department of medical cybernetics
and informatics, Medical Institute,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Кучумов Евгений Владимирович

кандидат технических наук,
старший научный сотрудник,
Научно-исследовательский институт
физических измерений (Россия, г. Пенза,
ул. Володарского, 8/10)

E-mail: evgenii_kuchumov@mail.ru

Kuchumov Evgeny Vladimirovich

Candidate of engineering sciences,
senior staff scientist, Research Institute
of Physical Measurements
(8/10 Volodarskogo street, Penza, Russia)

УДК 53.082.8, 51-73, 517.9

Геращенко, С. И.

Анализ особенностей системы интегродифференциальных уравнений, описывающих состояние медико-биологических объектов с ионным типом проводимости / С. И. Геращенко, С. М. Геращенко, Е. В. Кучумов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 78–88.

УДК 517.968, 517.983.37, 517.958:535.4

Д. В. Валовик, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак

СУЩЕСТВОВАНИЕ И ЕДИНСТВЕННОСТЬ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА СИСТЕМЕ НЕПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ ТЕЛ И ЭКРАНОВ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Теоретическое исследование векторной задачи рассеяния электромагнитной волны препятствием сложной формы, состоящим из нескольких объемных тел и бесконечно тонких абсолютно проводящих экранов.

Материалы и методы. Задача рассматривается в квазиклассической постановке (решение разыскивается в классическом смысле всюду, за исключением края экранов); для доказательства теоремы единственности решения краевой задачи применяются классические интегральные формулы анализа, распространяемые на пространства функций Соболева; для доказательства существования и гладкости решения задачи применяются элементы теории эллиптических псевдодифференциальных операторов на многообразиях с краем.

Результаты. Сформулирована квазиклассическая постановка задачи дифракции; доказана теорема о единственности квазиклассического решения скалярной задачи дифракции; доказана теорема о фредгольмовости системы интегродифференциальных уравнений; установлена гладкость решения этой системы.

Выводы. Полученные результаты могут быть использованы для исследования более сложных задач электродинамики, а также для теоретического обоснования численных методов их решения.

Ключевые слова: задача дифракции, квазиклассические решения, теорема единственности, пространства Соболева, фредгольмов оператор, эллиптический псевдодифференциальный оператор.

D. V. Valovik, M. Yu. Medvedik, Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak

EXISTENCE AND UNICITY OF THE SOLUTION OF THE DIFFRACTION PROBLEM FOR AN ELECTROMAGNETIC WAVE ON A SYSTEM OF NON-INTERSECTING BODIES AND SCREENS

Abstract.

Background. The aim of this work is to theoretically study the vector problem of electromagnetic wave scattering by an obstacle of complex shape consisting of several solid bodies and infinitely thin absolutely conducting screens.

Material and methods. The problem is considered in the quasiclassical statement (solution is sought in the classical sense everywhere except for the screen edge); to prove the theorem of uniqueness of the solution to the boundary value problem, the authors used classical integral formulas generalized for the elements of the Sobolev spaces; to prove existence and continuity of the solution, the researchers applied the theory of elliptic pseudodifferential operators over bounded manifolds.

Results. The quasiclassical statement of the electromagnetic wave diffraction problem has been suggested; the theorem of uniqueness of the quasi-classical solu-

¹ Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект №14-11-00344.

tion to the boundary value problem was proved; the Fredholm property of the matrix integro-differential operator was established; the theorem on continuity of solutions to the integro-differential equations was proved.

Conclusions. The obtained results can be used in the study of more complicated diffraction problems as well as for validation of numerical methods for their approximate solution.

Key words: diffraction problem, quasi-classical solutions, uniqueness theorem, Sobolev spaces, Fredholm operator, elliptic PsDO

Введение

В статье [1] впервые рассмотрен новый класс задач дифракции электромагнитных волн, в которых рассеивающая структура образована многообразиями различной размерности – задача рассматривается в квазиклассической постановке (решение разыскивается в классическом смысле всюду, за исключением края экранов); исходная краевая задача для системы уравнений Максвелла сводится методами теории потенциала к системе интегродифференциальных уравнений по областям и поверхностям рассеивателей. Для приближенного решения системы уравнений в [1] применен метод Галеркина с выбором кусочно-линейных финитных базисных вектор-функций.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию описанной задачи. Во-первых, доказывается теорема единственности квазиклассического решения поставленной задачи дифракции. Доказательство этой теоремы во многом напоминает доказательство аналогичного утверждения для решения скалярной задачи дифракции [2]: исходная краевая задача сводится к задаче сопряжения в нескольких подобластях свободного пространства; из классических интегральных соотношений и условий излучения следует, что решение задачи сопряжения (а следовательно, и исходной задачи) единственно.

Исходная краевая задача сводится методами теории потенциала [3, 4] к системе интегродифференциальных уравнений [1]. Из известных результатов о поведении поля вблизи края абсолютно проводящего экрана следует необходимость рассматривать полученные уравнения как псевдодифференциальные в пространствах Соболева сечений векторных расслоений. В работе определены пространства решений системы интегродифференциальных уравнений; показано, что решение ее является гладким во внутренних точках рассеивателей; кроме того, установлена фредгольмовость матричного интегродифференциального оператора рассматриваемой задачи дифракции.

1. Постановка задачи дифракции

Сформулируем кратко математическую постановку задачи дифракции для случая рассеивателя, состоящего из одного тела и одного экрана – более общий случай нескольких экранов и тел рассмотрен в [1].

Пусть Ω – связная ориентируемая незамкнутая ограниченная поверхность класса C^∞ в $\mathbb{R}^3$, являющаяся абсолютно проводящей, с кусочно-гладким краем; $\partial\Omega_\delta := \{x \in \mathbb{R}^3 : \text{dist}(x, \partial\Omega) < \delta\}$ – трубчатые окрестности края экрана. Пусть Q – ограниченная область с кусочно-гладкой (класса C^1) границей, причем $\overline{Q} \cap \overline{\Omega} = \emptyset$. Тело Q – диэлектрически неоднородное и анизотропное с гладкой тензор-функцией $\hat{\epsilon}(x)$ такой, что

$\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}^T$ и $\operatorname{Re} \hat{\varepsilon} > 0$, $\operatorname{Im} \hat{\varepsilon} \geq 0$ в $\bar{Q}$. Свободное пространство однородно и изотропно с постоянными ε_e, μ_e , причем $\operatorname{Im} \varepsilon_e \geq 0$, $\operatorname{Im} \mu_e \geq 0$, $\operatorname{Im} k_e \geq 0$, $k_e = \omega \sqrt{\varepsilon_e \mu_e}$.

Ниже P^+ , P^- – произвольные области, внешняя и внутренняя соответственно к Ω и такие, что $\Omega \subset \partial P^\pm$, а $\mathbf{j}_{0,E}$ – ток, локализованный вне рассеивателей: $\operatorname{supp}(\mathbf{j}_{0,E}) \cap (\bar{\Omega} \cup \bar{Q}) = \emptyset$.

Требуется определить полное электромагнитное поле $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$:

$$(\mathbf{E}, \mathbf{H}) \in C^2\left((\partial Q \cup \bar{\Omega})^c\right) \cap C^1\left(\bar{Q}^c \setminus \bar{\Omega}\right) \cap \bigcap_{\delta > 0} C^1(\bar{Q}) \cap C(\bar{P}^+ \setminus \partial \Omega_\delta) \cap C(\bar{P}^- \setminus \partial \Omega_\delta), \quad (1)$$

удовлетворяющее в $\mathbb{R}^3 \setminus (\partial Q \cup \bar{\Omega})$:

– уравнениям Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H} = -i\omega \hat{\varepsilon} \mathbf{E} + \mathbf{j}_{0,E}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} = i\omega \mu_0 \mathbf{H}, \end{cases} \quad (2)$$

– условиям непрерывности касательных компонент на границе области неоднородности:

$$[\mathbf{E}_\tau]_{\partial Q} = [\mathbf{H}_\tau]_{\partial Q} = 0, \quad (3)$$

– краевому условию на поверхности экрана Ω (за исключением точек его края):

$$\mathbf{E}_\tau|_\Omega = 0, \quad (4)$$

– условиям конечности энергии в любом ограниченном объеме пространства:

$$\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_{2,loc}(\mathbb{R}^3) \quad (5)$$

– условиям излучения Зоммерфельда на бесконечности для рассеянного поля

$$\frac{\partial(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s)}{\partial r} - ik_e(\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s) = o(1/r), \quad r \rightarrow \infty, \quad (6)$$

где $r = |\mathbf{x}|$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$.

Определение 1. Решение $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ задачи (2)–(6), удовлетворяющее условиям (1), называется квазиклассическим.

Теорема. Неоднородная задача (2)–(6) имеет не более одного решения.

Доказательство. В силу линейности задачи достаточно установить, что однородная краевая задача для рассеянного поля $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ может иметь лишь тривиальное решение.

Эта краевая задача формулируется следующим образом:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_s = -i\omega\hat{\epsilon}\mathbf{E}_s, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_s = i\omega\mu_e\mathbf{H}_s, \end{cases} \quad [\mathbf{E}_{s,\tau}]|_{\partial Q} = [\mathbf{H}_{s,\tau}]|_{\partial Q} = 0, \quad \mathbf{E}_{s,\tau}|_{\Omega} = 0,$$

Также для $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ предполагаются выполненными условия излучения.

Дополним экран Ω до произвольной кусочно-гладкой односвязной замкнутой ориентируемой поверхности ∂V_1 , охватывающей ограниченную область $V_1 \subset \mathbb{R}^3$ и такой, что $\bar{Q} \cap \bar{V}_1 = \emptyset$.

Пусть $B := B_R(0)$ – шар достаточно большого радиуса R такой, что $\bar{Q}, \bar{V}_1 \subset B$. Пусть $V_2 = Q$. Определим также области $V_3 := B \setminus (\bar{V}_1 \cup \bar{V}_2)$ с границей $\partial V_3 = \partial B \cup \partial V_1 \cup \partial V_2$ и $V_4 = \bar{B}^c$.

Рассматриваемую краевую задачу для рассеянного поля сведем к задаче сопряжения в областях V_l (ниже приняты обозначения $\mathbf{E}_l, \mathbf{H}_l$ для $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ в V_l):

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_l = -i\omega\epsilon_e \mathbf{E}_l, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_l = i\omega\mu_e \mathbf{H}_l, \end{cases} \quad l = 1, 3, 4; \quad \begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_2 = -i\omega\hat{\epsilon} \mathbf{E}_2, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_2 = i\omega\mu_e \mathbf{H}_2, \end{cases}$$

$$\mathbf{E}_{2,\tau}|_{\partial Q} = \mathbf{E}_{3,\tau}|_{\partial Q}; \quad \mathbf{H}_{2,\tau}|_{\partial Q} = \mathbf{H}_{3,\tau}|_{\partial Q}; \quad \mathbf{E}_{3,\tau}|_{\partial B} = \mathbf{E}_{4,\tau}|_{\partial B}; \quad \mathbf{H}_{3,\tau}|_{\partial B} = \mathbf{H}_{4,\tau}|_{\partial B};$$

$$\mathbf{E}_{1,\tau}|_{\partial V_1 \setminus \bar{\Omega}} = \mathbf{E}_{3,\tau}|_{\partial V_1 \setminus \bar{\Omega}}; \quad \mathbf{H}_{1,\tau}|_{\partial V_1 \setminus \bar{\Omega}} = \mathbf{H}_{3,\tau}|_{\partial V_1 \setminus \bar{\Omega}}; \quad \mathbf{E}_{1,\tau}|_{\Omega} = \mathbf{E}_{3,\tau}|_{\Omega} = 0.$$

Условия излучения Зоммерфельда заменим эквивалентными условиями Сильвера – Мюллера [5]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_4, \mathbf{H}_4 &= o(1/r), & \operatorname{Im} k > 0, \\ \mathbf{H}_4 \times \mathbf{e}_r - \mathbf{E}_4 &= o(1/r), & \mathbf{E}_4 \times \mathbf{e}_r - \mathbf{H}_4 = o(1/r) \quad r \rightarrow \infty, \\ \mathbf{E}_4, \mathbf{H}_4 &= O(1/r), & \operatorname{Im} k = 0. \end{aligned}$$

Применим лемму Лоренца

$$\int_{\partial V} (\mathbf{E}' \times \mathbf{H}'' - \mathbf{E}'' \times \mathbf{H}', \mathbf{n}) ds = \int_V (\mathbf{j}_H'', \bar{\mathbf{H}}') + (\mathbf{j}_E', \bar{\mathbf{E}}'') - (\mathbf{j}_H', \bar{\mathbf{H}}'') - (\mathbf{j}_E'', \bar{\mathbf{E}}') dV$$

в ограниченных областях V_1, V_2 и V_3 .

Опишем подробно эту процедуру для неоднородной области $V_2 = Q$. Наряду с исходной системой уравнений Максвелла

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_2 = -i\omega\hat{\epsilon} \mathbf{E}_2, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_2 = i\omega\mu_e \mathbf{H}_2 \end{cases}$$

рассмотрим еще систему уравнений для комплексно-сопряженного поля $\bar{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{H}}_2$:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \bar{\mathbf{H}}_2 = i\omega\hat{\epsilon} \bar{\mathbf{E}}_2, \\ \operatorname{rot} \bar{\mathbf{E}}_2 = -i\omega\mu_e \bar{\mathbf{H}}_2. \end{cases}$$

Заменяя $\bar{\mathbf{E}}_2$ на $-\tilde{\mathbf{E}}_2$, получим

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \bar{\mathbf{H}}_2 = -i\omega\tilde{\mathbf{E}}_2 = -i\omega\tilde{\mathbf{E}}_2 + i\omega(\tilde{\mathbf{E}} - \bar{\mathbf{E}})\tilde{\mathbf{E}}_2, \\ \operatorname{rot} \tilde{\mathbf{E}}_2 = i\omega\bar{\mu}_e \bar{\mathbf{H}}_2 = i\omega\mu_e \bar{\mathbf{H}}_2 - i\omega(\mu_e - \bar{\mu}_e)\bar{\mathbf{H}}_2. \end{cases}$$

Применяя лемму Лоренца к полям $\mathbf{E}' = \mathbf{E}_2$, $\mathbf{H}' = \mathbf{H}_2$, $\mathbf{E}'' = \tilde{\mathbf{E}}_2$, $\mathbf{H}'' = \bar{\mathbf{H}}_2$ и токам $\mathbf{j}_E'' = i\omega(\tilde{\mathbf{E}} - \bar{\mathbf{E}})\tilde{\mathbf{E}}_2$, $\mathbf{j}_H'' = i\omega(\mu_e - \bar{\mu}_e)\bar{\mathbf{H}}_2$, получим следующее равенство:

$$\begin{aligned} & \int_{\partial Q} (\mathbf{E}_2 \times \bar{\mathbf{H}}_2 - \tilde{\mathbf{E}}_2 \times \mathbf{H}_2, \mathbf{n}) ds = \\ & = - \int_Q i\omega(\tilde{\mathbf{E}} - \bar{\mathbf{E}})\tilde{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{E}}_2 dv + \int_Q i\omega(\mu_e - \bar{\mu}_e)\bar{\mathbf{H}}_2, \bar{\mathbf{H}}_2 dv. \end{aligned}$$

Заменяя теперь $\tilde{\mathbf{E}}_2$ на $-\bar{\mathbf{E}}_2$ и учитывая свойства сред, получим

$$\int_{\partial Q} (\mathbf{E}_2 \times \bar{\mathbf{H}}_2 + \bar{\mathbf{E}}_2 \times \mathbf{H}_2, \mathbf{n}) ds = \int_Q i\omega(\tilde{\mathbf{E}} - \bar{\mathbf{E}})\bar{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{E}}_2 dv. \quad (7)$$

В ограниченных областях V_1 и V_3 получаются аналогичные соотношения:

$$\int_{\partial V_1 \setminus \bar{\Omega}} (\mathbf{E}_1 \times \bar{\mathbf{H}}_1 + \bar{\mathbf{E}}_1 \times \mathbf{H}_1, \mathbf{n}) ds = \int_V i\omega(\epsilon_e - \bar{\epsilon}_e)\bar{\mathbf{E}}_1, \bar{\mathbf{E}}_1 dv, \quad (8)$$

$$\int_{\partial Q \cup \partial V_1 \setminus \bar{\Omega} \cup \partial B} (\mathbf{E}_3 \times \bar{\mathbf{H}}_3 + \bar{\mathbf{E}}_3 \times \mathbf{H}_3, \mathbf{n}) ds = \int_{V_3} i\omega((\epsilon_e - \bar{\epsilon}_e)\bar{\mathbf{E}}_3, \bar{\mathbf{E}}_3) dv. \quad (9)$$

Из условий излучения получим

$$\begin{aligned} & \int_{\partial B} (\mathbf{E}_3 \times \bar{\mathbf{H}}_3 + \overline{\mathbf{E}_3 \times \bar{\mathbf{H}}_3}, \mathbf{n}) ds = 2 \operatorname{Re} \int_{\partial B} (\mathbf{E}_3 \times \bar{\mathbf{H}}_3, \mathbf{n}) ds = \\ & = 2 \operatorname{Re} \int_{\partial B} ((\mathbf{H}_3 \times \mathbf{n} + o(1/r)) \times \bar{\mathbf{H}}_3, \mathbf{n}) ds = 2 \operatorname{Re} \int_{\partial B} ((\mathbf{H}_3 \times \mathbf{n}) \times \bar{\mathbf{H}}_3, \mathbf{n}) ds + o(1) = \\ & = 2 \operatorname{Re} \int_{\partial B} (\mathbf{H}_3 \times \mathbf{n}, \bar{\mathbf{H}}_3 \times \mathbf{n}) ds + o(1) = 2 \int_{\partial B} |\mathbf{H}_3 \times \mathbf{n}|^2 ds + o(1) = 2 \int_{\partial B} |\mathbf{H}_{3,\tau}|^2 ds + o(1). \end{aligned}$$

Сложим равенства (7), (8) и (9):

$$2 \int_{\partial B} |\mathbf{H}_{3,\tau}|^2 ds + \int_Q (\operatorname{Im} \tilde{\mathbf{E}} \bar{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{E}}_2) dv + \sum_{l=1,3} \int_{V_l} (\operatorname{Im} \epsilon_e \bar{\mathbf{E}}_l, \bar{\mathbf{E}}_l) dv = o(1), \quad (10)$$

и рассмотрим несколько случаев.

Пусть сначала $\operatorname{Im} \tilde{\mathbf{E}} > 0$ всюду в $\bar{\Omega}^c$. Из условий излучения и (10) следует сразу, что $\mathbf{E}, \mathbf{H} \equiv 0$ во всем пространстве.

Если $\text{Im} \hat{\epsilon}(x) > 0$ в Q и $\text{Im} \epsilon_e = 0$ в свободном пространстве, то

$$2 \int_{\partial B} |\mathbf{H}_{3,\tau}|^2 ds + \int_Q (\text{Im} \hat{\epsilon} \bar{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{E}}_2) dv = o(1).$$

Так как оба слагаемых здесь неотрицательны, то

$$\int_{\partial B} |\mathbf{H}_{3,\tau}|^2 ds = o(1), R \rightarrow \infty; \quad \int_Q (\text{Im} \hat{\epsilon} \bar{\mathbf{E}}_2, \bar{\mathbf{E}}_2) dv = 0.$$

В силу леммы Реллиха из первого равенства заключаем, что $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s \equiv 0$ вне рассеивателей; из второго равенства следует $\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2 \equiv 0$ в Q .

Наконец, если диэлектрическая проницаемость всюду вещественна и положительна в $\mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}$, снова из леммы Реллиха получаем $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s \equiv 0$ вне рассеивателей; равенство $\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2 \equiv 0$ в Q также сохраняется [6]. Доказательство завершено.

2. Интегродифференциальные уравнения задачи дифракции

Рассмотренная краевая задача сводится к операторному уравнению

$$\hat{L}(\mathbf{J}, \mathbf{u}) = \mathbf{f}. \quad (11)$$

Здесь $\mathbf{J} = \left[\frac{\hat{\epsilon}(x)}{\epsilon_0} - \hat{I} \right] \mathbf{E}$ – неизвестный вектор тока поляризации в Q ;

$\mathbf{u}$ – неизвестная поверхностная плотность тока, представляющая собой касательное к Ω векторное поле. Правая часть есть вектор $\mathbf{f} = (\mathbf{E}_{0,Q}, \mathbf{E}_{0,\tau})$, где $\mathbf{E}_{0,Q}$ – сужение падающего поля Q , а $\mathbf{E}_{0,\tau}$ – его касательная составляющая на экране.

Матричный оператор $\hat{L}$ имеет вид

$$\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2 = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & K_1 \\ K_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь операторы A, S, K_i определяются равенствами

$$A\mathbf{J} := \hat{\xi}\mathbf{J}(x) - (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy,$$

$$S\mathbf{u} := \left(-(k_e^2 + \text{grad div}) \int_{\Omega} G(x, y) \mathbf{u}(y) ds_y \right)_{\tau},$$

$$K_1\mathbf{u} := -(k_e^2 + \text{grad div}) \int_{\Omega} G(x, y) \mathbf{u}(y) ds_y,$$

$$K_2\mathbf{J} := \left(-(k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy \right)_{\tau}$$

и рассматриваются как отображения в следующих пространствах:

$$\begin{aligned} A\mathbf{J} &:= L_2(Q) \rightarrow L_2(Q), & S\mathbf{u} &:= W(\Omega) \rightarrow W'(\Omega), \\ K_1\mathbf{u} &:= W(\Omega) \rightarrow L_2(Q), & K_2\mathbf{J} &:= L_2(Q) \rightarrow W'(\Omega). \end{aligned}$$

Пространство $W = W(\bar{\Omega})$ сечений векторных расслоений было введено в монографии [4] как замыкание пространства $C_0^\infty(\Omega)$ по норме $\|\cdot\|_W$:

$$\|\mathbf{u}\|_W^2 = \|\mathbf{u}\|_{-1/2}^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{-1/2}^2.$$

Здесь $\|\mathbf{u}\|_{-1/2}^2$ обозначает норму в пространстве Соболева $H^{-1/2}(\Omega)$, пространство $W' = W'(S)$ – антидвойственное к W .

Решение уравнения (11) – пара $(\mathbf{J}, \mathbf{u}) \in L_2(Q) \times W(\Omega)$.

Теорема 2. В выбранных пространствах оператор $\hat{L}$ является фредгольмовым оператором с нулевым индексом.

Доказательство. В силу ограничений, наложенных на тензор диэлектрической проницаемости, оператор $\hat{A}$ является фредгольмовым в $L_2(Q)$ [7]. Оператор $S: W(\Omega) \rightarrow W'(\Omega)$ фредгольмов, так как всюду вне экрана выполнено условие $k_e \neq 0$ [4]. Следовательно, $\hat{L}_1$ – фредгольмов. Оператор $\hat{L}_2$ компактен, так как тело и экран не пересекаются и, следовательно, ядра обоих операторов K_1 и K_2 являются бесконечно дифференцируемыми. Таким образом, $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$ – фредгольмов оператор в выбранных пространствах. Теорема доказана.

Покажем теперь, что решение системы (11) является гладким. По предположению $\operatorname{supp}(\mathbf{j}_{0,E}) \cap (\bar{\Omega} \cup \bar{Q}) = \emptyset$, следовательно, $\mathbf{E}_{0,Q} \in C^\infty(\bar{Q})$ и $\mathbf{E}_{0,\tau} \in C^\infty(\bar{\Omega})$. Из эллиптичности оператора $A: H_{comp}^s(Q) \rightarrow H_{loc}^s(Q)$ (см. [7]) и гладкости $K_1\mathbf{u}$ в $\bar{Q}$ (так как $\bar{\Omega} \cap \bar{Q} = \emptyset$) следует, что $\mathbf{J} \in C^\infty(Q)$. Аналогично, эллиптичность оператора S [4] влечет гладкость $\mathbf{u}$ в Ω . Таким образом, верно

Утверждение. Если решение $(\mathbf{J}, \mathbf{u}) \in L_2(Q) \times W(\Omega)$ системы (11) существует, то $\mathbf{J}$ и $\mathbf{u}$ бесконечно дифференцируемы во внутренних точках Q и Ω соответственно.

Список литературы

1. **Максимова, М. А.** Численное решение задачи дифракции электромагнитных волн на системе тел и экранов / М. А. Максимова, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 3 (31). – С. 114–133.
2. **Медведик, М. Ю.** Скалярная задача дифракции плоской волны на системе непересекающихся экранов и неоднородных тел / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014. – Т. 54, № 8. – С. 1319–1331.
3. **Самохин, А. Б.** Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – М.: Радио и связь, 1998. – 160 с.

4. **Ильинский, А. С.** Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах / А. С. Ильинский, Ю. Г. Смирнов. – М. : Радиотехника, 1996. – 176 с.
5. **Ильинский, А. С.** Математические модели электродинамики / А. С. Ильинский, В. В. Кравцов, А. Г. Свешников. – М. : Высшая школа, 1991. – 224 с.
6. **Costabel, M.** Volume and surface integral equations for electromagnetic scattering by a dielectric body / M. Costabel, E. Darrigrand, E. Kone // *J. Comput. Appl. Math.* – 2010. – № 234. – P. 1817–1825.
7. **Валовик Д. В.** Метод псевдодифференциальных операторов в задаче дифракции электромагнитной волны на диэлектрическом теле / Д. В. Валовик, Ю. Г. Смирнов // *Дифференциальные уравнения.* – 2012. – Т. 48, № 4. – С. 509–515.

References

1. Maksimova M. A., Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2014, no. 3 (31), pp. 114–133.
2. Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Journal of calculus mathematics and mathematical physics]. 2014, vol. 54, no. 8, pp. 1319–1331.
3. Samokhin A. B. *Integral'nye uravneniya i iteratsionnye metody v elektromagnitnom rasseyanii* [Integral equations and iteration methods in magnetic scattering]. Moscow: Radio i svyaz', 1998, 160 p.
4. Il'inskiy A. S., Smirnov Yu. G. *Difraktsiya elektromagnitnykh voln na provodyashchikh tonkikh ekranakh* [Diffraction of electromagnetic waves on conductive thin screens]. Moscow: Radiotekhnika, 1996, 176 p.
5. Il'inskiy A. S., Kravtsov V. V., Sveshnikov A. G. *Matematicheskie modeli elektrodinamiki* [Mathematical models of electrodynamics]. Moscow: Vysshaya shkola, 1991, 224 p.
6. Costabel M., Darrigrand E., Kone E. *J. Comput. Appl. Math.* 2010, no. 234, pp. 1817–1825.
7. Valovik D. V., Smirnov Yu. G. *Differentsial'nye uravneniya* [Differential equations]. 2012, vol. 48, no. 4, pp. 509–515.

Валовик Дмитрий Викторович

доктор физико-математических наук,
доцент, кафедра математики
и суперкомпьютерного моделирования,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: dvalovik@mail.ru

Valovik Dmitriy Viktorovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of mathematics
and supercomputer modeling, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Медведик Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра математики
и суперкомпьютерного моделирования,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: _medv@mail.ru

Medvedik Mikhail Yur'evich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of mathematics
and supercomputer modeling, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Смирнов Юрий Геннадьевич

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
математики и суперкомпьютерного
моделирования, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Smirnov Yuriy Gennad'evich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of mathematics and supercomputer
modeling, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Цупак Алексей Александрович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра математики
и суперкомпьютерного моделирования,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: altsupak@yandex.ru

Tsupak Aleksey Aleksandrovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of mathematics
and supercomputer modeling, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

УДК 517.968, 517.983.37, 517.958:535.4

Валовик, Д. В.

Существование и единственность решения задачи дифракции электромагнитной волны на системе непересекающихся тел и экранов /
Д. В. Валовик, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия
высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические
науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 89–97.

РАСПАД ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО СТОЛБА МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ С НЕОДНОРОДНЫМ ПОРИСТЫМ ЯДРОМ

Аннотация.

Актуальность и цели. Магнитные жидкости, не существующие в природе, получают искусственно – путем диспергирования наночастиц твердого ферромагнетика в обычной немагнитной жидкости. Магнитные жидкости нашли широкое применение в различных областях техники и технологии. В данной статье сформулирована и исследована математическая модель распространения и неустойчивости волн на поверхности цилиндрического столба магнитной жидкости бесконечной длины, окружающей коаксиально расположенное, бесконечно длинное ядро круглого сечения из неоднородного (слоистого) пористого материала.

Материалы и методы. Для решения задачи используются методы математической физики. Задача решается в цилиндрической системе координат (r, θ, z) . Учитывается наличие поверхностного натяжения. Сила тяжести предполагается отсутствующей.

Результаты. Записаны уравнения движения магнитной жидкости внутри и вне пористой среды, а также уравнения для магнитного поля. Сформулированы граничные условия для гидродинамических и магнитных величин на поверхностях раздела сред. Найдено полное решение краевой задачи для гидродинамических и магнитных величин. Проведен численный анализ полученного дисперсионного уравнения, описывающего распространение поверхностных волн. Найдены условия, при которых возмущения поверхности жидкого столба становятся неустойчивыми и приводят к его распаду на цепочку из соединенных капель.

Выводы. Размер капель, образующихся при распаде жидкого столба, увеличивается с ростом магнитного поля, т.е. магнитное поле оказывает стабилизирующее влияние на распад жидкого столба.

Ключевые слова: поверхностные волны, неустойчивость, магнитная жидкость, пористая среда, магнитное поле.

N. G. Taktarov, O. A. Runova

BREAKUP OF A CYLINDRICAL COLUMN OF MAGNETIC FLUID WITH A NON-HOMOGENEOUS POROUS CORE

Abstract.

Background. The magnetic fluids, not existing in nature, are synthesised artificially by means of dispersion of nanoparticles of solid ferromagnetic in the usual non-magnetic fluid. The magnetic fluids have found a broad application in different areas of technology. A mathematical model of waves propagation and instability on a surface of a cylindrical column of magnetic fluid of infinite length, surrounding a coaxial infinite long non-homogeneous (laminated) porous core of round section was constructed and studied.

Materials and methods. The authors used the methods of mathematical physics and solved the problem in a cylindrical coordinate system (r, θ, z) . The presence of the surface tension was taken into account. The gravity was neglected.

Results. The equations of motion of the magnetic fluids inside and outside of the porous medium and the equations for the magnetic field were written. The boundary conditions for hydrodynamic and magnetic quantities on interfaces of the mediums were formulated. The full solution of a boundary value problem for hydrodynamic and magnetic quantities was found. The numerical analysis of the dispersion equation that describes surface wave propagation was completed. The authors found the conditions, under which the disturbances of the fluid column surface become unstable and result in its fragmentation into a chain of connected droplets.

Conclusions. The size of droplets, occurring during fragmentation of the fluid column, increases with the growth of the magnetic field, i.e. magnetic field has a stabilizing effect on the fragmentation of the fluid column.

Key words: surface waves, instability, magnetic fluid, porous medium, magnetic field.

Введение

Магнитные жидкости синтезируют искусственно путем коллоидного растворения наночастиц твердого ферромагнетика в обычной немагнитной жидкости [1]. Обладая способностью к намагничиванию, такие жидкости взаимодействуют с приложенным магнитным полем, которое способно влиять на их движение. На этом свойстве основаны разнообразные практические применения магнитных жидкостей в различных областях техники и технологии. В связи с этим представляет интерес изучение движения магнитных жидкостей в различных конкретных случаях. Так, например, задача об устойчивости и распаде струи магнитной жидкости решена в [2]. Как известно, струи магнитных чернил, управляемых магнитным полем, используются в струйных принтерах.

Для различных практических приложений представляет интерес изучение движения жидкостей в пористой среде при наличии электрического или магнитного поля. Распространение волн на заряженной поверхности жидкого проводника, контактирующего с пористой средой, рассмотрено в [3, 4].

Неустойчивость и распад столба магнитной жидкости, окружающей однородное пористое ядро цилиндрической формы, исследовано в [5]. В данной статье рассматривается обобщение этой задачи на случай неоднородного (слоистого) твердого ядра, состоящего из внутреннего сплошного цилиндра и окружающей его коаксиально расположенной пористой цилиндрической оболочки.

1. Постановка задачи

Предполагается, что внутри бесконечно длинного цилиндрического столба магнитной жидкости находится неоднородное (слоистое) твердое ядро, состоящее из двух частей: внутреннего коаксиально расположенного круглого сплошного цилиндра и окружающего соосного с ним круглого цилиндрического слоя, состоящего из однородного пористого материала. Учитывается наличие поверхностного натяжения. Сила тяжести предполагается отсутствующей. Вектор $\mathbf{H}_0$ напряженности однородного приложенного магнитного поля параллелен оси твердого ядра. Задача решается в цилиндрической системе координат (r, θ, z) , ось z которой направлена по общей оси твердого и жидкого цилиндров. Радиусы сплошного цилиндрического ядра,

внешней поверхности пористого слоя и невозмущенной цилиндрической поверхности обозначим a_1 , a_2 и a_0 соответственно. Величины, относящиеся к сплошному ядру ($0 \leq r < a_1$), пористому слою ($a_1 < r < a_2$), свободной жидкости ($a_2 < r < a_0$) и воздушному пространству вне жидкости ($a_0 < r < \infty$) обозначаются в необходимых случаях индексами 1, 2, 3 и 4 соответственно. Магнитные проницаемости μ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) в областях 1, 2, 3 и 4 предполагаются постоянными ($\mu_4 = 1$). Магнитная проницаемость среды в области 2 (пористый материал, насыщенный жидкостью) находится по формуле $\mu_2 = \mu_3 \Gamma + \mu_s (1 - \Gamma)$, где μ_s – проницаемость пористого материала; Γ – пористость (отношение объема пор ко всему элементарному объему среды). Предполагается, что $\Gamma = \text{const}$. В общем случае $\mu_s \neq \mu_1$.

Уравнения движения магнитной жидкости в пористой среде при сделанных предположениях имеют вид [1, 5]:

$$\frac{\rho}{\Gamma} \frac{\partial \mathbf{u}_2}{\partial t} = -\text{grad } p_2 - \frac{\eta}{K} \mathbf{u}_2, \quad \text{div } \mathbf{u}_1 = 0, \quad (1)$$

здесь ρ – плотность жидкости; p_2 – давление; $\mathbf{u}_2$ – макроскопическая скорость фильтрации, определяется как объемный поток жидкости на единицу площади в пористой среде; η – вязкость; K – коэффициент проницаемости пористой среды.

Предполагая, что амплитуда поверхностной волны значительно меньше ее длины, уравнения движения свободной жидкости вне пористой среды запишем в линейном приближении [6, с. 55]:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}_3}{\partial t} = -\text{grad } p_3, \quad \text{div } \mathbf{u}_3 = 0, \quad (2)$$

здесь $\mathbf{u}_3$ – скорость жидкости. В области 1 следует положить $\mathbf{u}_1 \equiv 0$.

Уравнения для магнитного поля в неэлектропроводной среде [7]:

$$\text{rot } \mathbf{H}_j = 0, \quad \text{div } \mu_j \mathbf{H}_j = 0 \quad (j = 1, 2, 3, 4). \quad (3)$$

Из уравнений (1)–(3) следует

$$\mathbf{u}_2 = \text{grad } \phi_2, \quad \mathbf{u}_3 = \text{grad } \phi_3, \quad \mathbf{H}_j = \text{grad } \psi_j, \quad (4)$$

$$\Delta \phi_2 = 0, \quad \Delta \phi_3 = 0, \quad \Delta \psi_j = 0 \quad (j = 1, 2, 3, 4).$$

Далее все величины будем записывать в виде

$$p_2 = p_{20} + p_{2w}, \quad p_3 = p_{30} + p_{3w}, \quad \mathbf{H}_j = \mathbf{H}_{j0} + \mathbf{H}_{jw}, \quad (5)$$

$$\psi_j = \psi_{j0} + \psi_{jw} = z H_{j0} + \psi_{jw},$$

здесь индексами 0 и w обозначены соответственно невозмущенные величины и малые возмущения, связанные с волной; $\mathbf{H}_{10} = \mathbf{H}_{20} = \mathbf{H}_{30} = \mathbf{H}_{40} \equiv \mathbf{H}_0$. Возмущения ψ_{iw} также должны удовлетворять уравнениям Лапласа (4).

