

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 4 (56)

2020

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

- Медведик М. Ю., Смирнов Ю. Г., Цупак А. А.* Решение векторной трехмерной обратной задачи дифракции на объемном неоднородном теле двухшаговым методом..... 3
- Москалева М. А., Смирнов Ю. Г.* О дискретности спектра интегродифференциальной оператор-функции в задаче о колебаниях в открытых объемных резонаторах..... 22
- Цупак А. А.* Численный метод и параллельный алгоритм решения задачи дифракции электромагнитной волны на неплоском идеально проводящем экране 32
- Бойков И. В., Рязанцев В. А.* Об одном методе восстановления граничного условия для линейных уравнений параболического типа 42

ФИЗИКА

- Гадомский О. Н., Мусич Д. О.* Спин-спиновое взаимодействие пространственно разнесенных электронных спинов в поле электромагнитного излучения..... 57
- Вострецова Л. Н., Адамович А. А.* Влияние γ -облучения на электрические и оптические характеристики светодиодов на основе InGaN/GaN 69
- Панкратов Е. Л.* Способ увеличения плотности элементов смесителя с понижением частоты и влияние модификации материалов на технологический процесс 80
- Макаров В. Н.* Расчет постоянных Маделунга для оценки энергии ионной связи в кристаллах оксидов с кубической, тетрагональной и ромбической сингониями..... 119
- Кревчик В. Д., Семенов М. Б., Кревчик П. В.* Квантовое туннелирование с диссипацией: приложение к туннельному транспорту для полупроводниковых квантовых точек в системе совмещенного АСМ/СТМ в условиях внешнего электрического поля (обзор). Часть II 132
- Ницев К. Н., Новопольцев М. И., Малыгин М. Ю., Чернобровкин Ю. В., Беглов В. И., Сизачев А. Ф., Мишкин В. П., Моисеев Н. В., Лютова Е. Н.* Влияние гранулометрического состава наполнителя и термообработки на адгезионную прочность многослойного металлического покрытия на поверхности металломатричного композиционного материала AlSiC..... 186

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

№ 4 (56)

2020

CONTENT

MATHEMATICS

- Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A.* The solution of a vector 3D inverse diffraction problem on a 3D heterogeneous body by a two-sweep method 3
- Moskaleva M. A., Smirnov Yu. G.* On the discreteness of the spectrum of integrodifferential operator-functions in the problem of oscillations in open volume resonators 22
- Tsupak A. A.* A numerical method and a parallel algorithm for solving the problem of electromagnetic wave diffraction on a non-planar perfectly conducting screen 32
- Boikov I. V., Ryazantsev V. A.* On the method for reconstructing the boundary condition for parabolic linear equations 42

PHYSICS

- Gadomskiy O. N., Musich D. O.* Spin-spin interaction of spatially separated electron spins in the field of electromagnetic radiation 57
- Vostretsova L. N., Adamovich A. A.* The effect of γ -radiation on the electrical and optical characteristics of InGaN / GaN LEDs 69
- Pankratov E. L.* A method for increasing the density of the mixer elements with underfrequency and the effect of material modification on the technological process 80
- Makarov V. N.* Calculation of the Madelung constant for estimating the ionic bond energy in oxide crystals with cubic, tetragonal, and rhombic crystal systems 119
- Krevchik V. D., Semenov M. B., Krevchik P. V.* Quantum tunneling with dissipation: an application to tunnel transport for semiconductor quantum dots in a combined AFM / STM system under external electric field conditions (Review). Part II 132
- Nishchev K. N., Novopol'tsev M. I., Malygin M. Yu., Chernobrovkin Yu. V., Beglov V. I., Sigachev A. F., Mishkin V. P., Moiseev N. V., Lyutova E. N.* The effect of the granulometric composition of the filler and heat treatment on the adhesion strength of multilayer metal coating on AlSiC MMC's surface ... 186

УДК 517.968, 517.983.37

DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-1

М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак

РЕШЕНИЕ ВЕКТОРНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ НА ОБЪЕМНОМ НЕОДНОРОДНОМ ТЕЛЕ ДВУХШАГОВЫМ МЕТОДОМ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Цель работы – обоснование и программная реализация двухшагового метода решения векторной трехмерной обратной задачи дифракции на неоднородном рассеивателе, характеризующемся кусочно-гладкой диэлектрической проницаемостью.

Материалы и методы. Исходная краевая задача для системы уравнений Максвелла сводится к системе интегродифференциальных уравнений; для исследования этой системы применяются элементы теории потенциала и преобразования Фурье.

Результаты. Предложена интегральная формулировка векторной обратной задачи дифракции, установлена единственность решения интегродифференциального уравнения первого рода в специальных классах функций; разработан двухшаговый метод решения векторной обратной задачи дифракции; программно реализованы алгоритмы уточнения приближенных решений задачи с зашумленными данными.

Выводы. Двухшаговый метод является эффективным подходом к решению векторных задач ближнеполевой томографии.

Ключевые слова: трехмерная векторная обратная задача дифракции, восстановление неизвестной диэлектрической проницаемости, интегродифференциальные уравнения, единственность решения, двухшаговый метод.

М. Yu. Medvedik, Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak

THE SOLUTION OF A VECTOR 3D INVERSE DIFFRACTION PROBLEM ON A 3D HETEROGENEOUS BODY BY A TWO-SWEEP METHOD

Abstract.

Background. The purpose of this work is justification and implementation of the two-step approach for solving vector 3D inverse problem of diffraction by a heterogeneous solid with a piecewise smooth permittivity.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 18-01-00219 А.

© Медведик М. Ю., Смирнов Ю. Г., Цупак А. А., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

Materials and methods. The original boundary value problem for Maxwell's equations is reduced to a system of integro-differential equations; the system is studied using potential theory and Fourier transform.

Results. The integral formulation of the vector inverse problem of diffraction is given; uniqueness of a solution to the integro-differential equation of the first type is established in special function spaces; non-iterative approach for solving the inverse problem is implemented; several techniques for solutions' refinement are also implemented.

Conclusions. The two-sweep method is an efficient technique for solving vector 3D problems of near-field tomography.

Keywords: vector 3D inverse problem of diffraction, reconstruction of unknown permittivity, integro-differential equations, uniqueness of solutions, two-sweep method.

Введение

Обратные векторные задачи дифракции в трехмерном пространстве представляют большой интерес на протяжении уже нескольких десятилетий. Один из наиболее распространенных подходов к их решению заключается в минимизации некоторых функционалов ошибок и использовании итерационных методов, требующих выбора хорошего начального приближения [1–4].

В данной работе рассматривается неитерационный подход к решению трехмерной векторной обратной задачи дифракции монохроматической электромагнитной волны на неоднородном теле. Задача состоит в отыскании неизвестной диэлектрической проницаемости (или соответствующего ей показателя преломления) ограниченного объемного рассеивателя, расположенного в \mathbb{R}^3 . В статье представлено описание, обоснование и применение двухшагового метода, который ранее успешно применялся для решения скалярных обратных задач рассеяния [5–12].

Статья состоит из четырех разделов. В первом разделе формулируется прямая задача дифракции монохроматической электромагнитной волны на ограниченном объемном препятствии с заданной постоянной магнитной проницаемостью μ_e и известной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(x)$. Исходная краевая задача для уравнений Максвелла сводится к системе, состоящей из сингулярного интегродифференциального уравнения электрического поля по области неоднородности и интегрального представления полного электрического поля вне рассеивателя. Приводятся основные результаты о разрешимости прямой задачи дифракции.

Второй раздел посвящен теоретическому исследованию обратной задачи дифракции, заключающейся в нахождении неизвестной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x)$ объемного тела заданной формы. Мы рассматриваем полную интегральную постановку обратной задачи, в отличие от общепринятого подхода, предполагающего решение *скалярного* интегрального уравнения относительно одной («преобладающей» над остальными) компоненты векторного поля. Первый шаг предлагаемого метода заключается в решении линейного интегродифференциального уравнения первого рода относительно тока поляризации $\mathbf{J}(x) = (\varepsilon(x) / \varepsilon_e - 1)\mathbf{E}(x)$. Здесь $\mathbf{E}(x)$ – напряженность электрического поля, ε_e – известная диэлектрическая проницаемость свободного

пространства. На втором шаге $\varepsilon(x)$ явно выражается через известные функции.

В третьем разделе показано, что интегродифференциальное уравнение первого рода имеет не более одного решения в конечномерных пространствах кусочно-постоянных функций [8, 11].

В четвертом разделе описаны результаты численных тестов. Рассмотрено несколько видов неоднородных рассеивателей; приведены результаты расчетов в случаях, когда ближнепольные данные заданы точно и с некоторой (симулированной) погрешностью. Подробное описание использованных методов приведено в [11, 12].

1. Прямая задача дифракции: постановка и основные результаты

Пусть $Q \subset \mathbb{R}^3$ – ограниченная область, причем граница ∂Q – кусочно-гладкая поверхность, состоящая из конечного числа поверхностей класса C^∞ .

Будем предполагать, что область Q является изотропной и неоднородной; она характеризуется постоянной магнитной проницаемостью $\mu_e > 0$ и функцией диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x) \in C^\infty(\bar{Q})$.

Введем *относительную диэлектрическую проницаемость* $\varepsilon_r = \varepsilon / \varepsilon_e$ и потребуем, чтобы в каждой точке $x \in \bar{Q}$ существовала функция

$$(\varepsilon_r(x) - 1)^{-1}. \quad (1)$$

Свободное пространство $\mathbb{R}^3 \setminus \bar{Q}$ предполагается однородным с постоянными значениями проницаемостей μ_e, ε_e , причем

$$\mu_e > 0, \quad \operatorname{Re} \varepsilon_e \geq 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon_e \geq 0. \quad (2)$$

Поле возбуждается плоской электромагнитной волной $\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0 \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$, удовлетворяющей системе уравнений Максвелла в \mathbb{R}^3 ,

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_0 = -i\omega \varepsilon_e \mathbf{E}_0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}_0 = i\omega \mu_e \mathbf{H}_0, \quad (3)$$

полное поле представляется в виде суммы падающего и рассеянного полей:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_s,$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_s.$$

Решение прямой задачи дифракции – полное электромагнитное поле \mathbf{E}, \mathbf{H} , принадлежащее классам функций

$$\mathbf{E}, \mathbf{H} \in C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \partial Q) \cap C(\bar{Q}) \cap C(\mathbb{R}^3 \setminus Q), \quad (4)$$

удовлетворяющее в $\mathbb{R}^3 \setminus \partial Q$ уравнениям Максвелла:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -i\omega \varepsilon \mathbf{E}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = i\omega \mu_e \mathbf{H}, \quad (5)$$

условиям непрерывности касательных компонент на границе области неоднородности:

$$[\mathbf{E}_\tau]|_{\partial Q} = [\mathbf{H}_\tau]|_{\partial Q} = 0, \quad (6)$$

условиям конечности энергии в любом ограниченном объеме пространства:

$$\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_{2,loc}(\mathbb{R}^3), \quad (7)$$

и условиям излучения Сильвера – Мюллера [13] на бесконечности для рассеянного поля:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s &= o(r^{-1}), & \operatorname{Im} k_e > 0, \\ \mathbf{H}_s \times \mathbf{e}_r - \mathbf{E}_s &= o(r^{-1}), & \mathbf{E}_s \times \mathbf{e}_r + \mathbf{H}_s &= o(r^{-1}), \\ \mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s &= O(r^{-1}), & \operatorname{Im} k_e = 0, & \quad r \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (8)$$

где $k_e^2 = \omega^2 \varepsilon_e \mu_e$ – волновое число, $\mathbf{e}_r = \mathbf{x} / r$, $r = |\mathbf{x}|$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T$; предельные соотношения в (8) выполняются равномерно по всем направлениям.

Определение 1. Решение \mathbf{E}, \mathbf{H} задачи (5)–(8), удовлетворяющее условиям (4), называется *классическим*.

Сформулируем основные результаты о разрешимости поставленной задачи.

Теорема 1. Пусть диэлектрическая проницаемость удовлетворяет в \bar{Q} условиям

$$\varepsilon_r \in C^\infty(\bar{Q}), \quad \varepsilon_r > 1, \quad (9)$$

а вне \bar{Q} выполняются условия $\varepsilon_e > 0$ и $\mu_e > 0$. Тогда задача дифракции (4)–(8) имеет не более одного классического решения.

Краевую задачу (5)–(8) можно свести к системе, состоящей из интегродифференциального уравнения по области неоднородности

$$\mathbf{E}(x) - (k_e^2 + \operatorname{grad} \operatorname{div}) \int_Q G(x, y) (\varepsilon_r(y) - 1) \mathbf{E}(y) dy = \mathbf{E}_0(x), \quad x \in Q, \quad (10)$$

и интегрального представления поля вне тела

$$\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}_0(x) + (k_e^2 + \operatorname{grad} \operatorname{div}) \int_Q G(x, y) (\varepsilon_r(y) - 1) \mathbf{E}(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{Q}. \quad (11)$$

Магнитное поле всюду выражается через электрическое по формуле

$$\mathbf{H} = \frac{1}{i\omega\mu_e} \operatorname{rot} \mathbf{E}. \quad (12)$$

Имеет место теорема об эквивалентности краевой задачи и интегродифференциального уравнения.

Теорема 2. Если краевая задача (5)–(8) имеет классическое решение \mathbf{E}, \mathbf{H} , то вектор-функция $\mathbf{E} \in C(Q) \cap L_2(Q)$ удовлетворяет интегродиффе-

ренициальному уравнению (11). Обратное, если $\mathbf{E} \in \mathbf{L}_2(Q)$ удовлетворяет уравнению (11), то краевая задача (5)–(8) имеет классическое решение \mathbf{E}, \mathbf{H} , выраженное формулами (10)–(12).

Теорема 3. Пусть диэлектрическая проницаемость удовлетворяет условиям $\varepsilon \in C^\infty(\bar{Q})$ и $\varepsilon_r(x) > 1, x \in \bar{Q}$. Тогда оператор

$$\mathbb{A}\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}(x) - (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y)(\varepsilon_r(y) - 1)\mathbf{E}(y)dy$$

непрерывно обратим в $\mathbf{L}_2(Q)$.

Замечание 1. Доказательства теорем 1–3 приведены в работах [14–21]. Описанные выше результаты обобщаются на случаи многосвязных областей и областей с кусочно-гладкой диэлектрической проницаемостью, в том числе и комплекснозначной с неотрицательной мнимой частью. В последнем случае \bar{Q} определяется как объединение замыканий \bar{Q}_i попарно непересекающихся подобластей Q_i , каждая из которых характеризуется бесконечно дифференцируемой проницаемостью $\varepsilon_i(x) \in C^\infty(\bar{Q}_i)$.

2. Постановка обратной задачи дифракции

В однородном трехмерном пространстве \mathbb{R}^3 , характеризующемся известным волновым числом $k_e > 0$, мы рассматриваем векторную обратную задачу дифракции монохроматической волны на изотропном неоднородном параллелепипеде Q :

$$Q = \{x : a_1 < x_1 < b_1, a_2 < x_2 < b_2, a_3 < x_3 < b_3\}. \quad (13)$$

Введем на Q равномерную сетку с узлами:

$$x_{k,i_k} = a_k + \frac{b_k - a_k}{n} i_k, \quad 0 \leq i_k \leq n, \quad k = 1, 2, 3.$$

Разобьем Q на элементарные параллелепипеды:

$$Q_{i_1 i_2 i_3} = \{x : x_{k,i_k} < x_k < x_{k,i_k+1}\}, \quad 0 \leq i_k \leq n-1. \quad (14)$$

Введем кусочно-постоянные функции $\chi_{i_1 i_2 i_3}$:

$$\chi_{i_1 i_2 i_3}(x) = \begin{cases} 1, & x \in Q_{i_1 i_2 i_3}, \\ 0, & x \notin Q_{i_1 i_2 i_3}. \end{cases} \quad (15)$$

Далее будем предполагать, что область Q характеризуется известной магнитной проницаемостью $\mu_e > 0$ и подлежащей отысканию кусочно-гладкой функцией диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x) = \varepsilon_r(x)\varepsilon_e$. Точнее,

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_{i_1 i_2 i_3}(x), & x \in Q_{i_1 i_2 i_3}, \end{cases} \quad (16)$$

где все функции $\varepsilon_{i_1 i_2 i_3}(x)$ являются бесконечно дифференцируемыми,

$$\varepsilon_{i_1 i_2 i_3} \in C^\infty(Q_{i_1 i_2 i_3}).$$

Диэлектрическую проницаемость в точках граней $\partial Q_{i_1 i_2 i_3}$ можно доопределить как предел значений $\varepsilon(x)$ в одном из смежных параллелепипедов.

Вводя мультииндекс $\mathbf{i} = (i_1 i_2 i_3)$, представим функцию $\varepsilon(x)$ при каждом $x \in Q$ равенством

$$\varepsilon(x) = \sum_{\mathbf{i}} \varepsilon_{\mathbf{i}}(x) \chi_{\mathbf{i}}(x). \quad (17)$$

Рассмотрим некоторую ограниченную область D такую, что $\overline{D} \cap \overline{Q} = \emptyset$. Предположим, что в точках $x \in D$ известны значения полного поля на фиксированной частоте $\omega > 0$.

При постановке обратной задачи дифракции будем использовать систему интегральных равенств (10), (11), определяющих зависимость поля $\mathbf{E}(x)$ от диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x)$ и падающей волны $\mathbf{E}_0(x)$.

Постановка обратной задачи дифракции. Требуется восстановить функцию $\varepsilon(x)$ в области неоднородности Q по результатам измерения полного поля $\mathbf{E}(x)$ в точках области D , используя равенство

$$(k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) (\varepsilon_r(y) - 1) \mathbf{E}(y) dy = \mathbf{E}(x) - \mathbf{E}_0(x), \quad x \in D, \quad (18)$$

с учетом уравнения в области неоднородности Q :

$$\mathbf{E}(x) - (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) (\varepsilon_r(y) - 1) \mathbf{E}(y) dy = \mathbf{E}_0(x), \quad x \in Q. \quad (19)$$

Опишем двухшаговый метод решения обратной задачи дифракции. Введем в области Q вектор-функцию

$$\mathbf{J}(x) := (\varepsilon_r(x) - 1) \mathbf{E}(x),$$

предполагая, что всюду в Q выполнено условие $|\varepsilon_r(x)| \geq \tilde{\varepsilon} > 1$. Тогда из представления поля вне рассеивателя получим уравнение для $\mathbf{J}(x)$:

$$(k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy = \mathbf{E}(x) - \mathbf{E}_0(x), \quad x \in D, \quad (20)$$

а уравнение в области неоднородности перепишем в виде

$$\frac{\mathbf{J}(x)}{\varepsilon_r(x) - 1} - (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy = \mathbf{E}_0(x), \quad x \in Q. \quad (21)$$

Двухшаговый метод восстановления диэлектрической проницаемости в Q состоит в следующем:

1. По известным значениям падающего поля $\mathbf{E}_0(x)$ и полного поля $\mathbf{E}(x)$ в области D необходимо найти ток $\mathbf{J}(x)$ в Q из уравнения (20).
2. Вычислить явно $\varepsilon_r(x)$ в Q , используя уравнение (21).

3. Единственность решения интегродифференциального уравнения первого рода в специальных классах функций

Для приближенного отыскания \mathbf{J} будет применен метод коллокации с финитными базисными функциями. Поэтому далее будем предполагать, что \mathbf{J} представляет собой кусочно-постоянную функцию

$$\mathbf{J}(x) = \sum_i \mathbf{J}_i \chi_i(x), \quad (22)$$

где $\mathbf{J}_i \in \mathbb{C}^3$ – неизвестные (векторные) коэффициенты; $\chi_i(x)$ – характеристические функции множеств Q_i (на гранях Q_i ток можно доопределить любым из постоянных значений).

Имеет место теорема о единственности решения уравнения (20) в классе кусочно-постоянных функций $\mathbf{J}(x)$.

Теорема 4. Пусть задано разбиение тела Q на n^3 параллелепипедов Q_i . Уравнение

$$\left(k_e^2 + \text{grad div}\right) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy = \mathbf{E}_s(x), \quad x \in D, \quad \bar{D} \cap \bar{Q} = \emptyset, \quad \mathbf{E}_s \in C^\infty(\bar{D}), \quad (23)$$

имеет не более одного кусочно-постоянного решения $\mathbf{J}(x)$ при всех $k_e > 0$ за исключением, быть может, конечного числа значений k_e .

Доказательство. 1. Рассмотрим однородное уравнение

$$\left(k_e^2 + \text{grad div}\right) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy = 0, \quad x \in D.$$

Введем обозначение:

$$\mathbf{v}(x) = \left(k_e^2 + \text{grad div}\right) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}^3. \quad (24)$$

Вне области неоднородности \bar{Q} ядро $G(x, y)$ бесконечно дифференцируемо, поэтому допустимо повторное дифференцирование под знаком интеграла и, следовательно, имеет место покомпонентное равенство

$$(\Delta + k_e^2) \mathbf{v}(x) = 0.$$

Так как в подобласти $D \subset \mathbb{R}^3 \setminus \bar{Q}$ функция \mathbf{v} тривиальна, то $\mathbf{v} \equiv 0$ и всюду в $\mathbb{R}^3 \setminus \bar{Q}$ согласно принципу единственного продолжения [13].

Из условий сопряжения для электрического поля на $\partial Q'$ следует, что

$$\mathbf{v}_\tau|_{\partial Q} = 0.$$

2. Рассмотрим фундаментальное решение $\bar{G}(x, y) = \frac{e^{-ik_e|x-y|}}{4\pi|x-y|}$ урав-

нения Гельмгольца и с учетом однородных граничных условий запишем еще одно представление для $\mathbf{v}(x)$:

$$\mathbf{v}(x) = (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q \bar{G}(x, y) \mathbf{J}(y) dy, \quad x \in Q.$$

Вычитая последнее из (24), получим

$$\begin{aligned} \mathbf{w}(x) &= (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q \frac{\sin(k_e |x - y|)}{4\pi |x - y|} \mathbf{J}(y) dy = \\ &= (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G_0(|x - y|) \mathbf{J}(y) dy \equiv 0, \quad x \in Q. \end{aligned} \quad (25)$$

Вектор-функция $\mathbf{w} \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ равна нулю в Q и всюду удовлетворяет однородному уравнению Гельмгольца. Следовательно, $\mathbf{w} \equiv 0$ в \mathbb{R}^3 .

3. Для преобразования Фурье $F\mathbf{w}(\xi)$ верно тождество $F\mathbf{w} \equiv 0$ в \mathbb{R}^3 .