Граничные условия на соответствующих поверхностях раздела имеют вид [5–7]:

- 1) $u_{2r} = 0$ при $r = a_1$ (на твердой поверхности);
- 2) $\psi_1 = \psi_2$ при $r = a_1$;
- 3) $\mu_1 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_1 = \mu_2 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_2$ при $r = a_1$;
- 4) $u_{2r} = u_{3r}$ при $r = a_2$ (на внешней границе пористой среды);
- 5) $\psi_2 = \psi_3$ при $r = a_2$;
- 6) $\mu_2 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_2 = \mu_3 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_3$ при $r = a_2$;
- 7) $p_2 - \frac{\mu_2}{4\pi} H_{2n}^2 + \frac{\mu_2}{8\pi} \mathbf{H}_2^2 = p_3 - \frac{\mu_3}{4\pi} H_{3n}^2 + \frac{\mu_3}{8\pi} \mathbf{H}_{3n}^2$ при $r = a_2$;
- 8) $u_{3r} = \frac{d\xi}{dt}$ при $r = a_0 + \xi$ (на свободной поверхности жидкости);
- 9) $\psi_3 = \psi_4$ при $r = a_0 + \xi$;
- 10) $\mu_3 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_3 = \mu_4 \mathbf{n} \cdot \text{grad} \psi_4$ при $r = a_0 + \xi$;
- 11) $p_3 - \frac{\mu_3}{4\pi} H_{3n}^2 + \frac{\mu_3}{8\pi} \mathbf{H}_{3n}^2 - \left(p_4 - \frac{\mu_4}{4\pi} H_{4n}^2 + \frac{\mu_4}{8\pi} \mathbf{H}_{4n}^2 \right) = 2\alpha C_m$ при

$r = a_0 + \xi$;

- 12) возмущение потенциала ψ_4 на бесконечности ($r \rightarrow \infty$) равно нулю.

Здесь $\mathbf{n}$ – единичная нормаль к соответствующей поверхности; C_m – средняя кривизна поверхности жидкости; α – коэффициент поверхностного натяжения; $r = a_0 + \xi(\theta, z, t)$ – уравнение искривленной поверхности жидкости ($\xi \ll a_0$).

Невозмущенные (равновесные) величины также должны удовлетворять граничным условиям (6) в предположении, что $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = 0$ и $\xi = 0$, а все $\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_0$.

Как известно из дифференциальной геометрии, выражения для $\mathbf{n}$ и C_m для слабodeформированной цилиндрической поверхности в линейном приближении имеют вид

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\theta, n_z) = \left(1, -\frac{1}{a_0} \frac{\partial \xi}{\partial \theta}, -\frac{\partial \xi}{\partial z} \right),$$

$$2C_m = \frac{1}{a_0} - \left(\frac{\xi}{a_0^2} + \frac{1}{a_0^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} \right). \quad (7)$$

На недеформированной цилиндрической поверхности $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$.

Для возмущений давления из (1) и (2) с учетом (4) находим

$$p_{2w} = -\frac{\rho}{\Gamma} \frac{\partial \phi_2}{\partial t} - \frac{\eta}{K} \phi_2, \quad p_{3w} = -\rho \frac{\partial \phi_3}{\partial t}. \quad (8)$$

Граничные условия (6) с учетом (7) в линейном приближении в силу равновесных граничных условий принимают вид

- 1) $\frac{\partial \phi_2}{\partial r} = 0$;
- 2) $\psi_{1w} = \psi_{2w}$;

$$\begin{aligned}
 3) \quad & \mu_1 \frac{\partial \psi_{1w}}{\partial r} = \mu_2 \frac{\partial \psi_{2w}}{\partial r}; \\
 4) \quad & \frac{\partial \varphi_2}{\partial r} = \frac{\partial \varphi_3}{\partial r}; \\
 5) \quad & \psi_{2w} = \psi_{3w}; \\
 6) \quad & \mu_2 \frac{\partial \psi_{2w}}{\partial r} = \mu_3 \frac{\partial \psi_{3w}}{\partial r}; \\
 7) \quad & p_{2w} + \frac{\mu_2}{4\pi} H_0 \frac{\partial \psi_{2w}}{\partial z} = p_{3w} + \frac{\mu_3}{4\pi} H_0 \frac{\partial \psi_{3w}}{\partial z}; \\
 8) \quad & \frac{\partial \varphi_3}{\partial r} = \frac{\partial \xi}{\partial t}; \\
 9) \quad & \psi_{3w} = \psi_{4w}; \\
 10) \quad & \mu_3 \left(H_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} - \frac{\partial \psi_{3w}}{\partial r} \right) = \mu_4 \left(H_0 \frac{\partial \xi}{\partial z} - \frac{\partial \psi_{4w}}{\partial r} \right); \\
 11) \quad & p_{3w} + \frac{\mu_3}{4\pi} H_0 \frac{\partial \psi_{3w}}{\partial z} - \frac{\mu_4}{4\pi} H_0 \frac{\partial \psi_{4w}}{\partial z} = -\alpha \left(\frac{\xi}{a_0^2} + \frac{1}{a_0^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} \right); \\
 12) \quad & \psi_{4w} = 0 \text{ при } r \rightarrow \infty.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Кроме того, на оси сплошного цилиндра ($r=0$) решения уравнений должны быть конечными.

В граничных условиях (9) величины p_{2w} и p_{3w} имеют вид (8).

Математическая модель является, таким образом, краевой задачей, состоящей из уравнений Лапласа (4) и граничных условий (9).

2. Решение краевой задачи

Решение уравнений (4) с граничными условиями (9) ищем в виде бегущих затухающих (либо нарастающих) волн:

$$\begin{aligned}
 & \{ \varphi_2, \varphi_3, \psi_{1w}, \psi_{2w}, \psi_{3w}, \psi_{4w}, \xi \} = \\
 & = \{ \varphi_2^*(r), \varphi_3^*(r), \psi_{1w}^*(r), \psi_{2w}^*(r), \psi_{3w}^*(r), \psi_{4w}^*(r), \xi^* \} \times \\
 & \times \exp(-\gamma t + ikz + im\theta),
 \end{aligned} \tag{10}$$

здесь $\varphi_1^*(r)$, $\varphi_2^*(r)$, $\psi_{jw}^*(r)$ ($j = 1, 2, 3, 4$) – неизвестные амплитуды; $k = 2\pi/\lambda$ – продольное волновое число; λ – длина волны, $m = 0, 1, 2, \dots$ – азимутальное волновое число; $\gamma = \gamma_r + i\gamma_i$ – комплексная величина; $\omega = |\gamma_i|$ – частота; $\beta = \gamma_r$ – коэффициент, который может быть как положительным (при затухании возмущения), так и отрицательным (при неустойчивости, приводящей к нарастанию возмущения).

Подставляя выражения (10) для φ_i и ψ_{jw} в уравнения Лапласа (4) в цилиндрических координатах, получим систему из шести модифицированных уравнений Бесселя порядка m для амплитуд, решения которых имеют вид

$$\Phi_2^* = C_1 I_m(kr) + C_2 K_m(kr), \quad \Phi_3^* = C_6 I_m(kr) + C_7 K_m(kr),$$

$$\Psi_{1w}^* = C_3 I_m(kr), \quad \Psi_{2w}^* = C_4 I_m(kr) + C_5 K_m(kr),$$

$$\Psi_{3w}^* = C_8 I_m(kr) + C_9 K_m(kr), \quad \Psi_{4w}^* = C_{10} K_m(kr),$$

здесь I_m и K_m – модифицированные функции Бесселя первого и второго родов порядка m ; $C_1, \dots, C_{10}$ – неизвестные коэффициенты.

Эти решения записаны с учетом свойств функций Бесселя: $I_m(kr) \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow \infty$ и $K_m(kr) \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$. В связи с этими свойствами бесконечно большие слагаемые в решениях отброшены.

Для амплитуд граничные условия (9) принимают вид:

- 1) $C_1 I'_m(ka_1) + C_2 K'_m(ka_1) = 0$;
- 2) $C_3 I_m(ka_1) = C_4 I_m(ka_1) + C_5 K_m(ka_1)$;
- 3) $\mu_1 C_3 I'_m(ka_1) = \mu_2 C_4 I'_m(ka_1) + \mu_2 C_5 K'_m(ka_1)$;
- 4) $C_1 I'_m(ka_2) + C_2 K'_m(ka_2) = C_6 I'_m(ka_2) + C_7 K'_m(ka_2)$;
- 5) $C_4 I_m(ka_2) + C_5 K_m(ka_2) = C_8 I_m(ka_2) + C_9 K_m(ka_2)$;
- 6) $\mu_2 C_4 I'_m(ka_2) + \mu_2 C_5 K'_m(ka_2) = \mu_3 C_8 I'_m(ka_2) + \mu_3 C_9 K'_m(ka_2)$;
- 7)

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\rho\gamma}{\Gamma} - \frac{\eta}{K} \right) [C_1 I_m(ka_2) + C_2 K_m(ka_2)] + \\ & + \frac{\mu_2 H_0 i k}{4\pi} [C_4 I_m(ka_2) + C_5 K_m(ka_2)] = \\ & = \rho\gamma [C_6 I_m(ka_2) + C_7 K_m(ka_2)] + \frac{\mu_3 H_0 i k}{4\pi} [C_8 I_m(ka_2) + C_9 K_m(ka_2)]; \\ & 8) \quad k C_6 I'_m(ka_0) + k C_7 K'_m(ka_0) = -\gamma \xi^*; \\ & 9) \quad C_8 I_m(ka_0) + C_9 K_m(ka_0) = C_{10} K_m(ka_0); \\ & 10) \quad \mu_3 [-H_0 i \xi^* + C_8 I'_m(ka_0) + C_9 K'_m(ka_0)] = \mu_4 [-H_0 i \xi^* + C_{10} K'_m(ka_0)]; \\ & 11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho\gamma [C_6 I_m(ka_0) + C_7 K_m(ka_0)] + \frac{\mu_3 H_0 i k}{4\pi} [C_8 I_m(ka_0) + C_9 K_m(ka_0)] - \\ & - \frac{\mu_4 H_0 i k}{4\pi} C_{10} K_m(ka_0) = -\frac{\alpha \xi^*}{a_0^2} (1 - m^2 - a_0^2 k^2). \end{aligned}$$

Здесь i – мнимая единица, штрихами обозначены производные. Граничное условие 12 из (9) удовлетворяется тождественно в силу того, что $K_m(kr) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Находя неизвестные коэффициенты $C_1, \dots, C_{10}$ из первых десяти уравнений (11), считая при этом амплитуду волны ξ^* заданной и подставляя затем эти коэффициенты в одиннадцатое уравнение, полу-

чим дисперсионное соотношение для поверхностных волн, кубическое относительно γ :

$$A_1\gamma^3 + A_2\gamma^2 + A_3\gamma + A_4 = 0. \quad (12)$$

Коэффициенты $A_1, \dots, A_4$ не выписываем ввиду их громоздкости.

Другой способ нахождения дисперсионного соотношения (12) заключается в приравнивании к нулю определителя линейной системы (11) с одиннадцатью неизвестными $C_1, \dots, C_{10}, \xi^*$.

Уравнение (12) кубическое и может быть приведено к так называемому неполному кубическому уравнению $x^3 + px + q = 0$ [8] с дискриминантом $D = (p/3)^3 + (q/2)^2$, где p и q выражаются через коэффициенты $A_1, \dots, A_4$. При условии $D > 0$ существует волновое движение, поскольку уравнение (12) имеет при этом два комплексно сопряженных корня. При $D \leq 0$ волновых движений нет, так как все три корня уравнения (12) действительные.

3. Анализ модели

Числовые расчеты с дисперсионным уравнением (12) проводились для следующих значений параметров: $\rho = 1$ г/см³; $\alpha = 20$ г/с²; $\eta = 0,01$ г/см · с; $\Gamma = 0,8$; $K = 0,02$ см²; $\mu_1 = 1$; $\mu_2 = 1,8$; $\mu_3 = 2$; $\mu_4 = 1$; $\mu_s = 1$.

Вместо размерных величин ω , β и k введем безразмерные:

$$\omega^* = \frac{\omega}{\sqrt{\alpha/(\rho a_0^3)}}, \quad \beta^* = \frac{\beta}{\sqrt{\alpha/(\rho a_0^3)}}, \quad k^* = ka_0.$$

На графиках зависимости ω^* и β^* от k^* область значений аргумента k^* делится на два интервала критической точкой $k^* = k_c^*$ ($\lambda_c = 2\pi/k_c$), которая находится из условия равенства дискриминанта нулю ($D = 0$). В точке k_c^* выполняются условия: $\omega^*(k_c^*) = 0$ и $\beta^*(k_c^*) = 0$.

При этом в интервале $0 < k^* < k_c^*$ происходит нарастание возмущений ($\beta^* < 0$) и волны отсутствуют. Амплитуда возмущений растет с наибольшей скоростью при $k^* = k_m^*$, при котором $|\beta^*|$ достигает максимума. Размер (длина) образующихся при распаде жидкого столба капель равен $\lambda_m \approx 2\pi/k_m$ ($k_m = k_m^*/a_0$). При $k^* \rightarrow k_c^*$ движение жидкости замедляется, т.е. $\omega^* \rightarrow 0$, $\beta^* \rightarrow 0$. В области $k^* > k_c^*$ выполняется условие $D > 0$ и существуют затухающие $\beta^* > 0$ волны.

На рис. 1 приведены графики зависимости величин ω^* и β^* от k^* при $m = 0$ (осесимметричные возмущения); $H_0 = 20$ эрстед (Э); $a_1 = 1$ см; $a_2 = 1,5$ см для нескольких значений a_0 . Пересечение графиков с осью Ok^*

происходит в точке k_c^* . Видно, что при всех значениях радиуса a_0 жидкого цилиндра и фиксированных значениях прочих параметров частота ω^* является монотонно возрастающей функцией волнового числа k^* . Коэффициент затухания β^* принимает максимальное значение при некотором k^* .

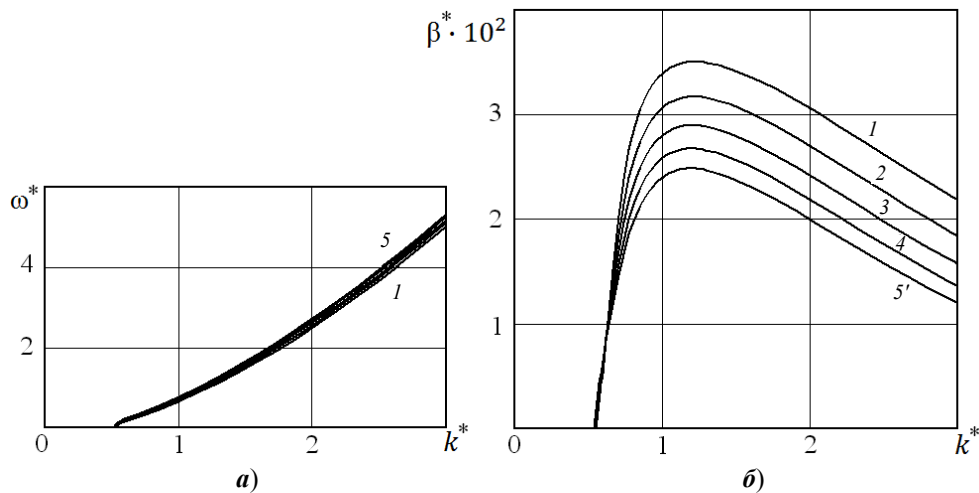


Рис. 1. Зависимость безразмерной частоты ω (а) и коэффициента затухания β (б) от волнового числа k : $a = 2; 2,1; 2,2; 2,3; 2,4$ см (1–5); $a = 1$ см; $a = 1,5$ см; $m = 0$; $H = 20$ Э

В случае $m = 1$ частота больше, а затухание сильнее, чем при $m = 0$ при одинаковых значениях прочих параметров. Для $m \geq 2$ движение является апериодическим, с сильным затуханием всех возмущений.

На рис. 2 приведены графики зависимости ω^* и β^* от k^* при $m = 0$; $H_0 = 20$ Э; $a_1 = 1$ см; $a_0 = 2$ см для нескольких значений a_2 . Видно, что частота ω^* уменьшается с увеличением радиуса a_2 пористого цилиндра (при фиксированном k^*). Затухание волн усиливается с ростом a_2 в связи с утолщением пористого слоя.

На рис. 3 приведены графики зависимости ω^* и β^* от k^* при $m = 0$; $H_0 = 20$ Э; $a_2 = 1,5$ см; $a_0 = 2$ см для нескольких значений a_1 . Видно, что частота ω^* увеличивается с возрастанием радиуса a_1 твердого цилиндра (при фиксированном k^*). Затухание волн уменьшается с ростом a_1 в связи с уменьшением толщины пористого слоя.

На рис. 4 приведены графики зависимости ω^* и β^* от k^* при $m = 0$; $a_1 = 1$ см; $a_2 = 1,5$ см; $a_0 = 2$ см для нескольких значений напряженности магнитного поля H_0 . Видно, что с ростом H_0 частота увеличивается при каждом зафиксированном значении k^* .

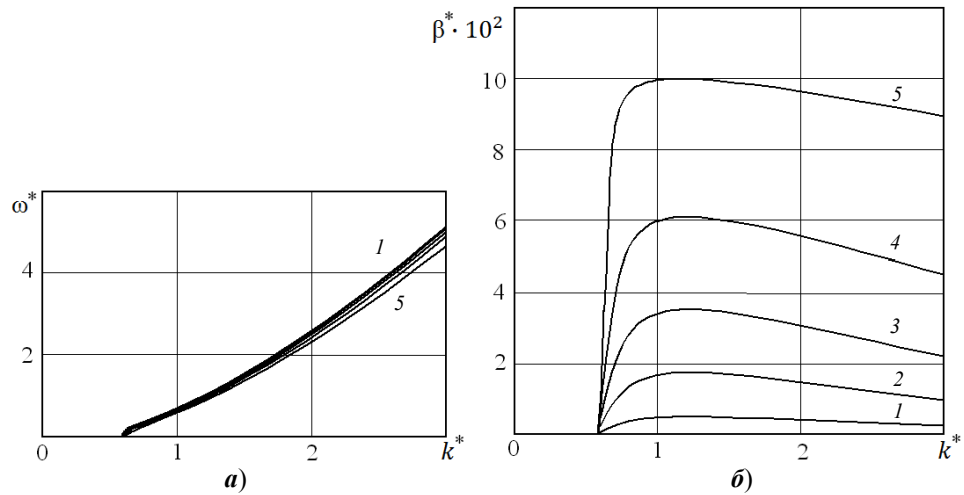


Рис. 2. Зависимость безразмерной частоты ω (а) и коэффициента затухания β (б) от волнового числа k : $a = 1,1; 1,3; 1,5; 1,7; 1,9$ см (1–5);
 $a = 1$ см; $a = 2$ см; $m = 0$; $H = 20$ Э

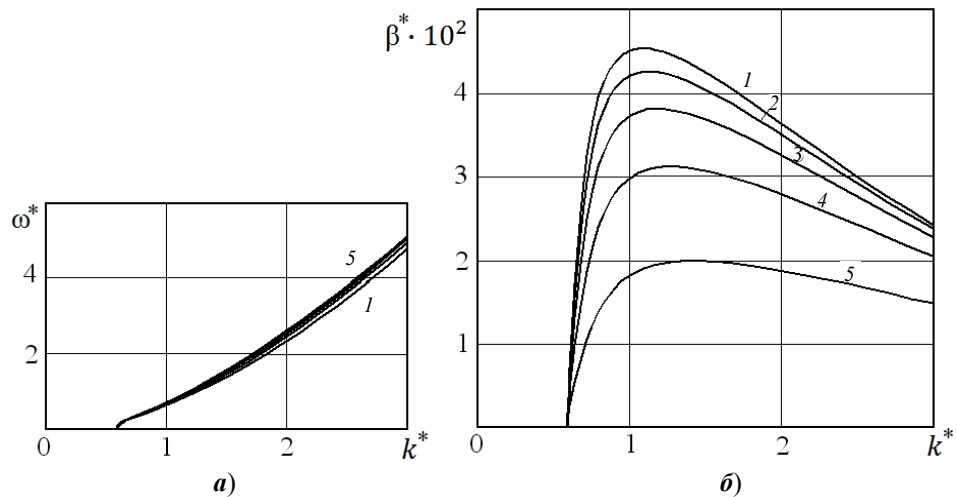


Рис. 3. Зависимость безразмерной частоты ω (а) и коэффициента затухания β (б) от волнового числа k : $a = 0,5; 0,7; 0,9; 1,1; 1,3$ см (1–5);
 $a = 1,5$ см; $a = 2$ см; $m = 0$; $H = 20$ Э

Влияние изменения H_0 на затухание волны имеет более сложный характер. С ростом H_0 величина k_c^* уменьшается, что равносильно увеличению критической длины волны $\lambda_c = 2\pi/k_c$. Это означает, что с ростом магнитного поля неустойчивость сдвигается в область волн с большей длиной, т.е. магнитное поле способно стабилизировать коротковолновые возмущения поверхности жидкого столба, затрудняя тем самым его распад на капли.

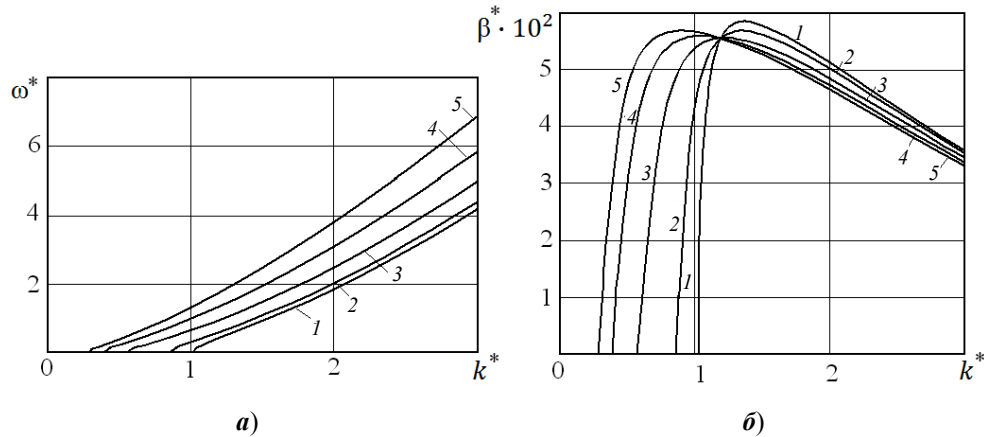


Рис. 4. Зависимость безразмерной частоты ω (а) и коэффициента затухания β (б) от волнового числа k : $H = 0; 10; 20; 30; 40$ Э (1–5); $a = 1$ см; $a = 1,5$ см; $a = 2$ см; $m = 0$

Закключение

Исследованы распространение и неустойчивость волн на поверхности цилиндрического столба магнитной жидкости, окружающей неоднородное (слоистое) пористое ядро. Рассмотрена область длинных волн ($0 < k^* < 3$), которая при симметричных возмущениях ($m = 0$) делится критической точкой k_c^* на два интервала. В интервале $0 < k^* < k_c^*$ происходит апериодическое движение ($\beta^* < 0$) с нарастающей амплитудой, приводящее к распаду жидкого столба на цепочку из соединенных между собой капель, длина которых приблизительно равна $\lambda_m = 2\pi/k_m$ ($k_m = k_m^*/a_0$). В интервале $k_c^* < k^* < 3$ существует затухающее волновое движение ($\beta^* > 0$).

Показано, что в интервале существования волнового движения частота ω^* является монотонно возрастающей функцией от волнового числа k^* при всех значениях радиуса a_0 жидкого цилиндра и фиксированных прочих параметрах. Коэффициент β^* принимает максимальное значение при некотором k^* .

При возрастании a_2 и фиксированных прочих параметрах величина ω^* уменьшается, а β^* возрастает при каждом заданном k^* .

С увеличением a_1 и фиксированных прочих параметрах величина ω^* возрастает, а β^* уменьшается при каждом заданном k^* .

При возрастании напряженности магнитного поля H_0 и фиксированных прочих параметрах частота увеличивается при каждом заданном k^* . Коэффициент β^* изменяется при этом более сложным образом. С ростом H_0

критическая длина волны $\lambda_c = 2\pi/k_c$ ($k_c = k_c^*/a_0$) увеличивается. Следовательно, с ростом магнитного поля неустойчивость сдвигается в область более длинных волн, т.е. магнитное поле стабилизирует коротковолновые возмущения поверхности жидкого столба.

Список литературы

1. **Розенцвейг, Р.** Феррогидродинамика / Р. Розенцвейг. – М. : Мир, 1989. – 356 с.
2. **Тактаров, Н. Г.** Распад струи магнитной жидкости / Н. Г. Тактаров // Магнитная гидродинамика. – 1975. – № 2. – С. 35–38.
3. **Тактаров, Н. Г.** Математическое моделирование поверхностных волн в слое жидкости с поверхностным зарядом на пористом основании / Н. Г. Тактаров, С. М. Миронова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 2 (18). – С. 41–48.
4. **Миронова, С. М.** Распространение волн на заряженной поверхности цилиндрического столба жидкости, окружающей длинное пористое ядро / С. М. Миронова, Н. Г. Тактаров // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 2012. – № 4. – С. 104–110.
5. **Егерёва, Э. Н.** Неустойчивость и распад столба магнитной жидкости, окружающей длинное пористое ядро / Э. Н. Егерёва, О. А. Рунова, Н. Г. Тактаров // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 2015. – № 1. – С. 182–191.
6. **Ландау, Л. Д.** Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 1986. – 735 с.
7. **Ландау, Л. Д.** Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2000. – 736 с.
8. **Курош, А. Г.** Курс высшей алгебры / А. Г. Курош. – М. : Наука, 1975. – 431 с.

References

1. Rozentsveyg R. *Ferrogidrodinamika* [Ferromagnetohydrodynamics]. Moscow: Mir, 1989, 356 p.
2. Taktarov N. G. *Magnitnaya gidrodinamika* [Magnetic hydrodynamics]. 1975, no. 2, pp. 35–38.
3. Taktarov N. G., Mironova S. M. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki*. [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 2 (18), pp. 41–48.
4. Mironova S. M., Taktarov N. G. *Izvestiya RAN. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Mechanics of liquid and gas]. 2012, no. 4, pp. 104–110.
5. Egereva E. N., Runova O. A., Taktarov N. G. *Izvestiya RAN. Mekhanika zhidkosti i gaza* [Proceedings of the Russian Academy of Sciences. Mechanics of liquid and gas]. 2015, no. 1, pp. 182–191.
6. Landau L. D., Lifshits E. M. *Gidrodinamika* [Hydrodynamics]. Moscow: Fizmat-lit, 1986, 735 p.
7. Landau L. D., Lifshits E. M. *Elektrodinamika sploshnykh sred* [Electrodynamics of continuum]. Moscow: Fizmatlit, 2000, 736 p.
8. Kurosh A. G. *Kurs vysshey algebry* [Course of higher algebra]. Moscow: Nauka, 1975, 431 p.

Тактаров Николай Григорьевич

доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра математики,
Мордовский государственный
педагогический институт
имени М. Е. Евсевьева (Россия,
г. Саранск, ул. Студенческая, 11а)

E-mail: colonnt@mail.ru

Taktarov Nikolai Grigoryevich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of mathematics, Mordovia State
Pedagogical Institute named after
M. E. Evseyev (11a Studencheskaya
street, Saransk, Russia)

Рунова Ольга Александровна

аспирант, Мордовский государственный
педагогический институт
имени М. Е. Евсевьева (Россия,
г. Саранск, ул. Студенческая, 11а)

E-mail: runova.olga@list.ru

Runova Olga Alexandrovna

Postgraduate student, Mordovia State
Pedagogical Institute named after
M. E. Evseyev (11a Studencheskaya
street, Saransk, Russia)

УДК 533.9:537.84

Тактаров, Н. Г.

Распад цилиндрического столба магнитной жидкости с неоднородным пористым ядром / Н. Г. Тактаров, О. А. Рунова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. — 2015. — № 1 (33). — С. 98–109.

УДК 535.8; 537.9; 539.33

В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, П. С. Будянский

ДИАМАГНЕТИЗМ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Аннотация.

Актуальность и цели. Большое количество примесных центров в полупроводниках может обладать в связанном состоянии не одним, а двумя электронами. Магнитный момент таких примесных центров, обуславливающий парамагнетизм, равен нулю. В этой связи двухэлектронные примесные центры могут обладать лишь диамагнитными свойствами, исследование которых позволяет получить ценную информацию о характере изменения тонкой структуры полупроводника в зависимости от изменения содержания в нем двухэлектронной примеси. Интерес к исследованию магнитных свойств квантовых точек с двухэлектронными примесными центрами обусловлен прежде всего новой физической ситуацией, связанной с квантовым размерным эффектом. С практической точки зрения такие системы могут быть использованы при разработке кубитов, а также лазерных структур на примесных переходах. Целью данной работы является теоретическое исследование особенностей диамагнитной восприимчивости нейтрального двухэлектронного примесного центра в квантовой точке, связанных с размерным квантованием. Проводится сравнение полученных результатов со случаем диамагнитной восприимчивости одноэлектронного D^- -центра в квантовой точке, а также со случаем нейтрального примесного центра в объемном полупроводнике.

Материалы и методы. Теоретические расчеты диамагнитной восприимчивости выполнены для случая InSb квантовой точки. На основе двухэлектронной модели примесного центра, потенциал которого представляет собой потенциал нулевого радиуса, проведен вариационный расчет энергии основного состояния примеси в сферической квантовой точке. Второй потенциал ионизации, определяющий энергию основного состояния такого примесного центра в квантовой точке, принимался в качестве эмпирического параметра. Диамагнитная восприимчивость двухэлектронного примесного центра рассчитывалась по формуле Ланжевена – Паули.

Результаты. Показано, что диамагнитная восприимчивость нейтрального примесного центра в квантовой точке меньше соответствующей величины в объемном полупроводнике. При этом с уменьшением второго потенциала ионизации их отношение медленно возрастает, а с ростом радиуса квантовой точки – стремится к единице. Установлено, что величина диамагнитной восприимчивости нейтрального двухэлектронного примесного центра в квантовой точке в несколько раз больше, чем величина диамагнитной восприимчивости одноэлектронного D^- -центра и с ростом радиуса квантовой точки это различие усиливается. Найдено, что величина диамагнитной восприимчивости достаточно быстро убывает при переходе к более глубоким примесным центрам.

Выводы. Наличие квантового размерного эффекта приводит к уменьшению диамагнитной восприимчивости как одноэлектронных, так и двухэлектронных

примесных центров при переходе *объемный полупроводник – квантовая точка*. В квантовых точках, характерный размер которых превышает боровский радиус экситона, вклад двухэлектронных примесных центров в диамагнитную восприимчивость может быть значительным.

Ключевые слова: двухэлектронные примесные центры, потенциал ионизации, диамагнитная восприимчивость, квантовая точка.

V. D. Krevchik, A. V. Razumov, P. S. Budyanskiy

DIAMAGNETISM OF DIELECTRONIC IMPURITY CENTERS IN SEMICONDUCTOR QUANTUM DOTS

Abstract.

Background. A large number of impurity centers in semiconductors may possess not one, but two electrons in the bound state. The magnetic moment of such impurity centers, causing paramagnetism, equals to zero. In this connection the dielectronic impurity centers may possess only diamagnetic properties, researching of which allows to obtain valuable information on the pattern of semiconductor's structural changes depending on changes in the content of the dielectronic impurity therein. The interest to investigation of magnetic properties of quantum dots with dielectronic impurity centers is caused, first of all, by a new physical situation, associated with quantum size effect. From the practical point of view, such systems may be used in development of qubits and lazer structures on impurity transitions. The aim of the work is to theoretically investigate the features of diamagnetic susceptibility of a neutral dielectronic impurity center in a quantum dot, associated with size quantization. The authors compare the obtained results with a case of diamagnetic susceptibility of the one-electron D^- -center in a quantum dot, as well as with a case of a neutral impurity center in a bulk semiconductor.

Materials and methods. Theoretical calculations of diamagnetic susceptibility were carried out for a case of the InSb quantum dot. On the basis of the two-electron model of the impurity center, the potential of which appears to be a zero radius potential, the authors conducted a variation calculation of the energy of the impurity's main condition in a spherical quantum dot. The second potential of ionization, determining the energy of the main condition of such an impurity center in a quantum dot, was considered as an empirical parameter. Diamagnetic susceptibility of the two-electron impurity center was calculated by the Langevin-Pauli formula.

Results. It is shown that the diamagnetic susceptibility of a neutral impurity center in a quantum dot is lower the corresponding value in a bulk semiconductor. Herewith, with the decrease of the second potential of ionization their relation slowly increases, and with the increase of the quantum dot radius it tends to unity. It is revealed that the value of diamagnetic susceptibility of the two-electron impurity center in a quantum dot is several times greater than the value of diamagnetic susceptibility of the one-electron D^- -center, and with the increase of the quantum dot radius this difference becomes stronger. It is found that the diamagnetic susceptibility quite rapidly fades away at transition to deeper impurity centers.

Conclusions. The presence of the quantum size effect leads to the decrease of diamagnetic susceptibility of both one-electron and two-electron impurity centers at the transition "bulk semiconductor-quantum dot". In quantum dots, the typical size of which exceeds the exciton's Bohr radius, the contribution of two-electron impurity centers into diamagnetic susceptibility may be significant.

Key words: two-electron impurity centers, ionization potential, diamagnetic susceptibility, quantum dot.

Введение

Диаманитная восприимчивость (ДВ) для двухэлектронных заряженных глубоких примесных центров (ПЦ) была рассчитана в работе [1] для случая объемного полупроводника в рамках модели короткодействующего потенциала. Была выявлена высокая чувствительность ДВ к величине второго потенциала ионизации [1]. В случае квантовых ям ДВ одноэлектронных D^- -центров теоретически исследовалась в работе [2], где было показано, что за счет более жесткого критерия перекрытия электронных орбит ДВ D^- -центров в квантовой яме может значительно превосходить соответствующую величину в объемном полупроводнике. Интерес к исследованию ДВ двухэлектронных ПЦ в квантовых точках (КТ) обусловлен прежде всего новой физической ситуацией, связанной с квантовым размерным эффектом.

С практической точки зрения такие системы могут быть использованы при разработке кубитов, а также лазерных структур на примесных переходах. Целью данной работы является теоретическое исследование особенностей ДВ нейтрального двухэлектронного ПЦ в КТ, связанных с размерным квантованием. Проводится сравнение полученных результатов со случаем ДВ одноэлектронного D^- -центра в КТ, а также со случаем нейтрального ПЦ в объемном полупроводнике.

Расчет диаманитной восприимчивости двухэлектронного примесного центра в полупроводниковой квантовой точке

Удерживающий потенциал КТ описывался в рамках модели «жестких стенок». На основе двухэлектронной модели ПЦ, потенциал которого представляет собой потенциал нулевого радиуса, нами ранее [3] проведен вариационный расчет энергии основного состояния нейтральной донорной примеси в сферической КТ. Второй потенциал ионизации E_2 , входящий в параметр $\eta = \sqrt{E_d/|E_2|}$ (E_d – эффективная боровская энергия) и определяющий энергию основного состояния такого ПЦ после удаления одного электрона, принимался в качестве эмпирического параметра, заменяющего недостающую информацию о потенциале нулевого радиуса [4]. В работе [3] было получено выражение для энергии основного состояния двухэлектронного ПЦ в КТ, которое может быть записано через экстремальное значение величины $\tilde{\eta}$ в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon(R_0^*) = & - \frac{2^6 \tilde{\eta}^{-2} \pi^2 E_d}{\text{sh}^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \left(\text{th}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) - R_0^* \tilde{\eta}^{-1} \text{csch}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \right)^2} \times \\ & \times \left\{ 2^{-4} \left(2 \tilde{\eta}^{-1} R_0^* - \text{sh}(2 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \right)^2 + \frac{\tilde{\eta}}{2^3} \times \right. \\ & \times \left[-4 \tilde{\eta}^{-1} R_0^* - 8 \text{ch}^3(\tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \text{sh}(\tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \text{Chi}(2 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) + 2 \ln(2 \exp(1+C) \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \right] \times \\ & \times \text{sh}(2 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) + \left(\text{Chi}(4 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) - \ln(2) \right) \text{sh}(4 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) - \text{Shi}(2 \tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \times \end{aligned}$$

$$\left(1 - 2\operatorname{ch}\left(2\tilde{\eta}^{-1}R_0^*\right) - \operatorname{ch}\left(4\tilde{\eta}^{-1}R_0^*\right) + \operatorname{ch}\left(4\tilde{\eta}^{-1}R_0^*\right)\operatorname{Shi}\left(4\tilde{\eta}^{-1}R_0^*\right)\right)\Big], \quad (1)$$

здесь C – постоянная Эйлера; $R_0^* = R_0/a_d$; R_0 – радиус КТ; $\operatorname{Chi}(x)$ и $\operatorname{Shi}(x)$ – гиперболические интегральные косинус и синус соответственно; a_d – эффективный борковский радиус.

Диаманитная восприимчивость двухэлектронного ПЦ в полупроводниковой КТ может быть вычислена по формуле Ланжевена – Паули [5]:

$$\chi_{q2} = -\frac{N_d e^2 a_d^2}{6m^* c^2} \left(\overline{\mathbf{r}_1^{*2}} + \overline{\mathbf{r}_2^{*2}} \right), \quad (2)$$

где e – заряд электрона; m^* – эффективная масса электрона; c – скорость света в вакууме; $N_d = 1/V$, V – объем КТ; $r_i^* = r_i/a_d$, r_i – координаты электронов ($i = 1, 2$).

Задача вычисления ДВ сводится к расчету следующих интегралов:

$$\overline{\mathbf{r}_1^{*2}} + \overline{\mathbf{r}_2^{*2}} = \iint \Psi^*(r_1^*, r_2^*) (\mathbf{r}_1^{*2} + \mathbf{r}_2^{*2}) \Psi(r_1^*, r_2^*) d\mathbf{r}_1^* d\mathbf{r}_2^*. \quad (3)$$

Пробная двухэлектронная волновая функция $\Psi(r_1^*, r_2^*)$ имеет вид [3]:

$$\Psi(r_1^*, r_2^*) = \Psi(r_1^*) \Psi(r_2^*). \quad (4)$$

Для расчета ДВ используются одноэлектронные волновые функции в (4), записанные через экстремальное значение вариационного параметра $\tilde{\eta}$:

$$\Psi(r_i^*) = \frac{\tilde{B}}{r_i^*} \begin{cases} \frac{\operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - \rho_d \tilde{\eta}^{-1}\right) \sin\left(\tilde{\chi}_0 r_i^*\right)}{\operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right) \sin\left(\tilde{\chi}_0 \rho_d\right)}, & r_i^* \leq \rho_d, \\ \frac{\operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_i^* \tilde{\eta}^{-1}\right)}{\operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right)}, & r_i^* \geq \rho_d, \end{cases} \quad (5)$$

здесь $\tilde{B} = \sqrt{2\tilde{\eta}^{-1} / \left(\operatorname{th}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right) - R_0^* \tilde{\eta}^{-1} \operatorname{csch}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right) \right)}$; $\tilde{\chi}_0 = \sqrt{V_0^* - \tilde{\eta}^{-2}}$;

$V_0^* = V_0/E_d$; $\operatorname{csch}(z)$ – гиперболический косеканс.

В результате (4) с учетом (1), (3) и (5) запишется в виде

$$\Psi(r_1^*, r_2^*) = \frac{\tilde{B}^2}{r_1^* r_2^*} \begin{cases} \frac{\operatorname{sh}^2\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - \rho_d \tilde{\eta}^{-1}\right) \sin\left(\tilde{\chi}_0 r_1^*\right) \sin\left(\tilde{\chi}_0 r_2^*\right)}{\operatorname{sh}^2\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right) \sin^2\left(\tilde{\chi}_0 \rho_d\right)}, & r_1^*, r_2^* \leq \rho_d, \\ \frac{\operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_1^* \tilde{\eta}^{-1}\right) \operatorname{sh}\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_2^* \tilde{\eta}^{-1}\right)}{\operatorname{sh}^2\left(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}\right)}, & r_1^*, r_2^* \geq \rho_d. \end{cases} \quad (6)$$

Тогда для (1) имеем

$$\begin{aligned} \chi_{q2} = & -\frac{N_d e^2 a_d^2}{6m^* c^2} \frac{\tilde{B}^4}{sh^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1})} \int_0^\pi d\theta_2 \sin \theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^\pi d\theta_1 \sin \theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \times \\ & \times \left[\frac{sh^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - \rho_d \tilde{\eta}^{-1})}{\sin^4(\tilde{\chi}_0 \rho_d)} \int_0^{\rho_d} dr_1^* \int_0^{\rho_d} dr_2^* (r_1^{*2} + r_2^{*2}) \sin^2(\tilde{\chi}_0 r_1^*) \sin^2(\tilde{\chi}_0 r_2^*) + \right. \\ & \left. + \int_{\rho_d}^{R_0^*} dr_1^* \int_{\rho_d}^{R_0^*} dr_2^* (r_1^{*2} + r_2^{*2}) sh^2(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_1^* \tilde{\eta}^{-1}) sh^2(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_2^* \tilde{\eta}^{-1}) \right]. \quad (7) \end{aligned}$$

Для интегралов в (7) можно записать

$$\begin{aligned} & \int_0^{\rho_d} dr_1^* \int_0^{\rho_d} dr_2^* (r_1^{*2} + r_2^{*2}) \sin^2(\tilde{\chi}_0 r_1^*) \sin^2(\tilde{\chi}_0 r_2^*) = 2^{-5} 3^{-1} \tilde{\chi}_0^{-4} \times \\ & \times \left[-3 + 6\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2 + 16\tilde{\chi}_0^4 \rho_d^4 - 24\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2 \cos(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) + (3 - 6\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2) \cos(4\tilde{\chi}_0 \rho_d) + \right. \\ & \left. + 12\tilde{\chi}_0 \rho_d \sin(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) - 32\tilde{\chi}_0^3 \rho_d^3 \sin(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) + 6\tilde{\chi}_0 \rho_d \sin(4\tilde{\chi}_0 \rho_d) \right], \quad (8) \\ & \int_{\rho_d}^{R_0^*} dr_1^* \int_{\rho_d}^{R_0^*} dr_2^* (r_1^{*2} + r_2^{*2}) sh^2(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_1^* \tilde{\eta}^{-1}) sh^2(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - r_2^* \tilde{\eta}^{-1}) = 2^{-5} 3^{-1} \tilde{\eta}^4 \times \\ & \times \left[-3 + 24R_0^{*2} \tilde{\eta}^{-2} + 16R_0^{*4} \tilde{\eta}^{-4} - 24R_0^* \tilde{\eta}^{-2} \rho_d - 16R_0^{*3} \tilde{\eta}^{-4} \rho_d - 6\tilde{\eta}^{-2} \rho_d^2 - \right. \\ & - 16R_0^* \tilde{\eta}^{-4} \rho_d^3 + 16\tilde{\eta}^{-4} \rho_d^4 - 24\tilde{\eta}^{-2} (R_0^* - \rho_d) \rho_d \operatorname{ch}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + (3 + 6\tilde{\eta}^{-2} \rho_d^2) \times \\ & \times \operatorname{ch}(4\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - 24\tilde{\eta}^{-1} R_0^* sh(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - 8\tilde{\eta}^{-3} R_0^{*3} sh(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + \\ & + 12\tilde{\eta}^{-1} \rho_d sh(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - 24\tilde{\eta}^{-3} R_0^* \rho_d^2 sh(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + \\ & \left. + 32\tilde{\eta}^{-3} \rho_d^3 sh(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + 6\tilde{\eta}^{-1} \rho_d sh(4\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Тогда выражение для ДВ будет иметь вид

$$\chi_{q2} = -\frac{N_d e^2 a_d^2}{3^2 m^* c^2} \frac{\pi^2 \tilde{\eta}^{-2}}{sh^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \left(\operatorname{th}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) - R_0^* \tilde{\eta}^{-1} \operatorname{csch}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \right)^2} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left\{ \frac{\text{sh}^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1} - \rho_d \tilde{\eta}^{-1})}{\tilde{\chi}_0^4 \sin^4(\tilde{\chi}_0 \rho_d)} \times \left[-3 + 6\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2 + 16\tilde{\chi}_0^4 \rho_d^4 - 24\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2 \cos(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) + \right. \right. \\
 & + (3 - 6\tilde{\chi}_0^2 \rho_d^2) \cos(4\tilde{\chi}_0 \rho_d) + 12\tilde{\chi}_0 \rho_d \sin(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) - 32\tilde{\chi}_0^3 \rho_d^3 \sin(2\tilde{\chi}_0 \rho_d) + \\
 & + 6\tilde{\chi}_0 \rho_d \sin(4\tilde{\chi}_0 \rho_d) \left. \right] + \tilde{\eta}^4 \left[-3 + 24R_0^{*2} \tilde{\eta}^{-2} + 16R_0^{*4} \tilde{\eta}^{-4} - 24R_0^* \tilde{\eta}^{-2} \rho_d - \right. \\
 & - 16R_0^{*3} \tilde{\eta}^{-4} \rho_d - 6\tilde{\eta}^{-2} \rho_d^2 - 16R_0^* \tilde{\eta}^{-4} \rho_d^3 + 16\tilde{\eta}^{-4} \rho_d^4 - 24\tilde{\eta}^{-2} (R_0^* - \rho_d) \times \\
 & \times \rho_d \text{ch}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + (3 + 6\tilde{\eta}^{-2} \rho_d^2) \text{ch}(4\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - \\
 & - 24\tilde{\eta}^{-1} R_0^* \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - 8\tilde{\eta}^{-3} R_0^{*3} \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + \\
 & + 12\tilde{\eta}^{-1} \rho_d \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) - 24\tilde{\eta}^{-3} R_0^* \rho_d^2 \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + \\
 & \left. \left. + 32\tilde{\eta}^{-3} \rho_d^3 \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) + 6\tilde{\eta}^{-1} \rho_d \text{sh}(4\tilde{\eta}^{-1} (R_0^* - \rho_d)) \right] \right\}. \quad (10)
 \end{aligned}$$

Выполняя в (10) предельный переход $\rho_d \rightarrow 0$ (ρ_d – радиус потенциальной ямы, в которой аппроксимировался короткодействующий потенциал [3]) для ДВ окончательно получим

$$\begin{aligned}
 \chi_{q2} = \chi_0 \frac{\tilde{\eta}^{-2}}{\text{sh}^4(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \left(\text{th}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) - R_0^* \tilde{\eta}^{-1} \text{csch}(R_0^* \tilde{\eta}^{-1}) \right)^2} & \left[-3 + 24R_0^{*2} \tilde{\eta}^{-2} + \right. \\
 & \left. + 16R_0^{*4} \tilde{\eta}^{-4} + 3\text{ch}(4\tilde{\eta}^{-1} R_0^*) - 8\tilde{\eta}^{-1} R_0^* (3 + \tilde{\eta}^{-2} R_0^{*2}) \text{sh}(2\tilde{\eta}^{-1} R_0^*) \right], \quad (11)
 \end{aligned}$$

здесь $\chi_0 = -N_d e^2 \pi^2 a_d^2 / 3^2 m^* c^2$.

Для сравнения выполним расчет ДВ D^- -центра в полупроводниковой КТ. Волновая функция электрона, локализованного на короткодействующем потенциале в центре КТ, имеет следующий вид [6]:

$$\begin{aligned}
 \Psi(r^*) = & \sqrt{\frac{2\eta_l^{-1}}{\text{th}(\eta_l^{-1} R_0^*) - \eta_l^{-1} R_0^* \text{csch}(\eta_l^{-1} R_0^*)}} \times \\
 & \times \left[\frac{\text{ch}(\eta_l^{-1} r^*)}{r^*} - \frac{\text{sh}(\eta_l^{-1} r^*)}{r^*} \frac{\text{ch}(\eta_l^{-1} R_0^*)}{\text{sh}(\eta_l^{-1} R_0^*)} \right], \quad (12)
 \end{aligned}$$

где $\eta_l = \sqrt{|E_\lambda|/E_d}$; E_λ – энергия связи D^- -состояния, отсчитываемая от дна КТ.

ДВ определяется следующим выражением:

$$\chi_{q1} = -\frac{N_d e^2 a_d^2}{6m^* c^2} \int \Psi^*(r^*) r^{*2} \Psi(r^*) dr^*. \quad (13)$$

Вычисление интеграла в (13) приводит к следующему выражению для χ_{q1} :

$$\begin{aligned} \chi_{q1} = \frac{\chi_0}{4} \cdot \frac{\eta_l^{-1} \left(\operatorname{csch}(\eta_l^{-1} R_0^*) \right)^2}{\operatorname{th}(\eta_l^{-1} R_0^*) - \eta_l^{-1} R_0^* \operatorname{csch}(\eta_l^{-1} R_0^*)} \times \\ \times \left(-4R_0^{*3} - 6\eta_l^2 R_0^* + 3\eta_l^3 \operatorname{sh}(2\eta_l^{-1} R_0^*) \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Зависимость диамагнитной восприимчивости от второго потенциала ионизации и радиуса квантовой точки

На рис. 1 представлена зависимость отношения χ_{q2}/χ_{v2} ДВ двухэлектронного ПЦ в КТ χ_{q2} и объемном полупроводнике χ_{v2} от параметра η для различных значений радиуса КТ R_0^* . Величина χ_{q2} была рассчитана с использованием формулы (11), а формула для χ_{v2} была взята из работы [1]. Из рисунка видно, что ДВ нейтрального двухэлектронного ПЦ в КТ меньше соответствующей величины в объемном полупроводнике. При этом с уменьшением второго потенциала ионизации их отношение медленно возрастает, а с ростом радиуса КТ стремится к единице (ср. кривые 1 и 3). На рис. 2 приведена зависимость отношения χ_{q2}/χ_{q1} ДВ двухэлектронного χ_{q2} и одноэлектронного χ_{q1} ПЦ в КТ от радиуса КТ R_0^* для различных значений параметров η и η_i , характеризующего мощность потенциала нулевого радиуса [6]. Величина χ_{q1} рассчитывалась с использованием формулы (14). Из рис. 2 видно, что величина ДВ нейтрального двухэлектронного ПЦ в КТ в несколько раз больше, чем величина ДВ одноэлектронного D^- -центра и с ростом радиуса КТ это различие усиливается. Можно также видеть, что величина ДВ достаточно быстро убывает при переходе к более глубоким примесным центрам (ср. кривые 1, 2).

Заключение

В рамках модели потенциала нулевого радиуса для двухэлектронного примесного центра в КТ получена зависимость ДВ такого примесного центра от второго потенциала ионизации и радиуса КТ.

Показано, что наличие квантового размерного эффекта приводит к уменьшению ДВ как одноэлектронных, так и двухэлектронных ПЦ при переходе *объемный полупроводник – квантовая точка*. В КТ, характерный размер которых превышает боровский радиус экситона, вклад двухэлектронных ПЦ в диамагнитную восприимчивость может быть значительным.

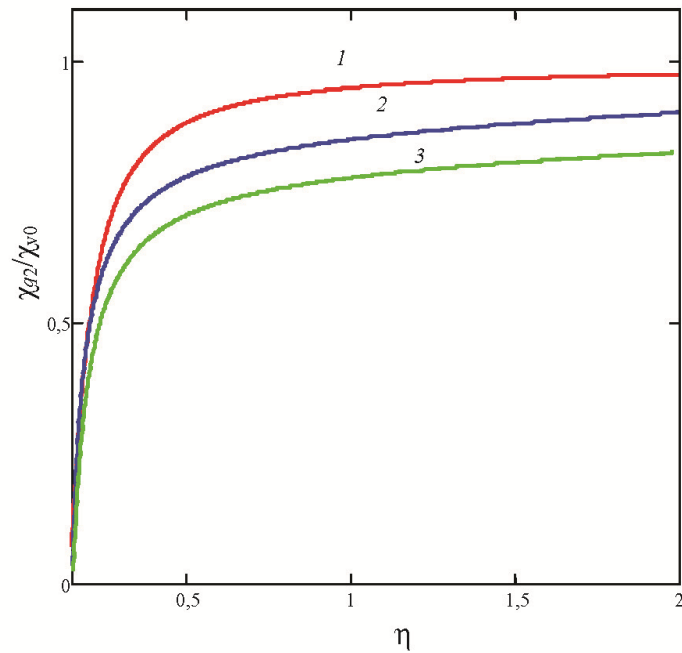


Рис. 1. Зависимость отношения χ_{q2}/χ_{v2} от параметра $\eta = \sqrt{E_d/|E_2|}$ для различных значений радиуса КТ R_0^* ; кривые: 1 – 3; 2 – 2; 3 – 1

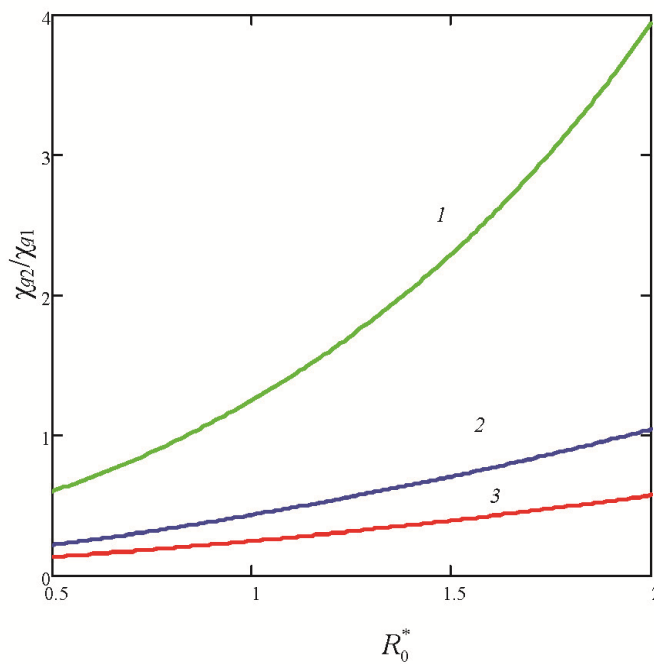


Рис. 2. Зависимость отношения χ_{q2}/χ_{q1} от радиуса КТ R_0^* для различных значений параметров η и η_i :
кривые: 1 – $\eta = 1, \eta_i = 6$; 2 – $\eta = 1, \eta_i = 8$; 3 – $\eta = 0,5, \eta_i = 6$

Список литературы

1. **Белорусец, Е. Д.** Диамagnetизм двухэлектронных глубоких примесных центров в полупроводниках / Е. Д. Белорусец, Э. З. Имамов, Б. Р. Маматкулов // Физика и техника полупроводников. – 1982. – Т. 16, № 1. – С. 89–92.
2. **Имамов, Е. З.** On Diamagnetism of Deep Impurities in Quantized Semiconductor Film / E. Z. Imamov, V. D. Krevchik // Phys. St. Sol. (b). – 1982. – Vol. 114. – P. 201–207.
3. **Кревчик, В. Д.** Двойная фотоионизация двухэлектронных примесных центров в квазиульмерных наноструктурах / В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, П. С. Будянский // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 3 (31). – С. 228–240.
4. **Гринберг, А. А.** Об энергетическом спектре многозарядных примесных центров в полупроводниках / А. А. Гринберг, Е. Д. Белорусец // Физика и техника полупроводников. – 1978. – Т. 12, № 10. – С. 1970–1978.
5. **Флюгге, З.** Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. – М.: Мир, 1974. – Т. 1.
6. **Кревчик, В. Д.** Энергетический спектр и оптические свойства комплекса квантовая точка – примесный центр / В. Д. Кревчик, А. В. Левашов // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, № 2. – С. 216–220.

References

1. Belorusetz E. D., Imamov E. Z., Mamatkulov B. R. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and technology of semiconductors]. 1982, vol. 16, no. 1, pp. 89–92.
2. Imamov E. Z., Krevchik V. D. *Phys. St. Sol. (b)*. 1982, vol. 114, pp. 201–207.
3. Krevchik V. D., Razumov A. V., Budyanskiy P. S. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2014, no. 3 (31), pp. 228–240.
4. Grinberg A. A., Belorusetz E. D. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and technology of semiconductors]. 1978, vol. 12, no. 10, pp. 1970–1978.
5. Flyugge Z. *Zadachi po kvantovoy mekhanike* [Problems on quantum mechanics]. Moscow: Mir, 1974, vol. 1.
6. Krevchik V. D., Levashov A. V. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and technology of semiconductors]. 2002, vol. 36, no. 2, pp. 216–220.

Кревчик Владимир Дмитриевич

доктор физико-математических наук,
профессор, декан факультета
приборостроения, информационных
технологий и электроники, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Krevchik Vladimir Dmitrievich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, dean of the faculty
of instrument engineering, information
technology and electronics, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Разумов Алексей Викторович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей физики
и методики обучения физике,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Razumov Aleksey Viktorovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general
physics and physics teaching technique,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Будянский Павел Сергеевичаспирант, Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Budyanskiy Pavel SergeevichPostgraduate student, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

УДК 535.8; 537.9; 539.33

Кревчик, В. Д.

Диамagnetизм двухэлектронных примесных центров в полупроводниковых квантовых точках / В. Д. Кревчик, А. В. Разумов, П. С. Будянский // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 110–119.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИРАЛЬНЫХ СУПРАКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОТРУБОК¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Спиральные супракристаллические нанотрубки рассматриваются как перспективные наноматериалы для использования в механических наноустройствах в качестве нанопружин и в наноэлектронике в качестве наносолоноидов. Целью данной работы является их математическое моделирование и демонстрация возможности широкой вариативности геометрических и физических параметров.

Материалы и методы. Объектами исследования являлись супракристаллические нанотрубки произвольного химического состава с sp^2 - и sp^3 -гибридизацией атомных орбиталей. Математическое моделирование их спирализации осуществлялось в программном пакете Accelrys Materials Studio. Для быстрой оптимизации геометрических параметров спиральных супракристаллических нанотрубок использовался метод Forcite молекулярной динамики. Дальнейшая оптимизация выполнялась на основе метода теории функционала плотности (DFT).

Результаты. Построены математические модели пяти типов спиральных супракристаллических нанотрубок, среди которых имеются как электропроводящие, так и диэлектрические.

Выводы. Спиральные супракристаллические нанотрубки могут быть использованы в качестве нанопружин и наносолоноидов.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, супракристаллические нанотрубки, спиральные нанотрубки, нанопружины, наносолоноиды, математическое моделирование.

R. A. Brazhe, A. F. Savin

MATHEMATICAL MODELING OF THE COILED SUPRACRYSTALLINE NANOTUBES

Abstract.

Background. Coiled supracrystalline nanotubes are considered as promising nanomaterials for nanosprings in mechanical nanodevices and nanosolenoids in nanoelectronics. The purpose of the paper is their mathematical modeling and demonstration of wide variability of their geometrical and physical properties.

Materials and methods. As the research objects the authors took supracrystalline nanotubes of any chemical composition with sp^2 - and sp^3 -hybridisation of atomic orbitals. Mathematical modeling of their spiralization was carried out in the Accelrys Materials Studio program package. For fast optimization of geometrical parameters of coiled supracrystalline nanotubes the Forcite method of molecular dynamics was used. Further optimization was carried out on the basis of the DFT-method.

Results. The mathematical models for five types of coiled supracrystalline nanotubes were constructed. There are both conductive and dielectric nanocoils among them.

Conclusions. The coiled supracrystalline nanotubes can be used as nanosprings and nanosolenoids.

¹ Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки № 2014/232 (проект № 1742).

Key words: carbon nanotubes, supracrystalline nanotubes, coiled nanotubes, nanosprings, nanosolenoids, mathematical modeling.

Введение

Вскоре после получения Ииджимой в 1991 г. первых нанотрубок [1] рядом авторов была предсказана возможность существования спирально закрученных и тороидальных нанотубулярных структур [2–5]. Первое сообщение об экспериментальном обнаружении углеродных нанотрубок спиральной формы было сделано бельгийской группой исследователей в 1994 г. [6]. Как было ими же показано в работе [7], механизм формирования таких спиралей состоит в периодическом внедрении в углеродную нанотрубку (УНТ), атомная решетка которой состоит из гексагонов, чередующихся пентагонов и гептагонов. Первые создают участки положительной кривизны, а вторые – отрицательной. Ииджима с соавторами показал [8, 9], что при этом происходит изменение электронных свойств нанотрубок и изменяется структура их энергетических зон. В дальнейшем выяснилось [10, 11], что электрические и магнитные свойства спирализованных нанотрубок также могут существенно отличаться от их цилиндрических прототипов. Тем не менее, как было установлено в ходе компьютерного моделирования с использованием методов молекулярной динамики [12], спиральные УНТ сохраняют свою термодинамическую и энергетическую устойчивость. Вопросам исследования структуры, стабильности и синтеза спиральных УНТ посвящены также работы [13, 14].

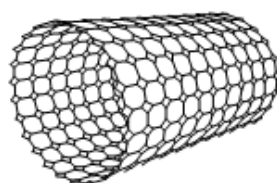
Обнаружено, что в механическом отношении спиральные УНТ ведут себя подобно сверхупругим пружинкам [15–18], модуль Юнга которых достигает 0,1 ТПа [18]. Моделированию и физическому истолкованию данного явления посвящена работа [19].

Как показано нами [20–23], электропроводящие спиральные нанотрубки можно использовать в качестве наносолоноидов, в том числе собирать из них суперсолоноиды индуктивностью до 10^4 Гн. Эта идея нашла подтверждение в работе [24].

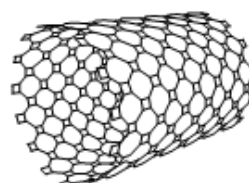
Таким образом, спиральные нанотрубки могут найти применение в различных механических и электронных наномасштабных устройствах, а их математическое моделирование и численные расчеты энергетических, упругих и электрических характеристик представляются актуальной задачей. В настоящей статье исследуются возможности спирализации так называемых супракристаллических нанотрубок, описанных нами впервые в работе [25].

1. Исследуемые нанотрубки

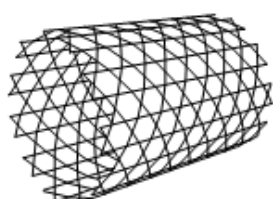
На рис. 1 представлены взятые из [25, 26] атомные модели супракристаллических нанотрубок (СНТ), а в табл. 1 сопоставлен вид их основных супрячек и «дефектных» супрячек, вызывающих спирализацию СНТ. Кроме того, там же приведены формулы, связывающие диаметр d СНТ с индексами хиральности n , m и длиной межатомной связи l . Рассматриваются кресельноподобные (n, n) и зигзагоподобные $(n, 0)$ СНТ, состоящие из атомов (не обязательно углерода) одного сорта (X – символ химического элемента). Во избежание недоразумений отметим, что, в отличие от [25], здесь использовано иное, принятое в большинстве публикаций, обозначение хиральности, при котором угол хиральности задается по отношению к направлению скручивания.



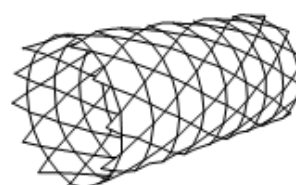
$(X)_{44}(n, n)$



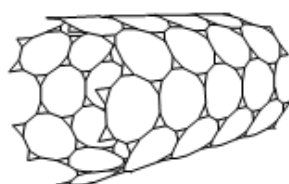
$(X)_{44}(n, 0)$



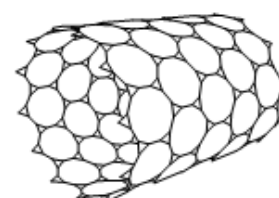
$(X)_{63(6)}(n, n)$



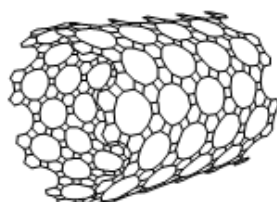
$(X)_{63(6)}(n, 0)$



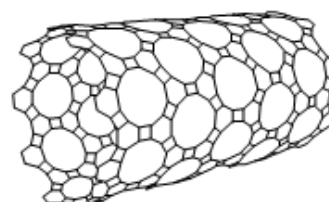
$(X)_{63(12)}(n, n)$



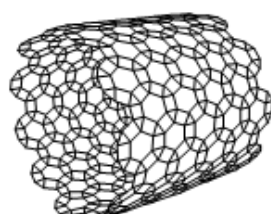
$(X)_{63(12)}(n, 0)$



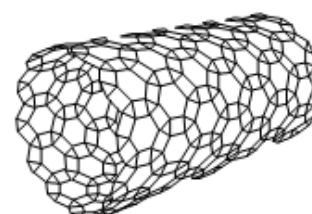
$(X)_{664}(n, n)$



$(X)_{664}(n, 0)$



$(X)_{634}(n, n)$

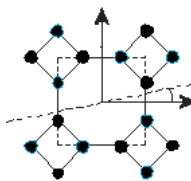
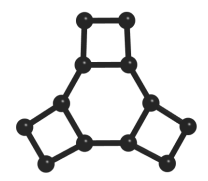
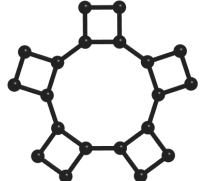
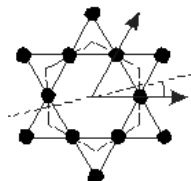
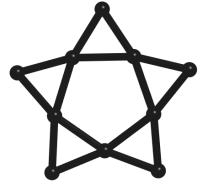
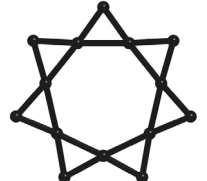
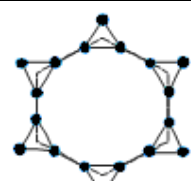
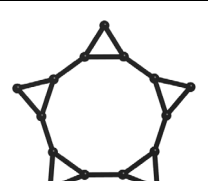
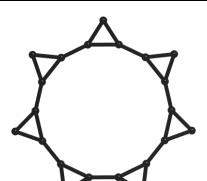
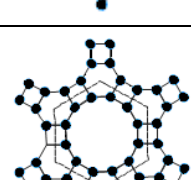
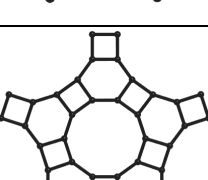
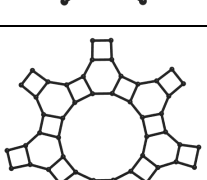
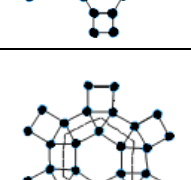
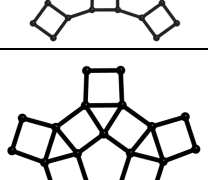
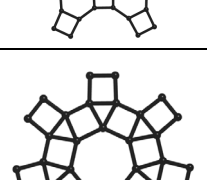


$(X)_{634}(n, 0)$

Рис. 1. Атомные модели рассматриваемых СЧТ

Таблица 1

Геометрические параметры спиральных СНТ

Вид супрaячейки	Вид «дефектных» ячеек		Диаметр СНТ
			$d = \frac{(1+\sqrt{2})l}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2}$
			$d = \frac{2l}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + mn}$
			$d = \frac{(2+\sqrt{3})l}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$
			$d = \frac{(3+\sqrt{3})l}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$
			$d = \frac{(1+\sqrt{3})l}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$

В частном случае углеродных СНТ структуры $(C)_{44}$, $(C)_{63(12)}$ и $(C)_{664}$, как и графен $(C)_6$, соответствуют атомам углерода, находящимся в состоянии с sp^2 -гибридизацией атомных орбиталей. В структурах $(C)_{63(6)}$ и $(C)_{634}$ атомы углерода отвечают состоянию с sp^3 -гибридизацией. В обоих случаях атом углерода находится в возбужденном состоянии с электронной конфигурацией ${}_6C^*: 1s^2 2s^1 3p^3$ и имеет четыре неспаренных электрона. Однако в первом случае одна s - и две p -орбитали смешиваются и образуют три гибридные sp^2 -орбитали в плоскости атомного листа, создающие σ -связи с соседними атомами, а третья p -орбиталь располагается перпендикулярно листу и содержит свободный электрон. Поэтому sp^2 -наноаллотропы углерода являются металлами (полуметаллами) или узкозонными полупроводниками. Во втором случае смешиваются одна s - и все три p -орбитали, образуя четыре гибридные

sp^3 -орбитали в плоскости атомного листа. Свободные электроны отсутствуют, и sp^3 -наноаллотропы углерода, таким образом, являются диэлектриками или широкозонными полупроводниками.

Введение «дефектных» ячеек усложняет энергетический спектр СНТ, приводя к локальным изменениям ширины запрещенной зоны [8, 9]. Однако эти изменения не могут ликвидировать свободные носители заряда и превратить электропроводящую СНТ в диэлектрическую и, наоборот, не изменяя симметрии, превратить диэлектрическую СНТ в металлическую.

2. Методика моделирования

Как отмечалось выше, спиральную СНТ можно получить, вводя в ее структуру периодически расположенные «дефектные» ячейки, изображенные в табл. 1. Подробное описание процедуры моделирования спиральных УНТ содержится в работе [27], где рассмотрены способы спирализации нанотрубок с хиральностями (5,5), (6, 6), (7, 7) и (8, 8).

Сворачивание в спираль УНТ с другой хиральностью приводит к нарушению геометрии получаемых структур. Например, при сворачивании в спираль УНТ с хиральностью (10, 10) она становится эллиптической в сечении, причем с увеличением индексов хиральности этот эффект усиливается.

В нашем случае для моделирования выбирались СНТ с количеством супрячеек на окружности от 6 до 10. Такой выбор был обусловлен стремлением проанализировать изменение сечения СНТ по сравнению с УНТ при сворачивании в спираль. В результате установлено, что с увеличением диаметра нанотрубки при сворачивании в ее сечении также начинает проявляться эллиптичность. В спираль рассмотренным способом могут быть свернуты СНТ с хиральностью (n, n) и $(n, 0)$. При этом в местах изгиба нанотрубка меняет свою хиральность.

Периодичность вставки «дефектных» супрячеек, как и в случае УНТ, определяется необходимостью введения в структуру нанотрубки парных «дефектов» в местах изгибов. С увеличением диаметра нанотрубки количество этих дефектов остается неизменным, увеличивается только число разделяющих их супрячеек. Диаметр спирали также можно менять, изменяя количество таких разделяющих супрячеек. В местах парных «дефектов» все СНТ изгибаются под тупым углом, за исключением нанотубулярной структуры $(X)_{44}$, которая всегда изгибается под углом 90° .

Математическое моделирование осуществлялось в программном пакете Accelrys Materials Studio 6.0. Для быстрой оптимизации геометрических параметров спиральных СНТ использовался метод молекулярной механики (Forcite), после чего дальнейшая оптимизация геометрии осуществлялась на основе метода функционала плотности (DFT) с помощью инструмента DFTB+ в том же программном пакете. При этом геометрия нанотрубок значительных изменений уже не претерпевала. Последующая визуализация СНТ также осуществлялась в программе Accelrys Materials Studio 6.0.