Введем параметры

$$h_1 = (b_1 - a_1) / n_1, \quad h_2 = (b_2 - a_2) / n_2, \quad h_3 = (b_3 - a_3) / n_3$$

и параллелепипед

$$Q_0 = (a_1, a_1 + h_1) \times (a_2, a_2 + h_2) \times (a_3, a_3 + h_3),$$

а все конечные элементы на Q определим через сдвиги Q_0 на некоторый вектор

$$Q_i = Q_{i_1 i_2 i_3} = Q_0 + r_{i_1 i_2 i_3}, \quad (26)$$

где

$$r_{i_1 i_2 i_3} = \mathbf{r}_i = (i_1 h_1, i_2 h_2, i_3 h_3), \quad 0 \leq i_k < n. \quad (27)$$

Тогда для $\mathbf{w}(x)$ имеет место представление

$$\begin{aligned} \mathbf{w}(x) &= \sum_i \mathbf{J}_i (k_e^2 + \text{grad div}) \int_{Q_0 + \mathbf{r}_i} G_0(|x - y|) dx = \\ &= \sum_i \mathbf{J}_i (k_e^2 + \text{grad div}) \int_{Q_0} G_0(|x - y - \mathbf{r}_i|) dx. \end{aligned} \quad (28)$$

Вычислим преобразование Фурье для \mathbf{w} с учетом последнего:

$$\begin{aligned} F\mathbf{w} &= -\hat{\mathbf{d}}(\xi) \sum_i \mathbf{J}_i F(G_0(|x - \mathbf{r}_i|) * \chi_0(x)) = -\hat{\mathbf{d}}(\xi) \sum_i \mathbf{J}_i F(G_0(|x - \mathbf{r}_i|)) F(\chi_0(x)) = \\ &= -\hat{\mathbf{d}}(\xi) \cdot F\chi_0(\xi) \cdot FG_0(\xi) \sum_i \mathbf{J}_i e^{i\mathbf{r}_i \cdot \xi} = \\ &= -\hat{\mathbf{d}}(\xi) (2\pi)^{-3} \prod_{k=1}^3 \frac{e^{-ih_k \xi_k} - 1}{\xi_k} \cdot \delta(|\xi| - k_e) \cdot \sum_i \mathbf{J}_i e^{i\mathbf{r}_i \cdot \xi}. \end{aligned}$$

Матрица $\hat{\mathbf{d}}(\xi)$ определяется следующим образом:

$$\hat{\mathbf{d}}(\xi) = \begin{pmatrix} \xi_1^2 - k_e^2 & \xi_1 \xi_2 & \xi_1 \xi_3 \\ \xi_1 \xi_2 & \xi_2^2 - k_e^2 & \xi_2 \xi_3 \\ \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & \xi_3^2 - k_e^2 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, тождество $F\mathbf{w} \equiv 0$ сводится к равенству

$$\hat{\mathbf{d}}(\xi) \sum_{\mathbf{i}} J_{\mathbf{i}} e^{i\mathbf{i} \cdot \xi} \equiv 0 \tag{29}$$

на сфере S_{k_e} радиуса k_e .

Так как $\det \hat{\mathbf{d}}(\xi) = (|\xi|^2 - k_e^2)k_e^4$, то $\hat{\mathbf{d}}(\xi)$ при $|\xi| = k_e$ является вырожденной матрицей.

Перепишем $\hat{\mathbf{d}}(\xi)$, переставив местами первую и третью строки, а затем выполним ряд строчечных преобразований и учтем, что $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = k_e^2$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{d}}(\xi) &= \begin{pmatrix} \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & \xi_3^2 - k_e^2 \\ \xi_1 \xi_2 & \xi_2^2 - k_e^2 & \xi_2 \xi_3 \\ \xi_1^2 - k_e^2 & \xi_1 \xi_2 & \xi_1 \xi_3 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & -\xi_1^2 - \xi_2^2 \\ \xi_1 \xi_2 & -\xi_1^2 - \xi_3^2 & \xi_2 \xi_3 \\ -\xi_2^2 - \xi_3^2 & \xi_1 \xi_2 & \xi_1 \xi_3 \end{pmatrix} \sim \\ &\sim \begin{pmatrix} \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & -\xi_1^2 - \xi_2^2 \\ 0 & -k_e^2 & k_e^2 \frac{\xi_2}{\xi_3} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & -\xi_1^2 - \xi_2^2 \\ 0 & 1 & -\frac{\xi_2}{\xi_3} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\xi_1 / \xi_3 \\ 0 & 1 & -\xi_2 / \xi_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Следовательно, система уравнений (29) сводится к равенствам

$$\begin{aligned} \xi_2 \sum_{\mathbf{i}} J_{\mathbf{i}}^{(1)} e^{i\mathbf{i} \cdot \xi} - \xi_1 \sum_{\mathbf{i}} J_{\mathbf{i}}^{(2)} e^{i\mathbf{i} \cdot \xi} &= 0, \quad \xi \in S_{k_e}^2, \\ \xi_3 \sum_{\mathbf{i}} J_{\mathbf{i}}^{(2)} e^{i\mathbf{i} \cdot \xi} - \xi_2 \sum_{\mathbf{i}} J_{\mathbf{i}}^{(3)} e^{i\mathbf{i} \cdot \xi} &= 0, \quad \xi \in S_{k_e}^2. \end{aligned} \tag{30}$$

Докажем тривиальность решения систем вида (30), установив линейную независимость функций

$$\left\{ \xi_2 e^{i\mathbf{i} \cdot \xi}, \xi_1 e^{i\mathbf{j} \cdot \xi} \right\} \tag{31}$$

на сфере радиуса k_e .

Для этого достаточно показать, что невырожденной является матрица Грама Γ системы функций (31). Представим Γ в блочном виде:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma^{1,1} & \Gamma^{1,2} \\ \Gamma^{2,1} & \Gamma^{2,2} \end{pmatrix}.$$

Элементы блоков вычисляются следующим образом:

$$\Gamma_{ij}^{m,n} = \int_{S_{k_e}} \xi_n \xi_m e^{ir_i \cdot \xi} e^{-ir_j \cdot \xi} d\xi.$$

Сделав замену $\xi = k_e \eta$, перейдем к интегралам по единичной сфере $S = S_1$:

$$\Gamma_{ij}^{m,n} = k_e^2 \int_S \eta_n \eta_m e^{ik_e r_{ij} \cdot \eta} d\eta = k_e^2 \gamma_{ij}^{m,n},$$

где $r_{ij} = r_i - r_j$.

Вычислим сначала диагональные элементы блоков $\gamma^{m,n}$:

$$\gamma_{ii}^{1,2} = \int_{|\eta|=1} \eta_1 \eta_2 d\eta = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \varphi \cos \varphi \sin^3 \theta = 0,$$

$$\gamma_{ii}^{1,1} = \int_{|\eta|=1} \eta_1^2 d\eta = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin^2 \varphi \sin^3 \theta = \frac{4\pi}{3},$$

$$\gamma_{ii}^{2,2} = \int_{|\eta|=1} \eta_2^2 d\eta = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \cos^2 \varphi \sin^3 \theta = \frac{4\pi}{3}.$$

Следовательно, элементы главной диагонали матрицы γ равны $\frac{4\pi}{3}$.

Вычислим теперь внедиагональные элементы блока $\gamma^{1,1}$:

$$\gamma_{ij}^{1,1} = \int_S \eta_1^2 e^{ik_e r_{ij} \cdot \eta} d\eta = \int_{S_+} + \int_{S_-} = {}^+ \gamma_{ij}^{1,1} + {}^- \gamma_{ij}^{1,1}.$$

Выразим $\eta_3 = \pm \sqrt{1 - \eta_1^2 - \eta_2^2}$ и учтем, что $\eta^2 = \eta_1^2 + \eta_2^2 < 1$. Тогда

$$\begin{aligned} \pm \gamma_{ij}^{1,1} &= \int_{S_\pm; |\eta| < 1} \eta_1^2 e^{ik_e (r_{ij}^{(1)} \eta_1 + r_{ij}^{(2)} \eta_2 \pm r_{ij}^{(3)} \sqrt{1 - \eta_1^2 - \eta_2^2})} \frac{d\eta}{\sqrt{1 - \eta_1^2 - \eta_2^2}} = \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \rho d\rho \left(\rho^2 \cos^2 \varphi e^{ik_e \rho (r_{ij}^{(1)} \cos \varphi + r_{ij}^{(2)} \sin \varphi)} \cdot e^{\pm ik_e r_{ij}^{(3)} \sqrt{1 - \rho^2}} \right). \end{aligned}$$

Воспользуемся соотношением

$$r_{ij}^{(1)} \cos \varphi + r_{ij}^{(2)} \sin \varphi = \sqrt{(r_{ij}^{(1)})^2 + (r_{ij}^{(2)})^2} \cos(\varphi - \varphi_0)$$

и введем обозначения

$$A := k_e \sqrt{(r_{ij}^{(1)})^2 + (r_{ij}^{(2)})^2}, \quad B := \pm k_e r_{ij}^{(3)}.$$

Теперь имеем

$$\pm \gamma_{ij}^{1,1} = \int_0^1 \rho^3 e^{iB\sqrt{1-\rho^2}} d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \left(\cos^2 \varphi e^{iA\rho \cos \varphi} \right). \quad (32)$$

Пусть $A = 0$, т.е. $r_{ij}^{(1)} = r_{ij}^{(2)} = 0$ и $r_{ij}^{(3)} \neq 0$. Имеем

$$\begin{aligned} \pm \gamma_{ij}^{1,1} &= \pi \int_0^1 \rho^3 e^{iB\sqrt{1-\rho^2}} d\rho = \pi \int_0^1 (t-t^3) e^{iBt} t dt = \\ &= \pi \left(e^{iB} \left(-\frac{2}{B^2} + \frac{6i}{B^3} - \frac{6}{B^4} \right) - \frac{1}{B^2} - \frac{6}{B^4} \right) = O\left(\frac{1}{B^2}\right), B \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Пусть теперь $A \neq 0$. Для внутреннего интеграла в (32) можем записать

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2(\varphi + \varphi_0) e^{iA\rho \cos \varphi}.$$

Учтем, что

$$\begin{aligned} \cos^2(\varphi + \varphi_0) &= \cos^2 \varphi \cos^2 \varphi_0 - 2 \cos \varphi \sin \varphi \cos \varphi_0 \sin \varphi_0 + \sin^2 \varphi \sin^2 \varphi_0 = \\ &= \frac{1}{2} (1 + \cos 2\varphi) \cos^2 \varphi_0 - \frac{1}{2} \sin 2\varphi \sin 2\varphi_0 + \frac{1}{2} (1 - \cos 2\varphi) \sin^2 \varphi_0. \end{aligned}$$

Получим

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi e^{iA\rho \cos \varphi} \cos \varphi &= - \int_0^{2\pi} d(\cos \varphi) e^{iA\rho \cos \varphi} \cos \varphi = 0; \\ \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iA\rho \cos \varphi} &= 2 \int_0^{\pi} d\varphi e^{iA\rho \cos \varphi} = 2\pi J_0(A\rho); \\ \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iA\rho \cos \varphi} \cos 2\varphi &= 2 \int_0^{\pi} d\varphi e^{iA\rho \cos \varphi} \cos 2\varphi = -2\pi J_2(A\rho). \end{aligned}$$

В последнем выражении мы воспользовались известным соотношением из [22].

Вернемся к вычислению интегралов $\pm \gamma_{ij}^{1,1}$, которые теперь можно представить в виде

$$\pm \gamma_{ij}^{1,1} = c_0 \int_0^1 \rho^3 e^{iB\sqrt{1-\rho^2}} J_0(A\rho) d\rho + c_2 \int_0^1 \rho^3 e^{iB\sqrt{1-\rho^2}} J_2(A\rho) d\rho, \quad (33)$$

где коэффициенты c_0, c_2 определяются по ранее выписанным выражениям.

Покажем, что каждый из интегралов в сумме (33) может быть сделан сколь угодно малым при достаточно больших k_e . Рассуждения проведем для первого интеграла, который представим в виде

$$\int_0^1 \rho^3 e^{iB\sqrt{1-\rho^2}} J_0(A\rho) d\rho = \int_0^\delta + \int_\delta^1 = i_1 + i_2.$$

Так как подынтегральная функция непрерывна на отрезке $[0;1]$, то для любого $\varepsilon > 0$ можно такое указать $\delta > 0$, что $|i_1| < \varepsilon$. Зафиксируем такое значение δ . Теперь за счет выбора достаточно большого значения $k_e > 0$ с учетом асимптотики функции Бесселя [23]:

$$J_\nu(x) = O\left(\frac{1}{\sqrt{x}}\right), \quad x \rightarrow +\infty,$$

можно получить, что и $|i_2| < \varepsilon$ равномерно по всем $r_{ij}^{(1)}, r_{ij}^{(2)}$.

Таким образом, показано, что внедиагональные элементы блока $\Gamma^{1,1}$ могут быть сделаны сколь угодно малыми за счет выбора k_e ; для остальных блоков $\Gamma^{n,m}$ рассуждения проводятся аналогично.

Итак, матрица Грама может быть представлена в виде

$$\Gamma = k_e^2 \left(\frac{4\pi}{3} I + \Gamma_1 \right),$$

где I – единичная матрица, а для Γ_1 верна оценка нормы $\|\Gamma_1\| < 1$.

Следовательно, Γ – невырожденная матрица, функции

$$\left\{ \xi_n e^{ir_i \cdot \xi}, \xi_m e^{ir_j \cdot \xi} \right\}$$

линейно независимы при $n \neq m$ на сфере радиуса k_e , а уравнение (20) имеет лишь тривиальное решение при достаточно большом $k_e > K$.

Заметим теперь, что определитель матрицы Грама аналитически зависит от волнового числа k_e и, следовательно, может иметь на промежутке $[0; K]$ лишь конечное число нулей. Таким образом, единственная разрешимость уравнения (20) установлена для всех k_e за исключением, быть может, конечного числа значений k_e . Теорема доказана.

Из теоремы 4 следует, что и решение обратной задачи дифракции для случая кусочно-постоянных токов \mathbf{J} единственно в силу однозначности представления $\varepsilon(x)$ согласно уравнению (21).

Замечание 2 (о существовании решения). Предположим, что правая часть уравнения (20) принадлежит линейной оболочке функций

$$(k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) \mathbf{J}(y) dy$$

на данной фиксированной сетке в Q . Тогда оператор уравнения (20) можно рассматривать как отображение, действующее в конечномерных пространствах. Это отображение будет обратимым вследствие теоремы 4.

4. Численное решение обратной задачи дифракции

В данном разделе мы опишем условия и результаты вычислительных экспериментов.

В качестве области неоднородности, в которой восстанавливается диэлектрическая проницаемость, рассмотрим куб Q с длиной ребра 0,3 м. Такой размер области вполне соответствует исследуемым на практике объектам. Значение волнового числа свободного от рассеивателя пространства равно 2 м^{-1} . В области Q введем прямоугольную сетку согласно соотношениям (13), (14).

Для проверки эффективности предложенного двухшагового метода была рассмотрена следующая модельная задача.

На первом этапе была решена *прямая задача дифракции* с заданной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(x)$ и определено полное поле \mathbf{E} в области неоднородности Q . На втором этапе решалась обратная задача дифракции двухшаговым методом. При этом для симуляции исходных данных в области D использовалось представление

$$\mathbf{E}(x) = (k_e^2 + \text{grad div}) \int_Q G(x, y) (\varepsilon_r(y) - 1) \mathbf{E}(y) dy + \mathbf{E}_0(x), \quad x \in D,$$

выражающее полное электрическое поле через решение \mathbf{E} прямой задачи в Q . Полученные на втором этапе приближенные значения $\varepsilon(x)$ сравнивались с известными точными значениями.

Вещественная часть известной диэлектрической проницаемости $\text{Re} \varepsilon(x)$ в первом эксперименте представлена на рис. 1.

Для численного решения уравнения (20) применяется метод коллокации. Ток \mathbf{J} ищется в виде линейной комбинации кусочно-постоянных

базисных функций (определены выше), $\mathbf{J}(x) = \sum_{j=1}^N \mathbf{c}_j \chi_j(x)$, а в качестве точек

коллокации используются точки $r_i \in D$, $i = 1, \dots, N$. В качестве падающей волны рассматривается поле точечного источника, расположенного в точке x_0 , $x_0 \notin \bar{Q} \cup \bar{D}$.

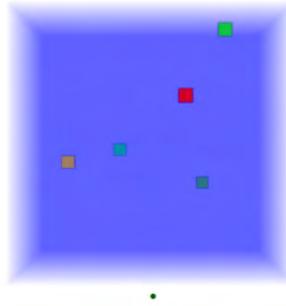


Рис. 1. Вещественная часть точного решения модельной задачи

На рис. 2 представлено приближенное решение обратной задачи, найденное двухшаговым методом. Метод позволяет не только определить геометрическое расположение неоднородностей, но и восстановить с приемлемой точностью значения искомой диэлектрической проницаемости даже при условии зашумленности ближнепольных данных.

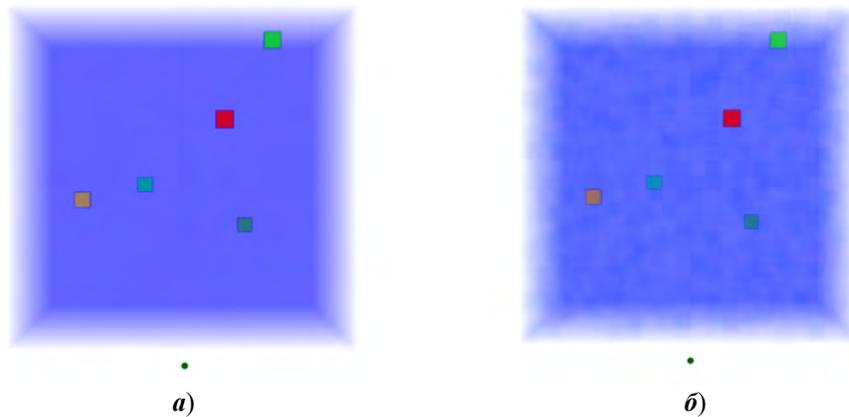


Рис. 2. Вещественная часть восстановленной диэлектрической проницаемости тела: *а* – значения поля в обратной задаче заданы точно; *б* – в ближнепольные данные внесена погрешность (шум) 5 %. Кружок под областью неоднородности обозначает место расположения источника падающей волны

Во втором вычислительном эксперименте в качестве области неоднородности был рассмотрен куб с длиной ребра 0,1 м ($Q = [-0,05; 0,05]^3$), внутри которого расположен однородный шар с центром в начале координат диаметра 0,06 м.

На рис. 3,*а* представлена мнимая часть точного решения ($\text{Im}\epsilon(x)$) обратной задачи дифракции, а на рис. 3,*б,в* – мнимые части найденных двухшаговым методом приближенных решений с точными и зашумленными ближнепольными данным соответственно. Отметим, что приближение для $\epsilon(x)$ находится не во всем шаре, а на объединении прямоугольных носителей базисных функций, целиком лежащих в шаре. Поэтому и точное решение представлено для кусочно-параллелепипедальной области.

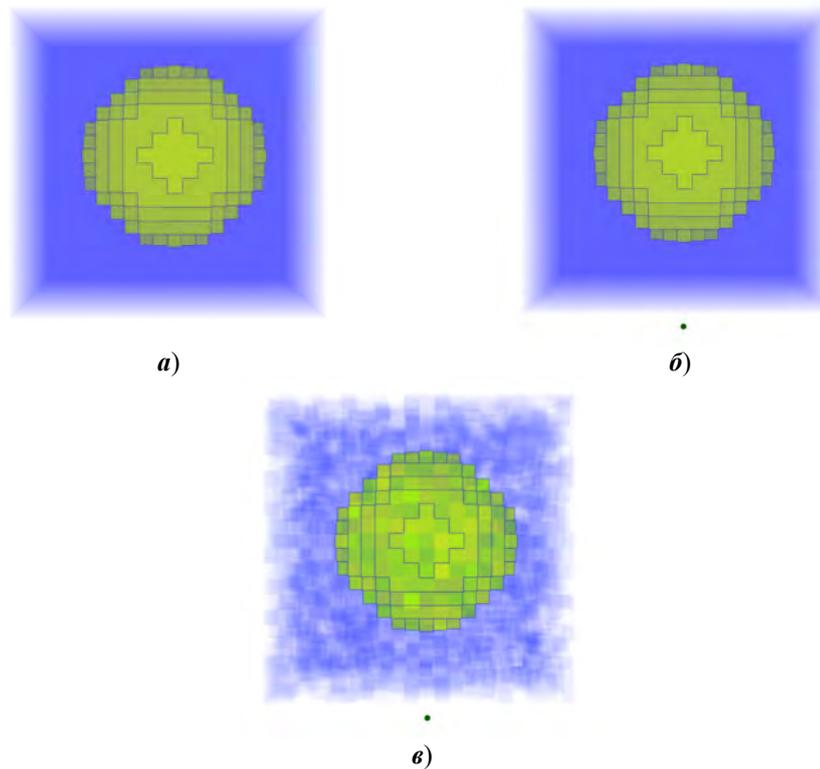


Рис. 3. Мнимая часть точного решения обратной задачи дифракции на кубе с шаровым включением (а); восстановленное значение $\text{Im} \varepsilon(x)$, значения поля вне рассеивателя заданы точно (б); восстановленное значение $\text{Im} \varepsilon(x)$ (в), значения поля вне рассеивателя заданы с погрешностью 5 %

Заключение

Разработан и теоретически обоснован двухшаговый метод решения задачи восстановления диэлектрической проницаемости неоднородного тела по измерениям ближнего поля, основанный на решении векторного линейного интегродифференциального уравнения по области неоднородности. Основным теоретическим результатом работы является теорема о единственности решения сингулярного интегродифференциального уравнения первого рода в классе кусочно-постоянных функций. Проведенные вычислительные эксперименты подтверждают эффективность предложенного алгоритма для решения обратной задачи дифракции.

Библиографический список

1. **Beilina, L.** Approximate Global Convergence and Adaptivity for Coefficient Inverse Problems / L. Beilina, M. Klibanov. – New York : Springer, 2012. – 407 p.
2. **Isakov, H.** Inverse Problems for Partial Differential Equations / H. Isakov. – New York : Springer, 2005. – 358 p.
3. **Romanov, V. G.** Inverse Problems of Mathematical Physics / V. G. Romanov. – Utrecht, The Netherlands : VNU, 1986. – 239 p.
4. **Bakushinsky, A. B.** Iterative Methods for Approximate Solution of Inverse Problems / A. B. Bakushinsky, M. Yu. Kokurin. – New York : Springer, 2004. – 291 p.