3. Полученные результаты

На рис. 2 представлены результаты моделирования исследуемых спиральных СНТ. Приведены вид спереди и вид с торца спирали. Для сравнения вначале изображена спиральная УНТ. Важным параметром спиральных СНТ,

от которого зависят ее упругие и магнитные характеристики, является шаг спирали. Он, в свою очередь, зависит от диаметра нанотрубки, диаметра спирали и величины бокового сдвига в каждом колене спирали, а также количества таких колен в одном витке.

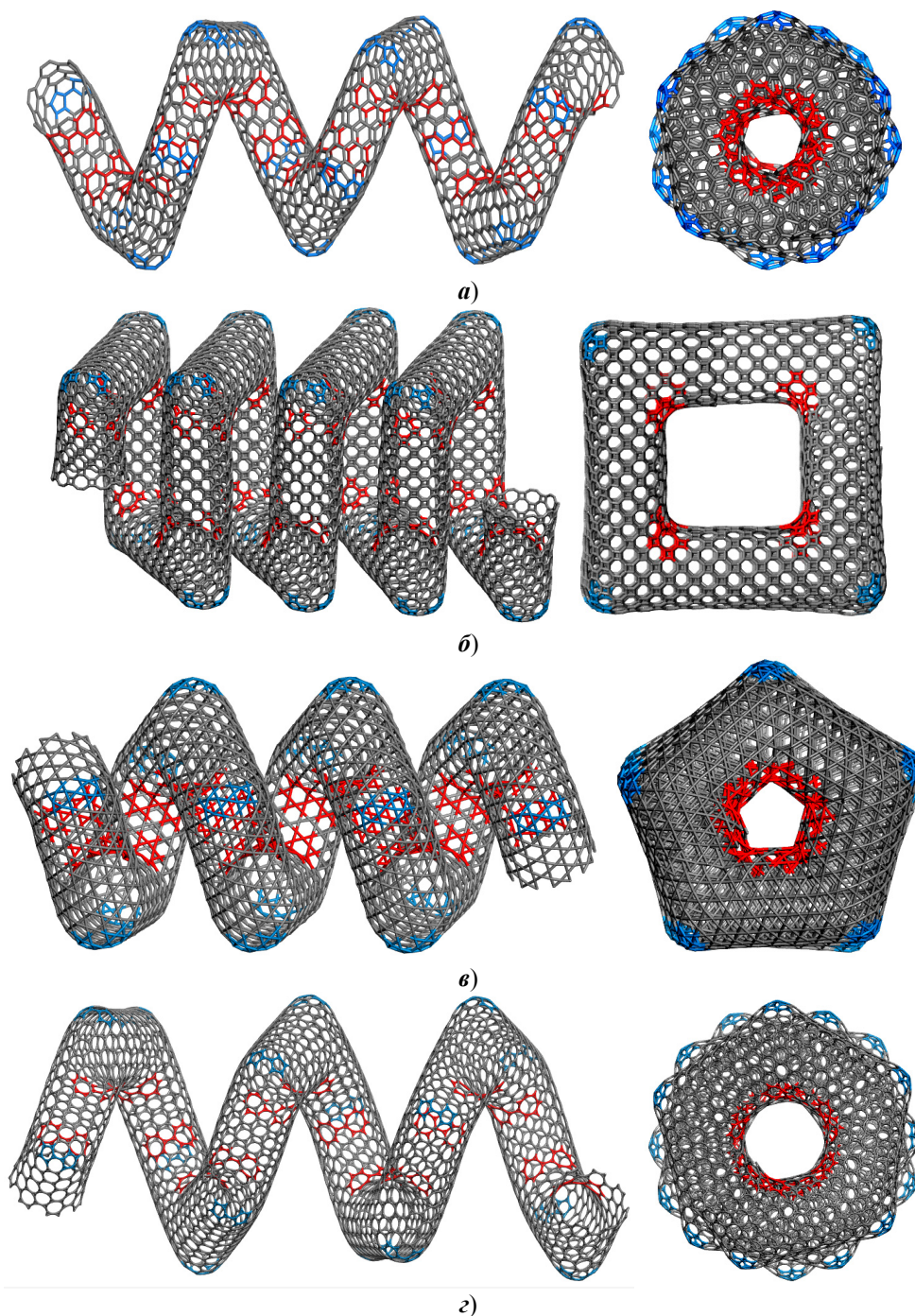
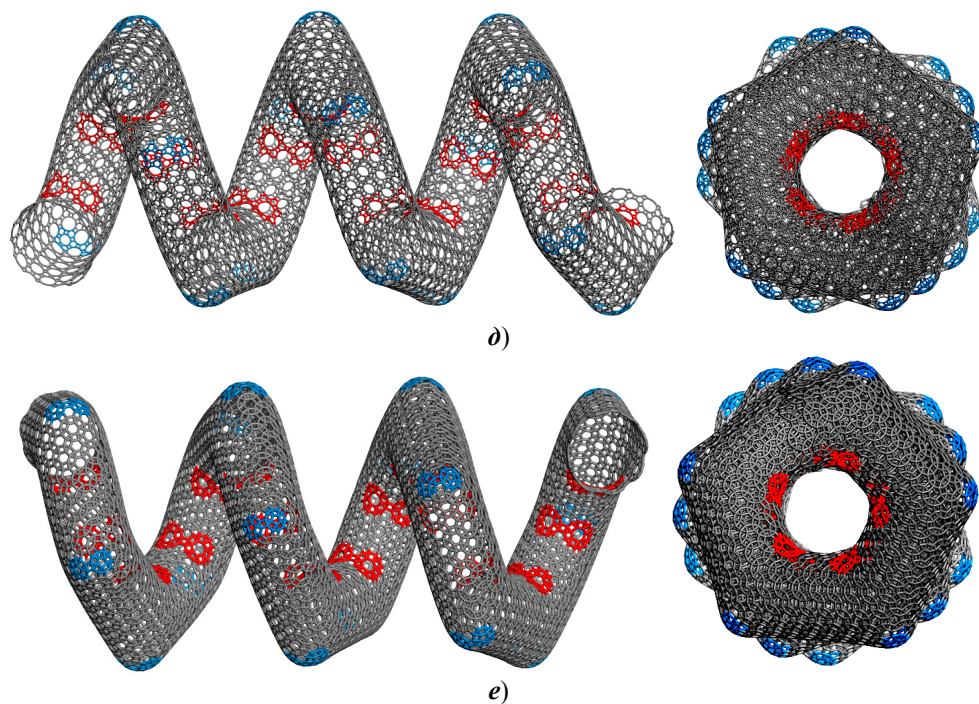


Рис. 2. Результаты моделирования спиральных СНТ:
 $a - (C)_6$; $б - (X)_{44}$; $в - (X)_{63(6)}$; $г - (X)_{63(12)}$

Рис. 2. Окончание: $d - (X)_{664}$; $e - (X)_{634}$

Чем меньше диаметр нанотрубки, тем чаще можно вставлять пары «дефектных» ячеек, тем меньше диаметр получаемой спирали, тем меньший боковой сдвиг в ее коленях можно реализовать, тем меньше ее шаг. Из рис. 2 видно, что наименьшее количество колен изгиба на один виток спирали (четыре) имеет место в спиральных СНТ, получаемых на основе нанотрубок вида $(X)_{44}$. Значит, при прочих равных геометрических показателях спиральные СНТ такого типа будут иметь наибольшее число витков на единицу длины.

Заключение

В зависимости от своего химического состава, симметрии и геометрических параметров спиральные СНТ могут как хорошо, так и плохо проводить электрический ток. Их упругие характеристики зависят не только от параметров спирали, но и от упругих свойств супракристаллической структуры. Как было показано в работах [26, 28], в случае углеродных наноструктур наивысшими значениями упругих констант обладают графен и sp^2 -наноаллотропы, а sp^3 -наноаллотропы уступают им в упругости более чем на порядок. Пружинные свойства спиральных СНТ могут найти применение в различных механических наноустройствах, а их электропроводящие разновидности – в качестве наносолоноидов в нанoeлектронике. Разумеется, в случае конкретных областей применения потребуются провести дополнительные численные расчеты упругих свойств нанопружин (коэффициента упругости, модуля Юнга и т.п.) и магнитных свойств наносолоноидов (погонная индуктивность, максимальная индукция создаваемого магнитного поля и т.п.).

Список литературы

1. **Iijima, S.** Helical microtubules of graphitic carbon / S. Iijima // *Nature*. – 1991. – Vol. 354. – P. 56–58.
2. **Itoh, S.** Toroidal form of carbon C₃₆₀ / S. Itoh, S. Ihara, J. Kitakami // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol. 47. – P. 1703–1704.
3. **Itoh, S.** Helically coiled cage forms of graphitic carbon / S. Itoh, S. Ihara, J. Kitakami // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 5643–5647.
4. **Itoh, S.** Toroidal forms of graphitic carbon. II. Elongated tori / S. Itoh, S. Ihara // *Phys. Rev. B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 8323–8328.
5. **Dunlap, B. I.** Connecting carbon tubules / B. I. Dunlap // *Phys. Rev. B*. – 1992. – Vol. 46. – P. 1933–1936.
6. The texture of catalytically grown coil-shaped carbon nanotubes / X. B. Zhang, X. F. Zhang, D. Bernaerts, G. Van Tendeloo, S. Amelinckx, J. Van Landuyt, V. Ivanov, J. B. Nady, P. Lambin, A. A. Lucas // *Europhys. Lett.* – 1994. – Vol. 27. – P. 141–146.
7. A Formation mechanism for catalytically grown helix-shaped graphite nanotubes / S. Amelinckx, X. B. Zhang, D. Bernaerts, X. F. Zhang, V. Ivanov, J. B. Nady // *Science*. – 1994. – Vol. 265. – P. 635–639.
8. **Iijima, S.** Grows-model for carbon nanotubes / S. Iijima, P. M. Ajayan, T. Ichihashi // *Phys. Rev. Lett.* – 1992. – Vol. 69. – P. 3100–3103.
9. **Iijima, S.** Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth / S. Iijima, T. Ichihashi, Y. Ando // *Nature*. – 1992. – Vol. 356. – P. 776–778.
10. Electronic-structure of helically coiled cage of graphitic carbon / K. Akagi, R. Tamura, M. Tsukada, S. Itoh, S. Ihara // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol. 74. – P. 2307–2310.
11. **Ihara, S.** Helically coiled and toroidal cage forms of graphitic carbon / S. Ihara, S. Itoh // *Carbon*. – 1995. – Vol. 33. – P. 931–939.
12. **Zhong-can, O. Y.** Coil formation in multishell carbon nanotubes: competition between curvature elasticity and interlayer adhesion / O. Y. Zhong-can, Z. B. Su, C. L. Wang // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – Vol. 78. – P. 4055–4058.
13. **Fejes, D.** A review of the properties and CVD synthesis of coiled carbon nanotubes / D. Fejes, K. Hernadi // *Materials*. – 2010. – № 3. – P. 2618–2642.
14. **Popović, Z. P.** Carbon nanocoils: structure and stability / Z. P. Popović, M. Damnjanović, I. Milošević // *Contemporary materials*. – 2012. – Vol. III, № 1. – P. 51–54.
15. **Chen, X. Q.** Mechanics of carbon nanocoil / X. Q. Chen, S. L. Zhang, D. A. Dikin, W. Q. Ding, R. S. Ruoff, L. J. Pan, Y. Nakayama // *Nano Lett.* – 2003. – Vol. 3, № 9. – P. 1299–1304.
16. **da Fonseca, A. F.** Mechanical properties of amorphous nanosprings / A. F. da Fonseca, C. P. Malta, D. S. Galvão // *Nanotechnology*. – 2005. – Vol. 17. – P. 5620–5626.
17. **Sanada, K.** Analytical and experimental characterization of stiffness and damping in carbon nanocoil reinforced polymer composites / K. Sanada, Y. Takada, S. Yamamoto, Y. Shindo // *J. Solid Mech. Mater. Eng.* – 2008. – Vol. 2, № 12. – P. 1517–1527.
18. **Hayashida, T.** Mechanical and electrical properties of carbon tubule nanocoils / T. Hayashida, L. Pan, Y. Nakayama // *Physica B: Cond. Mat.* – 2002. – Vol. 323. – P. 352–353.
19. **Liu, L. Zh.** Superelasticity of carbon nanocoils from atomic quantum simulations / L. Zh. Liu, H. L. Gao, J. J. Zhao, J. P. Lu // *Nanoscale Research Lett.* – 2010. – № 5. – P. 748–783.
20. **Браже, Р. А.** Супракристаллические суперсоленоиды / Р. А. Браже, А. Ф. Савин // *Радиоэлектронная техника : межвуз. сб. науч. тр. / под ред. В. А. Сергеева*. – Ульяновск : УлГТУ, 2012. – С. 169–172.

21. **Савин, А. Ф.** Программа для расчета параметров супракристаллических суперсолоноидов / А. Ф. Савин // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014661182 от 24.10.2014.
22. **Браже, Р. А.** Математическое моделирование и численные расчеты супракристаллических суперконденсаторов и суперсолоноидов для сверхнизкочастотной радиоэлектроники / Р. А. Браже, А. Ф. Савин // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2013. – Т. 16, № 4. – С. 58–62.
23. **Савин, А. Ф.** Математическое моделирование супракристаллических суперсолоноидов / А. Ф. Савин // Актуальные проблемы физической и функциональной электроники : материалы 17-й Всерос. молодежной науч. школы-семинара. – Ульяновск : УлГТУ, 2014. – С. 125–126.
24. **Zhang, Z.-Y.** Nano-solenoid: helicoids carbon – boron nitride hetero-nanotube / Z.-Y. Zhang, C. Miao, W. Guo // *Nanoscale*. – 2013. – Vol. 5. – P. 1192–11909.
25. **Браже, Р. А.** Компьютерное моделирование электрических свойств супракристаллических нанотрубок / А. Браже, А. А. Каренин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 3 (19). – С. 131–139.
26. **Браже, Р. А.** Физика супракристаллов / Р. А. Браже. – Ульяновск : УлГТУ, 2012. – 162 с.
27. **Liu, L.** Curved carbon nanotubes: From unique geometries to novel properties and peculiar applications / L. Liu, F. Liu, J. Zhao // *Nano Research*. – 2014. – Vol. 7, № 5. – P. 626–657.
28. **Браже, Р. А.** Упругие характеристики углеродных 2D-супракристаллов в сравнении с графеном / Р. А. Браже, А. А. Каренин, А. И. Кочаев, Р. М. Мефтахутдинов // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, № 7. – С. 1406–1408.

References

1. Iijima S. *Nature*. 1991, vol. 354, pp. 56–58.
2. Itoh S., Ihara S., Kitakami J. *Phys. Rev. B*. 1993, vol. 47, pp. 1703–1704.
3. Itoh S., Ihara S., Kitakami J. *Phys. Rev. B*. 1993, vol. 48, pp. 5643–5647.
4. Itoh S., Ihara S. *Phys. Rev. B*. 1993, vol. 48, pp. 8323–8328.
5. Dunlap B. I. *Phys. Rev. B*. 1992, vol. 46, pp. 1933–1936.
6. Zhang X. B., Zhang X. F., Bernaerts D., Tendeloo G. Van, Amelinckx S., Landyut J. Van, Ivanov V., Nady J. B., Lambin P., Lucas A. A. *Europhys. Lett.* 1994, vol. 27, pp. 141–146.
7. Amelinckx S., Zhang X. B., Bernaerts D., Zhang X. F., Ivanov V., Nady J. B. *Science*. 1994, vol. 265, pp. 635–639.
8. Iijima S., Ajayan P. M., Ichihashi T. *Phys. Rev. Lett.* 1992, vol. 69, pp. 3100–3103.
9. Iijima S., Ichihashi T., Ando Y. *Nature*. 1992, vol. 356, pp. 776–778.
10. Akagi K., Tamura R., Tsukada M., Itoh S., Ihara S. *Phys. Rev. Lett.* 1995, vol. 74, pp. 2307–2310.
11. Ihara S., Itoh S. *Carbon*. 1995, vol. 33, pp. 931–939.
12. Zhong-can O. Y., Su Z. B., Wang C. L. *Phys. Rev. Lett.* 1997, vol. 78, pp. 4055–4058.
13. Fejes D., Hernadi K. *Materials*. 2010, no. 3, pp. 2618–2642.
14. Popović Z. P., Damjanović M., Milošević I. *Contemporary materials*. 2012, vol. III, no. 1, pp. 51–54.
15. Chen X. Q., Zhang S. L., Dikin D. A., Ding W. Q., Ruoff R. S., Pan L. J., Nakayama Y. *Nano Lett.* 2003, vol. 3, no. 9, pp. 1299–1304.
16. da Fonseca A. F., Malta C. P., Galvão D. S. *Nanotechnology*. 2005, vol. 17, pp. 5620–5626.
17. Sanada K., Takada Y., Yamamoto S., Shindo Y. *J. Solid Mech. Mater. Eng.* 2008, vol. 2, no. 12, pp. 1517–1527.

18. Hayashida T., Pan L., Nakayama Y. *Physica B: Cond. Mat.* 2002, vol. 323, pp. 352–353.
19. Liu L. Zh., Gao H. L., Zhao J. J., Lu J. P. *Nanoscale Research Lett.* 2010, no. 5, pp. 748–783.
20. Brazhe R. A., Savin A. F. *Radioelektronnaya tekhnika: mezhvuz. sb. nauch. tr.* [Radio electronic engineering: interuniversity collected papers]. Ulyanovsk: UIGTU, 2012, pp. 169–172.
21. Savin A. F. *Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2014661182 ot 24.10.2014* [Certificate of State registration of software № 2014661182 from 24.10.2014].
22. Brazhe R. A., Savin A. F. *Fizika volnovykh protsessov i radiotekhnicheskie sistemy* [Physics of wave processes and radio engineering systems]. 2013, vol. 16, no. 4, pp. 58–62.
23. Savin A. F. *Aktual'nye problemy fizicheskoy i funktsional'noy elektroniki: materialy 17-y Vseros. molodezhnoy nauch. shkoly-seminara* [Topical problems of physical and functional electronics: proceedings of 17th All-Russian youth scientific school-seminar]. Ulyanovsk: UIGTU, 2014, pp. 125–126.
24. Zhang Z.-Y., Miao C., Guo W. *Nanoscale*. 2013, vol. 5, pp. 1192–1199.
25. Brazhe R. A., Karenin A. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 3 (19), pp. 131–139.
26. Brazhe R. A. *Fizika suprakristallov* [Physics of supracrystals]. Ulyanovsk: UIGTU, 2012, 162 p.
27. Liu L., Liu F., Zhao J. *Nano Research*. 2014, vol. 7, no. 5, pp. 626–657.
28. Brazhe R. A., Karenin A. A., Kochaev A. I., Meftakhutdinov R. M. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2011, vol. 53, no. 7, pp. 1406–1408.

Браже Рудольф Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

E-mail: brazhe@ulstu.ru

Brazhe Rudol'f Aleksandrovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of physics, Ulyanovsk State Technical
University (32 Severny Venetz street,
Ulyanovsk, Russia)

Савин Андрей Федорович

аспирант, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

E-mail: a_f_savin@mail.ru

Savin Andrey Fedorovich

Postgraduate student, Ulyanovsk State
Technical University (32 Severny
Venetz street, Ulyanovsk, Russia)

УДК 621.38–022.533

Браже, Р. А.

Математическое моделирование спиральных супракристаллических нанотрубок / Р. А. Браже, А. Ф. Савин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 120–129.

Р. А. Браже, Р. М. Мефтахутдинов, К. Х. Фатхутдинова

ЗОННАЯ СТРУКТУРА УГЛЕРОДНЫХ И КРЕМНИЕВЫХ 2D-СУПРАКРИСТАЛЛОВ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Уникальные свойства графена, в частности, его исключительно высокие электропроводность и теплопроводность, привели ряд исследователей к выводу о наступлении эры углеродной электроники, приходящей на смену классической кремниевой электронике. Целью настоящей работы является сравнение электронных свойств различных sp^2 -наноаллотропов углерода и кремния для подтверждения или опровержения такого вывода.

Материалы и методы. В работе исследованы супракристаллические sp^2 -наноаллотропы углерода и кремния следующих типов: $(X)_{44}$, $(X)_{63(12)}$ и $(X)_{664}$. Расчеты выполнены как в приближении сильной связи (ТВ-метод), так и на основе формализма теории функционала плотности (DFT -метод) с использованием программного пакета VASP.

Результаты. Показано, что как для углерода, так и для кремния, структуры $(X)_{44}$ и $(X)_{63(12)}$ являются полуметаллами, а $(X)_{664}$ – узкозонным полупроводником.

Выводы. Углеродные sp^2 -наноаллотропы представляются более перспективными для использования в наноэлектронике, чем аналогичные кремниевые наноаллотропы.

Ключевые слова: углерод, кремний, sp^2 -наноаллотропы, численные расчеты, ТВ-метод, DFT-метод, зонная структура.

R. A. Brazhe, R. M. Meftakhutdinov, K. Kh. Fatkhutdinova

BAND STRUCTURES OF CARBON AND SILICON 2D SUPRACRYSTALS

Abstract.

Background. Unique properties of graphene, in particular its exceptionally high electrical and thermal conductivity, lead some researchers to the conclusion that the carbon electronics is taking the place of the classical silicon electronics. The purpose of this paper is to compare electronic properties of different carbon and silicon sp^2 -nanoallotropes whether to confirm or refute this conclusion.

Materials and methods. Supracrystalline carbon and silicon sp^2 -nanoallotropes of the types $(X)_{44}$, $(X)_{63(12)}$ and $(X)_{664}$ are studied in the work. The calculations were carried out both by tight-binding approximation (the TB method) and by the density functional theory formalism (the DFT method) using the VASP package.

Results. It is shown that for both carbon and silicon the $(X)_{44}$ and $(X)_{63(12)}$ structures are semimetals, and the $(X)_{664}$ structure is a narrow-band semiconductor.

Conclusions. The carbon sp^2 -nanoallotropes really seem to be more promising materials for nanoelectronics than the analogous silicon nanoallotropes. Similar two-dimensional carbon and silicon nanoallotropes can be useful for nanoelectronics, nanophotonics, and nanooptoelectronics.

Key words: carbon, silicon, nanostructures, sp^2 -nanoallotropes, numerical calculations, TB method, DFT method, band structure.

¹ Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ 2014/232 (проект № 1742).

Введение

С теоретической точки зрения зонная структура и электронные свойства графеноподобной двумерной углеродной решетки с шестиугольными ячейками привлекали внимание исследователей задолго до получения графена Новоселовым и др. в 2004 [1, 2]. Пионерской работой такого рода можно считать работу Уоллеса [3]. Используя приближение сильной связи и пренебрегая интегралами перекрытия для 2D-атомных орбиталей, он получил симметричное расположение π и π^* электронных связей для подобной структуры со значением интеграла перескока γ_0 между соседними π орбиталями, равным примерно 0,9 эВ. Позднее Ломер [4], Шарлье и др. [5] оценили величину γ_0 как равную 3 и 3,2 эВ соответственно. Как было показано Саито и др [6, 7], симметрия π и π^* связей нарушается, если рассматривается перекрытие $2p_z$ -орбиталей. Электронные свойства графеновых и основанных на графене нанотрубок и нанолент были изучены Дюбуа и др. [8] не только в рамках модели сильной связи, но и с использованием теории функционала плотности [9, 10], которая применяется в кодах ABINIT [11] и SIESTA [12].

Предсказание новых устойчивых графеноподобных двумерных структур таких, как пентагептиты [13, 14], хкелиты [15], графины [16, 17], графдины [18], скварографиты [19] и т.д., состоящих из углеродных и других атомов, обусловило развитие численных методов для вычисления их свойств. В настоящей работе исследуются графеноподобные планарные структуры, называемые супракристаллами [20, 21]. Их упругие и акустические свойства были изучены ранее в работах [22–24].

Конечно, самая полная информация о физических свойствах графеноподобных двумерных структур может быть получена на основе численных расчетов с использованием методов теории функционала плотности (density functional theory, DFT). Однако, как было показано в недавних работах [25, 26], приближение сильной связи (tight binding, TB) может быть очень эффективным теоретическим подходом для изучения электронных и транспортных свойств двумерных углеродных наноаллотропов. Также были предложены комбинированные DF–TB модели для подобных вычислений [27].

В данной работе мы изучили электронные свойства углеродных и кремниевых 2D-супракристаллов с использованием TB-модели и DFT-методов.

1. Исследуемые структуры

На рис. 1 показаны три типа исследуемых 2D-супракристаллов, обладающих sp^2 -гибридизацией: $(X)_{44}$ – содержащая 4 атома в элементарной ячейке (показана пунктирной линией), $(X)_{63(12)}$ – содержащая 6 атомов в элементарной ячейке, $(X)_{664}$ – с 12 атомами. В приведенных обозначениях X показывает вид химического элемента, а индексы – поворотную симметрию. Векторы $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ – векторы трансляции. В табл. 1 эти векторы, а также их длины выражены через межатомное расстояние l . Следует отметить, что у структуры $(X)_{44}$ межатомное расстояние внутри квадрата и расстояние между ближайшими атомами соседних квадратов различное, причем первое больше, чем второе.

Базисные векторы обратной решетки $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ связаны с $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ следующими соотношениями:

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2,$$

результаты их расчетов приведены в табл. 1.

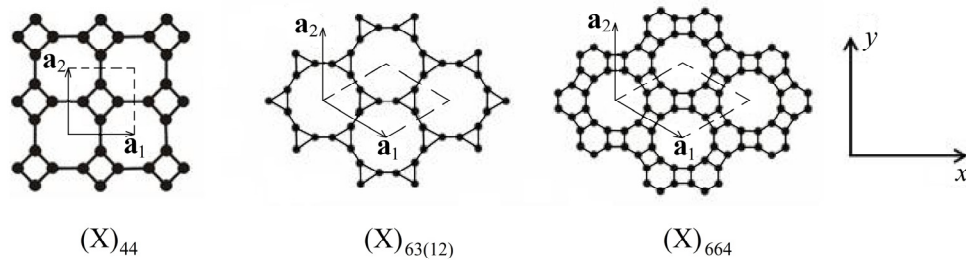


Рис. 1. Исследуемые 2D-супракристаллические структуры

Таблица 1

Базисные векторы прямой и обратной решеток

(X) ₄₄	(X) ₆₃₍₁₂₎	(X) ₆₆₄
$\mathbf{a}_1 = (\sqrt{2}l_1 + l_2, 0)$ $\mathbf{a}_2 = (0, \sqrt{2}l_1 + l_2)$	$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{2\sqrt{3}+3}{2}, -\frac{\sqrt{3}+2}{2} \right) l$ $\mathbf{a}_2 = (0, \sqrt{3}+2) l$	$\mathbf{a}_1 = \left(2\sqrt{3}+1, -\frac{\sqrt{3}+3}{2} \right) l$ $\mathbf{a}_2 = \left(0, \sqrt{16+\frac{9\sqrt{3}}{2}} \right) l$
$a = \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = (\sqrt{2}l_1 + l_2)$	$a = \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = (\sqrt{3}+2) l$	$a = \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2 = \left(\sqrt{16+\frac{9\sqrt{3}}{2}} \right) l$
$\mathbf{b}_1 = (0, 1) \frac{2\pi}{a}$ $\mathbf{b}_2 = (1, 0) \frac{2\pi}{a}$	$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}, 0 \right) \frac{2\pi}{a}$ $\mathbf{b}_2 = \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \frac{2\pi}{a}$	$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}, 0 \right) \frac{2\pi}{a}$ $\mathbf{b}_2 = \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \frac{2\pi}{a}$

Векторы обратной решетки позволяют построить соответствующую первую зону Бриллюэна (рис. 2). Структуры (X)₆₃₍₁₂₎ и (X)₆₆₄, как и графен, обладают поворотной осью 6-го порядка, поэтому их первая зона Бриллюэна имеет вид правильного шестиугольника, как показано на рис. 2, *a*. Пунктиром показана альтернативная зона. Как и в случае графена, зона Бриллюэна содержит три точки высокой симметрии: две эквивалентные в вершинах шестиугольника – *K* и *K'*, и одну на середине стороны – *M*. Структура (X)₄₄ обладает поворотной осью симметрии 4-го порядка, ее первая зона Бриллюэна имеет вид квадрата с двумя *S* точками на серединах сторон и одной *M* точкой в его угле.

2. Методы вычисления

Зонная структура кристаллических материалов исследуется с использованием как DFT-методов, так и в приближении сильной связи. Вычисления из

первых принципов были выполнены с использованием пакета VASP [28]. Для обменных корреляционных потенциалов были приспособлены приближения локальной плотности в форме Пердью – Зангера (LDA) и обобщенного градиента (GGA), разработанное Пердью и Вангом. Энергия обрезалась на значении 240 эВ. Сетка $9 \times 9 \times 1$ k -точек формировалась по схеме Монхорста – Пака. Для вычисления использовалась изолированная плоская структура. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным 30 Å.

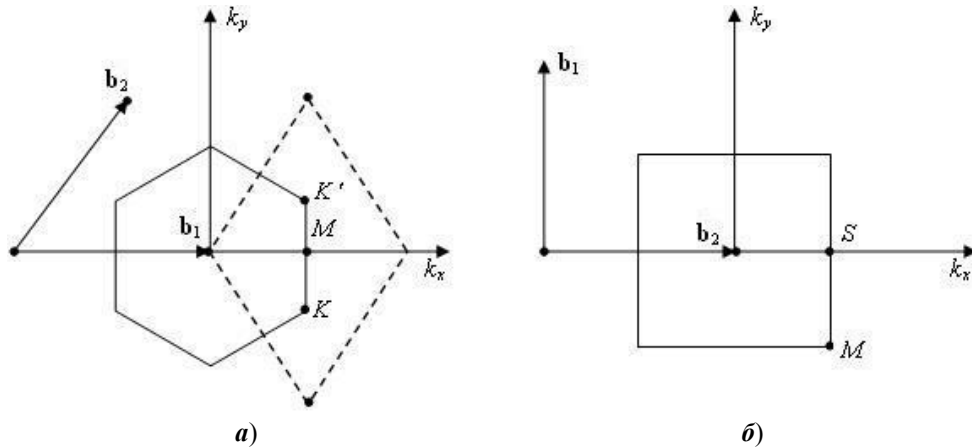


Рис. 2. Первая зона Бриллюэна: **a** – для структур $(X)_{63(12)}$ и $(X)_{664}$; **б** – для структуры $(X)_{44}$

В рамках приближения сильной связи из четырех валентных электронов рассматривался только $2p_z$ -электрон, с которым связана электропроводность структуры. Остальные электроны образуют ковалентные связи с соседними атомами в плоскости структуры и не дают вклада в проводимость.

Блоховская функция $2p_z$ -электрона, сконструированная на основе атомных волновых функций, имеет вид

$$\psi = \sum_{i=1}^n C_i \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i),$$

где φ_i – базисная волновая функция, относящаяся к атому i внутри элементарной ячейки и имеющему радиус-вектор $\mathbf{R}_i$; n – количество атомов в ячейке. Матричные элементы гамильтониана

$$H_{ij} = \int \varphi_i^* H \varphi_j d\tau = V_{pp\pi} \sum_{\text{ближайшие соседи}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)]$$

записывались в приближении взаимодействия лишь между ближайшими соседями. Перекрывание волновых функций при построении гамильтониана не учитывалось.

Интегралы перескока $V_{pp\pi}$ обычно определяются либо путем подгонки к экспериментальным данным, либо к результатам, полученным DFT-мето-

дами. Мы предлагаем рассчитывать эти интегралы по формуле, предложенной Гудвином [29]:

$$V_{pp\pi} = V_{pp\pi}^0 \left(\frac{r_0}{l} \right)^n \exp \left(n \left[- \left(\frac{l}{r_c} \right)^{n_c} + \left(\frac{r_0}{r_c} \right)^{n_c} \right] \right).$$

Здесь l – расстояние между атомами в исследуемой структуре. Значения параметров $V_{pp\pi}^0$, r_0 , r_c , n и n_c (табл. 2) были взяты из работы [29] для углерода и из [30] для кремния. Результаты расчета интегралов перескока приведены в табл. 2.

Таблица 2

Интегралы перескока

	(C) ₄₄		(C) ₆₃₍₁₂₎	(C) ₆₆₄	(Si) ₄₄		(Si) ₆₃₍₁₂₎	(Si) ₆₆₄
$V_{pp\pi}^0$, эВ	–1,829				–0,196			
r_0 , Å	1,54				2,35			
r_c , Å	2,87				2,77			
n	2,00				4,04			
n_c	6,85				29,48			
l , Å	1,48	1,38	1,71	1,56	1,77	1,86	2,18	2,27
$V_{pp\pi}$, эВ	–1,997	–2,311	–1,440	–1,777	–0,635	–0,520	–0,273	–0,230

Энергетические характеристики электронов были получены при численном решении задачи на собственные значения гамильтониана.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 3 показаны результаты расчетов зонных структур для углеродных и кремниевых sp^2 -супракристаллических наноаллотропов. Уровень Ферми соответствует 0 эВ. Видно, что результаты, полученные DFT-методами (пунктирная линия) качественно схожи с результатами, полученными с использованием метода сильной связи (сплошная линия). Результаты, полученные нами для (C)₆₃₍₁₂₎, (C)₄₄ и (C)₆₆₄, качественно схожи и с результатами, полученными для них же, но методом TB–DF [27]. В табл. 3 приведено сравнение результатов.

Полученные результаты показывают, что (C)₄₄ и (C)₆₃₍₁₂₎ обладают нулевой запрещенной зоной и принадлежат к полуметаллам, а (C)₆₆₄ является узкозонным полупроводником, причем ширина запрещенной зоны, полученная нами, составляет 0,33 эВ (TB-метод) и 0,34 эВ (DFT-метод), что сильно отличается от результата работы [27], в которой приводится значение 1,14 эВ. Как нам представляется, результат 0,33 эВ ближе к истинному, так как p_z -электрон слабо связан с атомом и для его перевода в зону проводимости не требуется много энергии.

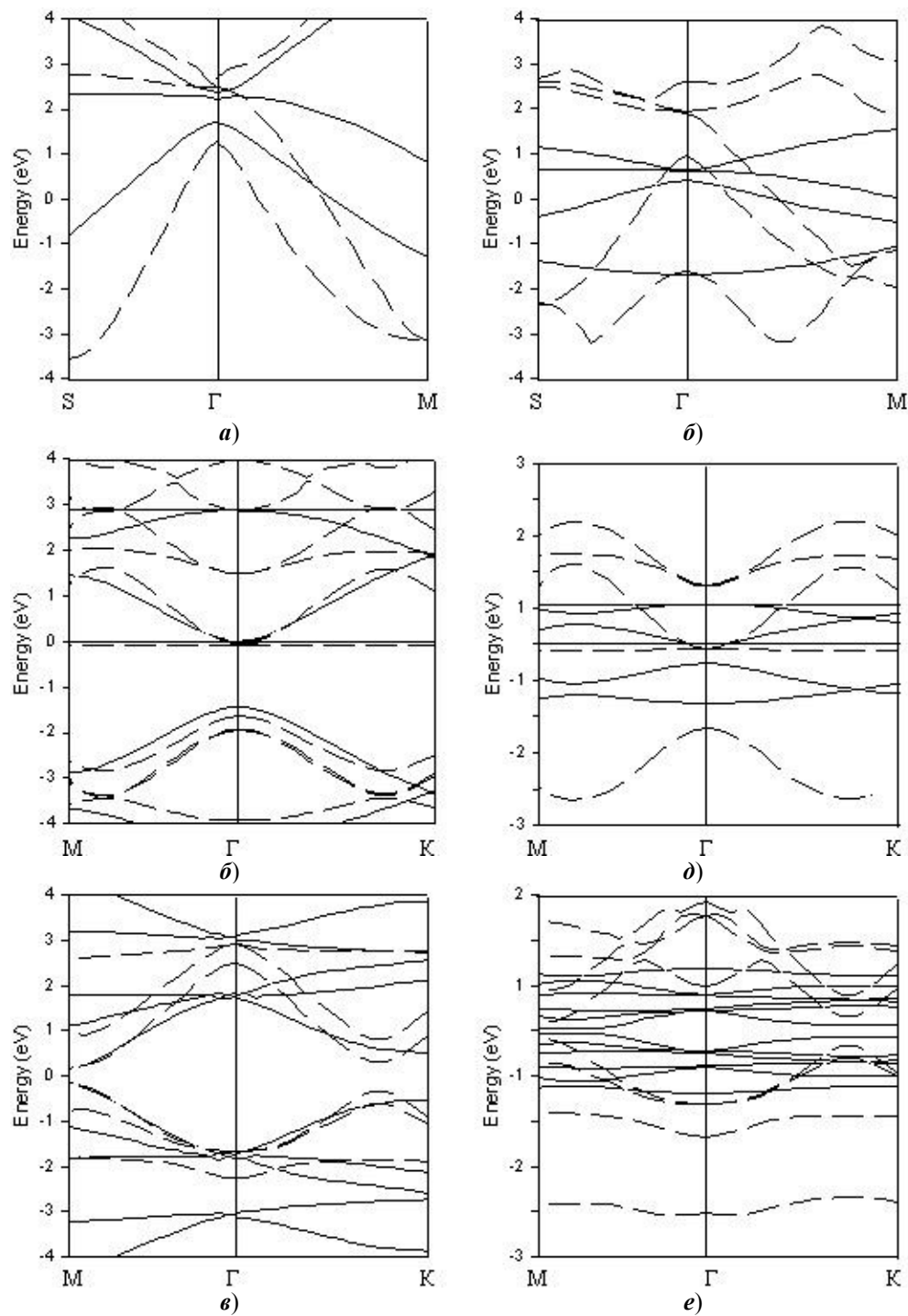


Рис. 3. Зонная структура: **a** – для $(C)_{44}$; **б** – для $(C)_{63(12)}$; **в** – для $(C)_{664}$; **г** – для $(Si)_{44}$; **д** – для $(Si)_{63(12)}$; **е** – для $(Si)_{664}$. Пунктирной линией показаны результаты расчета DFT-методами, сплошной – методом сильной связи

Структуры $(Si)_{44}$ и $(Si)_{63(12)}$ обнаруживают металлические свойства, так как ширина запрещенной зоны для них, рассчитанная как ТВ-методом, так и

DFT-методом, равна нулю, а (Si)₆₆₄ является узкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны, равной 0,06 эВ (ТВ-метод) и 0,19 эВ (DFT-метод).

Таблица 3

Сравнение результатов расчета ширины запрещенной зоны с данными работы [27]

Структура	(C) ₄₄			(C) ₆₃₍₁₂₎			(C) ₆₆₄		
	Наст. работа		ТВ–DF [27]	Наст. работа		ТВ–DF [27]	Наст. работа		ТВ–DF [27]
	ТВ	DFT		ТВ	DFT		ТВ	DFT	
Ширина запрещенной зоны, эВ	0	0	0	0	0	0	0,33	0,34	1,14

Проведенные расчеты показывают, что электронные свойства силицеподобных супракристаллов в целом такие же, как и у графеноподобных супракристаллов соответствующего типа. Правда, кремниевая структура (Si)₆₆₄ характеризуется существенно меньшей шириной запрещенной зоны по сравнению с аналогичной углеродной структурой (C)₆₆₄. Это означает, что углеродные sp^2 -наноаллотропы имеют преимущества по сравнению с их кремниевыми аналогами при их использовании в наноэлектронике: полуметаллы имеют большие значения электро- и теплопроводности, а полупроводники – большую ширину запрещенной зоны.

Список литературы

1. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, T. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // *Science*. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.
2. **Novoselov, K. S.** Two-dimensional atomic crystals / K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim // *PNAS*. – 2005. – Vol. 102. – P. 10451–10453.
3. **Wallace, P. R.** The band theory of graphite / P. R. Wallace // *Phys. Rev.* – 1947. – Vol. 71. – P. 622–634.
4. **Lomer, W. M.** The valence bands in two-dimensional graphite / W. M. Lomer // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1955. – Vol. 227. – P. 330–349.
5. **Charlier, J.-C.** Tight-binding model for the electronic properties of simple hexagonal graphite / J.-C. Charlier, J.-P. Michenaud, X. Gonze, J.-P. Vigreron // *Phys. Rev. B*. – 1991. – Vol. 44. – P. 13237–13249.
6. **Saito, R.** Physical properties of carbon nanotubes / R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. – London, Imperial, 1998.
7. **Saito, R.** Optical properties and Raman spectroscopy of carbon nanotubes / R. Saito, H. Kataura // *Carbon Nanotubes – Topics Appl. Phys.* – 2001. – Vol. 80. – P. 213–247.
8. **Dubois, S. M.-M.** Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures / S. M.-M. Dubois, Z. Zanolli, X. Declercq, J.-C. Charlier // *Eur. Phys. J. B*. – 2009. – Vol. 72. – P. 1–24.
9. **Hohenberg, P.** Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol. 136. – P. B864–B871.
10. **Kohn, W.** Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol. 140. – P. A1133–A1138.

11. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project / X. Gonze, J.-M. Beuken, R. Caracas, F. Deutaux, M. Fuchs, G.-M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, Ph. Ghosez, J.-Y. Raty, D. C. Allan // *Comp. Mat. Sci.* – 2002. – Vol. 25. – P. 478–492.
12. The Siesta method for ab initio order-N materials simulation / J. M. Soler, E. Artacho, J. Gale, D. A. Garcia, J. Junquera, O. Ordejon, D. Sanchez-Portal // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2002. – Vol. 14. – P. 2745–2779.
13. **Crespi, V. H.** Prediction of a pure-carbon planar covalent metal / V. H. Crespi, L. X. Benedict, M. L. Cohen, S. G. Louie // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 53. – P. R13303–R13305.
14. **Deza, M.** Pentaheptite modifications of the graphite sheet / M. Deza, P. W. Fowler, M. Shtorgin, K. Vietze // *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* – 2000. – Vol. 40. – P. 1325–1332.
15. **Terrones, H.** New metallic allotropes of planar and tubular carbon / H. Terrones, M. Terrones, E. Hernandez, N. Grobert, J.-C. Charlier, P. M. Ajayan // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84. – P. 1716–1719.
16. **Baughman, R. H.** Structure-property predictions for new planar forms of carbon: layered phases containing sp^2 and sp atoms / R. H. Baughman, H. Eckhardt, M. Kertesz // *J. Chem. Phys.* – 1987. – Vol. 87. – P. 6687–6700.
17. **Narita, N.** Optimized geometries and electronic structures of graphyne and its family / N. Narita, S. Nagai, S. Suzuki, K. Nakao // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58. – P. 11009–11014.
18. **Haley, M. M.** Carbon networks based on dehydrobenzoannulenes: synthesis of graphdiyne substructures / M. M. Haley, S. C. Brand, J. J. Pak // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1997. – Vol. 36. – P. 836–838.
19. **Bucknum, M. J.** The squarographites: a lesson in the chemical topology of tessellations in 2- and 3-dimensions / M. J. Bucknum, E. A. Castro // *Solid State Sci.* – 2008. – Vol. 10. – P. 1245–1251.
20. **Браже, Р. А.** Математические модели двумерных супракристаллов / Р. А. Браже, А. А. Каренин // Математическое моделирование физических, экономических, технических, социальных систем и процессов : тр. 7-й Междунар. конф. (2–5 февраля 2009 г.). – Ульяновск, 2009. – С. 51.
21. **Karenin, A. A.** Design and computer modeling of the supracrystals / A. A. Karenin // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2012. – Vol. 345. – P. 012025.
22. **Браже, Р. А.** Упругие характеристики углеродных 2D-супракристаллов в сравнении с графеном / Р. А. Браже, А. А. Каренин, А. И. Кочаев, Р. М. Мефтахутдинов // *Физика твердого тела.* – 2011. – Т. 53, № 7. – С. 1406–1408.
23. **Браже, Р. А.** Упругие волны в углеродных 2D-супракристаллах / Р. А. Браже, А. И. Кочаев, Р. М. Мефтахутдинов // *Физика твердого тела.* – 2011. – Т. 53, № 8. – С. 1614–1617.
24. **Браже, Р. А.** Изгибные волны в графене и в 2D-супракристаллах / Р. А. Браже, А. И. Кочаев // *Физика твердого тела.* – 2012. – Т. 54, № 8. – С. 1512–1514.
25. **Kim, B. G.** Graphyne: hexagonal network of carbon with versatile Dirac cones / B. G. Kim, H. J. Choi // *Phys. Rev. B.* – 2012. – Vol. 86. – P. 115435–115439.
26. A simple tight-binding model for typical graphyne structures / Zh. Liu, G. Yu, H. Yao, L. Liu, L. Jiang, Y. Zheng // *New J. Phys.* – 2012. – Vol. 14. – P. 113007.
27. **Enyashin, A. N.** Graphene allotropes / A. N. Enyashin, A. L. Ivanovskii // *Phys. Status Sol. (b).* – 2011 – Vol. 248, № 8. – P. 1879–1883.
28. **Kresse, G.** Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54. – P. 11169–11186.
29. **Goodwin, L. J.** A new tight binding parametrization for carbon / L. J. Goodwin // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 1991. – Vol. 3. – P. 3869–3878.

30. Bond-order potential for silicon / B. A. Gillespie, X. W. Zhou, D. A. Murdik, H. N. G. Wadley, R. Drautz, D. G. Pettifor // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 75. – P. 155207–155217.

References

1. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang T., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. *Science*. 2004, vol. 306, pp. 666–669.
2. Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V., Geim A. K. *PNAS*. 2005, vol. 102, pp. 10451–10453.
3. Wallace P. R. *Phys. Rev.* 1947, vol. 71, pp. 622–634.
4. Lomer W. M. *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1955, vol. 227, pp. 330–349.
5. Charlier J.-C., Michenaud J.-P., Gonze X., Vigneron J.-P. *Phys. Rev. B*. 1991, vol. 44, pp. 13237–13249.
6. Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. *Physical properties of carbon nanotubes*. London, Imperial, 1998.
7. Saito R., Kataura H. *Carbon Nanotubes – Topics Appl. Phys.* 2001, vol. 80, pp. 213–247.
8. Dubois S. M.-M., Zanolli Z., Declerk X., Charlier J.-C. *Eur. Phys. J. B*. 2009, vol. 72, pp. 1–24.
9. Hohenberg P., Kohn W. *Phys. Rev.* 1964, vol. 136, pp. B864–B871.
10. Kohn W., Sham L. J. *Phys. Rev.* 1965, vol. 140, pp. A1133–A1138.
11. Gonze X., Beuken J.-M., Caracas R., Deutaux F., Fuchs M., Rignanese G.-M., Sindic L., Verstraete M., Zerah G., Jollet F., Torrent M., Roy A., Mikami M., Ghosez Ph., Raty J.-Y., Allan D. C. *Comp. Mat. Sci.* 2002, vol. 25, pp. 478–492.
12. Soler J. M., Artacho E., Gale J., Garcia D. A., Junguera J., Ordejon O., Sanchez-Portal D. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002, vol. 14, pp. 2745–2779.
13. Crespi V. H., Benedict L. X., Cohen M. L., Louie S. G. *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 53, pp. R13303–R13305.
14. Deza M., Fowler P. W., Shtorgin M., Vietze K. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2000, vol. 40, pp. 1325–1332.
15. Terrones H., Terrones M., Hernandez E., Grobert N., Charlier J.-C., Ajayan P. M. *Phys. Rev. Lett.* 2000, vol. 84, pp. 1716–1719.
16. Baughman R. H., Eckhardt H., Kertesz M. *J. Chem. Phys.* 1987, vol. 87, pp. 6687–6700.
17. Narita N., Nagai S., Suzuki S., Nakao K. *Phys. Rev. B*. 1998, vol. 58, pp. 11009–11014.
18. Haley M. M., Brand S. C., Pak J. J. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1997, vol. 36, pp. 836–838.
19. Bucknum M. J., Castro E. A. *Solid State Sci.* 2008, vol. 10, pp. 1245–1251.
20. Brazhe R. A., Karenin A. A. *Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh, ekonomicheskikh, tekhnicheskikh, sotsial'nykh sistem i protsessov: tr. 7-y Mezhdunar. konf. (2–5 fevralya 2009 g.)* [Mathematical modeling of physical, economic, technical, social systems and processes: proceedings of 7th International conference (2–5 February 2009)]. Ulyanovsk, 2009, p. 51.
21. Karenin A. A. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2012, vol. 345, p. 012025.
22. Brazhe R. A., Karenin A. A., Kochaev A. I., Meftakhutdinov R. M. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2011, vol. 53, no. 7, pp. 1406–1408.
23. Brazhe R. A., Kochaev A. I., Meftakhutdinov R. M. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2011, vol. 53, no. 8, pp. 1614–1617.
24. Brazhe R. A., Kochaev A. I. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2012, vol. 54, no. 8, pp. 1512–1514.
25. Kim B. G., Choi H. J. *Phys. Rev. B*. 2012, vol. 86, pp. 115435–115439.

26. Liu Zh., Yu G., Yao H., Liu L., Jiang L., Zheng Y. *New J. Phys.* 2012, vol. 14, p. 113007.
27. Enyashin A. N., Ivanovskii A. L. *Phys. Status Sol. (b)*. 2011, vol. 248, no. 8, pp. 1879–1883.
28. Kresse G., Furthmüller J. *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 54, pp. 11169–11186.
29. Goodwin L. J. *J. Phys.: Condens. Matter*. 1991, vol. 3, pp. 3869–3878.
30. Gillespie B. A., Zhou X. W., Murdik D. A., Wadley H. N. G., Drautz R., Pettifor D. G. *Phys. Rev. B*. 2007, vol. 75, pp. 155207–155217.

Браже Рудольф Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

E-mail: brazhe@ulstu.ru

Brazhe Rudol'f Aleksandrovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of physics, Ulyanovsk State Technical
University (32 Severny Venetz street,
Ulyanovsk, Russia)

Мефтахутдинов Руслан Максутович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра физики, Ульяновский
государственный технический
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Северный Венец, 32)

E-mail: mrm@ulstu.ru

Meftakhutdinov Ruslan Maksutovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of physics, Ulyanovsk State
Technical University (32 Severny Venetz
street, Ulyanovsk, Russia)

Фатхутдинова Камила Хасановна

студентка, Ульяновский
государственный технический
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Северный Венец, 32)

E-mail: brazhe@ulstu.ru

Fatkhutdinova Kamila Khasanovna

Student, Ulyanovsk State Technical
University (32 Severny Venetz street,
Ulyanovsk, Russia)

УДК 538.915

Браже, Р. А.

Зонная структура углеродных и кремниевых 2D-супракристаллов /
Р. А. Браже, Р. М. Мефтахутдинов, К. Х. Фатхутдинова // Известия высших
учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. –
2015. – № 1 (33). – С. 130–139.

**ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ КОМПЛЕКСНОГО
КОЭФФИЦИЕНТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ В ВОЛНОВЕДУЩЕЙ
СТРУКТУРЕ «УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА – ГРАФЕН»
В ТЕРАГЕРЦОВОМ И ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНАХ¹**

Аннотация.

Актуальность и цели. Углеродные наноструктуры, состоящие из углеродных нанотрубок (УНТ) и монослоев графена, обладают уникальными электронными, оптическими и механическими свойствами для создания линий передачи и устройств на графеновой платформе в терагерцовом и инфракрасном диапазонах. Целью данной работы является теоретическое исследование процесса распространения электромагнитных волн в нового класса волноводящих 2D-структурах на основе УНТ и графена в терагерцовом и ближнем инфракрасном диапазонах на основе математического моделирования, базирующегося на решении уравнений Максвелла совместно с материальными уравнениями сред (УНТ и графена).

Материалы и методы. Разработана математическая модель распространения электромагнитных волн и их взаимодействия с волноводящими 2D-структурами на основе УНТ и графена, базирующаяся на решении краевой задачи для уравнений Максвелла, где поверхностная проводимость графена включена как параметр и определяется формулой Кубо, используя разработанный вычислительный алгоритм на основе автономных блоков с каналами Флоке.

Результаты. Получены результаты электродинамического расчета действительной и мнимой частей комплексного коэффициента распространения, а также коэффициента замедления и затухания на длине волны фундаментальной моды в волноводящих структурах (УНТ – монослой графена) в зависимости от частоты при различных значениях химического потенциала (напряжения внешнего постоянного электрического поля) в терагерцовом и ближнем инфракрасном диапазонах.

Выводы. Показано, что дисперсионные характеристики электромагнитных волн в волноводящих структурах УНТ–графен зависят от соотношения геометрических размеров (радиуса УНТ и расстояния УНТ–графен) и управляются действием внешнего электрического поля в терагерцовом, ближнем инфракрасном диапазонах.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, монослой графена, комплексный коэффициент распространения, химический потенциал, терагерц, ближний инфракрасный диапазон.

G. S. Makeeva, O. A. Golovanov

**ELECTRODYNAMIC CALCULATION OF A COMPLEX
COEFFICIENT OF ELECTROMAGNETIC WAVE PROPAGATION
IN THE WAVEGUIDING STRUCTURE “CARBON NANOTUBE -
GRAPHENE” IN TERAHERTZ AND INFRARED RANGES**

¹ Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 12-02-97025-р_поволжье_a.

Abstract.

Background. Carbon nanostructures, consisting of carbon nanotubes (CNTs) and graphene monolayers, have unique optical, electronic and mechanic properties for developing of waveguiding 2D structures and graphene-based devices at terahertz (THz) and infrared (IR) frequency ranges. The aim of the present work is to theoretically research propagation of electromagnetic waves in novel waveguiding 2D structures based on CNT- graphene at THz and near IR frequencies using mathematical modeling by solving the Maxwell's equations, complemented by the constitutive laws for CNTs and graphene.

Materials and methods. A mathematical model of propagation and interaction of electromagnetic waves in waveguiding 2D structures based on CNT- graphene was developed by solving the Maxwell boundary value problem, where the graphene electron surface conductivity is included as a parameter and determined from the Kubo formalism, using a computational algorithm on autonomous blocks with Floquet channels (FABs).

Results. The results of electrodynamic calculation of the real and imaginary parts of complex wave numbers and coefficients of delay and extinction of the fundamental mode in waveguiding 2D structures based on CNT- graphene depending on the frequency were obtained for different values of the chemical potential (the external electric field intensity) at THz and near IR frequency ranges.

Conclusions. It is shown that the dispersion performances of electromagnetic waves in waveguiding 2D structures based on CNT- graphene depend on the geometry sizes (the CNT radius and the distance between CNT and graphene) and can be tuned by the external electric field at THz and near IR frequencies.

Key words: carbon nanotubes, graphene monolayer, complex wave number, chemical potential, terahertz, near infrared frequency range.

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) являются уникальными одномерными системами, которые можно рассматривать как свернутые монослои графита [1–6]. Диаметр обычно колеблется в диапазоне 0,4–40 нм, но длина может отличаться в ~ 10000 раз и достигать 4 см. Отношение длины к диаметру УНТ может быть необычайно высоким, порядка $2,8 \cdot 10^7$. Это является причиной того, что все свойства УНТ по сравнению с типичными материалами являются чрезвычайно анизотропными и могут быть направленным образом варьируемыми.

Основная классификация УНТ проводится по количеству составляющих их слоев: однослойные, двухслойные, многослойные, тонкие УНТ. Однослойные УНТ – простейший вид нанотрубок. Эти УНТ имеют диаметр около 1 нм при длине, которая может быть во много тысяч раз больше [4]. Структуру однослойных УНТ можно представить как «обертывание» гексагональной сетки графита, основу которой составляют шестиугольники с расположенными в вершинах углов атомами углерода, в бесшовный цилиндр (рис. 1).

Многослойные УНТ состоят из нескольких слоев графита, сложенных в форме трубки. Расстояние между слоями равно 0,34 нм, т.е. такое же, как и между слоями в кристаллическом графите. Существуют две модели, используемые для описания их структуры [4]. Многослойные УНТ могут представлять собой несколько однослойных УНТ телескопического вида,

т.е. вложенных одна в другую (рис. 2) или, в другом случае, один монослой графена оборачивается несколько раз.

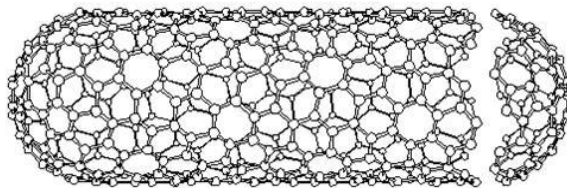


Рис. 1 Однослойные углеродные нанотрубки [4]



Рис. 2 Многослойные углеродные нанотрубки [4]

Эксперименты показывают, что материалы на основе УНТ являются очень прочными и жесткими с высокими пределом прочности на растяжение [4]. Это связано с совершенством структуры и сильной химической sp^2 -связью между атомами углерода, составляющими УНТ. При растягивающих нагрузках, превышающих некоторое критическое значение УНТ, испытывают пластическую деформацию.

Нанокompозиты на основе углеродных наноструктур, состоящих из набора вертикально ориентированных УНТ и монослоев графена, расположенных в верхней части решетки (рис. 3), были получены методом химического осаждения газа с использованием высокотемпературного каталитического пиролиза смеси ксилол-ферроцен [5]. Сканирующий электронный микроскопический анализ позволил установить особенности наноструктурной морфологии УНТ–графен, в частности, строение внутреннего слоя структуры монослоев графена и его связи с основной решеткой УНТ.

В синтезированной структуре (рис. 4) в 2D-плоскостях, перпендикулярных оси УНТ, практически полностью отсутствует тепло- и электропроводность. С другой стороны, графен обладает тепло- и электропроводностью в плоскости листа. В результате композитная структура имеет электрическую проводимость и тепловое рассеяние во всех направлениях [6].

Кроме того, монослой графена ограничивает длину УНТ, делая их практически однородными по длине. Нанокompозит легко растягивается

и гнется, при изгибе электрическое сопротивление материала увеличивается, но затем восстанавливается практически до начального состояния – после 1000 циклов сгибания/разгибания оно увеличивается на 1 %.

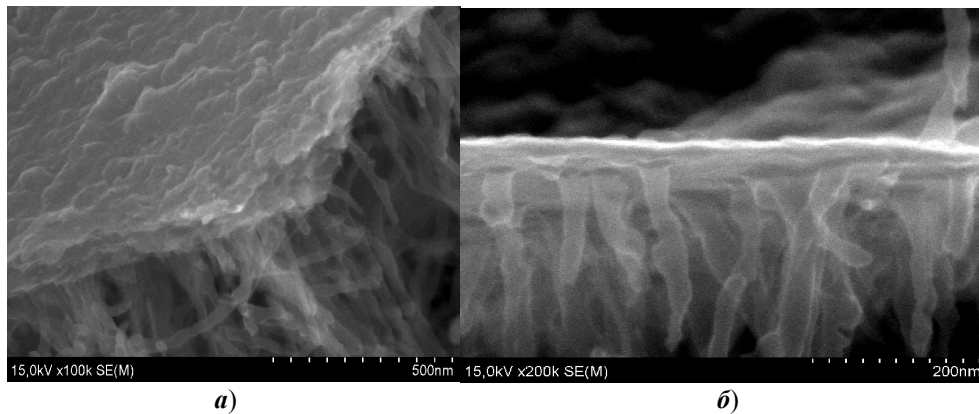


Рис. 3. Изображение в сканирующем электронном микроскопе нанокompозита на основе УНТ – монослои графена:
a – плоский слой графена; ***б*** – переход УНТ–графен [5]

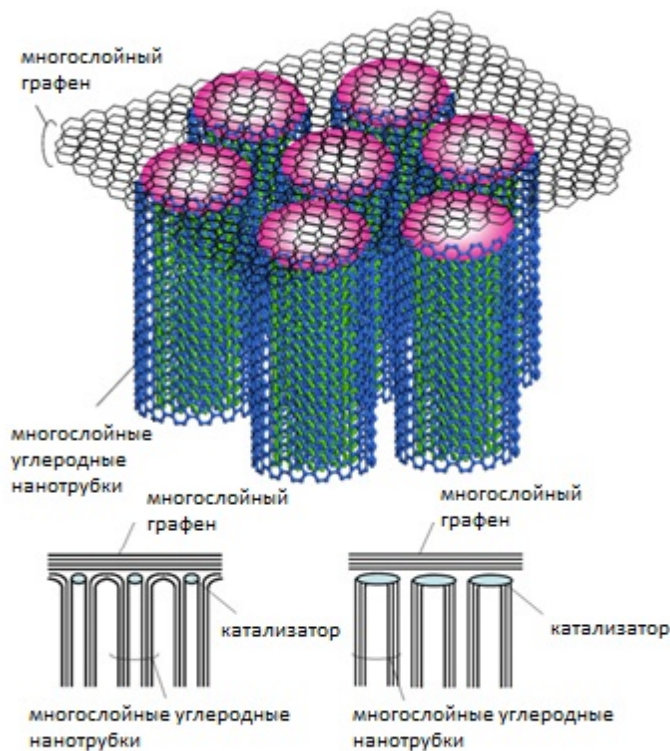


Рис. 4. Структура нанокompозита – УНТ, соединенные с монослоями графена [6]

Как следует из обзора источников [1–6], углеродные наноструктуры, состоящие из УНТ и монослоев графена, обладают уникальными электронными, оптическими и механическими свойствами для создания линий пере-

дачи и устройств на графеновой платформе в терагерцовом (ТГц) и инфракрасном (ИК) диапазонах.

Целью данной работы является теоретическое исследование процесса распространения электромагнитных волн в волноведущих 2D-структурах на основе графена и УНТ в ТГц- и ближнем ИК-диапазонах на основе математического моделирования, базирующегося на решении уравнений Максвелла, совместно с материальными уравнениями сред (углеродных наноструктур – графена и УНТ).

1. Математическая модель

Математическая модель распространения электромагнитных волн в электродинамических структурах на основе УНТ и графена базируется на решении краевой задачи для системы уравнений Максвелла

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \vec{H}(t) &= \frac{\partial \vec{D}(t)}{\partial t} + \vec{J}(t), \\ \operatorname{rot} \vec{E}(t) &= -\frac{\partial \vec{B}(t)}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \vec{D}(t) &= \rho, \quad \operatorname{div} \vec{B}(t) = 0\end{aligned}\tag{1}$$

совместно с материальными уравнениями среды (графена, УНТ)

$$\begin{aligned}\vec{D}(t) &= \epsilon_0 \epsilon \vec{E}(t), \\ \vec{B}(t) &= \mu_0 \mu \vec{H}(t), \\ \vec{J}(t) &= \sigma \vec{E}(t)\end{aligned}$$

и дополненной электродинамическими граничными условиями. Здесь $\vec{E}(t), \vec{H}(t)$ – векторы напряженностей электрического и магнитного полей; $\vec{D}(t), \vec{B}(t)$ – векторы электрической и магнитной индукций; $\vec{J}(t)$ – плотность тока; ϵ, μ – относительные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды; σ – объемная удельная проводимость (электропроводность) среды (графена, УНТ); ρ – объемная плотность электрического заряда; ϵ_0, μ_0 – электрическая и магнитная постоянные.

Монослой графена характеризуется поверхностной проводимостью σ_s , определяемой формулой Кубо [7]:

$$\begin{aligned}\sigma_s(\omega, \mu_c) &= \frac{-ie^2 k_b T}{\pi \hbar^2 (\omega - i2\Gamma)} \left(\frac{\mu_c}{k_b T} + 2 \ln \left(\exp \left(\frac{-\mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right) \right) - \\ &- \frac{ie^2 (\omega - i2\Gamma)}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{\left(\exp \left(\frac{-\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1} - \left(\exp \left(\frac{\xi - \mu_c}{k_b T} \right) + 1 \right)^{-1}}{(\omega - i2\Gamma)^2 - \left(\frac{2\xi}{\hbar} \right)^2} d\xi,\end{aligned}\tag{2}$$

где $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ К – заряд электрона; $k_b = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана; $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка; $T = 300$ К – температура; $\Gamma = 10^{12}$ 1/с – скорость релаксации; $\mu_c = 0 - 1$ эВ – химический потенциал ($1 \text{ эВ} = 1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж); $\omega = 2\pi f$ – частота.

Углеродные нанотрубки характеризуются поверхностной проводимостью, определяемой формулой [7]:

$$\sigma_{zz}(\omega) = \frac{-i4e^2 V_F}{\pi \hbar r (\omega - i\nu)}, \quad (3)$$

где $V_F = 3\gamma_0 b \pi / \hbar$, $\gamma_0 = 2,7$ эВ, $b = 0,142$; $\nu = 6T / r$, r – радиус УНТ.

В уравнения Максвелла (1) входит объемная удельная проводимость σ углеродной наноструктуры (графена, УНТ), которую необходимо выразить через поверхностную проводимость.

Введем эффективную толщину графена $d = 1 \cdot 10^{-9}$ м и установим связь между поверхностной σ_s и объемной σ проводимостями: $\sigma = \sigma_s / d$.

Для монослоя графена вводится комплексная диэлектрическая проницаемость [7]:

$$\epsilon(\omega, \mu_c) = 1 + \frac{i\sigma(\omega, \mu_c)}{\epsilon_0 \omega d},$$

где d – эффективная толщина монослоя графена.

Установим связь между поверхностной проводимостью УНТ σ_{zz} (3) и объемной удельной проводимостью УНТ σ :

$$\sigma = \sigma_{zz} / d,$$

где d – толщина стенки УНТ, и введем для УНТ комплексную диэлектрическую проницаемость:

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i\sigma_{zz}(\omega)}{\epsilon_0 \omega d}. \quad (4)$$

Тогда уравнения Максвелла (1) для электродинамических структур на основе графена, УНТ запишутся для гармонических колебаний в виде

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= i\omega \epsilon_0 \epsilon_b(\omega, \mu_c) \vec{E}, \\ \text{rot } \vec{E} &= -i\omega \mu_0 \mu_b \vec{H}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\epsilon = \epsilon_b$, $\mu = \mu_b$ – диэлектрическая и магнитная проницаемости графена и УНТ, которые считаем скалярными величинами.

2. Проводимость углеродных нанотрубок в ТГц- и ближнем ИК-диапазонах

Для электродинамического расчета линии передачи УНТ–графен предварительно рассчитана поверхностная проводимость УНТ по формуле (4). Ре-

зультаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей поверхностной проводимости σ_{zz} УНТ при различных радиусах УНТ в СВЧ, ТГц-диапазоне приведены на рис. 5.

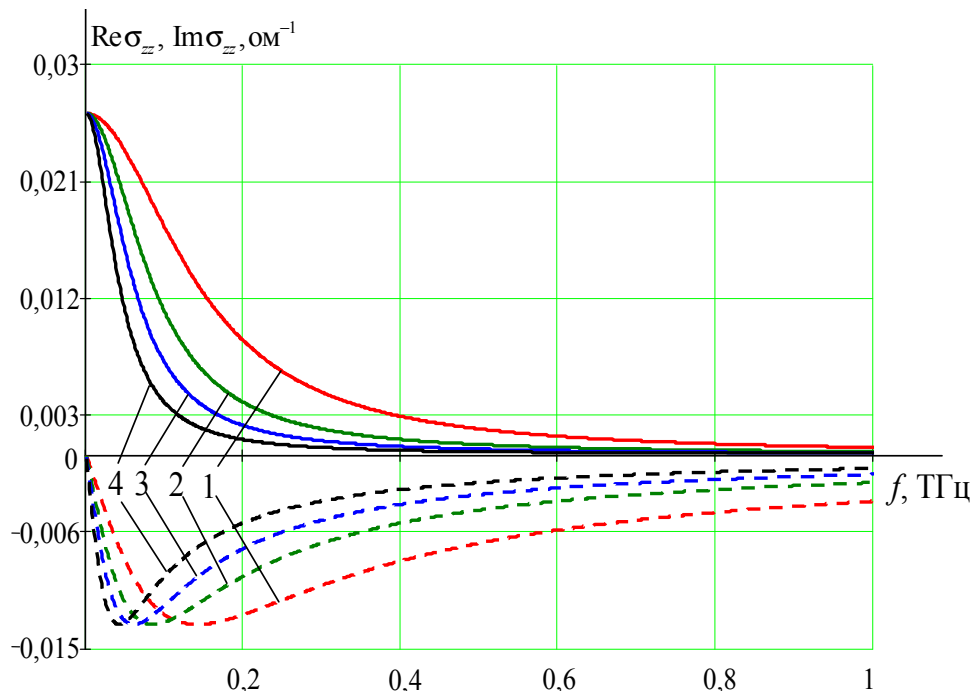


Рис. 5. Частотная зависимость действительной и мнимой частей поверхностной проводимости УНТ σ_{zz} в СВЧ- и ТГц-диапазоне при различных радиусах УНТ; кривые: 1 – $r = 2,03$ нм; 2 – $r = 3,39$ нм; 3 – $r = 4,74$ нм; 4 – $r = 6,8$ нм; сплошные кривые – $\text{Re } \sigma_{zz}$, пунктирные – $-\text{Im } \sigma_{zz}$

Результаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости УНТ в ближнем ИК-диапазоне приведены на рис. 6. Результаты расчета частотной зависимости действительной и мнимой частей объемной удельной проводимости УНТ в СВЧ, ТГц- и ближнем ИК-диапазонах приведены на рис. 7.

3. Результаты электродинамического расчета комплексного коэффициента распространения электромагнитных волн в линии передачи УНТ–графен в ТГц- и ближнем ИК-диапазоне

Вычислительный метод математического моделирования базируется на декомпозиции анизотропных наноструктурных наноматериалов и волноведущих структур на основе графена и УНТ на автономные блоки в виде прямоугольных параллелепипедов, содержащих УНТ, графен, и с виртуальными каналами Флоке на гранях (ФАБ) [8]. Расчетная модель на основе ФАБ линии передачи УНТ–графен представлена на рис. 8.

Для построения дескрипторов (матрицы проводимости Y) ФАБ, содержащих УНТ и графен, разработан вычислительный алгоритм решения краевой 3D-задачи дифракции проекционным методом Галеркина [9].