5. **Евстигнеев, Р. О.** Обратная задача восстановления неоднородностей тела для ранней диагностики заболеваний с помощью микроволновой томографии / Р. О. Евстигнеев, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2017. – № 4. – С. 3–17.
6. **Евстигнеев, Р. О.** Двухшаговый метод решения скалярной обратной трехмерной задачи дифракции на объемном неоднородном теле / Р. О. Евстигнеев, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2019. – № 4. – С. 12–28.
7. **Медведик, М. Ю.** Обратная задача определения параметров неоднородности тел, расположенных в свободном пространстве / М. Ю. Медведик, Р. О. Евстигнеев, Е. А. Гундарев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2018. – № 4. – С. 50–61.
8. **Смирнов, Ю. Г.** О единственности решения обратной задачи дифракции на неоднородном теле с кусочно-гельдеровым показателем преломления в специальном классе функций / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Доклады Академии наук. – 2019. – Т. 485, № 5. – С. 545–547.
9. **Смирнов, Ю. Г.** Двухмерная скалярная обратная задача дифракции на неоднородном препятствии с кусочно-непрерывным показателем преломления / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2018. – № 3. – С. 3–16.
10. **Medvedik, M. Y.** Two-step method for solving inverse problem of diffraction by an inhomogeneous body / M. Y. Medvedik, Y. G. Smirnov, A. A. Tsupak // Springer Proceedings in Mathematics and Statistics 38th. «Nonlinear and Inverse Problems in Electromagnetics – PIERS 2017». – 2018. – P. 83–92.
11. **Medvedik, M. Yu.** The two-step method for determining a piecewise-continuous refractive index of a 2D scatterer by near field measurements / M. Yu. Medvedik, Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak // Inverse Problems in Science and Engineering. – 2020. – Vol. 28, № 3. – P. 427–447.
12. **Medvedik, M. Yu.** Non-iterative two-step method for solving scalar inverse 3D diffraction problem / M. Yu. Medvedik and Yu. G. Smirnov and A. A. Tsupak // Inverse Problems in Science and Engineering. – 2020. – DOI 10.1080/17415977.2020.1727466.
13. **Colton, D.** Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory / D. Colton, R. Kress. – Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2013. – 418 p.
14. **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. – С. 89–97.
15. **Смирнов, Ю. Г.** Математическая теория дифракции акустических и электромагнитных волн на системе экранов и неоднородных тел / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак. – Москва : РУСАЙНС, 2016. – 226 с.
16. **Смирнов, Ю. Г.** О фредгольмовости уравнения электрического поля в векторной задаче дифракции на объемном частично экранированном теле / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Дифференциальные уравнения. – 2016. – Т. 52, № 9. – С. 1242–1251.
17. **Смирнов, Ю. Г.** О существовании и единственности классического решения задачи дифракции электромагнитной волны на неоднородном диэлектрическом теле без потерь / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2017. – Т. 57, № 4. – С. 702–709.

18. **Цупак, А. А.** О фредгольмовости интегродифференциального оператора в задаче дифракции электромагнитной волны на объемном теле, частично экранированном системой плоских экранов / А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 4. – С. 3–11.
19. **Smirnov, Yu. G.** On the Volume Singular Integrodifferential Equation for the Electromagnetic Diffraction Problem / Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak, D. V. Valovik // *Applicable Analysis: An International Journal*. – 2017. – Vol. 96, № 2. – P. 173–189.
20. **Smirnov, Yu. G.** Existence and Uniqueness Theorems in Electromagnetic Diffraction on Systems of Lossless Dielectrics and Perfectly Conducting Screens / Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak // *Applicable Analysis: An International Journal*. – 2017. – Vol. 96, № 8. – P. 1326–1341.
21. **Smirnov, Yu. G.** Integrodifferential Equations of the Vector Problem of Electromagnetic Wave Diffraction by a System of Nonintersecting Screens and Inhomogeneous Bodies / Yu. G. Smirnov, A. A. Tsupak // *Advances in Mathematical Physics*. – 2015. – Vol. 2015. – 6 p. – Article ID 945965.
22. **Градштейн, И. С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – Москва : Физматгизт, 1963. – 1100 с.
23. **Владимиров, В. С.** Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – Москва : Наука, 1981. – 512 с.

References

1. Beilina L., Klibanov M. *Approximate Global Convergence and Adaptivity for Coefficient Inverse Problems*. New York: Springer, 2012, 407 p.
2. Isakov H. *Inverse Problems for Partial Differential Equations*. New York: Springer, 2005, 358 p.
3. Romanov V. G. *Inverse Problems of Mathematical Physics*. Utrecht, The Netherlands: VNU, 1986, 239 p.
4. Bakushinsky A. B., Kokurin M. Yu. *Iterative Methods for Approximate Solution of Inverse Problems*. New York: Springer, 2004, 291 p.
5. Evstigneev R. O., 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]. 2017, no. 4, pp. 3–17. [In Russian]
6. Evstigneev R. O., 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]. 2019, no. 4, pp. 12–28. [In Russian]
7. Medvedik M. Yu., Evstigneev R. O., Gundarev E. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2018, no. 4, pp. 50–61. [In Russian]
8. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Doklady Akademii nauk* [Reports of the Academy of Sciences]. 2019, vol. 485, no. 5, pp. 545–547. [In Russian]
9. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2018, no. 3, pp. 3–16. [In Russian]
10. Medvedik M. Y., Smirnov Y. G., Tsupak A. A. *Springer Proceedings in Mathematics and Statistics 38th. «Nonlinear and Inverse Problems in Electromagnetics – PIERS 2017»*. 2018, pp. 83–92.
11. Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2020, vol. 28, no. 3, pp. 427–447.

12. Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2020. DOI 10.1080/17415977.2020.1727466.
13. Colton D., Kress R. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2013, 418 p.
14. Valovik D. V., 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] 2015, no. 1, pp. 89–97. [In Russian]
15. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Matematicheskaya teoriya difraktsii akusticheskikh i elektro-magnitnykh voln na sisteme ekranov i neodnorodnykh tel* [Mathematical theory of diffraction of acoustic and electromagnetic waves on a system of screens and heterogeneous bodies]. Moscow: RUSAYNS, 2016, 226 p. [In Russian]
16. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Differentsial'nye uravneniya* [Differential equations]. 2016, vol. 52, no. 9, pp. 1242–1251. [In Russian]
17. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Journal of computational mathematics and mathematical physics]. 2017, vol. 57, no. 4, pp. 702–709. [In Russian]
18. Tsupak A. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2015, no. 4, pp. 3–11. [In Russian]
19. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A., Valovik D. V. *Applicable Analysis: An International Journal*. 2017, vol. 96, no. 2, pp. 173–189.
20. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Applicable Analysis: An International Journal*. 2017, vol. 96, no. 8, pp. 1326–1341.
21. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Advances in Mathematical Physics*. 2015, vol. 2015, 6 p. Article ID 945965.
22. Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M. *Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedeniy* [Tables of integrals, sums, series and products]. Moscow: Fizmatgizt, 1963, 1100 p. [In Russian]
23. Vladimirov V. S. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of mathematical physics]. Moscow: Nauka, 1981, 512 p. [In Russian]

Медведик Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра математики
и суперкомпьютерного моделирования,
Пензенский государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Medvedik Mikhail Yur'evich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, sub-
department of mathematics and supercom-
puter 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 the 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 supercom-
puter modeling, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Образец цитирования:

Медведик, М. Ю. Решение векторной трехмерной обратной задачи дифракции на объемном неоднородном теле двухшаговым методом / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 3–21. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-1.

**О ДИСКРЕТНОСТИ СПЕКТРА
ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ОПЕРАТОР-ФУНКЦИИ
В ЗАДАЧЕ О КОЛЕБАНИЯХ В ОТКРЫТЫХ
ОБЪЕМНЫХ РЕЗОНАТОРАХ¹**

Аннотация.

Актуальность и цели. Цель работы – исследование свойств спектра резонансных частот в задаче о колебаниях объемных магнито-диэлектрических резонаторов.

Материалы и методы. Изучение проводится методом сведения задачи к анализу системы объемных интегродифференциальных уравнений по области неоднородности, определяющей оператор-функцию спектрального параметра.

Результаты. Доказана теорема о дискретности спектра резонансных частот в задаче о колебаниях в объемных резонаторах, представляющих собой ограниченные трехмерные анизотропные магнито-диэлектрические тела, функции диэлектрической и магнитной проницаемости которых являются кусочно-гладкими. Задача сведена к анализу системы объемных сингулярных интегральных уравнений, которая определяет голоморфную фредгольмову оператор-функцию спектрального параметра.

Выводы. Метод объемных интегродифференциальных уравнений является эффективным средством для анализа свойств задачи о колебаниях объемных магнито-диэлектрических резонаторов.

Ключевые слова: электромагнитные колебания, объемные резонаторы, уравнения Максвелла, анизотропные среды, объемные сингулярные интегральные уравнения.

М. А. Moskaleva, Yu. G. Smirnov

**ON THE DISCRETENESS OF THE SPECTRUM
OF INTEGRODIFFERENTIAL OPERATOR-FUNCTIONS IN THE
PROBLEM OF OSCILLATIONS IN OPEN VOLUME RESONATORS**

Abstract.

Background. The purpose of this work is to investigate the properties of the resonance frequency spectrum in the problem of oscillations of volumetric magneto-dielectric resonators.

Materials and methods. The study is carried out by reducing the problem to the analysis of the system of 3D integro-differential equations in the domain of heterogeneity that determines the operator-function of the spectral parameter.

¹ Исследование выполнено за счет гранта РФФИ (проект № 19-31-51004).

© Москалева М. А., Смирнов Ю. Г., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

Results. We prove the theorem on the discreteness of the resonance frequency spectrum in the problem of oscillations in volume resonators that are bounded 3D anisotropic magneto-dielectric bodies whose permittivity and permeability functions are piecewise smooth. The problem is reduced to the analysis of the system of volume singular integral equations that defines a holomorphic Fredholm operator-function of the spectral parameter.

Conclusions. The method of volume integro-differential equations is an effective tool for analyzing the properties of the problem of electromagnetic oscillations of volume magneto-dielectric resonators.

Keywords: electromagnetic oscillations, volume resonators, Maxwell's equations, anisotropic media, volume singular integral equations.

Введение

Методы определения резонансных частот электромагнитных колебаний в резонаторах имеют большое значение при их конструировании [1]. В открытых объемных магнитоэлектрических резонаторах могут существовать лишь комплексные резонансные частоты из-за излучения в свободное пространство [1, 2]. В статье рассматривается наиболее общая ситуация, когда среда в резонаторе является неоднородной и анизотропной, т.е. тензоры диэлектрической и магнитной проницаемости являются произвольными кусочно-гладкими функциями координат.

Для доказательства существования резонансных частот и исследования их свойств задача для системы уравнений Максвелла сводится к анализу системы интегродифференциальных объемных сингулярных уравнений по области неоднородности. Оператор-функция, определяемая системой интегродифференциальных уравнений, оказывается голоморфной функцией спектрального параметра – частоты колебаний, а при некоторых естественных ограничениях – и фредгольмовой в выбранном пространстве.

Это дает возможность доказать дискретность спектра резонансных частот в задаче о колебаниях открытых резонаторов – основное теоретическое свойство этой задачи.

1. Постановка задачи

Пусть Q – ограниченная область в пространстве \mathbf{R}^3 . Будем предполагать, что граница ∂Q области Q кусочно-гладкая.

Будем рассматривать следующий класс задач электродинамики. В области Q среда характеризуется тензорами диэлектрической и магнитной проницаемости $\hat{\epsilon}(x)$ и $\hat{\mu}(x)$ (матрицы-функции размерности 3×3), причем компоненты этих тензоров являются кусочно-дифференцируемыми функциями координат. Точнее, пусть область Q состоит из конечного числа подобластей Q_i с кусочно-гладкой границей ∂Q_i ; $\bar{Q} = \bigcup_i \bar{Q}_i$, $Q_i \cap Q_j = \emptyset$ при

$i \neq j$. Предположим, что $\hat{\epsilon} \in C^3(\bar{Q}_i)$, $\hat{\mu} \in C^3(\bar{Q}_i)$ для всех i . Точнее, будем предполагать, что $\hat{\epsilon}(x)$ и $\hat{\mu}(x)$ являются сужениями на Q_i функций, заданных на более широком множестве, т.е. $\hat{\epsilon}(x) = \hat{\epsilon}_i(x)$, $\hat{\mu}(x) = \hat{\mu}_i(x)$ при

$x \in Q_i$, $\hat{\varepsilon}_i \in C^3(\bar{B})$, $\hat{\mu}_i \in C^3(\bar{B})$, где B – (открытый) шар, содержащий Q , $\bar{Q} \subset B$. На ∂Q_i будем определять только предельные значения функций $\hat{\varepsilon}(x)$ и $\hat{\mu}(x)$ с разных сторон в точках гладкости поверхности.

Вне области Q (в $\mathbf{R}^3 \setminus \bar{Q}$) среда изотропна с постоянными параметрами, $\varepsilon = \varepsilon_0$ и $\mu = \mu_0$. Требуется определить электромагнитные колебания с временной зависимостью в виде множителя $\exp(-i\omega t)$, где ω – круговая частота.

В такой постановке соответствующая математическая задача формулируется следующим образом: найти векторные непрерывно дифференцируемые в Q_i и вне \bar{Q} функции электромагнитного поля, удовлетворяющие в областях гладкости параметров среды уравнениям Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -i\omega \hat{\varepsilon} \mathbf{E}, \operatorname{rot} \mathbf{E} = i\omega \hat{\mu} \mathbf{H} \quad (1)$$

и условию излучения на бесконечности

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} - ik_0 r u \right) = 0, \quad r := |x| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}, \quad (2)$$

где $k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ ($\operatorname{Im} \varepsilon_0 = 0$, $\operatorname{Im} \mu_0 = 0$, $\operatorname{Re} \varepsilon_0 > 0$, $\operatorname{Re} \mu_0 > 0$); u – любая из декартовых компонент полей \mathbf{E} или \mathbf{H} .

Далее на *гладких частях* поверхностей разрыва проницаемостей ∂Q_i функции \mathbf{E} и \mathbf{H} должны быть непрерывны вплоть до ∂Q_i (с каждой стороны) и удовлетворять условию непрерывности тангенциальных компонент полей:

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

где $[\cdot]_{\partial Q_i}$ означает разность следов с разных сторон ∂Q_i . Здесь τ – касательный вектор к ∂Q_i . Мы не будем вводить новые обозначения именно для гладких частей ∂Q_i , а будем, в случае необходимости, оговаривать особо это обстоятельство.

Кроме того, поля \mathbf{E} и \mathbf{H} должны удовлетворять условию ограниченности энергии в любом конечном объеме пространства, т.е. условию

$$\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_{2,loc}(\mathbf{R}^3). \quad (4)$$

Решения задачи (1)–(4) будем называть *классическими*.

2. Теоремы о фредгольмовости системы интегральных уравнений

Будем рассматривать задачи в анизотропной среде. Рассматриваемые задачи могут быть сведены к системе объемных сингулярных интегральных уравнений относительно электромагнитного поля в области Q [3–5]:

$$\mathbf{E}(x) + \frac{1}{3}(\hat{\varepsilon}_r(x) - \hat{I})\mathbf{E}(x) - p.v. \int_Q \left((\hat{\varepsilon}_r(y) - \hat{I})\mathbf{E}(y), \operatorname{grad} \right) \operatorname{grad} G(R) dy -$$

$$\begin{aligned}
& -k_0^2 \int_Q (\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{E}(y) G(R) dy - \\
& -i\omega\mu_0 \int_Q (\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y) \times \text{grad} G(R) dy = 0, x \in Q, \quad (5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{H}(x) + \frac{1}{3} (\hat{\mu}_r(x) - \hat{I}) \mathbf{H}(x) - p.v. \int_Q ((\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y), \text{grad}) \text{grad} G(R) dy - \\
& -k_0^2 \int_Q (\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y) G(R) dy + \\
& +i\omega\epsilon_0 \int_Q (\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{E}(y) \times \text{grad} G(R) dy = 0, x \in Q, \quad (6)
\end{aligned}$$

где $\hat{\epsilon}_r = \hat{\epsilon} / \epsilon_0$, $\hat{\mu}_r = \hat{\mu} / \mu_0$; G – функция Грина (фундаментальное решение) для уравнения Гельмгольца

$$G(R) = \frac{\exp(ik_0 R)}{4\pi R}, \quad (7)$$

$R = |x - y|$; $x = (x_1, x_2, x_3)$; $y = (y_1, y_2, y_3)$, \times – векторное произведение.

Ниже будем использовать гильбертово пространство шестимерных вектор-функций $\mathbf{L}_2(Q)$ со скалярным произведением, определяемым формулой

$$(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \int_Q \mathbf{U}(x) \mathbf{V}^*(x) dx.$$

Отметим, что оператор уравнений (5), (6) определен в $\mathbf{L}_2(Q)$ [4, 5].

Систему уравнений (5)–(6) можно записать в эквивалентной форме, в виде интегродифференциальных уравнений [4]:

$$\begin{aligned}
& \mathbf{E}(x) - \text{grad} \text{div} \int_Q G(R) (\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{E}(y) dy - k_0^2 \int_Q G(R) (\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{E}(y) dy - \\
& -i\omega\mu_0 \text{rot} \int_Q G(R) (\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y) dy = 0, x \in Q, \quad (8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{H}(x) - \text{grad} \text{div} \int_Q G(R) (\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y) dy - k_0^2 \int_Q G(R) (\hat{\mu}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{H}(y) dy + \\
& +i\omega\epsilon_0 \text{rot} \int_Q G(R) (\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I}) \mathbf{E}(y) dy = 0, x \in Q. \quad (9)
\end{aligned}$$

Выражения (8), (9) справедливы и при $x \in \mathbf{R}^3 \setminus \bar{Q}$. В этом случае они являются интегральными представлениями и определяют электромагнитное

поле вне области Q по найденному значению полей в Q . Отметим, что, поскольку $\hat{\epsilon}_r(x) = \hat{I}$, $\hat{\mu}_r(x) = \hat{I}$, $x \in \mathbf{R}^3 \setminus \bar{Q}$, то в этой области интегральные представления полей (8), (9) не будут иметь сингулярности. Электромагнитное поле вне Q определяется только значениями полей в Q с помощью интегральных представлений полей в $\mathbf{R}^3 \setminus \bar{Q}$, удовлетворяющих условию излучения.

Теперь рассмотрим вопрос о фредгольмовости интегральных уравнений. Дадим несколько определений, которые используются в дальнейшем изложении.

Определение 1. Пусть A – линейный ограниченный оператор, действующий в гильбертовом пространстве H . Тогда оператор A^* , который также определен в H , называется сопряженным к A , если равенство $(A f, g) = (f, A^* g)$ выполняется для всех $f, g \in H$.

Решения однородного уравнения $Au = 0$ будем называть нулями оператора A . Обозначим размерность подпространства нулей через $n(A)$. Тогда $n(A^*)$ – размерность подпространства нулей сопряженного оператора A^* . Разность $\text{Ind } A = n(A) - n(A^*)$ называется индексом оператора A .

Определение 2. Линейный оператор A , действующий в гильбертовом пространстве H , называется фредгольмовым оператором, если значения $n(A)$ и $n(A^*)$ конечны и индекс равен нулю.

Сначала рассмотрим интегральное уравнение в анизотропной диэлектрической среде, т.е. магнитная проницаемость всюду в \mathbf{R}^3 постоянна и равна μ_0 . Тогда система интегральных уравнений (5), (6) сводится к объемному сингулярному интегральному уравнению относительно электрического поля в области Q :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x) + \frac{1}{3}(\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})\mathbf{E}(x) - p.v. \int_Q ((\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I})\mathbf{E}(y), \text{grad}) \text{grad } G(R) dy - \\ k_0^2 \int_Q ((\hat{\epsilon}_r(y) - \hat{I})\mathbf{E}(y)G(R) dy = 0, \quad x \in Q, \hat{\epsilon}_r = \hat{\epsilon} / \epsilon_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Обозначим через \hat{B}_0 оператор уравнения (10). Тогда

$$\begin{aligned} (\hat{B}_0 \mathbf{W})(x) = \left(\hat{I} + \frac{1}{3}\hat{\eta}(x) \right) \mathbf{W}(x) - \int_Q \hat{G}_0(x, y)(\hat{\eta}(y)\mathbf{W}(y)) dy - \\ - p.v. \int_Q \hat{G}_1(x, y)(\hat{\eta}(y)\mathbf{W}(y)) dy, \quad x \in Q, \end{aligned} \quad (11)$$

где тензор-функция $\hat{\eta}(x) = (\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})$, а $\hat{G}_0(x, y)$ и $\hat{G}_1(x, y)$ – матричные функции очевидным образом определяемые из (10).

Рассмотрим оператор в пространстве L_2 вида

$$(\hat{A} \mathbf{W})(x) = \int_Q \hat{G}(x, y) \mathbf{W}(y) dy, \quad (12)$$

где $\hat{G}(x, y)$ – тензор-функция. Сопряженный оператор определяется формулой

$$(\hat{A}^* \mathbf{V})(x) = \int_Q \hat{G}^*(y, x) \mathbf{V}(y) dy, \quad (13)$$

где \hat{G}^* – сопряженный к \hat{G} тензор.

Тогда оператор, сопряженный к \hat{B}_0 в пространстве $L_2(Q)$, будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} (\hat{B}_0^* \mathbf{W})(x) = & \left(\hat{I} + \frac{1}{3} \hat{\eta}^*(x) \right) \mathbf{W}(x) - \hat{\eta}^*(x) \int_Q \hat{G}_0^*(y, x) \mathbf{W}(y) dy - \\ & - \hat{\eta}^*(x) p.v. \int_Q \hat{G}_1^*(y, x) \mathbf{W}(y) dy, \quad x \in Q. \end{aligned} \quad (14)$$

Ниже будем полагать, что тензор-функция $\hat{\eta}(x) = (\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})$ имеет обратную в каждой точке из \bar{Q} . Из (10), (11), (13) следует, что $\hat{G}_0(x, y) = \hat{G}_0(y, x)$, $\hat{G}_0 = \hat{G}_0^t$ и $\hat{G}_1 = \hat{G}_1^t$, $\hat{G}_1(x, y) = \hat{G}_1(y, x)$. Учитывая эти свойства тензоров, возьмем комплексное сопряжение от выражения (14):

$$\begin{aligned} (\hat{B}_0^* \mathbf{W})^*(x) = & \left(\hat{I} + \frac{1}{3} \hat{\eta}^t(x) \right) \mathbf{W}^*(x) - \hat{\eta}^t(x) \int_Q \hat{G}_0(x, y) \mathbf{W}^*(y) dy - \\ & - \hat{\eta}^t(x) p.v. \int_Q \hat{G}_1(x, y) \mathbf{W}^*(y) dy, \quad x \in Q, \end{aligned} \quad (15)$$

здесь символы t и $*$ обозначают транспонированный тензор и комплексно сопряженный вектор соответственно.

Пусть \mathbf{W} – ноль оператора (14), т.е. $\hat{B}_0^* \mathbf{W} = 0$. Обозначим $\mathbf{V} = (\hat{\eta}^t)^{-1} \mathbf{W}^*$. Тогда, из (11), (14), (15) имеем

$$(\hat{B}_0^* \mathbf{W})^* = \hat{\eta}^t \hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t) \mathbf{V} = 0,$$

где $\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)$ – оператор уравнения (10) с тензором диэлектрической проницаемости в Q , равным $\hat{\epsilon}^t$. Значит, размерности подпространств нулей операторов $\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon})$ и $\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)$ связаны неравенством $n(\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon})) \leq n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t))$. Теперь

пусть \mathbf{W} – нуль оператора (11) с диэлектрической проницаемостью $\hat{\epsilon}^t$, т.е. $\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)\mathbf{W} = 0$. Обозначим $\mathbf{V}^* = \hat{\eta}^t \mathbf{W}$. Тогда, из (11), (14), (15) имеем

$$\hat{\eta}^t \hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)\mathbf{W} = (\hat{B}_0^* \mathbf{W})^* = 0,$$

откуда следует, что $n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)) \leq n(\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon}))$. Значит,

$$n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)) = n(\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon})), \quad (16)$$

т.е. размерности подпространств нулей операторов $\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon})$ и $\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)$ равны. Если $\hat{\epsilon} = \hat{\epsilon}^t$, что выполняется, например, в изотропных средах, то $n(\hat{B}_0) = n(\hat{B}_0^*)$, и значит $Ind(\hat{B}_0) = 0$.

Если какой-либо эрмитов тензор $\hat{\delta}$ неотрицательно/положительно определен, то и эрмитов тензор $\hat{\delta}^t$ будет также неотрицательно/положительно определен. Поэтому при выполнении условий теоремы 2 получим

$$n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon})) = n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon}^t)) = 0. \quad (17)$$

Далее, из (16), (17) следует

$$n(\hat{B}_0(\hat{\epsilon})) = n(\hat{B}_0^*(\hat{\epsilon})) = 0. \quad (18)$$

Значит, при выполнении вышеприведенных условий оператор \hat{B}_0 будет фредгольмовым в пространстве $L_2(Q)$. Таким образом, имеем следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть $\hat{\mu} = \mu_0$ в \mathbf{R}^3 , и тензор-функция $(\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})$ имеет обратную в каждой точке из \bar{Q} . Тогда оператор сингулярного интегрального уравнения (10) фредгольмов в пространстве $L_2(Q)$.

Теперь рассмотрим задачи рассеяния на магнитоэлектрическом теле, диэлектрическая и магнитная проницаемости которого являются кусочно-дифференцируемыми функциями координат в Q , а поверхности разрыва параметров удовлетворяют вышеприведенным условиям.

Запишем систему сингулярных интегральных уравнений (5), (6) в символическом виде:

$$A(\omega) \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{S} & -i\omega\mu_0\hat{F} \\ i\omega\epsilon_0\hat{F} & \hat{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{\epsilon}_r - \hat{I})\mathbf{E} \\ (\hat{\mu}_r - \hat{I})\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

где вид операторов \hat{S} и \hat{F} ясен из (5), (6). Очевидно, что оператор \hat{S} является сингулярным оператором в $L_2(Q)$, а оператор \hat{F} компактным. Здесь $L_2(Q)$ – гильбертово пространство интегрируемых с квадратом шестимерных вектор-функций.

Рассмотрим следующее уравнение в $\bar{L}_2(Q)$:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{S} & 0 \\ 0 & \hat{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\hat{\epsilon}_r - \hat{I})\mathbf{E} \\ (\hat{\mu}_r - \hat{I})\mathbf{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Поскольку система уравнений (20) распадается на два независимых уравнения вида (10), получаем по доказанному выше, что оператор уравнения (20) будет фредгольмовым в $L_2(Q)$. Оператор уравнения (19) отличается от оператора уравнения (20) прибавлением компактных операторов \hat{F} . Значит, оператор уравнения (19) также является фредгольмовым оператором в $L_2(Q)$. Получаем следующее утверждение.

Теорема 2. Пусть тензор-функции $(\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})$ и $(\hat{\mu}_r(x) - \hat{I})$ имеют обратные в каждой точке из \bar{Q} . Тогда оператор системы сингулярных интегральных уравнений (5), (6) фредгольмов в пространстве $L_2(Q)$.

3. Теорема о дискретности спектра оператор-функции

Рассмотрим оператор-функцию $A(\omega): L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$ как функцию комплексной переменной $\omega \in \mathbb{C}$.

Лемма 1. Оператор-функция $A(\omega): L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$ является голоморфной на всей комплексной плоскости $\omega \in \mathbb{C}$.

Доказательство следует из того, что ядро (7) интегральных операторов \hat{S} и \hat{F} является аналитической функцией параметра ω .

Будем говорить, что в области Q выполнены условия C , если эрмитовы тензор-функции $(\hat{\epsilon}_i(x) + \hat{\epsilon}_i^*(x))/2$ и $(\hat{\mu}_i(x) + \hat{\mu}_i^*(x))/2$ положительно определены (аналог условия $\text{Re} \epsilon_i(x) > 0, \text{Re} \mu_i(x) > 0$ для изотропной среды), а тензор-функции $(\hat{\epsilon}_i(x) - \hat{\epsilon}_i^*(x))/(2i)$ и $(\hat{\mu}_i(x) - \hat{\mu}_i^*(x))/(2i)$ неотрицательно определены (аналог условия $\text{Im} \epsilon_i(x), \text{Im} \mu_i(x) \geq 0$ для изотропной среды). Символ «*» обозначает сопряженный тензор, т.е. транспонированный тензор с комплексно-сопряженными элементами.

При выполнении условий C при вещественных ω задача (19) имеет только тривиальное решение. В этом случае оператор-функция $A(\omega): L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$ имеет непустое резольвентное множество. Получаем следующий основной результат.

Теорема 3. Пусть выполнены условия C и тензор-функции $(\hat{\epsilon}_r(x) - \hat{I})$ и $(\hat{\mu}_r(x) - \hat{I})$ имеют обратные в каждой точке из \bar{Q} . Тогда оператор-функция $A(\omega): L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$ имеет дискретный спектр в \mathbb{C} , т.е. спектр этой оператор-функции является дискретным множеством изолированных характеристических чисел конечной алгебраической кратности.

Доказательство сразу следует из теоремы о голоморфной оператор-функции [6], леммы 1 и теоремы 2.

В открытых объемных магнито-диэлектрических резонаторах могут существовать только комплексные резонансные частоты из-за излучения в свободное пространство [1, 2]. Это значит, что вещественных положительных характеристических чисел у оператор-функции $A(\omega): L_2(Q) \rightarrow L_2(Q)$ нет. Все комплексные резонансные частоты имеют отрицательную мнимую часть. Физическая интерпретация комплексных резонансных частот подробно изложена в [2].

Заключение

В статье рассмотрена задача об электромагнитных колебаниях магнито-диэлектрических объемных резонаторов в наиболее общей ситуации, когда среда в резонаторе является неоднородной и анизотропной, т.е. тензоры диэлектрической и магнитной проницаемости являются произвольными кусочно-гладкими функциями координат.

Доказана дискретность спектра резонансных частот в задаче об электромагнитных колебаниях в открытых объемных резонаторах. Для исследования задача для системы уравнений Максвелла сведена к анализу системы интегродифференциальных объемных сингулярных уравнений по области неоднородности. Доказано, что оператор-функция, определяемая системой интегродифференциальных уравнений, является голоморфной функцией спектрального параметра – частоты колебаний, а при некоторых дополнительных условиях на тензоры диэлектрической и магнитной проницаемости – фредгольмовой оператор-функцией в выбранном пространстве.

Библиографический список

1. Диэлектрические резонаторы / М. Е. Ильченко, В. Ф. Взятыхшев, Л. Г. Гассанов и др. – Москва : Радио и связь, 1989. – 326 с.
2. Санчес-Паленсия, Э. Неоднородные среды и теория колебаний / Э. Санчес-Паленсия. – Москва : Мир, 1984. – 472 с.
3. Самохин, А. Б. Объемные сингулярные интегральные уравнения для задач рассеяния на трехмерных диэлектрических структурах / А. Б. Самохин // Дифференциальные уравнения. – 2014. – Т. 50, № 9. – С. 1215–1230.
4. Самохин, А. Б. Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – Москва : Радио и связь, 1998. – 161 с.
5. Смирнов, Ю. Г. Математическая теория дифракции акустических и электромагнитных волн на системе экранов и неоднородных тел / Ю. Г. Смирнов, А. А. Цупак. – Москва : Русайнс, 2016. – 226 с.
6. Гохберг, И. Ц. Введение в теорию линейных несамосопряженных операторов в гильбертовом пространстве / И. Ц. Гохберг, М. Г. Крейн. – Москва : Наука, 1965. – 448 с.

References

1. Il'chenko M. E., Vzyatyshev V. F., Gassanov L. G. et al. *Dielektricheskie rezonatory* [Dielectric resonators]. Moscow: Radio i svyaz', 1989, 326 p. [In Russian]
2. Sanches-Palensiya E. *Neodnorodnye sredy i teoriya kolebaniy* [Heterogeneous media and vibration theory]. Moscow: Mir, 1984, 472 p. [In Russian]
3. Samokhin A. B. *Differentsial'nye uravneniya* [Differential Equations]. 2014, vol. 50, no. 9, pp. 1215–1230. [In Russian]
4. Samokhin A. B. *Integral'nye uravneniya i iteratsionnye metody v elektro-magnitnom rasseyanii* [Integral equations and iterative methods in electromagnetic scattering]. Moscow: Radio i svyaz', 1998, 161 p. [In Russian]

5. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. *Matematicheskaya teoriya difraktsii akusticheskikh i elektro-magnitnykh voln na sisteme ekranov i neodnorodnykh tel* [Mathematical theory of diffraction of acoustic and electromagnetic waves on a system of screens and heterogeneous bodies]. Moscow: Rusayns, 2016, 226 p. [In Russian]
6. Gokhberg I. Ts., Kreyn M. G. *Vvedenie v teoriyu lineynykh nesamosopryazhennykh operatorov v gil'bertovom prostranstve* [Introduction to the theory of linear nonself-adjoint operators in a Hilbert space]. Moscow: Nauka, 1965, 448 p. [In Russian]

Москалева Марина Александровна

кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математики и суперкомпьютерного моделирования, Пензенский государственный университет (Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40); исполнитель в проекте РФФИ, Научно-технологический университет «Сириус» (Россия, г. Сочи, Олимпийский проспект, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Moskaleva Marina Aleksandrovna

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, sub-department of mathematics and supercomputer modeling, Penza State University (40 Krasnaya street, Penza, Russia); RFBR project contractor, “Sirius” University (40 Olimpiyskiy avenue, Sochi, Russia)

Смирнов Юрий Геннадьевич

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математики и суперкомпьютерного моделирования, Пензенский государственный университет (Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40); научный руководитель в проекте РФФИ, Научно-технологический университет «Сириус» (Россия, г. Сочи, Олимпийский проспект, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Smirnov Yuriy Gennad'evich

Doctor of physical and mathematical sciences, professor, head of the sub-department of mathematics and supercomputer modeling, Penza State University (40 Krasnaya street, Penza, Russia); RFBR project research supervisor, “Sirius” University (40 Olimpiyskiy avenue, Sochi, Russia)

Образец цитирования:

Москалева, М. А. О дискретности спектра интегродифференциальной оператор-функции в задаче о колебаниях в открытых объемных резонаторах / М. А. Москалева, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 22–31. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-2.

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА НЕПЛОСКОМ ИДЕАЛЬНО ПРОВОДЯЩЕМ ЭКРАНЕ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Цель работы – программная реализация параллельного алгоритма решения задачи дифракции электромагнитной волны на идеально проводящем неплоском экране.

Материалы и методы. Рассматривается векторное интегродифференциальное уравнение задачи дифракции; определяются базисные вектор-функции для решения задачи на неплоских параметрически заданных экранах. Для приближенного решения задачи используется метод Галеркина.

Результаты. Определены базисные вектор-функции на неплоских гладких параметризуемых экранах; программно реализован метод Галеркина, использован интерфейс MPI для параллельной реализации метода. Проведены вычислительные эксперименты и анализ эффективности параллелизации численного метода.

Выводы. Результаты вычислительных экспериментов подтверждают сходимость метода Галеркина и целесообразность использования параллельных алгоритмов для решения сложных векторных задач дифракции.

Ключевые слова: векторная задача дифракции, неплоские экраны, интегродифференциальные уравнения, метод Галеркина, параллельные алгоритмы.

А. А. Tsupak

A NUMERICAL METHOD AND A PARALLEL ALGORITHM FOR SOLVING THE PROBLEM OF ELECTROMAGNETIC WAVE DIFFRACTION ON A NON-PLANAR PERFECTLY CONDUCTING SCREEN

Abstract.

Background. The purpose of the work is to develop and implement the parallel algorithm for numerical solving the problem of electromagnetic wave diffraction by non-planar perfectly conducting screens.

Materials and methods. Vector integro-differential equation of the diffraction problem is considered; basis vector functions on non-planar parameterized screens are introduced; the Galerkin method is used to find approximate solutions of the problem.

Results. The Galerkin method is implemented using the MPI interface; computational experiments are performed; efficiency of parallelization of the numerical method is analyzed.

¹Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-01-00219А.

© Цупак А. А., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

Conclusions. The results of numerical tests confirmed the convergence of the Galerkin method and usefulness of using parallel algorithms for solving complex vector scattering problems.

Keywords: vector problem of diffraction, non-planar screens, integro-differential equations, the Galerkin method, parallel algorithms.

Введение

Рассматривается векторная задача дифракции монохроматической электромагнитной волны на гладком бесконечно тонком идеально проводящем неплоском экране, которая сводится [1] к векторному сингулярному интегродифференциальному уравнению по поверхности экрана.

В случае, когда экран расположен в поглощающем трехмерном пространстве \mathbb{R}^3 , оператор интегродифференциального уравнения является эллиптическим [1] в подходящих пространствах, что влечет сходимость метода Галеркина с базисными функциями, удовлетворяющими условию аппроксимации [2].

Для решения задачи дифракции на плоских (или кусочно-плоских) экранах можно использовать базисные финитные вектор-функции типа RWG или rooftop [3–8]. В случае неплоских экранов эффективным с вычислительной точки зрения является подход, состоящий в приближении гладкого экрана кусочно-плоским [9]. Однако теоретическое обоснование такого подхода затруднительно, так как фактически происходит замена пространства решений на гладком экране пространством функций, заданных на кусочно-плоском экране с ребрами.

Цель данной работы – реализовать метод Галеркина для решения векторной задачи дифракции электромагнитной волны на неплоских параметрически заданных экранах Ω .

Для определения базисных вектор-функций на неплоских экранах вводится равномерная прямоугольная сетка в области параметров D и задаются функции rooftop. Базисные функции на неплоском экране Ω определяются как образы функций rooftop при действии естественного отображения касательных пространств $dx:TD \rightarrow T\Omega$; здесь $x = x(t):T \rightarrow \Omega$ есть вектор функция, с помощью которой параметризуется экран Ω .

Проведенные эксперименты показали, что метод Галеркина является достаточно требовательным к вычислительным ресурсам. Это обусловлено более сложным (в сравнении со случаем плоских экранов) алгоритмом вычисления матричных элементов, выражающихся через четырехкратные интегралы и дифференциальные операторы на экране (касательные дивергенцию и градиент). Это приводит к необходимости разработки параллельных алгоритмов для решения задачи за приемлемое время.

В статье описана идея параллельного алгоритма решения задачи дифракции; проведен обзор вычислительных экспериментов на многоядерном персональном компьютере, проведен анализ эффективности параллелизации численного метода, реализованного на языке C++ с использованием интерфейса MPI.

1. Интегродифференциальное уравнение задачи дифракции

Будем рассматривать гладкие ориентируемые ограниченные поверхности Ω в \mathbb{R}^3 , заданные параметрически:

$$\mathbf{x}(t) = (x_1(t_1, t_2), x_2(t_1, t_2), x_3(t_1, t_2)). \quad (1)$$

В качестве множества изменения параметров будем рассматривать связную область $D \subset \square^2$, представляющую собой, например, конечное объединение прямоугольников.

Предположим, что функции $x_k \in C^\infty(\bar{D})$, а всюду в \bar{D} матрица Якоби $\hat{J}(t) = \partial \mathbf{x} / \partial t$ имеет ранг, равный 2. Тогда Ω – гладкая поверхность с кусочно-гладкой границей $\partial \Omega$, состоящей из конечного числа дуг, сходящихся под углами, отличными от нулевого. Введение регулярных координат по формуле (1) определяет и гладкое поле нормалей \mathbf{n} на Ω .

Задача дифракции монохроматической электромагнитной волны $(\mathbf{E}, \mathbf{H}) = (\mathbf{E}, \mathbf{H})e^{-i\omega t}$ сводится [1] к векторному интегродифференциальному уравнению:

$$-\left(k_e^2 + \text{grad}_\tau \text{div}_\tau\right) \int_{\Omega} G(x, y) \mathbf{u}(y) ds_y = \mathbf{E}_{0,\tau}(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

здесь $k_e = \omega \sqrt{\epsilon_e \mu_e}$ – волновое число свободного пространства; $\mathbf{E}_{0,\tau}$ – касательная составляющая падающей электрической волны, $G(x, y) = \frac{e^{ik_e|x-y|}}{4\pi|x-y|}$.

Операторы поверхностной (касательной) дивергенции и градиента определяются следующим образом [10, 11]:

$$\text{div}_\tau \mathbf{u} = g^{ij} \partial_i \mathbf{u} \partial_j \mathbf{x}, \quad \text{grad}_\tau \varphi = g^{ij} \partial_i \varphi \partial_j \mathbf{x}, \quad (3)$$

здесь ∂_i – операция дифференцирования по параметру t_i ; g^{ij} – тензор, обратный к метрическому тензору $g_{ij} = \partial_i \mathbf{x} \cdot \partial_j \mathbf{x}$; также опущен знак суммирования по индексам i, j . В случае плоского экрана (например,

$$x_1 = t_1, x_2 = t_2, x_3 = 0) \text{ получим } \text{div}_\tau \mathbf{u} = \frac{\partial u^1}{\partial t_1} + \frac{\partial u^2}{\partial t_2}, \quad \text{grad}_\tau \varphi = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t_1}, \frac{\partial \varphi}{\partial t_2}, 0\right).$$

Оператор $S : W(\bar{\Omega}) \rightarrow W'(\Omega)$ уравнения (2), рассматриваемый как псевдодифференциальный оператор [12] в пространствах сечений векторных расслоений, является фредгольмовым оператором при $k_e \neq 0$ и эллиптическим при $\text{Im} k_e > 0$ [1].

2. Описание численного метода и параллельного алгоритма. Результаты расчетов

Метод Галеркина для уравнения

$$S\mathbf{u} = \mathbf{u}_0, S : W(\bar{\Omega}) \rightarrow W'(\Omega), \quad (4)$$

приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$\langle S\mathbf{u}_N, \mathbf{v}_i \rangle = \langle \mathbf{u}_0, \mathbf{v}_i \rangle, \quad i = 1, \dots, N, \quad (5)$$

здесь $\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{f} \bar{\mathbf{g}} ds$ – полуторалинейная форма, непрерывная на паре пространств W', W ; \mathbf{v}_i – базисные вектор-функции;

$$\mathbf{u}_N(x) = \sum_{i=1}^N c_i \mathbf{v}_i(x), x \in \Omega \quad (6)$$

приближенное решение уравнения (4); c_i – неизвестные коэффициенты.

Определим базисные вектор-функции на произвольном гладком параметризуемом экране Ω . В области параметров $D = [0; a_1] \times [0; a_2]$ с равномерной сеткой узлов

$$t_{1,i_1} = h_1 i_1, t_{2,i_2} = h_2 i_2, h_k = \frac{a_k}{n_k}, i_k = 0, \dots, n_k,$$

введем два набора конечных элементов

$$D_{i_1 i_2}^1 = [t_{i_1}; t_{i_1+2}] \times [t_{i_2}; t_{i_2+1}] \quad (i_1 = 0, \dots, n-2, i_2 = 0, \dots, n-1),$$

$$D_{i_1 i_2}^2 = [t_{i_1}; t_{i_1+1}] \times [t_{i_2}; t_{i_2+2}] \quad (i_1 = 0, \dots, n-1, i_2 = 0, \dots, n-2)$$

и два набора скалярных финитных кусочно-линейных функций

$$v_{i_1 i_2}^{0,1}(t) = \begin{cases} 1 - |t_1 - t_{1,i_1}| h_1^{-1}, & t \in D_{i_1 i_2}^1; \\ 0, & t \notin D_{i_1 i_2}^1; \end{cases} \quad v_{i_1 i_2}^{0,2}(t) = \begin{cases} 1 - |t_2 - t_{2,i_2}| h_2^{-1}, & t \in D_{i_1 i_2}^2; \\ 0, & t \notin D_{i_1 i_2}^2. \end{cases}$$

Определим вектор-функции типа rooftop:

$$\mathbf{v}_{i_1 i_2}^{0,1}(t) = \left(v_{i_1 i_2}^{0,1}(t), 0, 0 \right), \mathbf{v}_{i_1 i_2}^{0,2}(t) = \left(0, v_{i_1 i_2}^{0,2}(t), 0 \right). \quad (7)$$

Такие функции подробно исследованы в [13], а в [7, 8] описано их применение для численного решения задачи дифракции на системе препятствий различной размерности. Таким образом, получено семейство вектор-функций $\mathbf{v}_i^0(t)$, удовлетворяющих [13] условию полноты в пространстве $W(\bar{D})$ (D – плоская область).

Теперь определим базисные функции в пространстве $W(\bar{\Omega})$ сечений $\Omega \rightarrow T\Omega$ касательного расслоения $T\Omega$ гладкой поверхности Ω . Так как по предположению координаты на Ω являются гладкими, то дифференциал

$$d\mathbf{x}(t) : T_t D \rightarrow T_x \Omega$$

есть биекция.