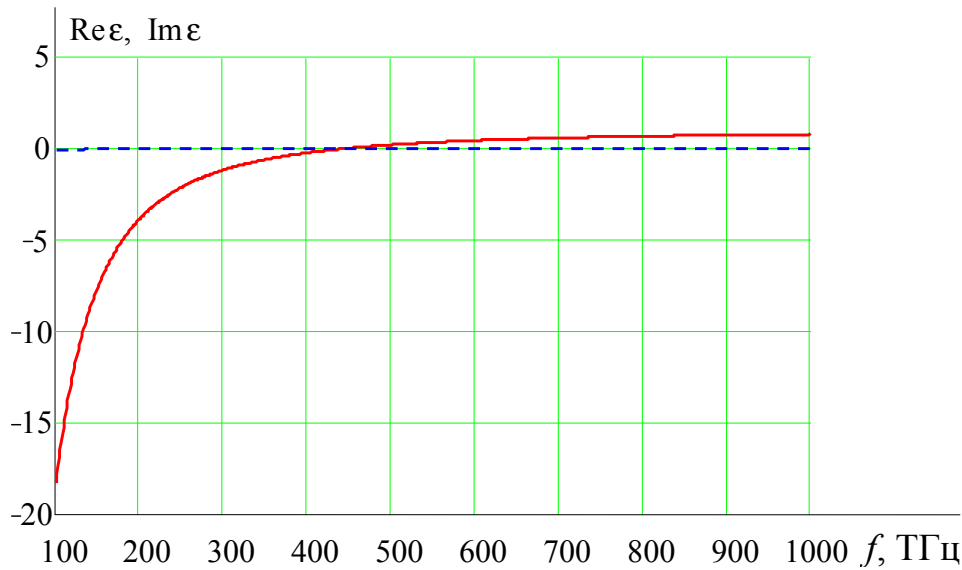


Рис. 6. Частотная зависимость действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости УНТ в ближнем ИК-диапазоне: $r = 1,4$ нм, $d = 0,5$ нм; сплошная кривая – $\text{Re } \epsilon$, пунктирная – $\text{Im } \epsilon$

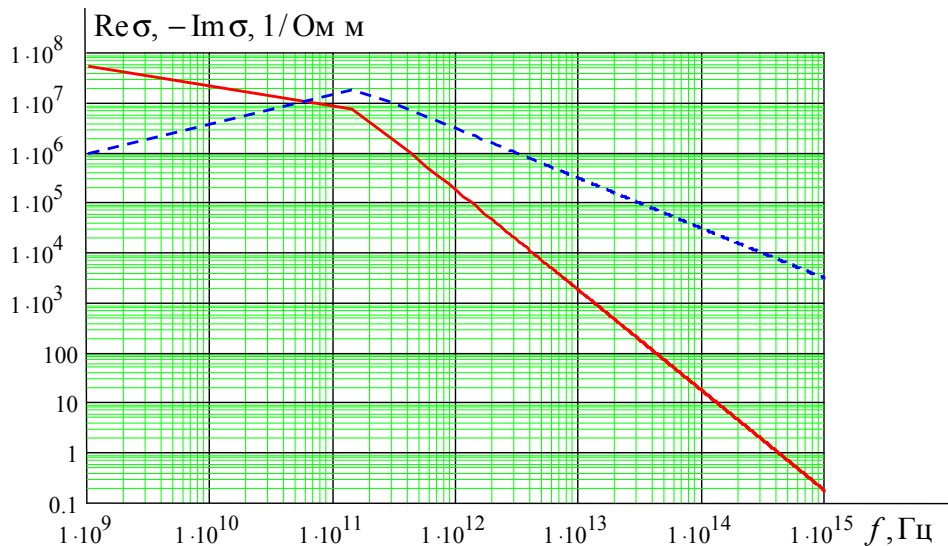


Рис. 7. Частотная зависимость действительной и мнимой частей объемной удельной проводимости УНТ в СВЧ, ТГц- и ближнем ИК-диапазонах: $r = 5,0$ нм, $d = 0,5$ нм; сплошная кривая – $\text{Re } \sigma$, пунктирная – $\text{Im } \sigma$

Математическая модель распространения электромагнитных волн в анизотропных наноструктурных материалах на основе графена и УНТ и волноведущих структурах УНТ–графен базируется на решении характеристического уравнения для определения постоянных распространения волн, включающего матрицу проводимости $\mathbf{Y}$ (дескриптор) ФАБ [9].

С использованием разработанного вычислительного алгоритма расчета матрицы проводимости $\mathbf{Y}$ ФАБ из характеристического уравнения [9] рассчи-

таны действительная и мнимая части комплексного коэффициента распространения фундаментальной моды в волноведущей структуре УНТ–графен в ТГц-диапазоне в зависимости от значения химического потенциала (величины внешнего постоянного электрического поля), а также соотношения геометрических размеров (при различных радиусах УНТ и расстояниях УНТ–графен).

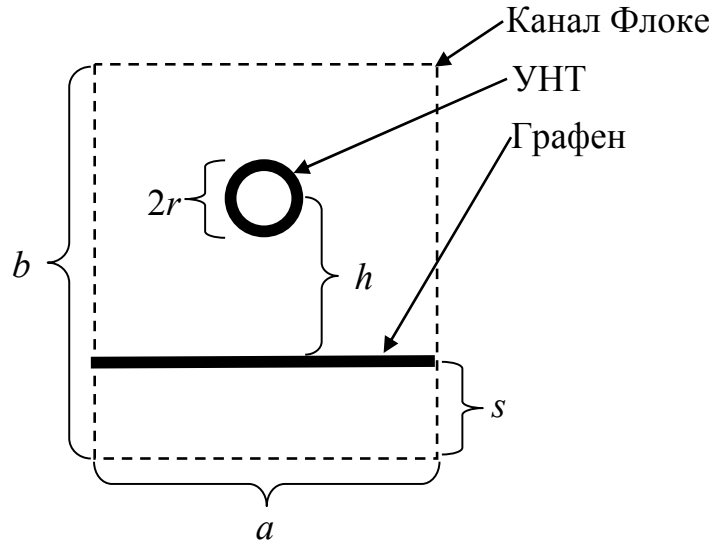


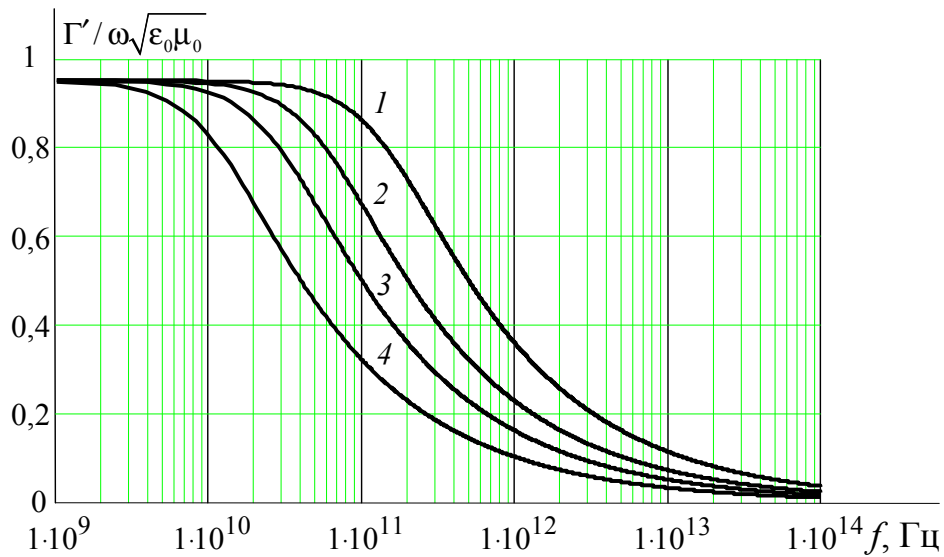
Рис. 8. Расчетная модель на основе ФАБ линии передачи УНТ–графен
 $a = b$ – размеры канала Флоке, $2r$ – диаметр УНТ, h – высота УНТ над графеном, s – толщина диэлектрика

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей относительной постоянной распространения $\Gamma' / \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ и коэффициента затухания Γ'' , дБ/м, электромагнитной волны основного типа в ТГц-диапазоне при различных радиусах УНТ представлены на рис. 9.

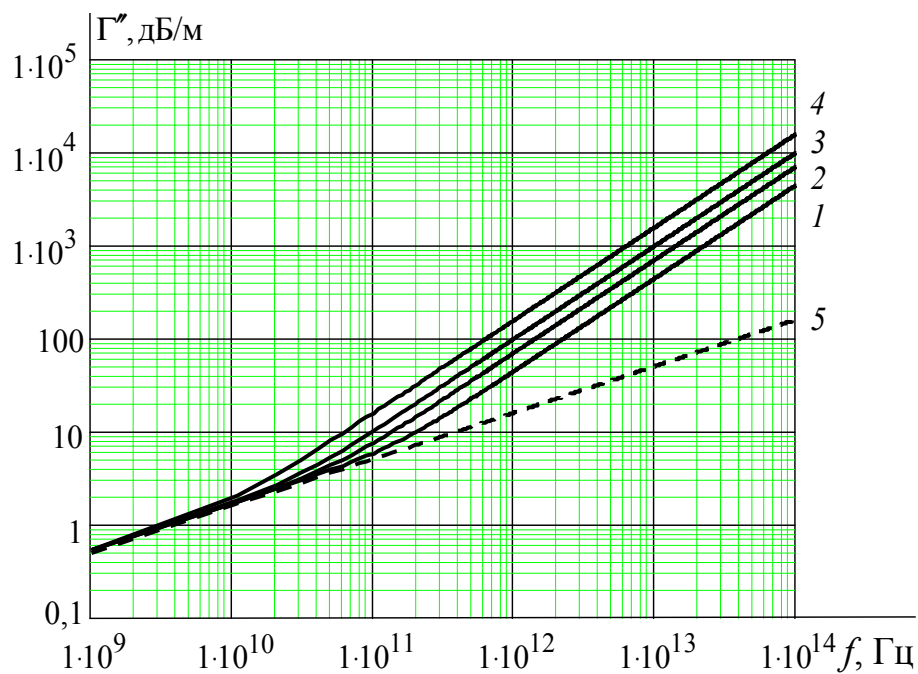
Как следует из результатов математического моделирования (рис. 9), при увеличении радиуса УНТ (2–25 нм) относительная постоянная распространения $\Gamma' / \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ и коэффициент затухания Γ'' (дБ/м) фундаментальной моды в волноведущей структуре УНТ–графен монотонно возрастают в ТГц-диапазоне.

Результаты электродинамического расчета частотных зависимостей относительной постоянной распространения $\Gamma' / \omega \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ и коэффициента затухания Γ'' (дБ/м) электромагнитной волны основного типа в волноведущей структуре УНТ–графен в ТГц-диапазоне при различных значениях химического потенциала представлены на рис. 10.

Из результатов математического моделирования (рис. 10, а) следует, что при изменении значения химического потенциала 0–1 эВ (при приложении внешнего электрического поля) постоянная распространения волны основного типа в линии передачи УНТ–графен существенно возрастает.



а)



б)

Рис. 9. Частотные зависимости относительной постоянной распространения (а) и коэффициента затухания (б) электромагнитной волны основного типа в линии передачи УНТ–графен при различных радиусах УНТ: $a = b = 1,5\lambda$, $s = 0,3\lambda$, $h = 0,1\lambda$, $\mu_c = 1$ эВ; кривые 1 – $r = 2,0$ нм; 2 – $r = 5,0$ нм; 3 – $r = 10,0$ нм; 4 – $r = 25,0$ нм; кривая 5 – для сравнения (трубка из меди)

Частотные зависимости коэффициента замедления $2\pi f \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} / \Gamma'$ и коэффициента затухания Γ'' / Γ' на длине волны основного типа в линии пере-

дачи УНТ-графен для различных радиусов УНТ при изменении значения химического потенциала (0–1 эВ) в ТГц-диапазоне представлены на рис. 11–13.

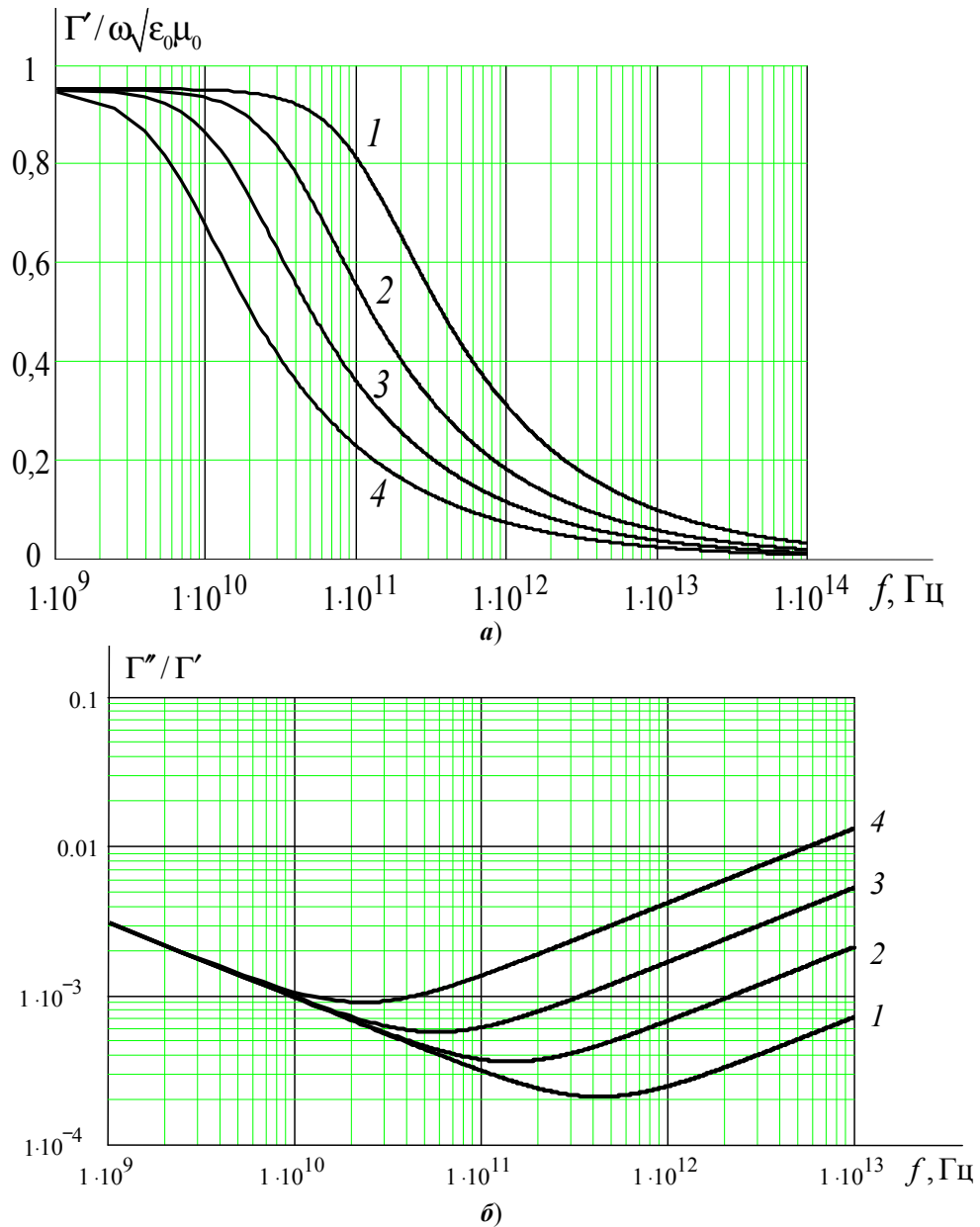


Рис. 10. Частотные зависимости относительной постоянной распространения (а) и коэффициента затухания (б) электромагнитной волны основного типа в линии передачи УНТ-графен при различных значениях химического потенциала μ_c : $a = b = 1,5\lambda$, $s = 0,3\lambda$, $h = 0,1\lambda$, $r = 2,71$ нм; кривые: 1 – $\mu_c = 1$ эВ; 2 – $\mu_c = 0,75$ эВ; 3 – $\mu_c = 0,5$ эВ; 4 – $\mu_c = 0$ эВ

Как следует из результатов математического моделирования (рис. 11–13, а), коэффициент замедления монотонно возрастает при увеличении значения химического потенциала (0–1 эВ). Дисперсионные зависимости коэффициента

замедления $2\pi f \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} / \Gamma'$ волны основного типа от частоты определяются геометрическими размерами структуры (радиус УНТ, расстояние УНТ–графен). Дисперсионные характеристики при увеличении значения химического потенциала 0–1 эВ сдвигаются в сторону более высоких частот ТГц-диапазона.

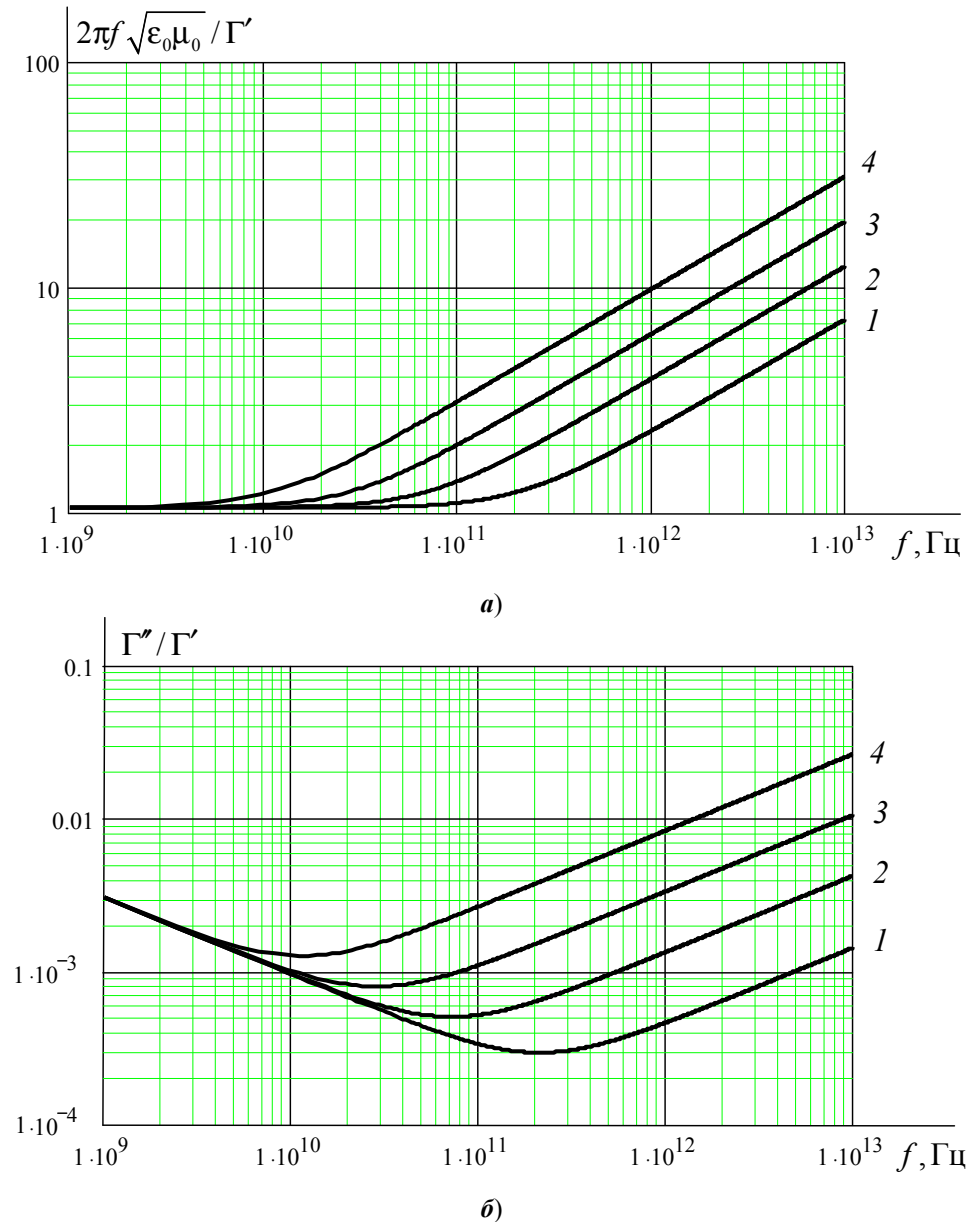


Рис. 11. Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа в линии передачи УНТ–графен при различных значениях химического потенциала μ_c : $r = 0,678$ нм; $a = b = 1,5\lambda$, $s = 0,3\lambda$, $h = 0,1\lambda$, кривые: 1 – $\mu_c = 1$ эВ; 2 – $\mu_c = 0,75$ эВ; 3 – $\mu_c = 0,5$ эВ; 4 – $\mu_c = 0$ эВ

Как видно из графиков (рис. 11–13, б), частотные зависимости коэффициента затухания Γ'' / Γ' на длине волны основного типа в линии передачи

УНТ–графен имеют минимум, положение которого зависит от радиуса УНТ и значения химического потенциала. С уменьшением радиуса УНТ ($r = 2,71 - 0,678$ нм) минимум коэффициента затухания Γ''/Γ' на длине волны смещается в сторону более высоких частот ТГц-диапазона и управляется химическим потенциалом.

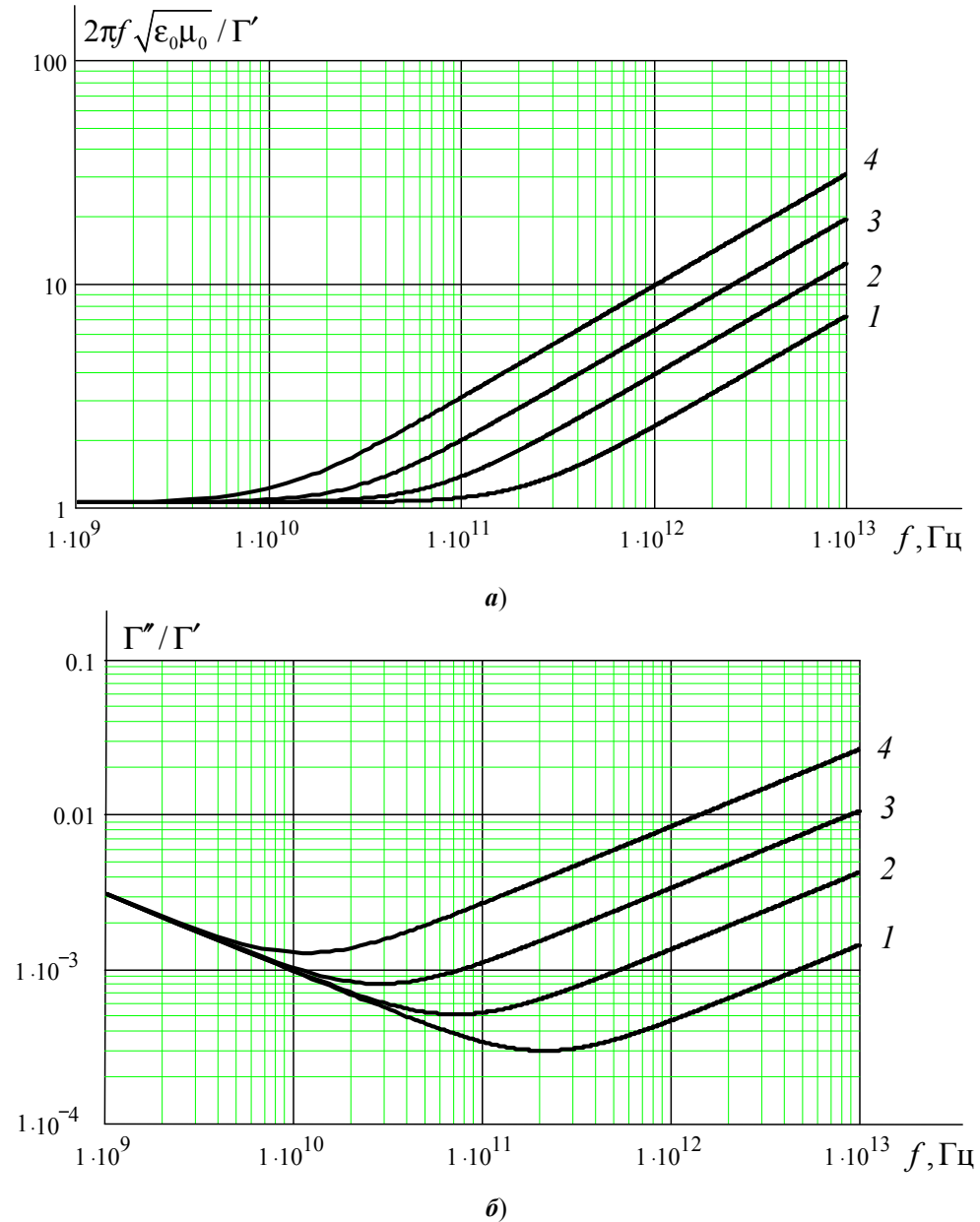


Рис. 12. Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа электромагнитной волны в линии передачи УНТ–графен при различных значениях химического потенциала μ_c : $r = 1,355$ нм; $a = b = 1,5\lambda$, $s = 0,3\lambda$, $h = 0,1\lambda$, кривые: 1 – $\mu_c = 1$ эВ; 2 – $\mu_c = 0,75$ эВ; 3 – $\mu_c = 0,5$ эВ; 4 – $\mu_c = 0$ эВ

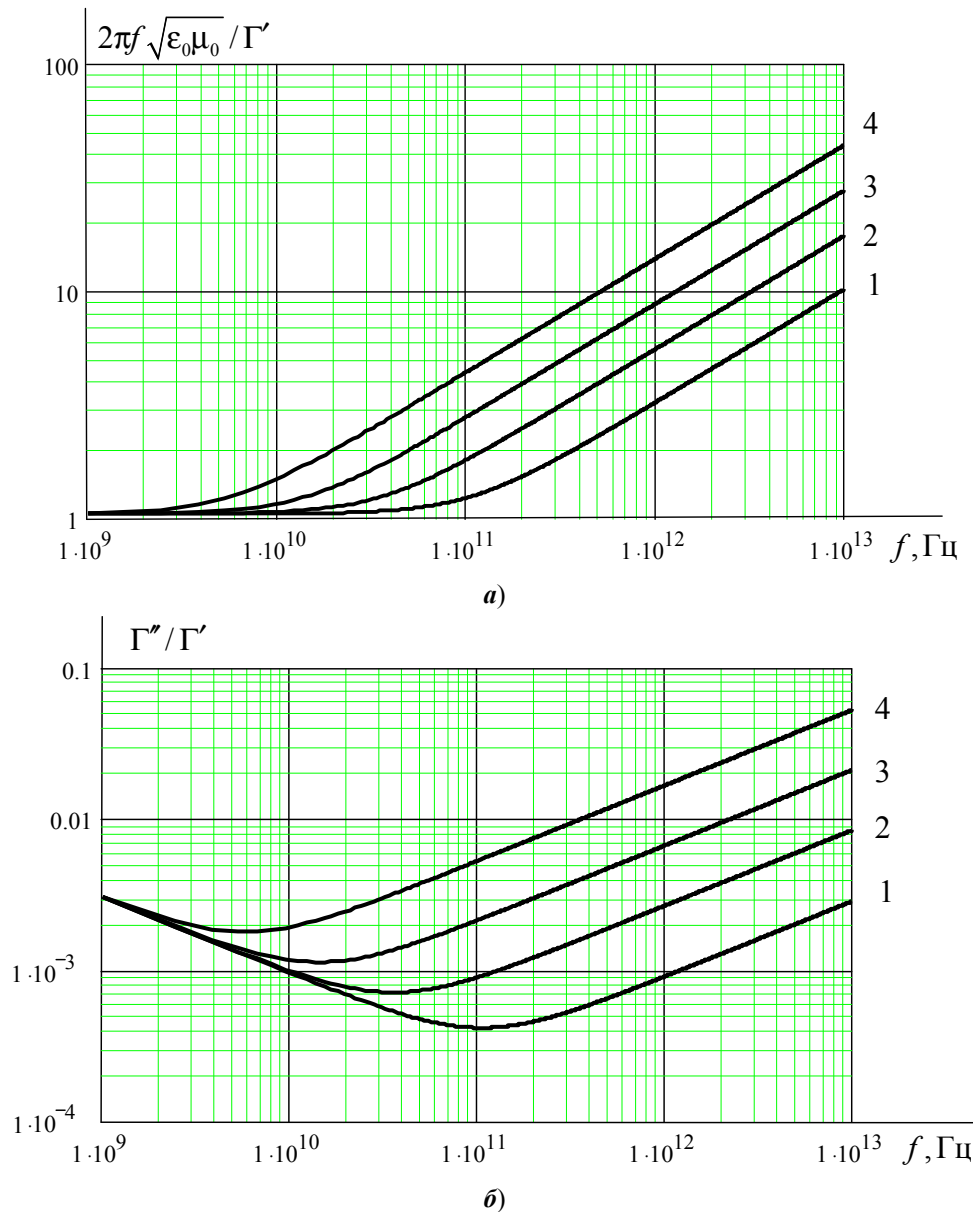


Рис. 13. Частотные зависимости коэффициента замедления (а) и затухания (б) на длине волны основного типа в линии передачи УНТ–графен при различных значениях химического потенциала μ_c : $r = 2,71$ нм, $a = b = 1,5\lambda$, $s = 0,3\lambda$, $h = 0,1\lambda$; кривые: 1 – $\mu_c = 1$ эВ; 2 – $\mu_c = 0,75$ эВ; 3 – $\mu_c = 0,5$ эВ; 4 – $\mu_c = 0$ эВ

Заключение

Впервые получены результаты математического моделирования распространения электромагнитных волн в волноведущих структурах нового класса на основе УНТ–графен для создания линий передачи и устройств на графеновой платформе в ТГц-диапазоне. Рассчитаны частотные зависимости коэффициента замедления и коэффициента затухания на длине волны основного типа в волноведущих структурах УНТ–графен при различных радиусах

УНТ в зависимости от химического потенциала в ТГц-диапазоне. Показано, что при увеличении значения химического потенциала (0–1 эВ) коэффициент замедления монотонно возрастает. Частотные зависимости коэффициента затухания имеют минимум, положение которого зависит от радиуса УНТ, с уменьшением радиуса УНТ ($r = 2,71\text{--}0,678$ нм) минимум коэффициента затухания смещается в сторону более высоких частот ТГц-диапазона и управляется химическим потенциалом. Дисперсионные зависимости волн основного типа определяются геометрическими размерами структуры (радиус УНТ, расстояние УНТ–графен). Из результатов математического моделирования следует, что изменение значения химического потенциала (действие внешнего электрического поля) является способом эффективного управления дисперсионными характеристиками электромагнитных волн в волноведущих структурах УНТ–графен в ТГц-диапазоне.

Список литературы

1. DailyTechInfo. – URL: <http://dailytechinfoorg.blogspot.ru>
2. Fine structure constant defines transparency of grapheme / R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber // *Science*. – 2008. – № 320. – P. 1308–1308.
3. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // *Science*. – 2004. – № 306 (5696). – P. 666–669.
4. **Дьячков, П. Н.** Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения / П. Н. Дьячков. – М.: Бином, 2006. – 293 с.
5. Semiconductor Physics / V. A. Labunov, B. G. Shulitski, A. L. Prudnikava, Y. P. Shaman, A. S. Basaev // *Quantum Electronics and Optoelectronics*. – 2010. – Vol. 13, № 2. – P. 137–141.
6. **Gonzalez, J.** Propagating, evanescent, and localized states in carbon nanotube-graphene junctions / J. Gonzalez, F. Guinea and J. Herrero // *Phys. Rev. B*. – Vol. 79. – 2009. – P. 165434.
7. **Hanson, G. W.** Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of grapheme / G. W. Hanson // *Journ. of Applied Physics*. – 2008. – Vol. 103. – P. 064302.
8. **Голованов, О. А.** Автономные блоки с виртуальными каналами Флоке и их применение для решения прикладных задач электродинамики / О. А. Голованов // *Радиотехника и электроника*. – 2006. – Т. 51, № 12. – С. 1423–1430.
9. **Макеева, Г. С.** Математическое моделирование распространения электромагнитных волн в наноструктурированных гироманнитных средах методом автономных блоков с магнитными нановключениями и каналами Флоке / Г. С. Макеева, О. А. Голованов // *Радиотехника и электроника*. – 2009. – Т. 54, № 12. – P. 1455–1459.

References

1. *DailyTechInfo*. Available at: <http://dailytechinfoorg.blogspot.ru>
2. Nair R. R., Blake P., Grigorenko A. N., Novoselov K. S., Booth T. J., Stauber T. *Science*. 2008, no. 320, pp. 1308–1308.
3. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. *Science*. 2004, no. 306 (5696), pp. 666–669.
4. D'yachkov P. N. *Uglerodnye nanotrubki: stroenie, svoystva, primeneniya* [Carbon nanotubes: structure, properties, application]. Moscow: Binom, 2006, 293 p.

5. Labunov V. A., Shulitski B. G., Prudnikava A. L., Shaman Y. P., Basaev A. S. *Quantum Electronics and Optoelectronics*. 2010, vol. 13, no. 2, pp. 137–141.
6. Gonzalez J., Guinea F. and Herrero J. *Phys. Rev. B*. 2009, vol. 79, p. 165434.
7. Hanson G. W. *Journ. of Applied Physics*. 2008, vol. 103, p. 064302.
8. Golovanov O. A. *Radiotekhnika i elektronika* [Radio engineering and electronics]. 2006, vol. 51, no. 12, pp. 1423–1430.
9. Makeeva G. S., Golovanov O. A. *Radiotekhnika i elektronika* [Radio engineering and electronics]. 2009, vol. 54, no. 12, pp. 1455–1459.

Макеева Галина Степановна

доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра радиотехники
и радиоэлектронных систем, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: radiotech@pnzgu.ru

Makeeva Galina Stepanovna

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department of radio
engineering and radio electronic systems,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Голованов Олег Александрович

доктор физико-математических
наук, профессор, кафедра
общепрофессиональных дисциплин,
Пензенский филиал Военной
академии материально-технического
обеспечения (Россия, г. Пенза-5)

E-mail: golovanovol@mail.ru

Golovanov Oleg Aleksandrovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of general professional disciplines, Penza
branch of the Military Academy
of Maintenance Supplies (Penza-5, Russia)

УДК 535.32

Макеева, Г. С.

Электродинамический расчет комплексного коэффициента распространения электромагнитной волны в волноведущей структуре углеродная нанотрубка – графен в терагерцовом и инфракрасном диапазонах / Г. С. Макеева, О. А. Голованов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 140–155.

(Ti,Al)-КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ ПРЕССОВАНИЕМ С ПОСЛЕДУЮЩИМ СПЕКАНИЕМ НА ВОЗДУХЕ. СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

Аннотация.

Актуальность и цели. Титан-алюминиевые композиты широко применяются при создании материалов с высокими прочностью, жаро- и коррозионной стойкостями, температурой плавления и т.д. Одним из способов создания композиционных материалов являются методы порошковой металлургии. Несмотря на большой объем литературных данных, посвященных исследованию (Ti, Al)-материалов, остаются вопросы по влиянию параметров прессования и спекания на конечные свойства. Целью данной работы являлось исследование структуры и свойств (плотности, твердости, температуропроводности) (Ti,Al)-материалов, полученных холодным прессованием с последующим твердофазным спеканием на воздухе.

Материалы и методы. В качестве исходных материалов использовали порошки титана (марки ПТМ-1) и алюминия (марки ПА-4). Содержание алюминия в композитах изменялось от 9 до 64 ат.%. Формование порошков проводили при давлении 720 МПа в течение 30 мин при комнатной температуре. Твердофазное спекание осуществляли на воздухе в течение двух часов при температуре 600 °С. Исследование (Ti,Al)-материалов проводили методами: оптическая и электронная микроскопия, метод лазерной вспышки, рентгеновская дифрактометрия, гидростатическое взвешивание, измерение твердости по Бриннелю.

Результаты. Исследована зависимость микроструктуры, фазового состава, твердости, плотности и температуропроводности от содержания алюминия в композиционном материале. Вследствие различия во взаимной растворимости титана и алюминия возможно проявление эффекта Киркендалла. Описаны возможные механизмы формирования фазового состава композитов.

Выводы. (Ti,Al)-композиционный материал содержит три кристаллографические фазы: α-титана, алюминия и интерметаллоида TiAl₃ (в виде пластинчатых кристаллитов), который образуется при диффузии алюминия в кристаллическую решетку титана с выделением тепла. Различия в положении дифракционных линий титана и алюминия, относительно соответствующих для порошковых материалов, связаны с возникновением макронапряжений при формовании отжигом и рекристаллизационными процессами при твердофазном спекании. Низкие значения коэффициента температуропроводности связаны с наличием пор и межфазных границ, которые приводят к диссипации теплового потока. Значения твердости (по Бриннелю) и плотности монотонно убывают, а коэффициент температуропроводности растет при увеличении содержания алюминия в композиционном материале.

Ключевые слова: композиционный материал, прессование, спекание, твердость, фазовый состав, структура, температуропроводность.

N. A. Pan'kin, V. P. Mishkin, M. A. Okin, A. F. Sigachev

(Ti,Al)-COMPOSITE MATERIALS, OBTAINED BY PRESSING WITH FURTHER SINTERING IN THE OPEN AIR. STRUCTURE AND PROPERTIES

Abstract.