Базисные функции $\mathbf{v}_{i_1 i_2}^k(x)$ в точках $x = x(t) = x(t_1, t_2)$ неплоского экрана определим как перенесенные дифференциалом $d\mathbf{x}$ вектор-функции типа rooftop:

$$\mathbf{v}_{i_1 i_2}^k(x(t)) = dx \mathbf{v}_{i_1 i_2}^{0,k}(t_1, t_2), x(t) \in \Omega. \quad (8)$$

Число базисных функций при заданном разбиении равно

$$N = (n_1 - 1)n_2 + (n_2 - 1)n_1.$$

На рис. 1,а представлен график второй компоненты функций $\mathbf{v}_{11}^{0,2}(t)$ на прямоугольнике $D = (0; 2\pi) \times (0; \pi)$ при числе разбиений $n_1 = n_2 = 4$. На рис. 1,б,в,г изображены соответственно первая, вторая и третья компоненты базисной вектор-функции \mathbf{v}_{11}^2 на единичной сфере.

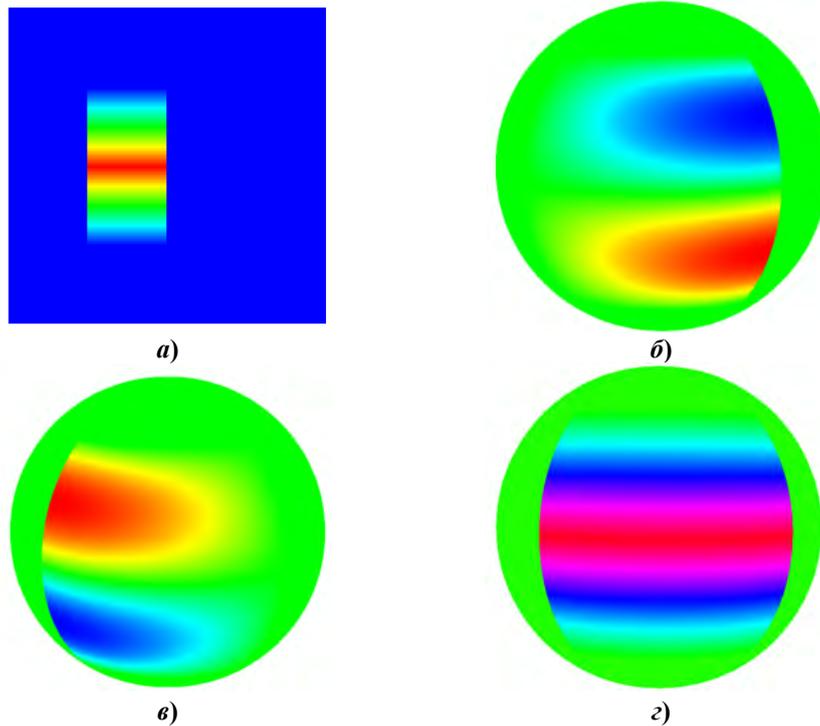


Рис. 1. Функция $\mathbf{v}_{11}^{0,2}(t) \in [0; 1]$ на D (а); первая (б), вторая (в) и третья (г) компоненты базисной вектор-функции \mathbf{v}_{11}^2 на единичной сфере

Расширенную матрицу системы линейных алгебраических уравнений (5) представим в блочном виде:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{11} & \mathbf{S}^{12} & \mathbf{f}^1 \\ \mathbf{S}^{21} & \mathbf{S}^{22} & \mathbf{f}^2 \end{pmatrix}.$$

Элементы столбца правой части вычисляются по формулам:

$$\left(\mathbf{f}^k\right)^{i_1 i_2} = \left\langle \mathbf{E}^0, \mathbf{v}_{i_1 i_2}^k \right\rangle = \int_{D_{i_1 i_2}^k} \mathbf{E}^0(x(t)) \cdot \mathbf{v}_{i_1 i_2}^k(x(t)) \sqrt{g(t)} dt, \quad (9)$$

где $g(t) = \det g_{ij}(t) = g_{11}(t)g_{22}(t) - g_{12}^2(t)$. Элементы блоков основной матрицы таковы:

$$\begin{aligned} (S^{kl})_{j_1 j_2}^{i_1 i_2} &= \left\langle S \mathbf{v}_{j_1 j_2}^l, \mathbf{v}_{i_1 i_2}^k \right\rangle = \\ &= \int_{D_{i_1 i_2}^k} \left(g^{\mu\nu} \partial_\mu (g^{\alpha\beta} \partial_\alpha A \mathbf{v}_{j_1 j_2}^l(t) \partial_\beta \mathbf{x}) \partial_\nu \mathbf{x} + k_e^2 A \mathbf{v}_{j_1 j_2}^l(t) \right) \cdot \mathbf{v}_{i_1 i_2}^k(x(t)) \sqrt{g(t)} dt, \end{aligned} \quad (10)$$

здесь

$$A \mathbf{v}_{j_1 j_2}^l(t) = \int_{D_{j_1 j_2}^l} G(x(t), x(s)) \mathbf{v}_{j_1 j_2}^l(x(s)) \sqrt{g(s)} ds. \quad (11)$$

Для заполнения матрицы системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) требуется много времени, особенно при большом числе базисных функций, необходимом для получения приближенных решений задачи с приемлемой точностью.

Эффективным оказывается простейший параллельный алгоритм заполнения матрицы СЛАУ. Пусть N – порядок матрицы, а M – число процессов. Будем заполнять и хранить на p -м процессе ($p = 0, \dots, M - 1$) горизонтальные блоки расширенной матрицы S размера $N_p \times (N + 1)$. Здесь число N_p строк p -го блока равно $[N / p]$ ($[\cdot]$ – операция вычисления целой части), если $p \neq M - 1$, а $N_{M-1} = N - (M - 1)[N / p]$.

В табл. 1 приведены сведения о времени (в секундах) заполнения матрицы СЛАУ при различном значении N порядка матрицы и числа M задействованных процессов. Вычисления проводились на суперкомпьютере «Ломоносов-2» Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова [14].

Таблица 1

Число разбиений $n_1 = n_2$	8	16	32	64
Порядок матрицы N	112	480	1984	8064
Число процессов M				
4	3.4	31	380	5649
8	1.6	15	190	2824
16	0.739	7.5	94	1400
32	0.29	3.4	46	700
64	0.08	1.6	23	358

Для решения СЛАУ предложена простейшая параллельная реализация метода Гаусса. На k -м шаге метода (k – номер ведущей строки) осуществляется:

– определение номера p_k процесса, на котором хранится ведущая строка;

- преобразование ведущей строки (деление ее на ведущий элемент) на p_k -м процессе;
- рассылка преобразованной ведущей строки от p_k -го процесса всем остальным процессам;
- выполнение всеми процессами процедуры исключения Жордана – Гаусса.

В табл. 2 представлены данные о зависимости времени решения СЛАУ методом Гаусса от порядка M матрицы и числа процессов N .

Таблица 2

Порядок матрицы N	112	480	1984	8064
Число процессов M				
4	0,0007	0,031	2,4	288
8	0,0008	0,018	1,8	163
16	0,4	0,34	0,9	82
32	0,82	0,77	1	56
64	2,31	1,7	2	36

Применение параллельного алгоритма для решения СЛАУ методом Гаусса оказалось эффективным при достаточно больших значениях порядка матрицы (более тысячи). При малых же происходит существенное замедление вычислений: сказываются относительно большие затраты времени на обработку межпроцессорного обмена данными в сравнении со временем, необходимым для выполнения арифметических операций.

На рис. 2 представлены графики приближенных решений задачи дифракции плоской электромагнитной волны $\mathbf{E}^0(x) = (0, e^{ik_e x_1}, 0)$ на единичной сфере $\Omega = S_1(0)$ с центром в начале координат (диаметр сферы равен 2 м). Волновое число поглощающего пространства $k_e = 1 + i \cdot 0.001$, что соответствует электромагнитной волне с длиной волны $\lambda = 2\pi$ м и круговой частотой $\omega \approx 3 \cdot 10^8$ Гц.

Особенности поведения векторного решения задачи отображены на рис. 3, где, помимо модуля $|\mathbf{u}_N|$, решения при $N = 32512$ представлены модули всех его компонент u_N^1, u_N^2, u_N^3 .

Заключение

Рассмотрена векторная задача дифракции электромагнитной волны на неплоском идеально проводящем экране. Сформулирован метод Галеркина решения сингулярного интегродифференциального уравнения по поверхности экрана. На гладких неплоских параметризованных экранах определены базисные вектор-функции. Предложена и программно реализована параллельная версия метода Галеркина. Выполнены вычислительные тесты, иллюстрирующие сходимость метода, правильность и эффективность его параллельной реализации.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

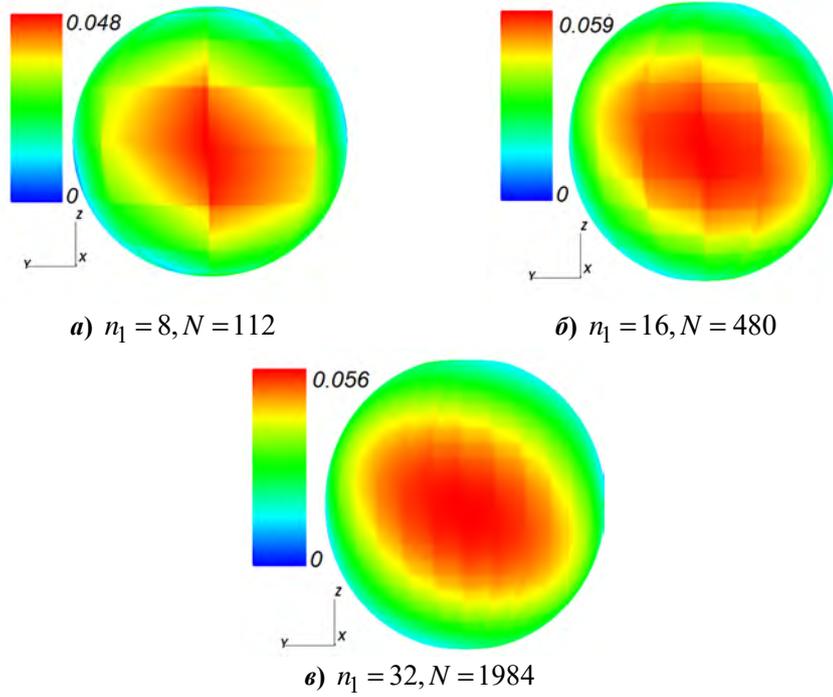


Рис. 2. Модуль приближенных решений \mathbf{u}_N интегродифференциального уравнения на единичной сфере

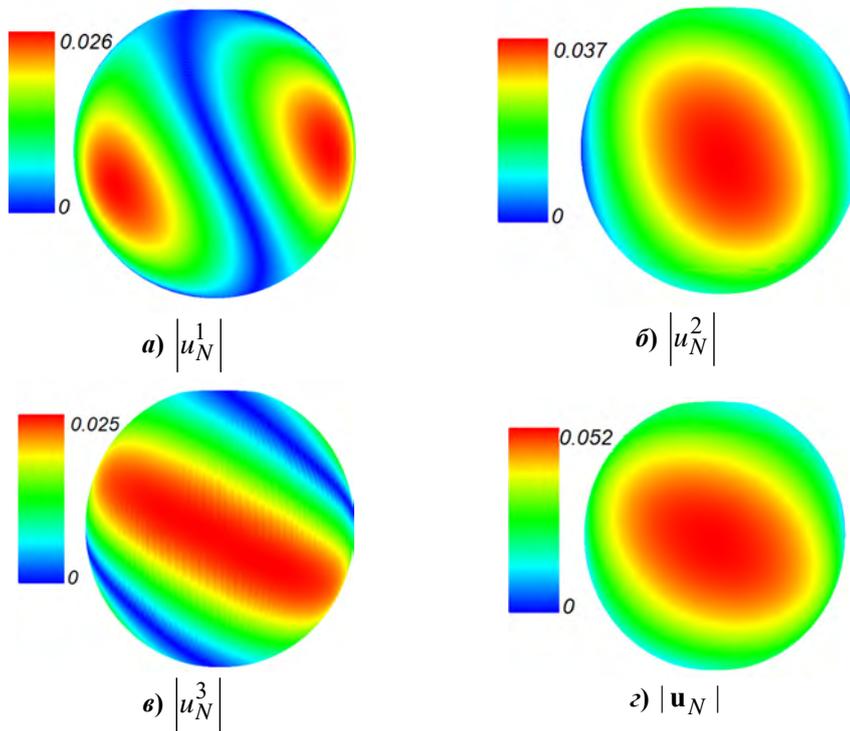


Рис. 3. Решение задачи на единичной сфере при $n_1 = 128, N = 32512$

Библиографический список

1. **Ильинский, А. С.** Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах / А. С. Ильинский, Ю. Г. Смирнов. – Москва : ИПРЖ «Радиотехника», 1998. – 176 с.
2. **Kress, R.** Linear integral equations / R. Kress. – Berlin : Springer-Verlag, 1989.
3. **Rao, S. M.** Electromagnetic Scattering by Surface of Arbitrary Shape / S. M. Rao, D. R. Wilton, A. W. Glisson // IEEE Trans. Antennas Propagation. – 1982. – Vol. AP-30, № 3. – P. 40930–418.
4. **Hänninen, I.** Singularity subtraction integral formulae for surface integral equations with RWG, rooftop and hybrid basis functions / I. Hänninen, M. Taskinen and J. Sarvas // Prog. Electromagn. Res. PIER. – 2006. – Vol. 63. – P. 243–278.
5. **Смирнов, Ю. Г.** О сходимости методов Галеркина для уравнений с операторами, эллиптическими на подпространствах, и решении уравнения электрического поля // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2007. – Т. 47, № 1. – С. 133–143.
6. **Антонов, А. В.** Разработка web-ориентированного вычислительного комплекса для решения трехмерных векторных задач дифракции электромагнитных волн на основе субиерархических параллельных алгоритмов и ГРИД-технологий / А. В. Антонов, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2007. – № 4. – С. 60–67.
7. **Смирнов, Ю. Г.** Решение задачи электромагнитной волны на экранах сложной формы / Ю. Г. Смирнов, М. Ю. Медведик, М. А. Максимова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – № 4. – С. 59–72.
8. **Смирнов, Ю. Г.** Численное решение задачи дифракции электромагнитных волн на системе тел и экранов / Ю. Г. Смирнов, М. Ю. Медведик, А. А. Цупак, М. А. Максимова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 3. – С. 114–134.
9. **Daeva, S. G.** Numerical Simulation of Scattering of Acoustic Waves by Inelastic Bodies using Hypersingular Boundary Equation / S. G. Daeva, A. V. Setukha // AIP Conference Proceedings. – 2015. – Vol. 1648. – P. 39004-1.
10. **Wandzura, S.** Electric current basis functions for curved surface / S. Wandzura // Electromagnetics. – 1992. – Vol. 12. – P. 77–97.
11. **Дубровин, Б. А.** Современная геометрия / Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко. – Москва : Наука, 1982. – 372 с.
12. **Агранович, М. С.** Соболевские пространства, их обобщения и эллиптические задачи в областях с гладкой и липшицевой границей / М. С. Агранович. – Москва : МЦНМО, 2013. – 378 с.
13. **Медведик, М. Ю.** Применение функций крышек для решения задачи дифракции электромагнитных волн на экранах сложной формы / М. Ю. Медведик // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2012. – № 3 (23). – С. 84–98.
14. **Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community / V. I. Voevodin, A. Antonov, D. Nikitenko, P. Shvets, S. Sobolev, I. Sidorov, K. Stefanov, Vad. Voevodin, S. Zhumatiy // Supercomputing Frontiers and Innovations. – 2019. – № 6 (2). – P. 4–11.**

References

1. Il'inskiy A. S., Smirnov Yu. G. *Difraktsiya elektromagnitnykh voln na provodyashchikh tonkikh ekranakh* [Diffraction of electromagnetic waves on thin conducting screens]. Moscow: IPRZh «Radiotekhnika», 1998, 176 p. [In Russian]

2. Kress R. *Linear integral equations*. Berlin: Springer-Verlag, 1989.
3. Rao S. M., Wilton D. R., Glisson A. W. *IEEE Trans. Antennas Propagation*. 1982, vol. Ap-30, no. 3, pp. 40930–418.
4. Hänninen I., Taskinen M., Sarvas J. *Prog. Electromagn. Res. PIER*. 2006, vol. 63, pp. 243–278.
5. Smirnov Yu. G. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Journal of computational mathematics and mathematical physics]. 2007, vol. 47, no. 1, pp. 133–143. [In Russian]
6. Antonov A. V., Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2007, no. 4, pp. 60–67. [In Russian]
7. Smirnov Yu. G., Medvedik M. Yu., Maksimova M. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 4, pp. 59–72. [In Russian]
8. Smirnov Yu. G., Medvedik M. Yu., Tsupak A. A., Maksimova M. A. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2014, no. 3, pp. 114–134. [In Russian]
9. Daeva S. G., Setukha A. V. *AIP Conference Proceedings*. 2015, vol. 1648, pp. 39004-1.
10. Wandzura S. *Electromagnetics*. 1992, vol. 12, pp. 77–97.
11. Dubrovin B. A., Novikov S. P., Fomenko A. T. *Sovremennaya geometriya* [Modern geometry]. Moscow: Nauka, 1982, 372 p. [In Russian]
12. Agranovich M. S. *Sobolevskie prostranstva, ikh obobshcheniya i ellipticheskie zadachi v oblastiakh s gladkoy i lipshitsevoy granitsey* [The Sobolev spaces, their generalizations and elliptic problems in domains with smooth and Lipschitz boundaries]. Moscow: MTsNMO, 2013, 378 p. [In Russian]
13. Medvedik M. Yu. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 3 (23), pp. 84–98. [In Russian]
14. Voevodin V., Antonov A., Nikitenko D., Shvets P., Sobolev S., Sidorov I., Stefanov K., Voevodin Vad., Zhumatiy S. *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2019, no. 6 (2), pp. 4–11.

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 supercom-
puter modeling, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Образец цитирования:

Цупак, А. А. Численный метод и параллельный алгоритм решения задачи дифракции электромагнитной волны на неплоском идеально проводящем экране / А. А. Цупак // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 32–41. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-3.

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ГРАНИЧНОГО УСЛОВИЯ ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

Аннотация.

Актуальность и цели. Задача об определении неизвестного граничного условия часто возникает в различных областях физики и техники в тех случаях, когда непосредственное измерение характеристик поля на части границы затруднено, либо же вовсе невозможно. Примеры задач такого типа можно встретить, в частности, в геофизике, ядерной физике, в обратных задачах теплообмена и т.д. Их сложность в значительной степени обусловлена их некорректностью, т.е. неустойчивостью их решения к возмущениям исходных данных. Учет этого свойства при решении обратных задач приводит к необходимости в разработке специальных методов регуляризации. Несмотря на многочисленные работы, выполненные в данном направлении, до настоящего момента не теряет актуальности проблема разработки новых численных методов решения граничных обратных задач математической физики.

Материалы и методы. Рассматривается начально-краевая задача для одномерного уравнения теплопроводности. Ставится задача о приближенном восстановлении неизвестного граничного условия на одном из концов интервала изменения пространственной переменной в предположении о том, что известными являются функции, определяющие начальное условие, а также граничное условие на другом конце интервала изменения пространственной переменной. В качестве дополнительной информации используются функционалы от решения исходной начально-краевой задачи при некотором фиксированном значении пространственной переменной. При конструировании численного алгоритма решения поставленной задачи (в интегральном представлении) используется подход, основанный на аппроксимации по коллокационной технологии полученного интегрального уравнения и реализации вычислительной схемы итерационным процессом, построенным на базе непрерывного операторного метода решения уравнений в банаховых пространствах. В числе достоинств метода следует назвать в первую очередь его простоту, а также универсальность и устойчивость к возмущениям исходных данных.

Результаты. Построены численные методы решения обратной граничной задачи для одномерного линейного параболического уравнения. Рассмотрены первая и вторая краевые задачи. Эффективность предложенных методов проиллюстрирована решением ряда модельных примеров.

Выводы. Подход к решению прямых и обратных задач математической физики, основанный на применении непрерывного операторного метода решения уравнений в банаховых пространствах, оказался эффективен при решении граничной обратной задачи для линейного одномерного уравнения теплопроводности. Весьма перспективным видится дальнейшее развитие этого подхода для применения его к решению задачи одновременного восстановления

нескольких граничных условий, а также к решению обратных граничных задач для многомерных уравнений.

Ключевые слова: параболическое уравнение, граничная обратная задача, непрерывный операторный метод, логарифмическая норма, регуляризация.

I. V. Boykov, V. A. Ryazantsev

ON THE METHOD FOR RECONSTRUCTING THE BOUNDARY CONDITION FOR PARABOLIC LINEAR EQUATIONS

Abstract.

Background. A problem of determination of unknown boundary condition often appears in different fields of physics and technical sciences in cases when direct measuring of field characteristics at some part of the boundary is difficult or even impossible. Examples of such problems can be found in applications of geophysics, nuclear physics, inverse heat transfer problems etc. Their complexity is mainly due to their ill-posedness, i. e. instability of solutions to different perturbations of initial data. Taking into account this feature while solving such problems leads to necessity for development of special regularization methods. In spite of a lot of results obtained in this direction, until present moment the problem of development of new methods for solution of inverse boundary problems of mathematical physics appears relevant.

Materials and methods. An initial boundary value problem for one-dimensional heat equation is considered in the paper. We consider the problem of approximate recovery of a boundary condition at one end of the interval range on changing in spatial variable while functions determining initial condition and also another boundary condition are assumed to be known. As an additional information about we use functionals of the solution of basic initial boundary value problem at some fixed value of the spatial variable. In order to construct the numerical algorithm for solving the problem we use the approach based on integral representation of the basic problem, approximation of the obtained integral equation by collocation technique and realization of the computational scheme by means of the iteration process that is constructed using continuous operator method for solving equations in Banach spaces. The advantages of the method include its simplicity together with its universality and stability of perturbations of the initial data.

Results. Numerical methods for solving the boundary value problem for one-dimensional linear parabolic equation have been constructed. The boundary value problems of first and second type have been considered. Efficiency of the proposed methods is illustrated with several model examples.

Conclusions. The approach to solving direct and inverse problems of mathematical physics based on application of continuous operator method for solving equations in Banach spaces has been proved to be effective for solving boundary value problem for linear one-dimensional heat equation. Further development of this approach for its application to the problem of simultaneous recovery of several boundary conditions and also to the inverse boundary value problem for multidimensional equations seems to be promising.

Keywords: parabolic equation, boundary value problem, continuous operator method, logarithmic norm, regularization.

Введение

Аналитическим и численным методам решения обратных задач математической физики, в том числе начально-краевых задач для параболических

уравнений, посвящена обширная литература. Особый интерес исследователей, занимающихся разработкой численных методов решения обратных и некорректных задач для параболических уравнений, вызывают градиентные методы [1], в частности, метод наискорейшего спуска [2]. Среди важных работ, посвященных анализу и решению задач о восстановлении граничных условий для уравнений параболического типа, следует назвать работы [3–11]. Тем не менее до настоящего времени существует большая потребность в разработке эффективных численных методов решения граничной обратной задачи для уравнений теплопроводности.

В данной работе в качестве такого метода предлагается непрерывный метод решения нелинейных операторных уравнений.

Следуя работе [12], коротко опишем этот метод.

Рассмотрим операторное уравнение

$$\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{y}, \quad (1)$$

где $\mathbf{x} \in B$, а Φ – оператор, отображающий банахово пространство B в себя.

Поставим уравнению (1) в соответствие задачу Коши для дифференциального уравнения

$$\frac{d\bar{\mathbf{x}}(\sigma)}{d\sigma} = \Phi(\bar{\mathbf{x}}(\sigma)) - \mathbf{y}, \quad (2)$$

$$\bar{\mathbf{x}}(0) = \boldsymbol{\chi}, \quad (3)$$

где $\sigma \geq 0$. Справедлива следующая теорема.

Теорема 1 [12]. Предположим, что уравнение (1) имеет решение $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, причем на любой дифференцируемой кривой $g(t)$, расположенной в шаре $B(0, r)$ радиуса r , справедливы следующие условия:

1) при всяком $\sigma > 0$ имеет место неравенство

$$\int_0^{\sigma} \Lambda(\Phi'(\varphi(s))) ds \leq 0;$$

2) выполняется неравенство

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \frac{1}{\sigma} \int_0^{\sigma} \Lambda(\Phi'(\varphi(s))) ds \leq -\alpha, \quad \alpha > 0.$$

Тогда решение задачи Коши (2)–(3) сходится к решению \mathbf{x}^* уравнения (1).

Здесь через Φ' обозначена производная Фреше оператора Φ . Через $\Lambda(\Phi')$ обозначается логарифмическая норма оператора Φ' , определяемая формулой

$$\Lambda(\Phi') = \lim_{h \downarrow 0} \frac{\|\mathbf{I} - h\Phi'\| - 1}{h},$$

где \mathbf{I} – тождественный оператор, а символ \downarrow означает стремление к нулю, убывая.

1. Постановка задачи

В данной работе рассматривается обобщенная начально-краевая задача для линейного одномерного уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 \leq t \leq T \quad 0 \leq x \leq \ell, \quad (4)$$

$$u(0, x) = \varphi(x), \quad (5)$$

$$\Lambda(u; x=0) = \psi_1(t), \quad \Lambda(u; x=\ell) = \psi_2(t), \quad (6)$$

где $\gamma > 0$, а Λ – оператор, фиксирующий конкретный тип граничного условия рассматриваемой задачи:

– первая краевая задача: $\Lambda(u; x=a) = u(t, a)$;

– вторая краевая задача: $\Lambda(u; x=a) = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a}$.

Дополнительно предполагается, что известной при $0 \leq t \leq T$ является функция $\alpha(t) = u(t, x^*)$, где $x^* \in (0, \ell)$ – некоторое фиксированное значение.

В этих условиях ставятся следующие задачи:

- 1) восстановление $\psi_1(t)$ при известной функции $\psi_2(t)$;
- 2) восстановление $\psi_2(t)$ при известной функции $\psi_1(t)$.

В следующем разделе подробно описывается алгоритм решения первой задачи. Вторая задача решается аналогично, и построение соответствующего алгоритма проводится очевидным образом.

2. Общее описание алгоритма

Общее решение начально-краевой задачи (4)–(6) определяется интегральной формулой [13]

$$u(t, x) = \beta(\varphi, \psi_2; t, x) + \gamma \int_0^t H_1(x, t-s) \psi_1(s) ds, \quad (7)$$

где $\beta(\varphi, \psi_2; t, x)$ и $H_1(t, x)$ определяются способом задания оператора Λ :

– в случае первой краевой задачи:

$$\beta(\varphi, \psi_2; t, x) = \int_0^\ell \varphi(\xi) G(x, \xi, t) d\xi - \gamma \cdot \int_0^t H_2(x, t-s) \psi_2(s) ds,$$

$$H_1(x, t) = \frac{\partial}{\partial \xi} G(x, \xi, t) \Big|_{\xi=0}, \quad H_2(x, t) = \frac{\partial}{\partial \xi} G(x, \xi, t) \Big|_{\xi=\ell};$$

где

$$G(x, \xi, t) = G_1(x, \xi, t) = \frac{2}{\ell} \sum_{k=1}^{\infty} \sin\left(\frac{k\pi x}{\ell}\right) \sin\left(\frac{k\pi \xi}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{\gamma k^2 \pi^2 t}{\ell^2}\right) =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi\gamma t}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi+2k\ell)^2}{4\gamma t}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi+2k\ell)^2}{4\gamma t}\right] \right\}; \quad (8)$$

– в случае второй краевой задачи:

$$\beta(\varphi, \psi_2; t, x) = \int_0^{\ell} \varphi(\xi) G(x, \xi, t) d\xi + \gamma \int_0^t \psi_2(s) G(x, \ell, t-s) ds,$$

$$H_1(x, t) = -\gamma \cdot G(x, 0, t),$$

где

$$G(x, \xi, t) = G_2(x, \xi, t) = \frac{1}{\ell} + \frac{2}{\ell} \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left(\frac{k\pi x}{\ell}\right) \cos\left(\frac{k\pi \xi}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{\gamma k^2 \pi^2 t}{\ell^2}\right) =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi\gamma t}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi+2k\ell)^2}{4\gamma t}\right] + \exp\left[-\frac{(x+\xi+2k\ell)^2}{4\gamma t}\right] \right\}. \quad (9)$$

Зафиксируем в уравнении (7) $x = x^*$ и запишем его в следующем виде:

$$\beta(\varphi, \psi_2; t, x^*) + \gamma \int_0^t H_1(x^*, t-s) \psi_1(s) ds - \alpha(t) = 0. \quad (10)$$

Введем на интервале $t \in [0, T]$ равномерную сетку из узлов $t_i = i\tau$, $i = \overline{0, M}$, с шагом $\tau = T/M$, где M – достаточно большое целое положительное число. Тогда интервал $t \in [0, T]$ разобьется на интервалы

$$[t_0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{M-2}, t_{M-1}], [t_{M-1}, t_M].$$

Рассмотрим вопрос о подходящем способе аппроксимации интеграла:

$$\int_0^{t_i} H_1(x^*, t_i - s) \psi_1(s) ds.$$

Запишем этот интеграл в виде суммы:

$$\int_0^{t_i} H_1(x^*, t_i - s) \psi_1(s) ds = \sum_{m=0}^{i-1} \int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) \psi_1(s) ds.$$

Согласно обобщенной теореме о среднем в интервале $[t_m, t_{m+1}]$ найдется такая точка $\tilde{s}_{i,m}$, что

$$\int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) \Psi_1(s) ds = \Psi_1(\tilde{s}_{i,m}) \left(\int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) ds \right). \quad (11)$$

Предположив, что шаг разбиения τ достаточно мал, примем

$$\tilde{s}_{i,m} = t_{m+1/2} = t_m + \tau/2, \quad m = \overline{0, i-1}, \quad i = \overline{1, M}.$$

Тогда формула (11) заменится приближенной формулой:

$$\int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) \Psi_1(s) ds \approx \Psi_1(t_{m+1/2}) \left(\int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) ds \right) = \Psi_1(t_{m+1/2}) \mu_{i,m},$$

$$\mu_{i,m} = \int_{t_m}^{t_{m+1}} H_1(x^*, t_i - s) ds. \quad (12)$$

Покажем, что интеграл $\mu_{i,m}$ может быть во всех случаях вычислен аналитически.

Пусть сначала рассматривается первая краевая задача. Имеем:

$$\begin{aligned} \mu_{i,m} &= \frac{2\pi}{\ell^2} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\int_{t_m}^{t_{m+1}} \exp\left(-\frac{\gamma k^2 \pi^2 (t_i - s)}{\ell^2}\right) ds \right) \cdot k \sin\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right) = \\ &= \frac{2}{\gamma\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(\frac{\gamma k^2 \pi^2 (t_i - s)}{\ell^2}\right) \Big|_{s=t_m}^{s=t_{m+1}} \cdot \frac{\sin\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right)}{k} = \\ &= \frac{2}{\gamma\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ e^{\frac{\gamma k^2 \pi^2 (i-m-1)\tau}{\ell^2}} - e^{\frac{\gamma k^2 \pi^2 (i-m)\tau}{\ell^2}} \right\} \cdot \frac{\sin\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right)}{k}. \end{aligned} \quad (13)$$

Теперь рассмотрим вторую краевую задачу. В этом случае:

$$\begin{aligned} \mu_{i,m} &= -\frac{1}{\ell} \left[\int_{t_m}^{t_{m+1}} ds + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right) \cdot \int_{t_m}^{t_{m+1}} \exp\left(-\frac{\gamma k^2 \pi^2 (t_i - s)}{\ell^2}\right) ds \right] = \\ &= -\frac{1}{\ell} \left[\tau + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right) \cdot \frac{\ell^2}{\gamma k^2 \pi^2} \cdot \exp\left(-\frac{\gamma k^2 \pi^2 (t_i - s)}{\ell^2}\right) \Big|_{t_m}^{t_{m+1}} \right] = \end{aligned}$$

$$= -\frac{\tau}{\ell} - \frac{2\ell}{\gamma\pi^2} \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{k\pi x^*}{\ell}\right)}{k^2} \cdot \left[e^{-\frac{\gamma k^2 \pi^2 \tau(i-m-1)}{\ell^2}} - e^{-\frac{\gamma k^2 \pi^2 \tau(i-m)}{\ell^2}} \right]. \quad (14)$$

Таким образом, при $t = t_i$ интеграл в левой части уравнения (10) аппроксимируется следующим образом:

$$\int_0^{t_i} H_1(x^*, t_i - s) \psi_1(s) ds \approx \sum_{m=0}^{i-1} \psi_1(t_{m+1/2}) \mu_{i,m}. \quad (15)$$

Приняв $t = t_i$ и подставив аппроксимацию (15) в уравнение (10), получаем

$$\beta_i + \gamma \sum_{m=0}^{i-1} \psi_1(t_{m+1/2}) \mu_{i,m} - \alpha_i = 0, \quad (16)$$

где $\beta_i = \beta(\varphi, \psi_2; t_i, x)$, $\alpha_i = \alpha(t)$.

Уравнение (16) служит основой для построения численных методов восстановления функции $\psi_1(t)$.

Для построения численного метода восстановления функции $\psi_1(t)$ воспользуемся непрерывным операторным методом. Введем в рассмотрение вспомогательные функции $\bar{\psi}_{1,j}(\sigma)$ ($j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{2M-1}{2}$) такие, что $\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \bar{\psi}_{1,j}(\sigma) = \psi_1(t_j)$. В соответствии с описанием непрерывного операторного метода функции $\bar{\psi}_{1,j}(\sigma)$ удовлетворяют следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\bar{\psi}_{1,\frac{1}{2}}}{d\sigma} = v_1 \left\{ \beta_1 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \bar{\psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma) \mu_{1,0} - \alpha_1 \right\}, \quad (17)$$

$$\frac{d\bar{\psi}_{1,\frac{3}{2}}}{d\sigma} = v_2 \left\{ (\beta_2 - \beta_1) + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \bar{\psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma) \mu_{2,1} - (\alpha_2 - \alpha_1) \right\}, \quad (18)$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\frac{d\bar{\psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}}{d\sigma} = v_M \left\{ \left(\beta_M - \sum_{k=1}^{M-1} \beta_k \right) + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \bar{\psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(\sigma) \mu_{1,M-1} - \left(\alpha_M - \sum_{k=1}^M \alpha_k \right) \right\}, \quad (19)$$

здесь $v_j = \pm 1$ ($j = \overline{1, M}$) – константы, фиксируемые таким образом, чтобы логарифмическая норма матрицы в правой части рассматриваемой системы дифференциальных уравнений была отрицательной.

Для обеспечения единственности решения системы дифференциальных уравнений (17)–(19) необходимо присоединить к ней совокупность началь-

ных условий. С вычислительной точки зрения целесообразно зафиксировать начальные условия при помощи формулы

$$\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(0) = \dots = \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(0) = \Psi_1(0). \tag{20}$$

Для решения задачи (17)–(20) применим широкий спектр численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений. В частности, легко видеть, что при непосредственном решении системы (17)–(20) процесс решения распадается на M последовательных этапов, на каждом из которых приближенно решается одно из уравнений системы. Однако в связи с влиянием ошибок при аппроксимации интегралов, а также погрешностей в исходных данных задачи такой подход представляется нецелесообразным, поскольку он приводит к значительным отклонениям от решения. Поэтому ниже предложен альтернативный подход к решению задачи (17)–(20), позволяющий уменьшить влияние погрешностей на решение.

Преобразуем систему (17)–(19) следующим образом:

$$\frac{d\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}}{d\sigma} = v_1 \left\{ \beta_1 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma) - \alpha_1 \right\}, \tag{21}$$

$$\frac{d\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}}{d\sigma} + \frac{d\bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}}{d\sigma} = v_2 \left\{ \beta_2 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \left[\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma) + \bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma) \right] - \alpha_2 \right\}, \tag{22}$$

.....

$$\sum_{k=1}^M \frac{d\bar{\Psi}_{1,\frac{2k-1}{2}}}{d\sigma} = v_M \left\{ \beta_M + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \left(\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma) + \bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma) + \dots + \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(\sigma) \right) - \alpha_M \right\}. \tag{23}$$

Решение системы (21)–(23) осуществляется методом Эйлера. Пусть θ – шаг метода Эйлера, а L – число итераций метода Эйлера. Тогда одна итерация метода заключается в последовательном счете по следующим формулам:

$$\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(1)}) = \bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(0)}) + v_1 \cdot \theta \cdot \left\{ \beta_1 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(0)}) - \alpha_1 \right\}, \tag{24}$$

$$\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(2)}) = \bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(1)}) + \theta \cdot v_2 \cdot \left\{ \beta_2 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \left[\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(1)}) + \bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma_r^{(0)}) \right] - \alpha_2 \right\}, \tag{25}$$

$$\bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma_r^{(1)}) = \bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma_r^{(0)}) + \theta \cdot v_2 \cdot \left\{ \beta_2 + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \left[\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(2)}) + \bar{\Psi}_{1,\frac{3}{2}}(\sigma_r^{(0)}) \right] - \alpha_2 \right\}, \tag{26}$$

.....

$$\begin{aligned} & \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(\sigma_r^{(1)}) = \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(\sigma_r^{(0)}) + \\ & + v_M \cdot \theta \cdot \left\{ \beta_M + \frac{\gamma\tau}{2} \cdot \left(\bar{\Psi}_{1,\frac{1}{2}}(\sigma_r^{(M)}) + \dots + \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-3}{2}}(\sigma_r^{(2)}) + \bar{\Psi}_{1,\frac{2M-1}{2}}(\sigma) \right) - \alpha_M \right\}, \tag{27} \end{aligned}$$

здесь $\sigma_r = \sigma_r^{(0)}$. Набор значений, найденных на текущей итерации, фиксируется в соответствии с формулами

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{1, \frac{1}{2}}(\sigma_{r+1}) &= \bar{\Psi}_{1, \frac{1}{2}}(\sigma_r^{(M)}), \bar{\Psi}_{1, \frac{3}{2}}(\sigma_{r+1}) = \bar{\Psi}_{1, \frac{3}{2}}(\sigma_r^{(M-1)}), \dots, \\ \bar{\Psi}_{1, \frac{2M-3}{2}}(\sigma_{r+1}) &= \bar{\Psi}_{1, \frac{2M-3}{2}}(\sigma_r^{(2)}), \bar{\Psi}_{1, \frac{2M-1}{2}}(\sigma_{r+1}) = \bar{\Psi}_{1, \frac{2M-1}{2}}(\sigma_r^{(1)}). \end{aligned} \quad (28)$$

Результат работы алгоритма определяется формулами

$$\Psi_1(t_{1/2}) \approx \bar{\Psi}_{1, 1/2}(\sigma_L), \dots, \Psi_1(t_{(2M-1)/2}) \approx \bar{\Psi}_{1, (2M-1)/2}(\sigma_L). \quad (29)$$

Замечание 1. Заметим, что вышеописанный подход допускает обобщение на другие типы краевых задач, а также на краевые задачи для уравнения вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Phi(t, x).$$

Замечание 2. Поскольку в реальных задачах исходные данные, как правило, являются известными не точно, а с некоторыми погрешностями, то на практике часто приходится выполнять ряд действий, направленных на уменьшение влияния погрешностей входных данных на решение задачи. В число таковых действий входят, в частности, предварительная обработка входных данных для фильтрации упомянутых погрешностей, а также постобработка решения, например, при помощи метода наименьших квадратов.

3. Решение модельных примеров

Модельный пример 1. Рассмотрим первую краевую задачу для уравнения (1), в которой $0 \leq x \leq 1$ и $\gamma = 1$. Известны функции

$$\varphi(x) = e^{-x} \cos(x), \quad \Psi_2(t) = e^{-1} \cos(1 - 2t), \quad u\left(t, \frac{1}{4}\right) = e^{-1/4} \cos\left(\frac{1}{4} - 2t\right).$$

Поставим задачу о восстановлении функции $\Psi_1(t)$ при $0 \leq t \leq 1$.

Замечание 3. Точное решение поставленной задачи определяется формулой $\Psi_1(t) = \cos(2t)$ при точном решении задачи (1)–(3), равном

$$u(t, x) = e^{-x} \cos(x - 2t).$$

При численных расчетах были зафиксированы следующие параметры метода: $\tau = 0,01$, $L = 100$, $\theta = 0,01$. Все значения $\bar{\Psi}_{1, 1/2}(0), \dots, \bar{\Psi}_{1, (2M-1)/2}(0)$ фиксировались равными 1. Значения функции $G_1(x, \xi, t)$ определялись приближенно по формуле (8) в результате вычисления суммы первых 100 членов рядов, причем при $t \leq 0,2$ использовался первый ряд, а при $t > 0,2$ использовался второй ряд. Интегралы, входящие в функцию $\beta(\varphi, \Psi_2; t_i, x)$,

вычислялись приближенно по квадратурной формуле средних прямоугольников с шагами $\tau = 0,01$ по переменной t и $h = 0,01$ по переменной x .

Предположим сначала, что исходные данные задачи известны точно. Соответствующий результат восстановления функции $\psi_1(t)$ представлен на рис. 1.

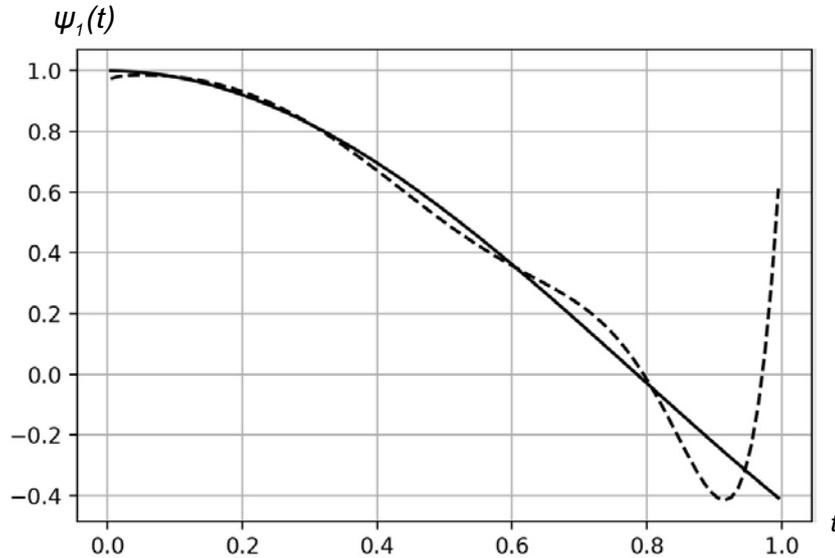


Рис. 1. Решение примера 1 в условиях отсутствия погрешностей

Здесь и далее сплошной линией изображено точное решение задачи, а пунктирной линией – ее приближенное решение.

Теперь пусть исходные данные задачи возмущаются случайными погрешностями, по модулю не превосходящими 0,1. Тогда результат восстановления $\psi_1(t)$ при прежних параметрах метода показан на рис. 2.

Целесообразной представляется дополнительная обработка результата с целью получения более гладкого решения. Для этого будем искать функцию $\psi_1(t)$ в виде полинома

$$\psi_1(t) = a_0 t^5 + a_1 t^4 + a_2 t^3 + a_3 t + a_4,$$

коэффициенты которого ищутся на основании найденного приближенного набора значений $\psi_1(t_{1/2}), \dots, \psi_1(t_{(2M-1)/2})$ при помощи метода наименьших квадратов. Результат представлен на рис. 3.