Background. (Ti, Al)-composites are widely used at manufacturing of materials with high strength, thermal and corrosion resistance, melting temperature etc. The methods of composite material manufacturing include the methods of powder metallurgy. Despite a large number of literary data, devoted to the research of (Ti, Al)-materials, there still remain some questions on the influence of pressing and sintering parameters on end-use properties. The aim of the work was to research the structure and properties (density, hardness, thermal diffusivity) of (Ti, Al)-materials, obtained by cold pressing with further solid-phase sintering in the open air.

Materials and methods. The powders of titanium (PTM-1 brand) and aluminum (PA-4 brand) were taken as the initial materials. The content of aluminum in composites was changing from 9 to 64%. Powder molding was carried out at 720 megapascals during 30 minutes at room temperature. Solid-phase sintering was carried out in the open air during 2 hours at 600 °C. The research of (Ti,Al)-materials was conducted by the following methods: optical and electronic microscopy, the method of laser flash, x-ray diffractometry, hydrostatic weighing, measurement of the Brinell hardness.

Results. The authors researched the dependence of the microstructure, phase composition, hardness, density and thermal diffusivity on the content of aluminum in the composite material. Due to the difference in mutual solubility of titanium and aluminum there may occur the Kirkendall effect. The researchers also described the possible mechanisms of composite's phase compound formation.

Conclusions. The (Ti,Al)-composite material contains three crystallographic phases: α -titanium, aluminum and TiAl_3 intermetalloid (in the form of a plate crystallite), that is formed at the diffusion of aluminum into a crystal lattice of titanium with heat release. Differences in positions of diffraction lines of titanium and aluminum, relative to the corresponding ones for powder materials, are associated with the occurrence of macrostresses at molding through annealing and recrystallization processes in the process of solid-phase sintering. Low values of the thermal diffusivity coefficient are associated with the presence of pores and interphase boundaries that lead to dissipation of a heat flow. The values of hardness (Brinell) and density monotonically fade away, and the coefficient of thermal diffusivity increases as the content of aluminum in the composite material grows.

Key words: composite material, pressing, sintering, hardness, phase composition, structure, thermal diffusivity.

Введение

Использование композиционных материалов позволяет получать изделия, которые по своим физико-механическим и физико-химическим свойствам могут превосходить соответствующие параметры исходных компонентов. Одним из распространенных способов получения композитов являются методы порошковой металлургии – формование (холодное или горячее) и спекание (твдофазное или жидкофазное) [1].

Целью настоящей работы являлось исследование структуры и свойств (плотности, твердости, температуропроводности) (Ti,Al)-материалов, полученных холодным прессованием с последующим твердофазным спеканием на воздухе. Выбор данного сочетания химических элементов обусловлен их широким применением при создании материалов, обладающих высокой прочностью в сочетании с низкой плотностью, высокой жаро- и коррозионной стойкостью, высокой температурой плавления и т.д. [2–5], востребованных

в аэрокосмической, автомобильной, химической и нефтехимической промышленности. В последнее время титан-алюминиевые сплавы и композиты, наряду с нитридом титана [6, 7], широко используются при создании защитных и износостойких покрытий на поверхности твердых тел [8–10].

1. Методика эксперимента

В качестве исходных материалов для получения (Ti, Al)-композитов использовали порошки титана (марки ПТМ-1) и алюминия (марки ПА-4). Содержание алюминия в композитах изменялось в интервале от 9 до 64 ат. %.

Формование порошков в образцы цилиндрической формы проводили при комнатной температуре на установке Shimadzu AG-X100kN. Рабочая нагрузка составляла 90 кН (720 МПа) и удерживалась в течение 30 мин. Скорость движения верхнего пуансона – 0,6 мм/мин. Далее проводили твердофазное спекание на воздухе в течение двух часов при температуре 600 °С.

Исследования микроструктуры проводили с помощью металлографического микроскопа OLYMPUS GX-71. Исследования структуры поверхности излома и определение элементного состава проводились на растровом электронном микроскопе Quanta 200 i 3D FEI. РЭМ-изображения были получены при ускоряющем напряжении 30 кВ в режиме высокого вакуума ($\sim 10^{-3}$ Па). Элементный состав определяли методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

Фазовый состав исследовали на рентгеновском дифрактометре ДРОН-6 с фокусировкой по Бреггу – Брентано в медном фильтрованном излучении. Коэффициент температуропроводности при комнатной температуре определяли методом лазерной вспышки на приборе LFA-427. Плотность композитов определяли методом гидростатического взвешивания в дистиллированной воде при комнатной температуре.

2. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены типичная диаграмма прессования (Ti,Al)-композитов и ее производная. Можно выделить несколько участков, соответствующих различным стадиям процесса формования порошкового материала [1]:

- 1) сближение и уплотнение частиц материала за счет их смещения относительно друг друга и заполнения пустот (0–300 с);
- 2) интенсивное уплотнение материала за счет заполнения пустот и различных типов деформации (упругая и пластическая, 300–550 с);
- 3) объемное сжатие частиц порошка без увеличения контактных поверхностей (свыше 550 с).

Анализ поверхности шлифов и изломов (Ti, Al)-композитов (рис. 2) указывает на то, что исследуемый материал содержит некоторое количество пор. При этом увеличение содержания алюминия приводит к снижению пористости композита. Это обусловлено тем, что алюминий вследствие большей пластичности при прессовании заполняет пространство между частично деформированными зернами титана. В электронно-микроскопических исследованиях, кроме того (см. левую верхнюю вставку на рис. 2, а, б), обнаружено

присутствие блочных кристаллитов. При увеличении концентрации алюминия происходит их замуровывание. Содержание алюминия влияет на плотность (рис. 3) и твердость по Бриннелю (рис. 4) прессованных образцов. При увеличении концентрации алюминия наблюдается снижение значений твердости от 163–170 до 65–85 HB, а также уменьшение плотности (Ti, Al)-композита.

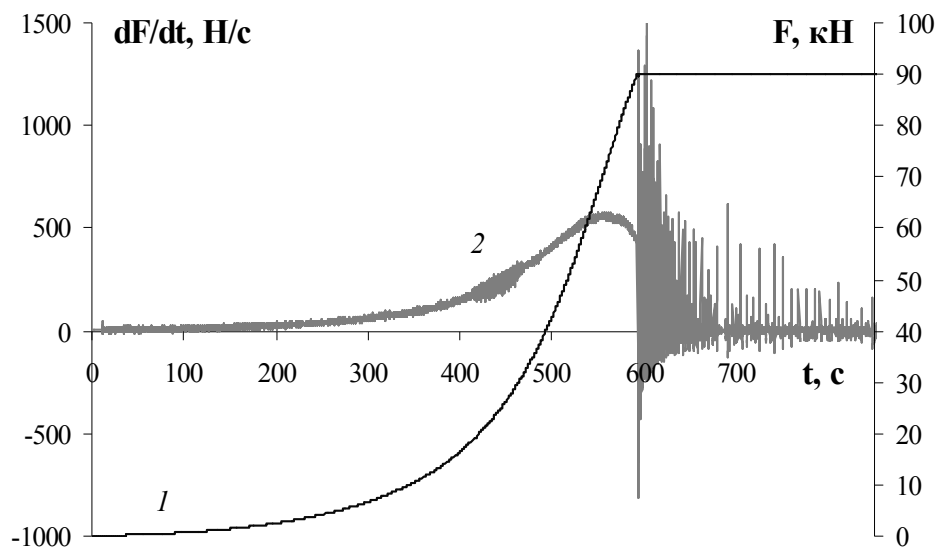


Рис. 1. Диаграмма прессования (*1* – шкала значений справа) (Ti,Al)-композита и ее производная (*2* – шкала значений слева) при содержании алюминия 64 ат.%. Участок после 600 с соответствует удержанию под рабочей нагрузкой

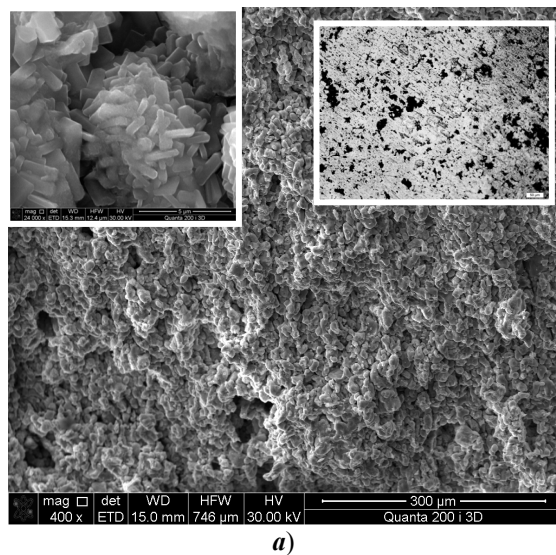
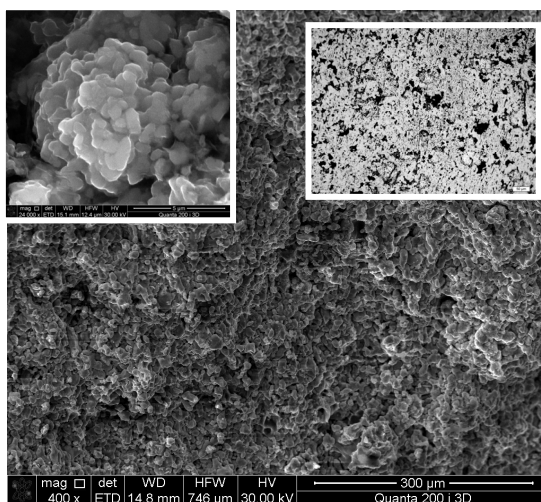
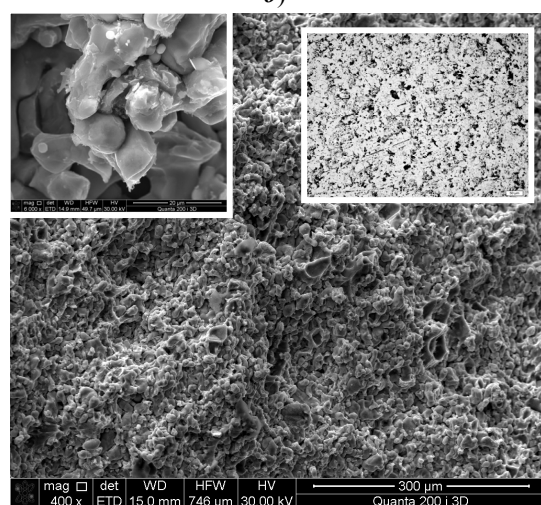


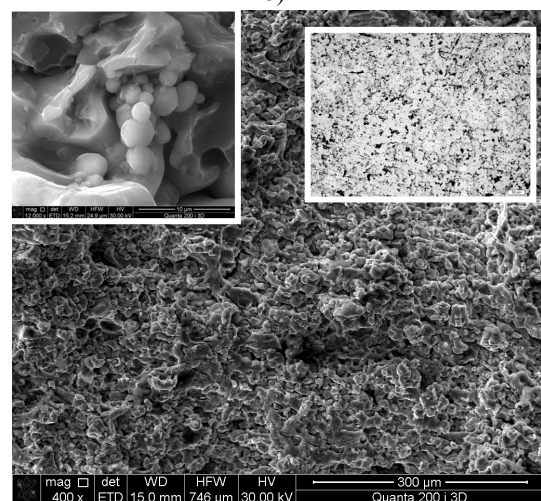
Рис. 2. Структура (Ti,Al)-композитов: *a* – 16 ат.% Al; *б* – 24 ат.% Al, *в* – 49 ат.% Al; *г* – 64 ат.% Al. Вкладка вверху слева – увеличенное изображение некоторых объектов композиционного материала; вкладка вверху справа – микроструктура поверхности шлифа



б)



в)



г)

Рис. 2. Окончание

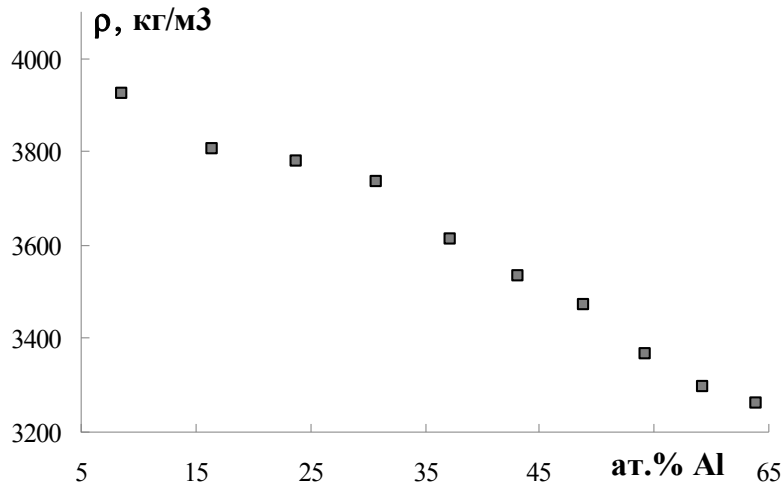
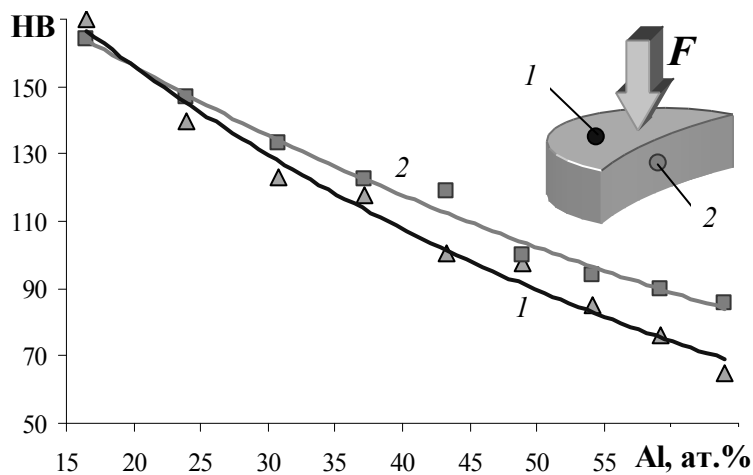


Рис. 3. Зависимость плотности от концентрации алюминия в (Ti,Al)-композите

Рис. 4. Зависимость твердости по Бринеллю (Ti, Al)-композита от содержания алюминия (F – направление приложения нагрузки; точки 1, 2 – места измерения твердости)

В направлении, перпендикулярном линии приложения нагрузки (позиция 2 на рис. 4), твердость несколько выше соответствующих значений вдоль направления прессования (позиция 1 на рис. 4). Разница становится более заметной при увеличении содержания алюминия в композиционном материале. Также отмечается некоторое упрочнение композита относительно отожженных массивных титана (130–160 HB) и алюминия (20–40 HB) после процесса формирования и последующего твердофазного спекания.

Результаты измерения коэффициента температуропроводности при комнатной температуре представлены на рис. 5. Экспериментальные данные о коэффициенте температуропроводности значительно меньше теоретических расчетов при учете парциальных вкладов титана и алюминия. Это связа-

но с наличием пор и межфазных границ, что приводит к диссипации теплового потока [11].

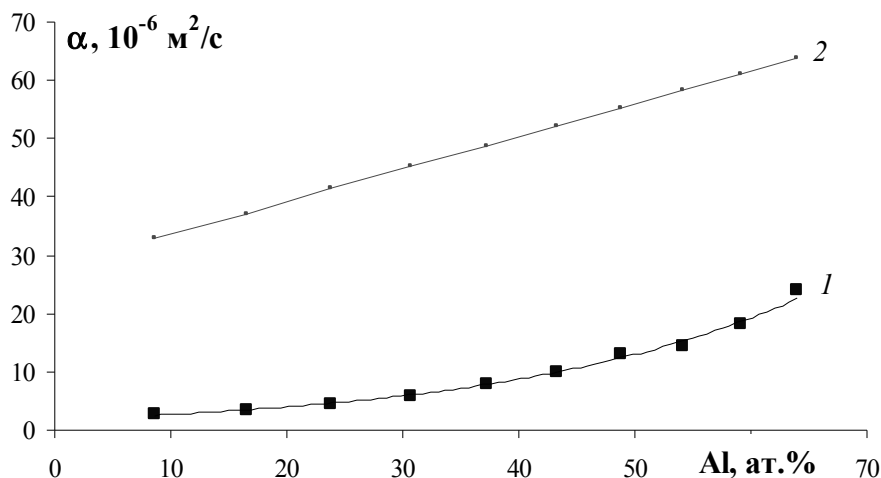


Рис. 5. Зависимость коэффициента температуропроводности α (Ti, Al)-композитов от концентрации алюминия (1 – данные эксперимента; 2 – теоретические результаты)

Рентгенографические исследования указывают на присутствие в (Ti,Al)-композите трех фаз (рис. 6): α -титана (пространственная группа – $P63/mmc$), алюминия ($Fm3m$) и интерметаллического соединения $TiAl_3$ ($I4/mmm$). Зарождение $TiAl_3$ происходит вследствие диффузии алюминия в кристаллическую решетку титана [4, 5, 8, 10, 12]. При этом можно выделить три этапа [4, 5, 8, 10, 12]: «начальная стадия» – малоактивный рост интерметаллоида на границе раздела титана и алюминия; «стадия роста» – интенсивное образование дисперсных интерметаллидных частиц $TiAl_3$ и рост (Ti,Al)-интерметаллидного слоя; «стадия насыщения» – увеличение объемного содержания фазы $TiAl_3$ в интерметаллидном слое. В области контакта Ti-Al с меньшим содержанием алюминия возможно образование фазы $TiAl$, находящейся в равновесии с $TiAl_3$, а на заключительной стадии – Ti_3Al [4, 5, 8]. Присутствие линий $TiAl$ и Ti_3Al не обнаружено, что, возможно, связано с их низким содержанием, не превышающим пределов обнаружения рентгеновского метода.

В исследуемых материалах возможен локальный разогрев, обусловленный протеканием экзотермической реакции $3Al + Ti \rightarrow TiAl_3$ с образованием блочных интерметаллоидов $TiAl_3$ (см. рис. 2). В работе [12] показано, что при сплавлении титана и алюминия может наблюдаться повышение температуры прессовок (до 400 °C) относительно температуры печи. Данный эффект определяется содержанием титана (более 10 ат.%) и температурой спекания (более 770 °C). Вышеуказанная экзотермическая реакция способствует интенсификации диффузионных процессов. В системе титан–алюминий взаимная растворимость компонентов сильно различается. Так, алюминий достаточно хорошо растворяется как в жидком, так и в твердом титане, но растворимость титана в алюминии очень невелика. Данный факт способствует проявлению для (Ti,Al)-систем эффекта Киркендалла [13, 14]. На его возможность указано в работе [14] при исследовании границы контакта $TiAl_3/Ti$.

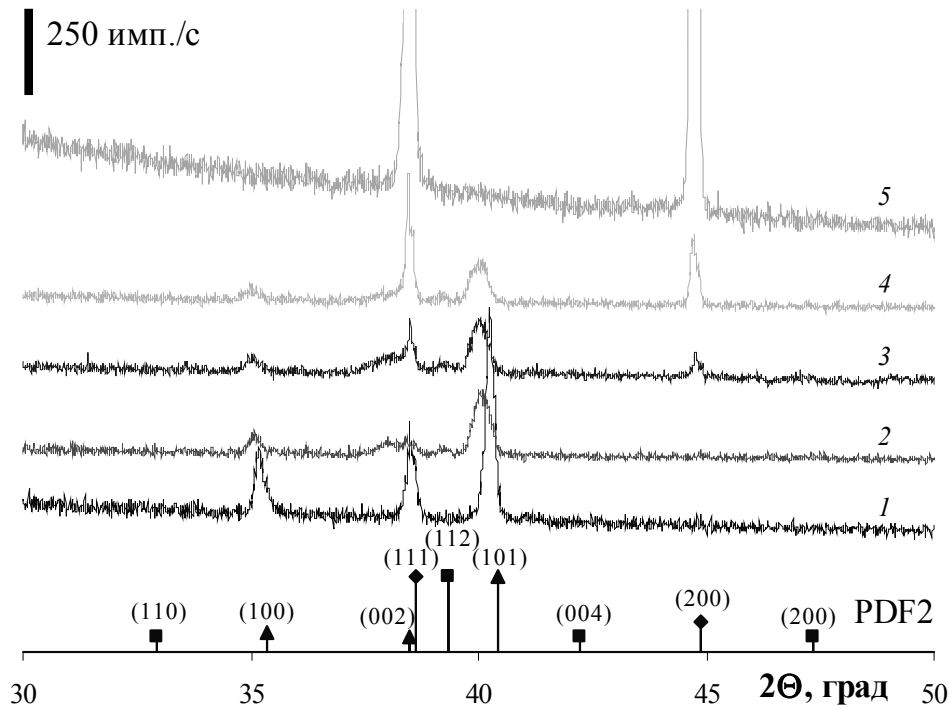


Рис. 6. Участки рентгеновской дифракционной картины от порошков и (Ti, Al)-композитов: 1 – ПТМ-1; 2 – 5 мас.%; 3 – 25 мас.%; 4 – 50 мас.%; 5 – ПА-4 (внизу данные из базы PDF2; ▲ – α -Ti; ◆ – Al; ■ – TiAl_3)

В композитах обнаружено присутствие следующих химических элементов (рис. 7): титана, алюминия (основные элементы), кремния, кальция, углерода (входят в состав порошков), железа (основной элемент материала пресс-формы), кислорода и азота (элементы атмосферы). Так как титан и алюминий относятся к металлам с высоким сродством к кислороду, то на поверхности частиц используемых порошков, а также готового композиционного изделия, неизменно присутствуют оксиды. Они приводят к замедлению диффузии атомов титана и алюминия и таким образом росту интерметаллидной фазы TiAl_3 . Присутствие других химических элементов также способствует уменьшению скорости диффузии алюминия в титан.

Кроме того, рентгенографические исследования выявили смещение линий α -титана и алюминия в (Ti, Al)-композите относительно аналогичных рефлексов для порошковых материалов (ПТМ-1 и ПА-4). Это указывает на наличие макронапряжений в зернах титана и алюминия. При этом изменение положения дифракционных линий алюминия меньше, чем для титана, что является следствием отжига и рекристаллизационных процессов, происходящих в алюминии при твердофазном спекании.

Выводы

1. Обнаружено присутствие трех фаз: α -титана, алюминия и интерметаллоида TiAl_3 (в виде пластинчатых кристаллитов), который образуется при диффузии алюминия в кристаллическую решетку титана с выделением тепла.

Из-за различий во взаимной растворимости титана и алюминия возможно проявление эффекта Киркендалла.

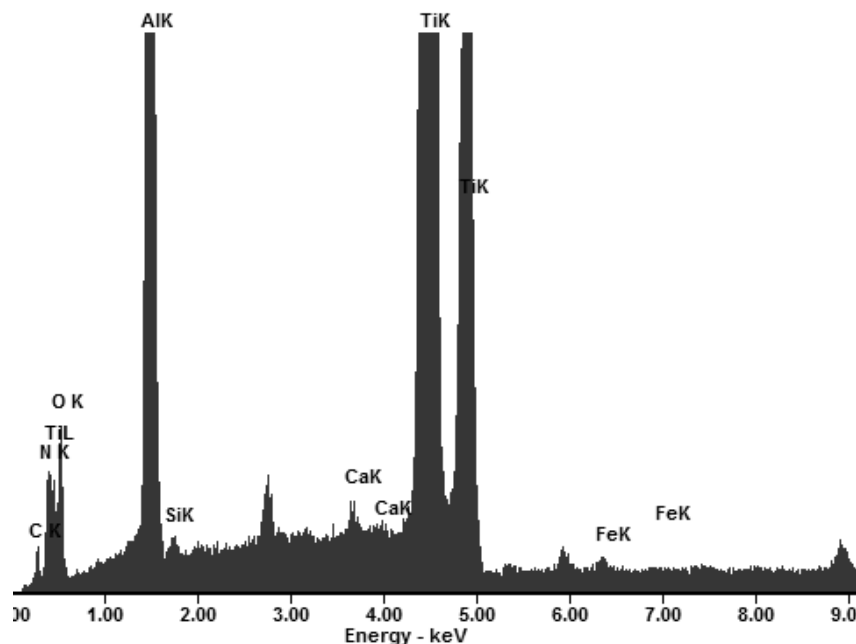


Рис. 7. Энергодисперсионный спектр (Ti,Al)-композита

2. Различия в положении дифракционных линий титана и алюминия относительно соответствующих для порошковых материалов связаны с возникновением макронапряжений при формовании, отжиге и рекристаллизационными процессами при твердофазном спекании.

3. Низкие значения коэффициента температуропроводности связаны с наличием пор и межфазных границ, которые приводят к диссипации теплового потока. Значения твердости (по Бреннелю), плотности и температуропроводности определяются содержанием алюминия в композиционном материале.

Список литературы

1. **Либенсон, Г. А.** Процессы порошковой металлургии. Т. 2. Формирование и спекание / Г. А. Либенсон, В. Ю. Лопатин, Г. В. Комарницкий. – М. : МИСИС, 2002. – 503 с.
2. **Фишгойт, Л. А.** Коррозионно-электрохимические свойства интерметаллидов системы титан-азот / Л. А. Фишгойт, Л. Л. Мешков // Вестник Московского университета. Сер. 2. Химия. – 1999. – Т. 40, № 6. – С. 369–372.
3. **Поварова, К. Б.** К вопросу о формировании оксидных пленок на поверхности γ -TiAl на воздухе и при воздействии кислот / К. Б. Поварова, И. Д. Марчукова, Г. С. Браславская // Металлы. – 1994. – № 5. – С. 148–151.
4. **Пачин, С. А.** Формирование и исследование электроискровых покрытий на основе алюминидов титана / С. А. Пачин, А. А. Бурков // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 6. – С. 16–24.
5. **Максимова, С. В.** Формирование паяных соединений алюминидов титана / С. В. Максимова // Автоматическая сварка. – 2009. – № 3. – С. 7–13.

6. **Панькин, Н. А.** Влияние местоположения образца в межэлектродном пространстве на структуру и свойства TiN-покрытий / Н. А. Панькин, Н. А. Смоланов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2006. – № 10. – С. 54–57.
7. **Смоланов, Н. А.** Остаточные напряжения и микротвердость конденсата, полученного вблизи титанового катода при нанесении TiN-покрытий методом конденсации с ионной бомбардировкой / Н. А. Панькин, Н. А. Смоланов // Прикладная физика. – 2009. – № 3. – С. 99–101.
8. **Прибытков, Г. А.** Структурные превращения на поверхности катодов Al-Ti под воздействием вакуумной дуги / Г. А. Прибытков, И. А. Андреева, В. В. Коржова // Физика и химия обработки материалов. – 2011. – № 1. – С. 18–25.
9. Получение многокомпонентных СВС-прессованных катодов на основе тугоплавких соединений титана для нанесения вакуумно-дуговых покрытий / А. П. Амосов, Е. И. Латухин, А. Ф. Федотов, А. А. Ермошкин, С. И. Алтухов // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. – 2011. – № 1. – С. 46–50.
10. **Трыков, Ю. П.** Особенности деформирования и кинетика диффузии в сваренном взрывом титано-алюминиевом композите / Ю. П. Трыков, Л. М. Гуревич, А. Н. Жоров, В. Д. Рогозин // Физика и химия обработки материалов. – 2004. – № 3. – С. 50–54.
11. **Дульнев, Г. Н.** Теплопроводность смесей и композиционных материалов / Г. Н. Дульнев, Ю. П. Заричняк. – Л. : Энергия, 1974. – 264 с.
12. **Сорокова, С. Н.** Связанная модель спекания порошков системы Ti-TiAl₃ / С. Н. Сорокова, А. Г. Князева // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т. 314, № 2. – С. 96–101.
13. **Гегузин, Я. Е.** Диффузионная зона / Я. Е. Гегузин. – М. : Наука, 1979. – 344 с.
14. **Лoo, F. J. J.** Diffusion in the titanium-aluminium system – interdiffusion in the composition range between 25 and 100 at.% Ti. Part II / F. J. J. Loo, G. D. Rieck // Acta Metall. – 1973. – Vol. 21. – P. 73–84.

References

1. Libenson G. A., Lopatin V. Yu., Komarnitskiy G. V. *Protsessy poroshkovoy metallurgii. T. 2. Formirovanie i spekanie* [Powder metallurgy processes. Vol. 2. Formation and sintering]. Moscow: MISIS, 2002, 503 p.
2. Fishgoyt L. A., Meshkov L. L. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Ser. 2. Khimiya* [Bulletin of Moscow University. Series 2. Chemistry]. 1999, vol. 40, no. 6, pp. 369–372.
3. Povarova K. B., Marchukova I. D., Braslavskaya G. S. *K voprosu o formirovanii oksidnykh plenok na poverkhnosti γ-TiAl na vozdukh i pri vozdeystvii kislot* [On the issue of formation of oxide films on the γ-TiAl surface in the air and effected by acids]. Metall. 1994, no. 5, pp. 148–151.
4. Pachin S. A., Burkov A. A. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neytronnye issledovaniya* [Surface. X-ray, synchrotron and neutron research]. 2013, no. 6, pp. 16–24.
5. Maksimova S. V. *Avtomaticheskaya svarka* [Automatic welding]. 2009, no. 3, pp. 7–13.
6. Pan'kin N. A., Smolanov N. A. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neytronnye issledovaniya* [Surface. X-ray, synchrotron and neutron research]. 2006, no. 10, pp. 54–57.
7. Smolanov N. A., Pan'kin N. A. *Prikladnaya fizika* [Applied physics]. 2009, no. 3, pp. 99–101.
8. Pribytkov G. A., Andreeva I. A., Korzhova V. V. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and chemistry of material processing]. 2011, no. 1, pp. 18–25.

9. Amosov A. P., Latukhin E. I., Fedotov A. F., Ermoshkin A. A., Altukhov S. I. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya* [University proceedings. Powder metallurgy and functional coating]. 2011, no. 1, pp. 46–50.
 10. Trykov Yu. P., Gurevich L. M., Zhorov A. N., Rogozin V. D. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and chemistry of material processing]. 2004, no. 3, pp. 50–54.
 11. Dul'nev G. N., Zarichnyak Yu. P. *Teploprovodnost' smesey i kompozitsionnykh materialov* [Heat conductivity of mixtures and composite materials]. Leningrad: Energiya, 1974, 264 p.
 12. Sorokova S. N., Knyazeva A. G. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta* [Proceedings of Tomsk Polytechnic University]. 2009, vol. 314, no. 2, pp. 96–101.
 13. Geguzin Ya. E. *Diffuzionnaya zona* [Diffusion area]. Moscow: Nauka, 1979, 344 p.
 14. Loo F. J. J., Rieck G. D. *Acta Metall.* 1973, vol. 21, pp. 73–84.
-

Панькин Николай Александрович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра физики твердого тела,
Мордовский государственный
университет имени Н. П. Огарева
(Россия, г. Саранск,
ул. Большевикская, 68)

E-mail: panjkinna@yandex.ru

Pan'kin Nikolay Aleksandrovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of solid state physics,
Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Мишкин Владимир Петрович

младший научный сотрудник, кафедра
общей физики, Мордовский
государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия,
г. Саранск, ул. Большевикская, 68)

E-mail: vladimirm1978@mail.ru

Mishkin Vladimir Petrovich

Junior researcher, sub-department
of general physics, Ogarev Mordovia
State University (68 Bolshevistskaya
street, Saransk, Russia)

Окин Максим Александрович

кандидат технических наук, доцент,
кафедра физики твердого тела,
Мордовский государственный
университет имени Н. П. Огарева
(Россия, г. Саранск,
ул. Большевикская, 68)

E-mail: okinma@mail.ru

Okin Maksim Aleksandrovich

Candidate of engineering sciences,
associate professor, sub-department
of solid state physics, Ogarev Mordovia
State University (68 Bolshevistskaya
street, Saransk, Russia)

Сигачев Александр Федорович

ведущий инженер, кафедра физики
твердого тела, Мордовский
государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия,
г. Саранск, ул. Большевикская, 68)

E-mail: siaf@mail.ru

Sigachev Aleksandr Fedorovich

Leading engineer, sub-department of solid
state physics, Ogarev Mordovia State
University (68 Bolshevistskaya street,
Saransk, Russia)

УДК 621.762.4.045, 621.762.52

Панькин, Н. А.

(Ti,Al)-композиционные материалы, полученные прессованием с последующим спеканием на воздухе. Структура и свойства / Н. А. Панькин, В. П. Мишкин, М. А. Окин, А. Ф. Сигачев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 156–167.

ДИМЕР В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Аннотация.

Актуальность и цели. Точно решаемые модели имеют важное значение в квантовой физике, поскольку большинство моделей в квантовой физике не являются точно решаемыми. Используя точные решения, можно провести детальный анализ поведения рассматриваемой модели. Кроме того, используя точные решения в качестве эталона, можно сравнить их с решениями, полученными приближенным методом. Димер в модели Хаббарда относится к точно решаемой модели. Целью настоящей работы является сравнение точных решений, полученных для димера в модели Хаббарда, с решениями, полученными в приближении статических флуктуаций.

Материалы и методы. В работе при получении точных решений и решений в приближении статических флуктуаций использовался метод уравнений движения для операторов рождения, метод функций Грина и спектральная теорема. Знание функций Грина позволяет определить энергетический спектр квантовой системы, поскольку полюса функций Грина соответствуют энергетическим состояниям квантовой системы. Спектральная теорема позволяет, зная функции Грина, вычислить корреляционные функции квантовой системы.

Результаты. В результате использования методов квантовой теории поля были получены как точные, так и в приближении статических флуктуаций антикоммутаторные функции Грина для димера. С использованием антикоммутаторных функций Грина были получены корреляционные функции и энергетический спектр для димера.

Выводы. Полученные в работе результаты показывают, что в димере, как и в более сложных системах, энергетический спектр при сильном кулоновском отталкивании электронов расщепляется на две подзоны Хаббарда, а также происходит переход «металл – диэлектрик». Кроме того, в данной работе показано, что некоторые энергетические состояния димера, полученные в приближении статических флуктуаций, совпадают с энергетическими состояниями димера, полученными из точного решения.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, димер, наносистемы.

А. В. Silant'ev

DIMER IN THE HUBBARD MODEL

Abstract.

Background. Exactly solvable models are of great importance in quantum physics, as most models in quantum physics are not exactly solvable. The detailed analysis of exactly solvable model's behavior can be made by exact solutions. The solutions of exactly solvable models, obtained by the approximation method, can be compared with exact solutions, used as standards. A dimer in the Hubbard model is an exactly solvable model. The purpose of this paper is to compare exact solutions obtained for a dimer in the Hubbard model, with solutions obtained for a dimer by approximation of static fluctuations.

Materials and methods. In this study, to construct exact solutions and solutions in approximation of static fluctuations the authors used the method of motion equa-

tions for creation operators, the method of Green's functions and the spectral theorem. The energy spectrum of a quantum system can be calculated by Green's functions, as the poles of Green's functions correspond to the energy spectrum of a quantum system. Knowing the Green's functions, the spectral theorem allows to calculate the correlation functions of the quantum system.

Results. Resulting from the usage of the methods of the quantum field theory there were obtained anticommutator Green's functions for a dimer, that were both exact and in approximation of static fluctuations. Using the anticommutator Green's functions the authors obtained correlation functions and the energy spectrum for a dimer.

Conclusions. This work demonstrates that the energy spectrum of a dimer is split by a strong Coulomb repulsion of electrons on two Hubbard subbands and the "metal-insulator" transition occurs in a dimer. This work also demonstrates that several energy states of a dimer, obtained by the approximation of static fluctuations, coincide with energy states of a dimer, obtained by an exact solution.

Key words: Hubbard model, Green's functions, energy spectrum, dimer, nanosystems.