Модельный пример 2. Теперь рассмотрим вторую краевую задачу для уравнения (1), в которой $0 \leq x \leq 1$ и $\gamma = 1$. В число исходных данных входят функции

$$\varphi(x) = e^{-x} \sin(x), \quad \psi_2(t) = e^{-1} [\sin(2t-1) + \cos(2t-1)],$$

$$u\left(t, \frac{1}{3}\right) = e^{-1/3} \sin\left(\frac{1}{3} - 2t\right).$$

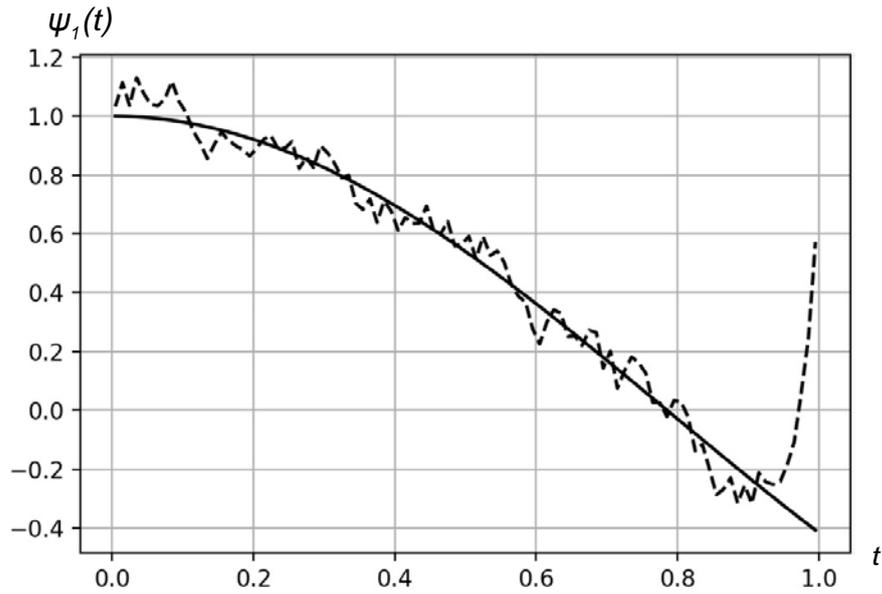


Рис. 2. Решение примера 1 в условиях наличия погрешностей

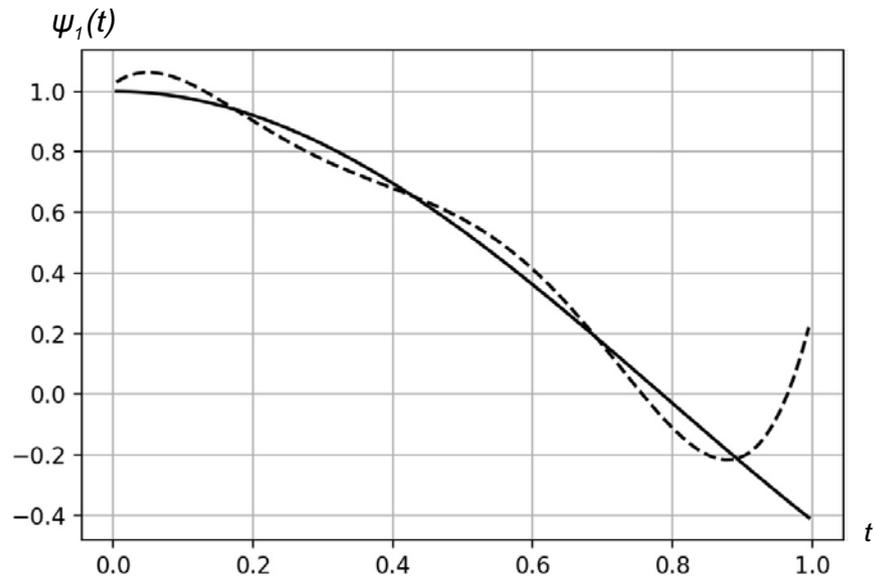


Рис. 3. Сглаживание решения примера 1 методом наименьших квадратов

Ставится задача восстановления функции $\psi_1(t)$ при $0 \leq t \leq 1$.

Замечание 4. Точное решение задачи фиксируется формулой $\psi_1(t) = \sin(2t) + \cos(2t)$ при точном решении задачи (1)–(3), равном

$$u(t, x) = e^{-x} \sin(x - 2t).$$

При проведении численных экспериментов использовались следующие параметры метода: $\tau = 0,01$, $L = 1000$, $\theta = 0,01$. Все значения $\bar{\Psi}_{1,1/2}(0), \dots$

$\bar{\Psi}_{1,(2M-1)/2}(0)$ принимались равными 1. Значения функции $G_2(x, \xi, t)$ вычислялись приближенно по формуле (9) ограничиваясь вычислением суммы первых 100 членов рядов, причем при $t \leq 0,2$ применялся первый ряд, а при $t > 0,2$ применялся второй ряд. Интегралы функции $\beta(\varphi, \psi_2; t_i, x)$ вычислялись приближенно по квадратурной формуле средних прямоугольников с шагами $\tau = 0,01$ по переменной t и $h = 0,1$ по переменной x .

Предположим вначале, что исходные данные задачи известны точно. Соответствующий результат восстановления $\psi_1(t)$ проиллюстрирован на рис. 4.

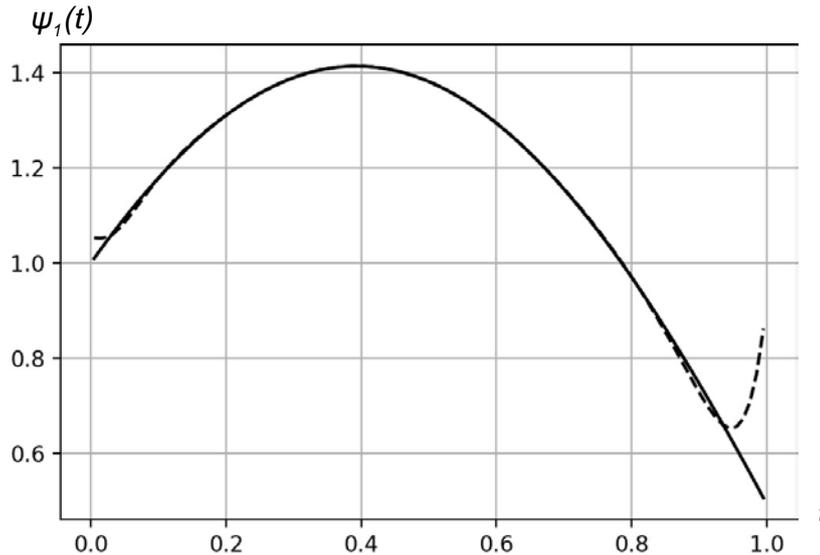


Рис. 4. Решение примера 2 в условиях отсутствия погрешностей

Далее предположим, что исходные данные задачи возмущаются случайными погрешностями, по модулю не превосходящими 0,05. Тогда результат восстановления $\psi_1(t)$ при тех же значениях параметров вычислительной схемы продемонстрирован на рис. 5.

Дополнительная обработка результата с целью получения более гладкого решения проводилась следующим образом. Решение задачи искалось в виде полинома

$$\psi_1(t) = a_1 t^4 + a_2 t^3 + a_3 t + a_4,$$

коэффициенты которого определялись на основе найденного множества значений $\psi_1(t_{1/2}), \dots, \psi_1(t_{(2M-1)/2})$ методом наименьших квадратов. Результат показан на рис. 6.

Заключение

В работе предложены численные методы восстановления граничного условия в начально-краевой задаче для линейного одномерного параболиче-

ского уравнения. Рассмотрены первая и вторая краевые задачи. Основой упомянутых методов служит непрерывный операторный метод решения уравнений в банаховых пространствах. Сходимость методов может быть обоснована с использованием аппарата теории устойчивости решений дифференциальных уравнений. Решение модельных примеров проиллюстрировало эффективность разработанных методов. Весьма перспективными направлениями дальнейших исследований являются распространения предложенного в статье подхода на многомерные уравнения, нелинейные уравнения, а также задачи одновременного восстановления нескольких граничных условий.

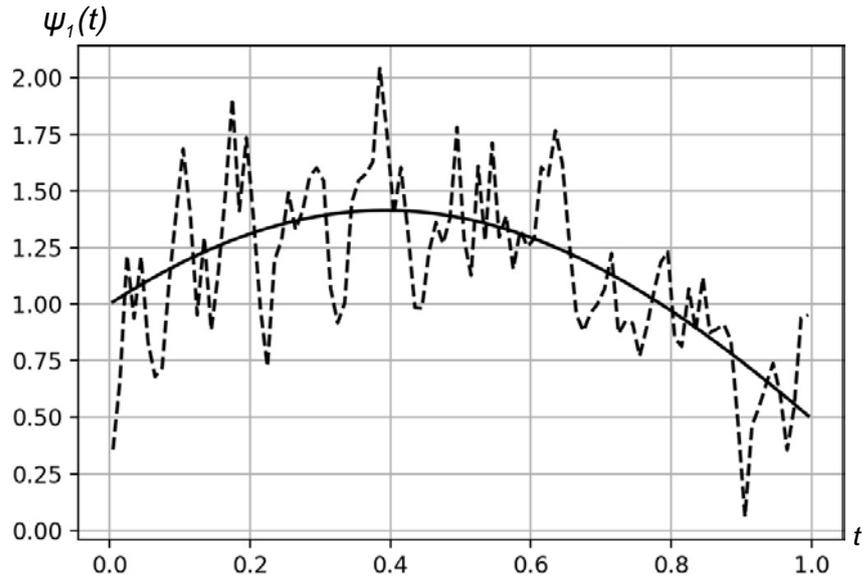


Рис. 5. Решение примера 2 в условиях наличия погрешностей

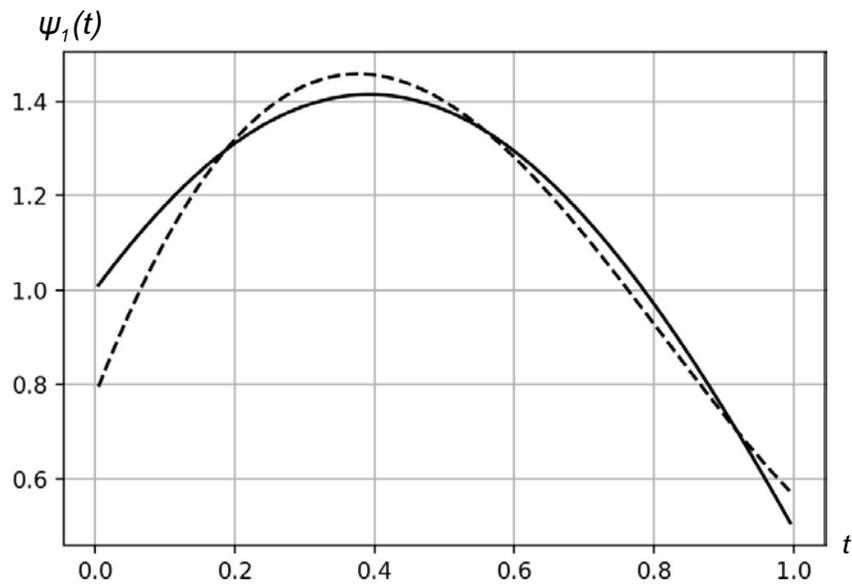


Рис. 6. Сглаживание решения примера 2 методом наименьших квадратов

Библиографический список

1. **Алифанов, О. М.** Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена / О. М. Алифанов, Е. А. Артюхин, С. В. Румянцев. – Москва : Наука, 1988. – 288 с.
2. **Кабанихин, С. И.** Обратные и некорректные задачи / С. И. Кабанихин. – Новосибирск : Сибирское научное издательство, 2009. – 457 с.
3. **Алифанов, О. М.** Обратные задачи теплообмена / О. М. Алифанов. – Москва : Машиностроение, 1988. – 280 с.
4. **Иванов, В. К.** Теория линейных некорректных задач и ее приложения / В. К. Иванов, В. В. Васин, В. П. Танана. – Москва : Наука, 1978. – 206 с.
5. **Самарский, А. А.** Вычислительная теплопередача / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – Москва : Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
6. **Бек, Дж.** Некорректные обратные задачи теплопроводности / Дж. Бек, Б. Блакуэлл, Ч. Сент-Клэр. – Москва : Мир, 1989. – 312 с.
7. **Vasil'ev, V. V.** The numerical solution of the boundary inverse problem for a parabolic equation / V. V. Vasil'ev, M. V. Vasilyeva, A. M. Kardashevsky // AIP Conference Proceedings – 2016. – Vol. 1773, iss. 1. – Art. ID 100010.
8. **Vasiliev, V. I.** Numerical method for solving boundary inverse problem for one-dimensional parabolic equation / V. I. Vasiliev, L. Su // Математические заметки СВФУ. – 2017. – Т. 24, № 2. – С. 108–117.
9. **Jonas, P.** Approximate inverse for a one-dimensional inverse heat conduction problem / P. Jonas, A. K. Louis // Inverse Problems. – 1999. – Vol. 16, iss. 1. – P. 175–185.
10. **Hon, Y. C.** The method of fundamental solution for solving multidimensional inverse heat conduction problems / Y. C. Hon, Y. Wei // CMES – Computer Modelling in Engineering and Sciences. – 2005. – Vol. 7, iss. 2. – P. 119–132.
11. **Wen, P. H.** Inverse heat conduction problems by using particular solutions / P. H. Wen, Y. C. Hon, Y. G. Xu // Heat Transfer Asian Res. – 2011. – Vol. 40, iss. 2. – P. 171–186.
12. **Бойков, И. В.** Об одном непрерывном методе решения нелинейных операторных уравнений / И. В. Бойков // Дифференциальные уравнения. – 2012. – Т. 48, № 9. – С. 1308–1314.
13. **Полянин, А. Д.** Справочник по линейным уравнениям математической физики / А. Д. Полянин. – Москва : Физматлит, 2001. – 576 с.

References

1. Alifanov O. M., Artyukhin E. A., Romyantsev S. V. *Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach i ikh prilozheniya k obratnym zadacham teploobmena* [Extreme methods for solving ill-posed problems and their application to inverse problems of heat exchange]. Moscow: Nauka, 1988, 288 p. [In Russian]
2. Kabanikhin S. I. *Obratnye i nekorrektnye zadachi* [Inverse and ill-posed problems]. Novosibirsk: Sibirskoe nauchnoe izdatel'stvo, 2009, 457 p. [In Russian]
3. Alifanov O. M. *Obratnye zadachi teploobmena* [Inverse problems of heat exchange]. Moscow: Mashinostroenie, 1988, 280 p. [In Russian]
4. Ivanov V. K., Vasin V. V., Tanana V. P. *Teoriya lineynykh nekorrektnykh zadach i ee prilozheniya* [Theory of linear ill-posed problems and its applications]. Moscow: Nauka, 1978, 206 p. [In Russian]
5. Samarskiy A. A., Vabishchevich P. N. *Vychislitel'naya teploperedacha* [Computational heat transfer]. Moscow: Editorial URSS, 2003, 784 p. [In Russian]
6. Bek Dzh., Blakuell B., Sent-Kler Ch. *Nekorrektnye obratnye zadachi teploprovodnosti* [Ill-posed inverse heat conduction problems]. Moscow: Mir, 1989, 312 p. [In Russian]
7. Vasil'ev V. V., Vasilyeva M. V., Kardashevsky A. M. *AIP Conference Proceedings*. 2016, vol. 1773, iss. 1, Art. ID 100010.

8. Vasiliev V. I., Su L. *Matematicheskie zametki SVFU* [Mathematical notes of NEFU]. 2017, vol. 24, no. 2, pp. 108–117. [In Russian]
9. Jonas P., Louis A. K. *Inverse Problems*. 1999, vol. 16, iss. 1, pp. 175–185.
10. Hon Y. C., Wei Y. *CMES – Computer Modelling in Engineering and Sciences*. 2005, vol. 7, iss. 2, pp. 119–132.
11. Wen P. H., Hon Y. C., Xu Y. G. *Heat Transfer Asian Res.* 2011, vol. 40, iss. 2, pp. 171–186.
12. Boykov I. V. *Differentsial'nye uravneniya* [Differential equations]. 2012, vol. 48, no. 9, pp. 1308–1314. [In Russian]
13. Polyanin, A. D. *Spravochnik po lineynym uravneniyam matematicheskoy fiziki* [Handbook of linear equations in mathematical physics]. Moscow: Fizmatlit, 2001, 576 p. [In Russian]

Бойков Илья Владимирович

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
высшей и прикладной математики,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: boikov@pnzgu.ru

Boykov Ilya Vladimirovich

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

Рязанцев Владимир Андреевич

кандидат технических наук, доцент,
кафедра высшей и прикладной
математики, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: math@pnzgu.ru

Ryazantsev Vladimir Andreevich

Candidate of engineering sciences,
associate professor, sub-department
of higher and applied mathematics,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Образец цитирования:

Бойков, И. В. Об одном методе восстановления граничного условия для линейных уравнений параболического типа / И. В. Бойков, В. А. Рязанцев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 42–56. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-4.

СПИН-СПИНОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО РАЗНЕСЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СПИНОВ В ПОЛЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Аннотация.

Актуальность и цели. В настоящее время значительное внимание исследователи уделяют поиску новых магнитных метаматериалов. В связи с этим в данной работе решается актуальная задача вывода нелокальных уравнений распространения электромагнитных волн в магнитных средах, где осуществляются спиновые переходы под действием радиочастотных, сверхвысокочастотных и терагерцевых полей. На основе этих уравнений предлагается решать различные задачи, подобные уже решаемым задачам в оптике.

Материалы и методы. Решение поставленной задачи проведено на основе эффектов 2-го и 3-порядков квантовой электродинамики с выделением спин-спиновых взаимодействий пространственно разнесенных электронов двух водородных атомов. При этом в разложении запаздывающих потенциалов учитываются два параметра малости (v/c) и $(\Delta\xi/R_{12})$, где v – скорость движения электронов, c – скорость света в вакууме, $\Delta\xi$ – смещение электронов относительно неподвижных ядер, R_{12} – расстояние между ядрами атомов.

Выводы. Показано, что в операторе спин-спинового взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов, принадлежащих двум водородоподобным атомам, присутствуют члены, пропорциональные $1/R_{12}^3$, $1/R_{12}^2$, $1/R_{12}$, в отличие от оператора Брейта, где взаимодействие двух электронов определяется лишь членами $1/R_{12}^3$. На основе полученного оператора спин-спинового взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов, переходя к эффектам 3-го порядка квантовой электродинамики, получили уравнение распространения электромагнитных волн в системе электронных спинов.

Ключевые слова: электромагнитные волны, электронный спин, спин-спиновое взаимодействие двух пространственно разнесенных электронов, водородоподобный атом, запаздывающие потенциалы, эффекты 2-го и 3-порядков квантовой электродинамики, оператор Брейта.

О. N. Gadomskiy, D. O. Musich

SPIN-SPIN INTERACTION OF SPATIALLY SEPARATED ELECTRON SPINS IN THE FIELD OF ELECTROMAGNETIC RADIATION

© Гадомский О. Н., Мусич Д. О., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

Abstract.

Background. At present, researchers are paying considerable attention to the search for new magnetic metamaterials. In this regard, this article solves the urgent problem of deriving nonlocal equations for the propagation of electromagnetic waves in magnetic media, where spin transitions are carried out under the action of radio frequency, microwave and terahertz fields. Based on these equations, it is proposed to solve various problems similar to those already being solved in optics.

Materials and methods. The solution to the problem posed is based on the effects of the 2nd and 3rd orders of quantum electrodynamics, highlighting the spin-spin interactions of spatially separated electrons of two hydrogen atoms. In this case, the expansion of the retarded potentials takes into account two smallness parameters (v/c) and $(\Delta\xi/R_{12})$, where v is the speed of motion of electrons, c is the speed of light in vacuum, $\Delta\xi$ is the displacement of electrons relative to immobile nuclei, R_{12} is the distance between the nuclei of atoms.

Conclusions. It is shown that the operator of the spin-spin interaction of two spatially separated electrons belonging to two hydrogen-like atoms contains terms proportional to $1/R_{12}^3$, $1/R_{12}^2$, $1/R_{12}$, in contrast to the Breit operator, where the interaction of two electrons is determined only by the terms $1/R_{12}^3$. On the basis of the obtained operator of spin-spin interaction of two spatially separated electrons, passing to the effects of the third order of quantum electrodynamics, an equation for the propagation of electromagnetic waves in a system of electron spins is obtained.

Keywords: electromagnetic waves, electron spin, spin-spin interaction of two spatially separated electrons, hydrogen-like atom, retarded potentials, effects of the 2nd and 3rd orders of quantum electrodynamics, the Breit operator.

Введение

Спин-спиновое взаимодействие электронов из-за его релятивистской природы значительно слабее других взаимодействий, определяющих структуру энергетических уровней. Так, энергия спин-спинового взаимодействия двух электронов внутри атомов или молекул составляет порядка $10^{-4} - 10^{-5}$ эВ. Спин-спиновое взаимодействие играет важную роль в динамике многочастичных систем, влияя на поперечную релаксацию, спиновую диффузию, спиновую температуру [1, 2]. Роль спин-спинового взаимодействия электронов может значительно возрасти при распространении резонансного радиочастотного поля в системе свободных электронов, например в магнитном метаматериале из металлических нано- или микросфер.

Оператор спин-спинового взаимодействия двух электронов соответствует запаздывающему взаимодействию порядка $(v/c)^2$ (v – скорость движения электронов, c – скорость света) и содержится в операторе Брейта [3–5]. Этот оператор был получен в рамках 2-го порядка теории возмущений квантовой электродинамики и применяется для описания сосредоточенных электронных систем, размеры которых удовлетворяют условию $(\omega_0 \Delta\xi / c)$, где $\Delta\xi$ – размеры системы, ω_0 – собственная частота в спектре взаимодействующих электронов. Однако значительный интерес представляет учет спин-спинового взаимодействия в протяженных системах, например в ферромагнетиках, магнитных метаматериалах в поле электромагнитного излучения, чему и посвящена данная статья.

В классической электродинамике магнитное поле кругового тока зависит от расстояния до точки наблюдения по закону $1/r^3$ [6]. Именно это свойство магнитных полей используется для описания магнитных метаматериалов из разомкнутых кольцевых резонаторов [7, 8] при рассмотрении взаимодействия соседних магнитных моментов. При учете запаздывания электромагнитное поле магнитных диполей зависит от расстояния до точки наблюдения по более сложному закону [6]. В данной статье представлено квантоэлектродинамическое рассмотрение взаимодействия пространственно разнесенных электронных спинов и будет получен оператор спин-спинового взаимодействия более общий, чем оператор Брейта.

Как показано в [9, 10], решение проблемы двух электронов позволяет вывести нелокальные уравнения электродинамики, например в виде интегродифференциальных уравнений распространения электромагнитных волн. Квантоэлектродинамическое рассмотрение взаимодействия двух электронов в поле излучения позволяет выяснить физический смысл поляризационных полей с участием промежуточных состояний с положительной и отрицательной энергией. В случае гелиеподобного атома взаимодействие двух электронов в поле реальных фотонов как эффекты 3-го порядка квантовой электродинамики было описано Дрейком [11]. В наших работах было дано описание взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов в поле излучения. При этом основное внимание было уделено электрическим дипольным квантовым переходам в спектре водородоподобных атомов. Обобщение этого рассмотрения на случай квазимолекулярных систем дано в [12]. В данной статье приведено подробное описание взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов с рассмотрением квантовых переходов между спиновыми состояниями электронов.

На основе полученного оператора спин-спинового взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов выведено интегродифференциальное уравнение распространения электромагнитных волн в непрерывной среде электронных спинов.