В настоящее время изучению низкоразмерных сильно коррелируемых электронных систем и их структурных элементов посвящено большое число теоретических исследований. Для описания этих систем используется модель Хаббарда, которая была одновременно предложена Хаббардом [1], Гутцвиллером [2] и Канамори [3]. Отметим, что модель Хаббарда является частным случаем полярной модели Шубина – Вонсовского, которая была предложена в 1934 г. [4]. В полярной модели наряду с кулоновским взаимодействием электронов, находящихся на одном узле, учитывается также взаимодействие электронов, которые находятся на соседних узлах. В модели Хаббарда сильно коррелируемые электронные системы описываются гамильтонианом следующего вида:

$$H = \sum_{\sigma,i} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{\sigma,i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,i} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (1)$$

где $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ на узле i ; $n_{i\sigma}$ – оператор числа частиц со спином σ на узле i ; ϵ_i – энергия одноэлектронного атомного состояния на узле i ; t_{ij} – интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с узла i на узел j ; U_i – энергия кулоновского взаимодействия двух электронов с разными спинами, находящихся на i -м узле; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Примерами квазидвумерных сильно коррелируемых электронных систем могут служить органические сверхпроводники $k-(ET)_2X$ и $\theta-(ET)_2X$, проводящие слои которых состоят из димеров, которые образованы двумя молекулами ET [5]. Как показывают расчеты, для $k-(ET)_2Cu(SCN)_2$ энергия кулоновского отталкивания электронов, находящихся на одной молекуле ET , принимает следующее значение: $U = 3,9$ эВ [6], а интеграл переноса внутри димера $t = -0,244$ эВ [7]. Отметим, что интегралы переноса между димерами в $k-(ET)_2Cu(SCN)_2$ намного меньше $|t|$.

Отметим также, что димер в рамках модели Хаббарда используется в качестве модели двухатомных молекул. Например, в [8] димер используется для описания молекулы водорода, а в [9] – для описания как молекулы водорода, так и двухатомной гетерополярной молекулы LiH.

Цель данной работы состоит в том, чтобы получить для димера как точное решение, так и решение в приближении статических флуктуаций (ПСФ) [10–12]. Отметим, что в настоящее время имеется несколько подходов к вычислению функций Грина в ПСФ. Анализ этих подходов приведен в работе [13].

Функция Грина и корреляционные функции димера: точное решение

Из формулы (1) следует, что димер в рамках модели Хаббарда описывается следующим гамильтонианом:

$$H = \sum_{\sigma} \left[\varepsilon \cdot (n_{1\sigma} + n_{2\sigma}) + t \cdot (c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \frac{U}{2} (n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} + n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}}) \right]. \quad (2)$$

Для того чтобы вычислить функцию Грина, прежде всего найдем выражение для оператора $c_{f\sigma}^+(\tau)$, заданного в представлении Гейзенберга. Для этого запишем уравнение движения для этого оператора:

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^+ + t \cdot c_{j\sigma}^+ + U \cdot c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}, \quad (3)$$

где $\tau = it, j = 1, 2; f = 1, 2; j \neq f$.

Как видно из (3), для того чтобы найти оператор $c_{f\sigma}^+(\tau)$, необходимо еще получить уравнение движения для оператора $c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}$:

$$\frac{dc_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} + t \left(c_{f\sigma}^+ c_{j,\bar{\sigma}}^+ c_{f\bar{\sigma}} - c_{f\sigma}^+ c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{j,\bar{\sigma}} + c_{j,\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} \right), \quad (4)$$

где $j = 1, 2; f = 1, 2; j \neq f$.

Как видно из (4), данное дифференциальное уравнение содержит целый ряд новых операторов. Составляя уравнения движения для вновь появляющихся операторов, мы получим замкнутую систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^+ + t \cdot c_{j\sigma}^+ + U \cdot c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} + t \left(c_{f\sigma}^+ c_{j,\bar{\sigma}}^+ c_{f\bar{\sigma}} - c_{f\sigma}^+ c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{j,\bar{\sigma}} + c_{j,\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} \right),$$

$$\frac{dc_{f\sigma}^+ n_{j,\bar{\sigma}}}{d\tau} = \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^+ n_{j,\bar{\sigma}} + U c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} n_{j,\bar{\sigma}} + t \left(c_{f\sigma}^+ c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{j,\bar{\sigma}} - c_{f\sigma}^+ c_{j,\bar{\sigma}}^+ c_{f\bar{\sigma}} + c_{j,\sigma}^+ n_{j,\bar{\sigma}} \right),$$

$$\begin{aligned}
\frac{dc_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}} + Uc_{f\sigma}^{+n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}} + tc_{j,\sigma}^{+n_{f\sigma}}, \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}} + Uc_{f\sigma}^{+n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}}} + \\
&+ t \left(c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + c_{j,\sigma}^{+}n_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}} \right), \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{f\sigma}^{+n_{j,\sigma}n_{f\bar{\sigma}}} + \\
&+ t \left(c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + c_{j,\sigma}^{+}n_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}} \right), \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{f\sigma}^{+n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}} + t c_{j,\sigma}^{+n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}}, \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{f\sigma}^{+n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}}} + t c_{j,\sigma}^{+n_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}}, \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}} + \\
&+ t \left(c_{j,\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}} + c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}} \right) + Uc_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}, \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}} - Uc_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + \\
&+ t \left(c_{j,\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}} + c_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}} \right), \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U)c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + \\
&+ t \left(c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + c_{j,\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}n_{f\sigma}} \right), \\
\frac{dc_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + \\
&+ t \left(c_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} - c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}n_{j,\sigma}} + c_{j,\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}n_{f\sigma}} \right),
\end{aligned} \tag{5}$$

где $j = 1, 2; f = 1, 2; j \neq f$.

Система уравнений (5), содержащая 24 дифференциальных уравнения первого порядка, является замкнутой и имеет точное аналитическое решение. Поскольку решение является громоздким, то мы его здесь не приводим. Зная

решение системы уравнений (5), мы можем найти Фурье-образ антикоммутирующей функции Грина:

$$\langle\langle c_{2\sigma}^+ | c_{2\sigma} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^8 \frac{F_m}{E - E_m + ih}, \quad (6)$$

$$F_1 = (R - 4b) \left(-2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle + \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \right. \\ \left. + \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / (4R),$$

$$F_2 = \left(2 - 2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle - \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \right. \\ \left. - \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle - 3 \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / 4,$$

$$F_3 = (R + 4b) \left(2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle + \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \right. \\ \left. + \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / (4R),$$

$$F_4 = \left(2 + 2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle - \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \right. \\ \left. - \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle - 3 \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / 4,$$

$$F_5 = \left(-2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle - \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \right. \\ \left. - \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / 4,$$

$$F_6 = (R + 4b) \left(-2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle + \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \right. \\ \left. + \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / (4R),$$

$$F_7 = \left(2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle - \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \right. \\ \left. - \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / 4,$$

$$F_8 = (R - 4b) \left(2 \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle + \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle + \right. \\ \left. + \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle \right) / (4R),$$

$$E_1 = \varepsilon + (U - R)/2 - b, \quad E_2 = \varepsilon - b, \quad E_3 = \varepsilon + (U - R)/2 + b, \quad E_4 = \varepsilon + b,$$

$$E_5 = \varepsilon + U - b, \quad E_6 = \varepsilon + (U + R)/2 - b, \quad E_7 = \varepsilon + U + b, \\ E_8 = \varepsilon + (U + R)/2 + b, \quad R = \sqrt{U^2 + 16b^2}, \quad (7)$$

где F_m – спектральная плотность энергетического состояния E_m , $b = -t$.

Зная решение системы уравнений (5), мы можем также найти корреляционные функции:

$$\begin{aligned} \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} \left(3\varphi(e + U - b) + \varphi((4e + 3U - R)/2) + \varphi(3e + 2U - b) + \right. \\ &\quad \left. + \varphi(3e + 2U + b) + 3\varphi(e + U + b) + \varphi(2e + U) + \varphi(2e + 2U) + \right. \\ &\quad \left. + \varphi((4e + 3U + R)/2) + \varphi(2(e + U)) + 2 \right), \\ \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \left(4b\varphi((4e + 3U + R)/2) - 4b\varphi((4e + 3U - R)/2) + \right. \\ &\quad \left. + R\varphi(3e + 2U + b) + R\varphi(e + U + b) - R\varphi(e + U - b) - R\varphi(3e + 2U - b) \right), \\ \langle c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle &= -\frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \left(R\varphi(e + U - b) - R\varphi(e + U + b) - \right. \\ &\quad \left. - 2b\varphi((4e + 3U + R)/2) + 2b\varphi((4e + 3U - R)/2) \right), \\ \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \left((R - U)\varphi((4e + 3U - R)/2) + \right. \\ &\quad \left. + (R + U)\varphi((4e + 3U + R)/2) - 2R\varphi(2e + 2U) \right), \\ \langle c_{2\sigma}^+ c_{2\bar{\sigma}}^+ c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} \left(-2R\varphi(2e + U) + \right. \\ &\quad \left. + (U + R)\varphi((4e + 3U - R)/2) + (-U + R)\varphi((4e + 3U + R)/2) \right), \\ \langle n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \left(2R\varphi(2e + U) + 4R(\varphi(e + U + b) + \varphi(e + U - b) + 1) + \right. \\ &\quad \left. + (R + U)\varphi((4e + 3U - R)/2) + (R - U)\varphi((4e + 3U + R)/2) \right), \\ \langle n_{2\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle &= \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \left(2R\varphi(2e + 2U) + 4R(\varphi(e + U + b) + \varphi(e + U - b) + 1) + \right. \\ &\quad \left. + (R - U)\varphi((4e + 3U - R)/2) + (R + U)\varphi((4e + 3U + R)/2) \right), \\ \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle &= \langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle (1 + \varphi(e + U + b))(1 + \varphi(e + U - b)), \\ \langle c_{1\bar{\sigma}}^+ c_{2\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle &= -\frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \left(2b\varphi((4e + 3U - R)/2) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -2b\varphi((4e+3U+R)/2)+R\varphi(e+U-b)-R\varphi(e+U+b)), \\
 & \langle c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} (-\varphi(e+U-b) + \varphi(e+U+b)), \\
 & \langle n_{1\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} (2 + \varphi(e+U-b) + \varphi(e+U+b)), \\
 & \langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = 1 / (2\varphi(2(e+U)) + \varphi((4e+3U+R)/2) + \varphi((4e+3U-R)/2) + \\
 & \quad + 2\varphi(e+U+b) + 2\varphi(3e+2U-b) + \\
 & \quad + 2\varphi(3e+2U+b) + \varphi(2e+U) + \varphi(2e+2U) + 2\varphi(e+U-b) + 1), \\
 & \varphi(E) = \exp(E/kT), \quad e = \varepsilon - \mu, \tag{8}
 \end{aligned}$$

здесь μ – химический потенциал; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Функция Грина димера в приближении статических флуктуаций

Для того чтобы найти функцию Грина димера в ПСФ [11], найдем прежде всего решение уравнения (3) в ПСФ. В работе [11] показано, что в ПСФ оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ является интегралом движения. Умножая (3) на оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ и учитывая, что $(n_{f\bar{\sigma}})^2 = n_{f\bar{\sigma}}$, получим

$$\frac{d(c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} + t \cdot c_{i\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}, \quad i \neq f. \tag{9}$$

Для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, запишем уравнения движения для операторов $c_{1\sigma}^+, c_{2\sigma}^+, c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, c_{1\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}, c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}, c_{2\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}}, c_{2\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}}$:

$$\begin{aligned}
 \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{1\sigma}^+ + t \cdot c_{2\sigma}^+ + U \cdot c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, \\
 \frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{2\sigma}^+ + t \cdot c_{1\sigma}^+ + U \cdot c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}, \\
 \frac{dc_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) \cdot c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} + t \cdot c_{2\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}}, \\
 \frac{dc_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) \cdot c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + t \cdot c_{1\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}, \\
 \frac{dc_{1\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{1\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + t \cdot c_{2\sigma}^+ n_{2\bar{\sigma}} + U \cdot c_{1\sigma}^+ n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dc_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}}{d\tau} &= \varepsilon \cdot c_{2\sigma}^{+}n_{1,\bar{\sigma}} + t \cdot c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}} + U \cdot c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2\bar{\sigma}}, \\
\frac{dc_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}} + t \cdot c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}, \\
\frac{dc_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon + U) c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}} + t \cdot c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}. \quad (10)
\end{aligned}$$

Решив систему уравнений (10), получим для операторов $c_{1\sigma}^{+}$, $c_{2\sigma}^{+}$ следующие выражения:

$$\begin{aligned}
c_{j\sigma}^{+}(\tau) &= \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^{+}(0) - c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) - c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) + c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) + c_{f\sigma}^{+}(0) - \right. \\
&\quad \left. - c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) - c_{f\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) + c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right] \cdot \exp(E_1\tau) + \frac{1}{2} \left(c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) - \right. \\
&\quad \left. - c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right) \cdot \exp(E_6\tau) + \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^{+}(0) - c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) - c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) + \right. \\
&\quad \left. + c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) - c_{f\sigma}^{+}(0) + c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}} + c_{f\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) - c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right] \cdot \exp(E_3\tau) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \left(c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) + c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right) \cdot \exp(E_4\tau) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) + c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) - 2c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) + \frac{U}{R_1} \left(c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) - c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) \right) - \right. \\
&\quad \left. - 2\frac{b}{R_1} \left(c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) + c_{f\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) - 2c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right) \right] \cdot \exp(E_5\tau) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) + c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) - 2c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0) + \frac{U}{R_1} \left(-c_{j\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) + c_{j\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) \right) - \right. \\
&\quad \left. - 2\frac{b}{R_1} \left(-c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}(0) - c_{f\sigma}^{+}n_{j\bar{\sigma}}(0) + 2c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0) \right) \right] \cdot \exp(E_2\tau), \quad (11)
\end{aligned}$$

где $j = 1, 2; f = 1, 2; j \neq f$;

$$\begin{aligned}
E_1 &= \varepsilon - b, \quad E_2 = \varepsilon + (U - R_1)/2, \quad E_3 = \varepsilon + b, \quad E_4 = \varepsilon + U - b, \\
E_5 &= \varepsilon + (U + R_1)/2, \quad E_6 = \varepsilon + U + b, \quad R_1 = \sqrt{U^2 + 4b^2}. \quad (12)
\end{aligned}$$

Зная выражения (11) для операторов $c_{1\sigma}^{+}$, $c_{2\sigma}^{+}$, мы можем найти Фурье-образ антикоммутирующих функций Грина:

$$\left\langle \left\langle c_{2\sigma}^{+} \middle| c_{2\sigma} \right\rangle \right\rangle = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^6 \frac{F_m}{E - E_m + ih}, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} F_1 = F_3 &= (1 + \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle) / 2 - \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle, \\ F_2 = F_5 &= \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle, \quad F_4 = F_6 = \langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle / 2. \end{aligned} \quad (14)$$

Используя соотношения (11), (13) и спектральную теорему [14], получим выражения для корреляционных функций:

$$\langle n_{1\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_1}{2K}, \quad \langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_2}{K}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} K_1 &= [2f_F(E_5)f_F(E_2) + f_F(E_6) + f_F(E_4) - 2f_F(E_6)f_F(E_4)] \times \\ &\quad \times [f_F(E_1) + f_F(E_3)], \\ K_2 &= f_F(E_5)f_F(E_2) \cdot [f_F(E_1) + f_F(E_3)], \\ K &= [1 - f_F(E_6) + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_2)]f_F(E_4) + \\ &\quad + [1 + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_2)]f_F(E_6) + \\ &\quad + 2[f_F(E_5) + f_F(E_2) - f_F(E_1) - f_F(E_3)]f_F(E_4)f_F(E_6) + \\ &\quad + [2 + f_F(E_1) - f_F(E_6) + f_F(E_3) - f_F(E_4)]f_F(E_5)f_F(E_2), \\ f_F(E) &= \left[e^{(E-\mu)/(kT)} + 1 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Обсуждение результатов

Зная выражения для корреляционных функций димера, можно найти некоторые его физические характеристики. Например, для того чтобы найти химический потенциал димера, следует решить уравнение на химпотенциал:

$$2\langle n_{j\sigma} \rangle = n, \quad (17)$$

где n – средняя концентрация электронов в системе.

Подставляя корреляционную функцию из (8) в (17), получим, что в случае, когда зона проводимости заполнена на половину ($n = 1$), химический потенциал димера имеет следующий вид:

$$\mu = \varepsilon + \frac{U}{2}. \quad (18)$$

Таким образом, при $n = 1$ химический потенциал димера не зависит от температуры и сдвинут относительно энергии одноэлектронного атомного состояния на $U/2$.

Как известно, полюса функций Грина определяют энергетический спектр системы. Как видно из соотношений (6), (13) и (14), в точном решении у димера имеется 8 энергетических состояний, в приближении неоднородных

статических флуктуаций имеется 6 энергетических состояний, а в случае однородных статических флуктуаций имеется только 4 энергетических состояния, поскольку в этом случае $\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$. Отметим, что половина энергетических состояний находится вблизи энергии $\epsilon + U$, образуя верхнюю подзону Хаббарда, а оставшаяся половина энергетических состояний сосредоточена вблизи энергии ϵ , образуя нижнюю подзону Хаббарда. На рис. 1–6 представлены зависимости энергетических состояний димера относительно химического потенциала от b/U (U/b) для точного решения, для решения, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, и для решения, полученного в приближении однородных статических флуктуаций соответственно.

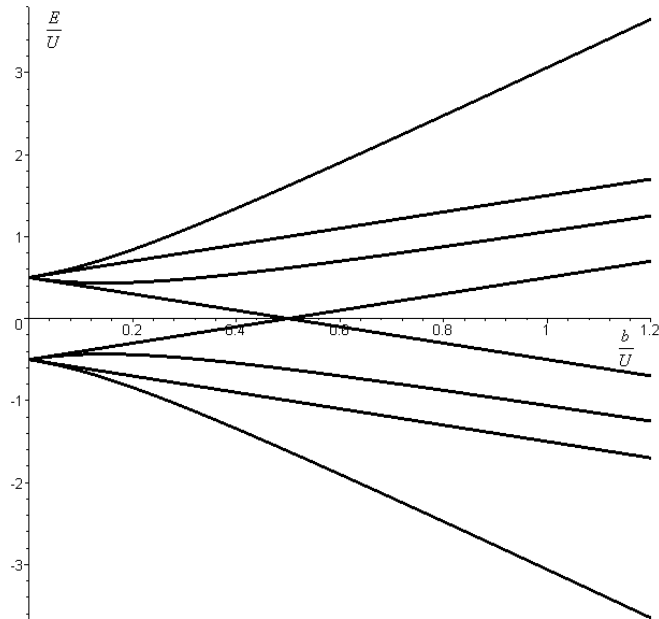


Рис. 1. Зависимость энергетического спектра димера, полученного из точного решения, от b/U

Из рис. 1–6 видно, что как в точном решении, так и в ПСФ при изменении параметра b/U (U/b) одно энергетическое состояние переходит из нижней подзоны в верхнюю подзону, другое энергетическое состояние переходит из верхней подзоны в нижнюю подзону. Из формулы (7) следует, что при $2b < U$ энергетическое состояние E_5 находится в верхней подзоне, а энергетическое состояние E_4 находится в нижней подзоне; а при $2b > U$ энергетическое состояние E_4 находится в верхней подзоне, а энергетическое состояние E_5 находится в нижней подзоне. Переход энергетических состояний из одной подзоны в другую приводит к тому, что при некоторых значениях параметра b/U энергетическая щель между подзонами обращается в нуль. Как следует из соотношений (7), энергетическая щель между подзонами обращается в нуль при выполнении следующего условия:

$$U = 2b. \quad (19)$$

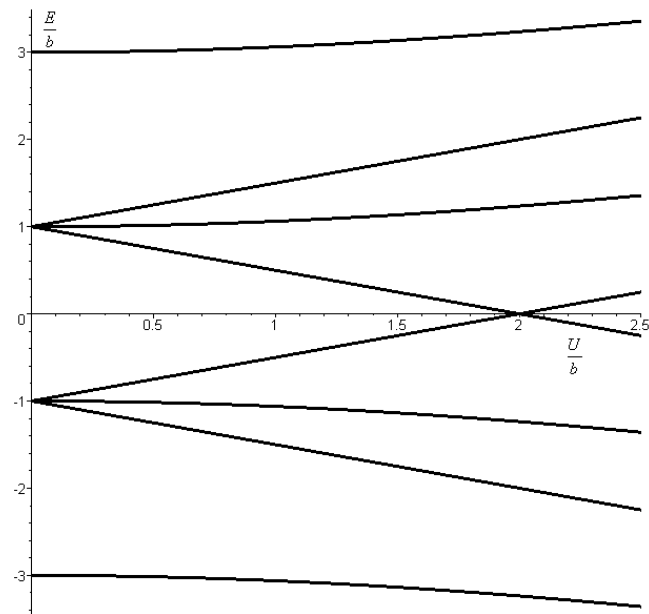


Рис. 2. Зависимость энергетического спектра димера, полученного из точного решения, от U/b

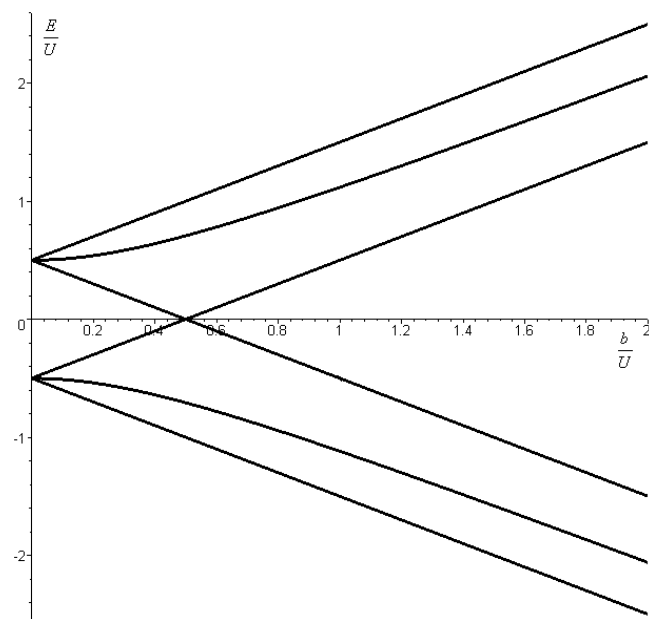


Рис. 3. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, от b/U

Таким образом, при выполнении условия (19) в системе происходит так называемый «фазовый переход металл–диэлектрик» [15], который наблюдается в более сложных системах.

Отметим, что условия, при которых энергетическая щель между подзонами обращается в нуль в ПСФ, совпадают с условием, которое было получе-

но из точного решения. Это связано с тем, что четыре энергетических уровня димера, полученные в ПСФ, совпадают с четырьмя из восьми энергетических уровней, полученных при точном решении.

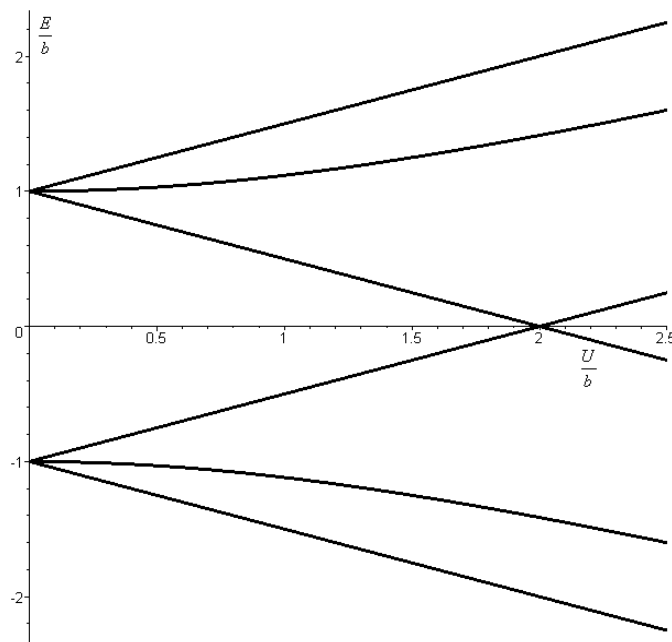


Рис. 4. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, от U/b

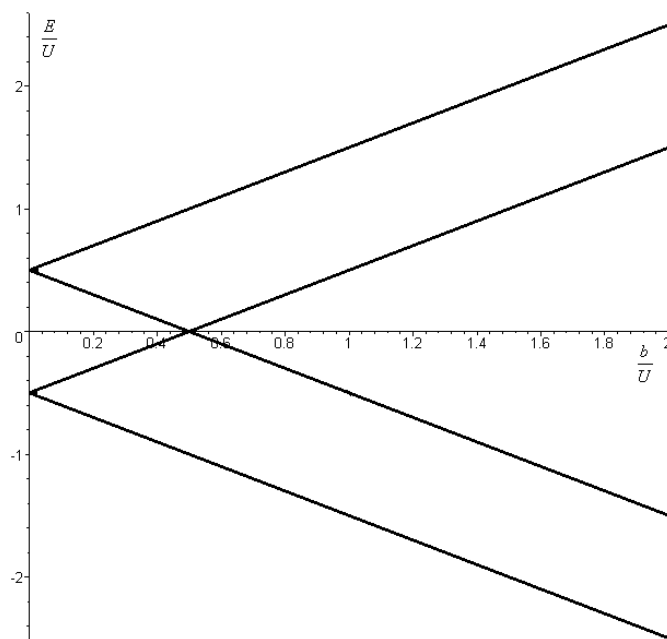


Рис. 5. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении однородных статических флуктуаций, от b/U

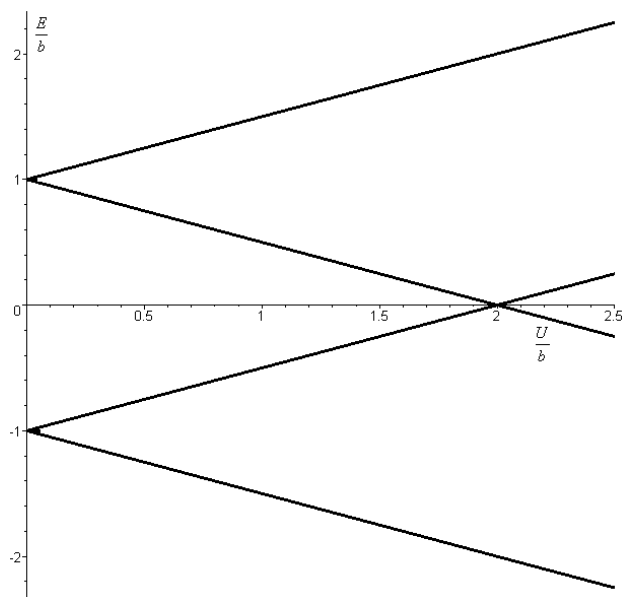


Рис. 6. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении однородных статических флуктуаций, от U/b

Из рис. 1, 3 и 5 видно, что в атомном пределе, т.е. при $b = 0$, имеются только два энергетических состояния, которые расщепляются при $b \neq 0$ и образуют две подзоны Хаббарда. Из рис. 4 и рис. 6 видно, что в ПСФ в зонном пределе, т.е. при $U = 0$, имеются два энергетических состояния, которые расщепляются при $U \neq 0$. В точном решении при $U \ll b$, как видно из рис. 2, имеется существенное отличие от решения, полученного в ПСФ. Из (6) и (7) следует, что $F_1 = F_8 = 0$ при $U = 0$, и $F_1 \neq 0, F_8 \neq 0$ при $U \neq 0$. Таким образом, как видно из рис. 2, при $U \neq 0$ происходит не только расщепление двух энергетических состояний, но появляются новые энергетические состояния с энергиями E_1, E_8 . Возможно, что в более сложных системах при $U \ll b$ кроме основной зоны также образуются дополнительные подзоны.

Полученные в работе результаты показывают, что в димере, как и в более сложных системах, энергетический спектр при сильном кулоновском отталкивании электронов расщепляется на две подзоны Хаббарда, щель между которыми при $U = 2b$ исчезает, что приводит к так называемому переходу «метал – диэлектрик», который наблюдается в сложных системах, описываемых моделью Хаббарда. Кроме того, в данной работе показано, что четыре энергетических состояния димера, полученные в ПСФ, совпадают с энергетическими состояниями димера, полученными из точного решения.

Список литературы

1. **Hubbard, J.** Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society A. – 1963. – Vol. 276. – P. 238–257.
2. **Gutzwiller, M. C.** Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals / M. C. Gutzwiller // Physical Review Letters. – 1963. – Vol. 10. – P. 159–162.
3. **Kanamori, J.** Electron correlations and ferromagnetism of transition metals / J. Kanamori // Progress of Theoretical Physics. – 1963. – Vol. 30. – P. 275–289.

4. **Shubin, S. P.** On the electron tfeory of metals / S. P. Shubin, S. V. Wonsowskii // *Proceedings of the Royal Society A.* – 1934. – Vol. 145. – P. 159–180.
5. **McKenzie, R. H.** A strongly correlated electron model for the layered organic superconductors $k\text{-(BEDT-TTF)}_2X$ / R. H. McKenzie // *Comments on Condensed Matter Physics.* – 1998. – Vol. 18. – P. 309–317.
6. **Castet, F.** Determination of the coulombic interaction parameters of the extended Hubbard model in organic conductors / F. Castet, A. Fritsch, L. Ducasse // *Journal of Physics I.* – 1996. – Vol. 6. – P. 583–593.
7. **Campos, C. E.** Extended Hückel tight-binding study of the effect of pressure and uniaxial stress on the electronic structure of $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{KHg(SCN)}_4$ and $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu(NCS)}_2$ / C. E. Campos, P. S. Sandhu, J. S. Brooks, T. Ziman // *Physical Review B.* – 1996. – Vol. 53. – P. 12725.
8. **Alvarez-Fernández, B.** The Hubbard model for the hydrogen molecule / B. Alvarez-Fernández, J. A. Blanco // *European Journal of Physics.* – 2002. – Vol. 23. – P. 11–14.
9. **Meniry, E. J.** Introduction to the Hubbard Model / E. J. Meniry. – Belfast : University of Belfast, 2005. – P. 93.
10. **Силантьев, А. В.** Применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.* – 2011. – № 3 (19). – С. 151–163.
11. **Силантьев, А. В.** Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.* – 2011. – № 4 (20). – С. 86–100.
12. **Силантьев, А. В.** Исследование наносистем в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки.* – 2012. – № 4 (24). – С. 214–226.
13. **Силантьев, А. В.** Фуллерен C_{60} в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия вузов. Физика.* – 2013. – Т. 56, № 2. – С. 70–79.
14. **Тябликов, С. В.** Методы квантовой теории магнетизма / С. В. Тябликов. – М. : Наука, 1975. – С. 527.
15. **Gebhard, F.** The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods / F. Gebhard. – Berlin, Springer, 1997. – P. 379.

References

1. Hubbard J. *Proceedings of the Royal Society A.* 1963, vol. 276, pp. 238–257.
2. Gutzwiller M. C. *Physical Review Letters.* 1963, vol. 10, pp. 159–162.
3. Kanamori J. *Progress of Theoretical Physics.* 1963, vol. 30, pp. 275–289.
4. Shubin S. P., Wonsowskii S. V. *Proceedings of the Royal Society A.* 1934, vol. 145, pp. 159–180.
5. McKenzie R. H. *Comments on Condensed Matter Physics.* 1998, vol. 18, pp. 309–317.
6. Castet F., Fritsch A., Ducasse L. *Journal of Physics I.* 1996, vol. 6, pp. 583–593.
7. Campos C. E., Sandhu P. S., Brooks J. S., Ziman T. *Physical Review B.* 1996, vol. 53, p. 12725.
8. Alvarez-Fernández B., Blanco J. A. *European Journal of Physics.* 2002, vol. 23, pp. 11–14.
9. Meniry E. J. *Introduction to the Hubbard Model.* Belfast: University of Belfast, 2005, p. 93.
10. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 3 (19), pp. 151–163.
11. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki.* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 4 (20), pp. 86–100.

12. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 4 (24), pp. 214–226.
13. Silant'ev A. V. *Izvestiya vuzov. Fizika*. [University proceedings. Physics]. 2013, vol. 56, no. 2, pp. 70–79.
14. Tyablikov S. V. *Metody kvantovoy teorii magnetizma* [Methods of the quantum magnetic theory]. Moscow: Nauka, 1975, p. 527.
15. Gebhard F. *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods*. Berlin, Springer, 1997, p. 379.

Силантьев Анатолий Владимирович
старший преподаватель, кафедра физики
и методики преподавания физики,
Марийский государственный
университет (Россия, г. Йошкар-Ола,
пл. Ленина, 1)

E-mail: kvvant@rambler.ru

Silant'ev Anatoliy Vladimirovich
Senior lecturer, sub-department of physics
and physics teaching technique, Mari
State University (1 Lenina square,
Yoshkar-Ola, Russia)

УДК 538.22

Силантьев, А. В.

Димер в модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 168–182.

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 (тип файла – RTF, DOC).

Необходимо представить статью в электронном виде (VolgaVuz@mail.ru) 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 полупетельный интервал. Статья **обязательно** должна содержать индекс УДК, ключевые слова и развернутую аннотацию объемом от 100 до 250 слов, имеющую четкую структуру **на русском** (Актуальность и цели. Материал и методы. Результаты. Выводы) и **английском языках** (Background. Materials and methods. Results. Conclusions).

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 **обязательно** должны быть набраны в редакторе формул Microsoft Word Equation (версия 3.0) или MathType. 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. **Требования к оформлению списка литературы** на русские и иностранные источники: **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, страницы; **для материалов конференций** – фамилия и инициалы автора, название статьи, название конференции, город, издательство, год, страницы.

К материалам статьи **должна** прилагаться следующая информация: фамилия, имя, отчество, ученая степень, звание и должность, место и юридический адрес работы (на русском и английском языках), e-mail, контактные телефоны (желательно сотовые).

Обращаем внимание авторов на то, что перевод имен собственных на английский язык в списке литературы осуществляется автоматически с использованием программы транслитерации в кодировке BGN (сайт translit.ru). Для обеспечения единообразия указания данных об авторах статей во всех реферируемых базах при формировании авторской справки при подаче статьи необходимо предоставить перевод фамилии, имени, отчества каждого автора на английский язык, или он будет осуществлен автоматически в программе транслитерации в кодировке BGN.

Плата с аспирантов за публикацию рукописей не взимается. Рукопись, полученная редакцией, не возвращается. Редакция оставляет за собой право проводить редакционную и допечатную правку текстов статей, не изменяющую их основного смысла, без согласования с автором.

Статьи, оформленные без соблюдения приведенных выше требований, к рассмотрению не принимаются.

Уважаемые читатели!

Для гарантированного и своевременного получения журнала «**Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки**» рекомендуем вам оформить подписку.

Журнал выходит 4 раза в год по тематике:

- **математика**
- **физика**
- **механика**

Стоимость одного номера журнала – 500 руб. 00 коп.

Для оформления подписки через редакцию необходимо заполнить и отправить заявку в редакцию журнала: факс/тел. (841-2) 36-84-87. E-mail: VolgaVuz@mail.ru

Подписку можно также оформить по объединенному каталогу «Пресса России» тематические разделы «Научно-технические издания. Известия РАН. Известия ВУЗов». Подписной индекс – 82413.

ЗАЯВКА

Прошу оформить подписку на журнал «Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки» на 20__ г.

№ 1 – _____ шт., № 2 – _____ шт., № 3 – _____ шт., № 4 – _____ шт.

Наименование организации (полное) _____

ИНН _____ КПП _____

Почтовый индекс _____

Республика, край, область _____

Город (населенный пункт) _____

Улица _____ Дом _____

Корпус _____ Офис _____

ФИО ответственного _____

Должность _____

Тел. _____ Факс _____ E-mail _____

Руководитель предприятия _____

(подпись)

(ФИО)

Дата «____» _____ 20__ г.