1. Оператор энергии взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов

Матричный элемент энергии взаимодействия двух электронов, принадлежащих двум водородоподобным атомам на произвольном расстоянии друг от друга, представим следующим образом [13]:

$$U_{AB;CD} = e^2 \int \psi_C^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_D^\dagger(\mathbf{r}_2) \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \\ \times \exp\left(\frac{i}{c} |\boldsymbol{\omega}_{AC}| |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right) \psi_A(\mathbf{r}_1) \psi_B(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2$ – матрицы Дирака 1-го и 2-го электронов; e – заряд электрона; $\psi_A(\mathbf{r}_1)$, $\psi_B(\mathbf{r}_2)$ – волновые функции электронов в состоянии A и B ; $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – радиус-векторы электронов; $\psi_C^\dagger(\mathbf{r}_1)$, $\psi_D^\dagger(\mathbf{r}_2)$ – эрмитовосопряженные вол-

новые функции электронов в состоянии C и D . При этом частоты состояний удовлетворяют закону сохранения (рис. 1)

$$\omega_A + \omega_B = \omega_C + \omega_D. \quad (2)$$

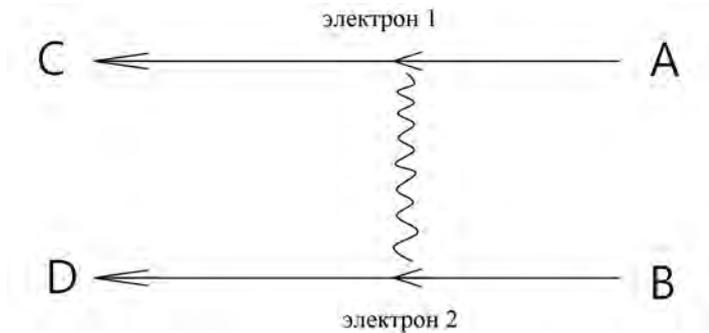


Рис. 1. Диаграмма взаимодействия двух электронов через поле виртуальных фотонов: A, B – начальные состояния электронов с энергиями $\hbar\omega_A, \hbar\omega_B$; C, D – конечные состояния электронов с энергиями $\hbar\omega_C, \hbar\omega_D$

Расстояние между электронами в (1) представим как

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = |\xi_1 - \mathbf{R}_{12} - \xi_2|, \quad (3)$$

где ξ_1, ξ_2 – смещения электронов относительно неподвижных ядер атомов; R_{12} – расстояние между ядрами. Это позволяет записать следующее приближенное равенство:

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = R_{12} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{(\Delta\xi)^2}{R_{12}^2} - \frac{(\Delta\xi R_{12})}{R_{12}^2} - \frac{(\Delta\xi R_{12})^2}{2R_{12}^4} \right\}, \quad (4)$$

где $\Delta\xi = \xi_1 - \xi_2$.

Проведем разложение фактора запаздывания в (1) с учетом (4), получим

$$\frac{\exp\left(\frac{i}{c}|\omega_{AC}||\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{\exp\left(\frac{i}{c}|\omega_{AC}|R_{12}\right)}{R_{12}} \times \left[1 + \frac{i}{c}|\omega_{AC}|R_{12}f_0 - \frac{1}{2c^2}|\omega_{AC}|^2(R_{12}f_0)^2 \right] \times [1 - f_0 + f_0^2], \quad (5)$$

где безразмерная функция f_0 имеет вид

$$f_0 = \frac{(\Delta\xi)^2}{2R_{12}^2} - \frac{(\Delta\xi R_{12})}{R_{12}^2} - \frac{(\Delta\xi R_{12})^2}{2R_{12}^4}. \quad (6)$$

Будем пренебрегать в (5) членами порядка $(\Delta\xi / R_{12})^n$ при $n > 2$.

Матричные элементы α_1 и $\alpha_2 \sim v/c$, где v – скорость движения электронов, c – скорость света в вакууме. Поэтому при подстановке разложения (5) в матричный элемент (1) будем учитывать члены, не превышающие этот порядок величины. Поэтому оператор энергии запишем следующим образом:

$$U_G = \frac{e^2}{R_{12}} e^{i\omega_0 R_{12}/c} (1 - \alpha_1 \alpha_2) (1 - f_0 + f_0^2) + \frac{ie^2}{\hbar R_{12}} e^{i\omega_0 R_{12}/c} \times \left[H_1, (R_{12} f_0 - (R_{12} f_0)^2) \right] - \frac{e^2 e^c}{2c^2 \hbar^2 R_{12}} \times \left[H_1 \left[H_2, (R_{12} f_0)^2 \right] \right], \quad (7)$$

где $\omega_0 = \omega_{AC}$ и H_1, H_2 – операторы электронов 1 и 2,

$$H_1 = c\alpha_1 p_1 + \beta_1 m c^2 + eA_1^{(e)}, \quad H_2 = c\alpha_2 p_2 + \beta_2 m c^2 + eA_2^{(e)}, \quad (8)$$

p_1, p_2 – операторы импульса электронов; $\beta_{1,2}$ – β -матрицы Дирака; $A_{1,2}^{(e)}$ – скалярные потенциалы электронов в атомах 1 и 2;

$$\begin{aligned} H_1 \Psi_A(\mathbf{r}_1) &= \hbar \omega_A \Psi_A(\mathbf{r}_1), \\ H_2 \Psi_B(\mathbf{r}_2) &= \hbar \omega_B \Psi_B(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (9)$$

Вычислим коммутаторы в (7) и получим следующий оператор взаимодействия двух электронов:

$$U_G = \frac{e^2}{R_{12}} e^{i\omega_0 R_{12}/c} f_1 - \frac{e^2}{R_{12}} e^{i\omega_0 R_{12}/c} (\alpha_1 \alpha_2) (f_1 - 1) + e^2 e^{i\omega_0 R_{12}/c} \alpha_1 f_3, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} f_3 &= \frac{\Delta \xi}{R_{12}^2} - \frac{R_{12}}{R_{12}^2} - \frac{3(\Delta \xi R_{12}) R_{12}}{R_{12}^4}, \\ f_1 &= 1 - \frac{(\Delta \xi)^2}{2R_{12}^2} - \frac{(\Delta \xi R_{12})}{R_{12}^2} - \frac{3(\Delta \xi R_{12})^2}{2R_{12}^4}. \end{aligned} \quad (11)$$

Покажем, что оператор U_G переходит в оператор Брейта U_B для двух электронов в гелиеподобном атоме. Действительно, при выполнении условий

$$R_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \quad \xi_1 - \xi_2 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \frac{\omega}{c} R_{12} \rightarrow 0$$

получим, что

$$U_G = U_B = \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{2} \frac{(\alpha_1 \alpha_2) + (\alpha_1 \mathbf{n}_{12})(\alpha_2 \mathbf{n}_{12})}{r_{12}}, \quad (12)$$

где $\mathbf{n}_{12} = \mathbf{r}_{12} / r_{12}$.

2. Переход к слабoreлятивистскому пределу

Представим волновые функции в (1) как [13]:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ x \end{pmatrix}, \quad \chi = \frac{\sigma p}{2mc} \varphi, \quad (13)$$

где σ – матрицы Паули [13].

Вектор плотности электрического тока определим с помощью матричного элемента

$$\mathbf{j} = ce \cdot \Psi^+ \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \Psi = ce \left(\varphi^+ \boldsymbol{\sigma} + \chi^+ \boldsymbol{\sigma} \varphi \right), \quad (14)$$

где $\Psi^+, \varphi^+, \chi^+$ – эрмитовосопряженные волновые функции.

В результате получим следующее выражение для вектора плотности электрического тока:

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2mi} \left\{ \varphi^+ \nabla \varphi - (\nabla \varphi^+) \varphi \right\} + c \left[\nabla \times (\varphi^+ \boldsymbol{\mu} \varphi) \right], \quad (15)$$

где $\boldsymbol{\mu} = (e\hbar / 2mc) \boldsymbol{\sigma}$ – оператор спинового магнитного момента электрона.

Используем выражение (15) для вычисления матричных элементов оператора U_G , основное внимание уделяя спин-спиновому взаимодействию электронов. Соответствующий оператор спин-спинового взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов обозначим как U_G^{s-s} . Тогда после вычисления получим, что

$$U_G^{s-s} = -\frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} e^{i\omega_0 R_{12}} \left[\frac{-\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2}{R_{12}^3} - \frac{3(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{R}_{12})(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{R}_{12})}{R_{12}^5} \right] + \frac{e^2 p_0}{2mc} e^{i\omega_0 R_{12}} \times \\ \times \left[\frac{-\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2}{R_{12}} - \frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{R}_{12})(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{R}_{12})}{R_{12}^3} \right] - \frac{e^2 \hbar}{2mc} i \left[\frac{-\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2}{R_{12}^2} - \frac{3(\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{R}_{12})(\boldsymbol{\sigma}_2 \mathbf{R}_{12})}{R_{12}^4} \right], \quad (16)$$

где p_0 – матричный элемент (по модулю) оператора импульса электрона.

Оператор спин-спинового взаимодействия, полученный из оператора Брейта (12) в слабoreлятивистском пределе, зависит от расстояния между электронами по закону $(1/R_{12}^3)$ и соответствует первому слагаемому в (16) при $(\omega_0 R_{12} / c) \rightarrow 0$. Для пространственно разнесенных электронов, как видно из (16), возникают также и другие зависимости от расстояния между электронами.

Переходя к операторам $\boldsymbol{\mu}_1$ и $\boldsymbol{\mu}_2$ спинового магнитного момента электронов, получим из (16) следующий оператор:

$$U_G^{s-s} = -e^2 e^{i\omega_0 R_{12}} \left[\frac{-(\boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\mu}_2)}{R_{12}^3} - \frac{3(\boldsymbol{\mu}_1 \mathbf{R}_{12})(\boldsymbol{\mu}_2 \mathbf{R}_{12})}{R_{12}^5} \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{2p_0mc}{\hbar^2} e^{\frac{i}{c}\omega_0 R_{12}} \left[\frac{-(\mu_1\mu_2)}{R_{12}} - \frac{(\mu_1 R_{12})(\mu_2 R_{12})}{R_{12}^3} \right] - \\
 & - \frac{2imc}{\hbar} e^{\frac{i}{c}\omega_0 R_{12}} \left[\frac{-(\mu_1\mu_2)}{R_{12}^2} - \frac{3(\mu_1 R_{12})(\mu_2 R_{12})}{R_{12}^4} \right]. \quad (17)
 \end{aligned}$$

Первое слагаемое в этом операторе, обратно пропорциональное $1/R_{12}^3$, соответствует величинам порядка $(v/c)^2 (\Delta\xi/R_{12})^2$. В этом можно убедиться, если вычислить энергию взаимодействия двух электронов в основном состоянии, используя первый порядок теории возмущений. Второе слагаемое в (17) соответствует величинам порядка (v/c) , а третье – величинам порядка $(v/c)(\Delta\xi/R_{12})$. Это означает, что основную роль в спин-спиновом взаимодействии пространственно разнесенных электронов играют члены, пропорциональные $1/R_{12}$.

3. Учет внешнего поля излучения

Взаимодействие двух электронов во внешнем поле излучения определим с помощью поляризующих полей, пропорциональных квантомеханическим средним α_1 и α_2 . При этом реализуется следующая схема квантовых переходов. Пусть оба электрона находятся в основном состоянии с волновой функцией ψ_m и энергией $E_m = \hbar\omega_m$. В результате взаимодействия электронов через поле виртуальных фотонов один из электронов, например электрон 2, переходит в некоторое состояние с волновой функцией ψ_k и энергией $E_k = \hbar\omega_k$, а затем возвращается в исходное состояние ψ_m . При этом первый электрон переходит в возбужденное состояние с энергией $E_n = \hbar\omega_n$ и волновой функцией ψ_n . Эта схема квантовых переходов соответствует эффектам 3-го порядка квантовой электродинамики (рис. 2).

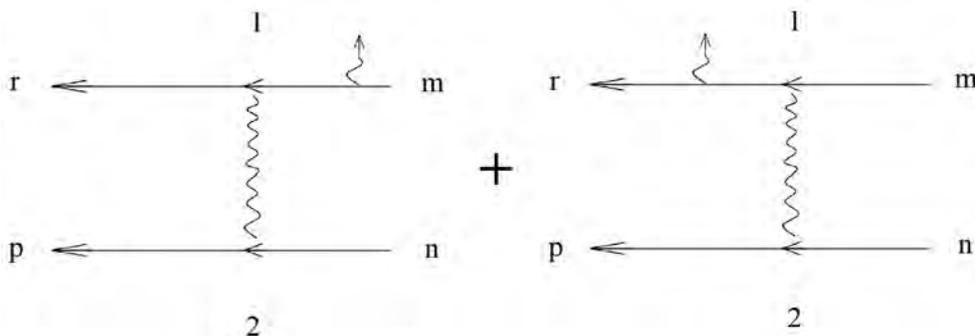


Рис. 2. Диаграмма взаимодействия двух электронов через поле виртуальных и реальных фотонов: m, n – индексы начальных состояний электронов, p, r – индексы их конечных состояний. При этом закон сохранения энергии – $E_n + E_m + E_p + E_r \pm \hbar\omega = 0$, ω – частота реальных фотонов

Вычислим α_2 с помощью теории возмущений, ограничиваясь ее первым порядком. Уравнение Дирака для решения этой задачи имеет вид

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_2 \right) \Psi_m = -e\alpha_2 A \Psi_m, \quad (18)$$

где $H_2 \Psi_m = \hbar\omega_m \Psi_m$, а волновая функция Ψ_m представляется в виде квантовой суперпозиции:

$$\Psi_m = \left\{ \Psi_m + \sum_k \left(a_{mk} e^{i\omega t} + b_{mk} e^{-i\omega t} \right) \Psi_k \right\} e^{-i\omega_m t}, \quad (19)$$

где a_{mk}, b_{mk} – комплексные коэффициенты.

Пусть векторный потенциал A в уравнении (18) имеет вид

$$A(\mathbf{r}_2, t) = \frac{1}{2} A(\mathbf{r}_2) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right), \quad (20)$$

где $A(\mathbf{r}_2)$ – функция координаты \mathbf{r}_2 местоположения электрона 2.

Подставим (19) в (18), чтобы вычислить коэффициенты a_{mk} и b_{mk} . Тогда получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \sum_k \left[(\omega_{mk} - \omega) e^{i\omega t} a_{mk} + (\omega_{mk} + \omega) e^{-i\omega t} b_{mk} \right] \Psi_k(\mathbf{r}_2) = \\ = -\frac{1}{2} e\alpha_2 A(\mathbf{r}_2) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

где $\omega_{mk} = \omega_m - \omega_k$ – частота перехода. Умножим обе части уравнения (21) на $\Psi_k^*(\mathbf{r}_2)$ и проинтегрируем по переменным \mathbf{r}_2 . Тогда находим после приравнивания коэффициентов, стоящих при одинаковых временных экспоненциальных множителях, значения неизвестных коэффициентов:

$$a_{mk} = \frac{\Psi_k(\mathbf{r}_2) | -e\alpha_2 A(\mathbf{r}_2) | \Psi_m(\mathbf{r}_2)}{2\hbar(\omega_{mk} - \omega)}, \quad b_{mk} = \frac{\Psi_k(\mathbf{r}_2) | -e\alpha_2 A(\mathbf{r}_2) | \Psi_m(\mathbf{r}_2)}{2\hbar(\omega_{mk} + \omega)}. \quad (22)$$

Используя значения коэффициентов (22), получим для квантово-механического среднего α_2 следующее выражение:

$$\begin{aligned} \alpha_{2m} = \Psi_m | \alpha_2 | \Psi_m = \Psi_m | \alpha_2 | \Psi_m + \\ + \sum_k \Psi_m | \alpha_2 | \Psi_k a_{mk} e^{i\omega t} + \sum_k \Psi_m | \alpha_2 | \Psi_k b_{mk} e^{-i\omega t} + (c.c.). \end{aligned} \quad (23)$$

Часть выражения (23), зависящая от векторного потенциала $A(\mathbf{r}_2)$, определяет тензор поляризуемости α_{2m} в состоянии m для частот вдали от ω_{mk} . При стремлении ω к ω_{mk} следует перейти к комплексным энергиям $E_k \rightarrow E_k - (i/2)\Gamma_k$, где Γ_k^{-1} – время жизни возбужденных состояний k .

Матричные элементы α_2 в (23) найдем с помощью выражений (14) и (15), позволяющих определить тип квантовых переходов в тензоре поляризуемости. Ниже будем рассматривать только спиновые квантовые переходы в спектре взаимодействующих электронов.

4. Уравнение распространения электромагнитных волн в системе электронных спинов

Напряженность магнитного поля в месте расположения электрона 1 с радиус-вектором \mathbf{r}_1 определим с помощью оператора (17) следующим образом:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}_1) = \text{rot rot} \frac{\boldsymbol{\mu}_2 t - R_{12}/c}{R_{12}}, \quad (24)$$

где $\boldsymbol{\mu}_2$ – квантовомеханическое среднее магнитного спинового момента электрона 2 в точке $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}_{12}$. Дифференцирование в (24) проводится по координатам точки наблюдения \mathbf{r}_1 .

Запишем оператор U_G^{s-s} как

$$U_G^{s-s} = \boldsymbol{\mu}_1 \mathbf{H}(\mathbf{r}_1) \quad (25)$$

при условии, что временная зависимость $\boldsymbol{\mu}_2$ определяется законом

$$\boldsymbol{\mu}_2 = \boldsymbol{\mu}_{20} e^{-i\omega t}, \quad (26)$$

где ω – частота внешнего поля излучения. Подставляя (26) в (24), найдем соответствие между операторами (17) и (25).

В протяженной среде электронных спинов при распространении в этой среде электромагнитных волн уравнение распространения электромагнитных волн при непрерывном распределении спинов имеет вид

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}_1(\mathbf{r}, t) + \int \text{rot rot} N \frac{\boldsymbol{\mu}_2 t - R_{12}/c}{R} dV', \quad (27)$$

где $\mathbf{H}_1(\mathbf{r}, t)$ – напряженность магнитного поля внешней электромагнитной волны в точке наблюдения \mathbf{r} ; $\boldsymbol{\mu}$ – некоторая функция локального поля $\mathbf{H}(\mathbf{r}', t)$ внутри среды в точках \mathbf{r}' в запаздывающие моменты времени $t - R/c$, $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, интегрирование ведется по всем точкам \mathbf{r}' среды.

Определим зависимость $\boldsymbol{\mu}$ от поля \mathbf{H} , используя уравнение Блоха для электронной намагниченности $\mathbf{M} = N\boldsymbol{\mu}$:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}] - \frac{1}{T_2}(M_x \mathbf{i} + M_y \mathbf{j}) - \frac{1}{T_1}(M_z + M_0) \mathbf{k}, \quad (28)$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – орты координатных осей; M_0 – равновесная намагниченность; $\gamma = (e/mc)$; T_1 и T_2 – времена продольной и поперечной релаксации [2].

Стационарное решение уравнений (28) во вращающейся с частотой ω системе координат имеет вид

$$\tilde{M}_x + i\tilde{M}_y = M_0 \frac{\Delta\omega\gamma H_1 T_2^2 + i\gamma H_1 T_2}{1 + (T_2\Delta\omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}, \quad (29)$$

где H_1 – напряженность радиочастотного магнитного поля, осуществляющего квантовые переходы между спиновыми состояниями электрона в постоянном магнитном поле H_0 , $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, $\omega_0 = +|\gamma|H_0$.

При выполнении условия $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2 \ll 1$ в слабых радиочастотных полях получим из (29), что

$$\tilde{M}_x + i\tilde{M}_y = (iH_{1x} + jH_{1y}) N\alpha_M = M_0 |\gamma| (iH_{1x} + jH_{1y}) \frac{1}{\omega_0 - \omega - i/T_2}, \quad (30)$$

где $M_0 = M_z$ и пропорционально напряженности постоянного магнитного поля H_0 , направленного вдоль оси z ($z \parallel \mathbf{k}$), а напряженность радиочастотного поля $\mathbf{H}_1 \perp \mathbf{k}$. Подставляя (30) в (27), получим интегродифференциальное уравнение распространения электромагнитных волн в протяженной системе электрических спинов для нахождения поля $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ в различных точках наблюдения как внутри среды, так и за ее пределами.

Заключение

Итак, в данной статье представлено квантовоэлектродинамическое рассмотрение взаимодействия двух пространственно разнесенных электронов в поле внешнего радиочастотного поля, что позволяет вывести уравнение распространения электромагнитных волн в системе электронных спинов. Это уравнение представляет значительный интерес, например, при описании магнитных метаматериалов из металлических микросфер.

Библиографический список

1. Таунс, Ч. Радиоспектроскопия / Ч. Таунс, А. Шавлов. – Москва : Изд-во Иностранной литературы, 1959. – 754 с.
2. Абрагам, А. Ядерный магнетизм / А. Абрагам. – Москва : Изд-во Иностранной литературы, 1963. – 528 с.
3. Breit, G. The Effect of Retardation on the Interaction of Two Electrons / G. Breit // Phys. Rev. – 1929. – Vol. 34, iss. 553. – DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.553>.
4. Ландау, Л. Д. On the Relativistic Correction of the Schrödinger Equation for the Many-Body Problem / Л. Д. Ландау // Phys. Z. Sowjet Sow. Phys. – 1935. – Vol. 8, iss. 487.
5. Bethe, H. Über die Wechselwirkung von zwei Elektronen / H. Bethe, E. Fermi // Z. Physik. – 1932. – Vol. 77. – P. 296–306.
6. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособ : в 10 т. Т. II. Теория поля / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Физматгиз, 2003. – 536 с
7. Shamoninna, E. Waves in Metamaterial / E. Shamoninna, L. Solymar. – Oxford : Oxford Univ. Press, 2009.

8. Лагарьков, А. Н. Сверхразрешение и усиление в метаматериалах / А. Н. Лагарьков, А. К. Сарычев, В. Н. Кисель, Г. Тартаковский // *Успехи физических наук.* – 2009. – Т. 179 (9). – С. 1018–1027.
9. Гадомский, О. Н. Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики / О. Н. Гадомский // *Успехи физических наук.* – 2009. – Т. 170 (11). – С. 1145–1179.
10. Гадомский, О. Н. К теории излучения системы слабо взаимодействующих частиц / О. Н. Гадомский, В. Р. Нагибаров, Н. К. Соловаров // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 1972. – Т. 63. – С. 813–819.
11. Drake, G. W. F. Relativistic Corrections to Radiative Transition Probabilities / G. W. F. Drake // *Phys. Rev. A*. – 1972. – Vol. 5, iss. 5. – P. 1979. – DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.5.1979>
12. Lazur, V. Interaction of two quasimolecular electrons via the field of virtual photons as a second-order effect of quantum electrodynamics / V. Lazur, S. I. Myhalyna, O. K. Reity // *Phys. Rev. A.* – 2010. – Vol. 81, № 6. – P. 062707.
13. Ахиезер, А. И. Квантовая электродинамика / А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий. – Москва : Физматгиз, 1959. – 656 с.

References

1. Tauns Ch., Shavlov A. *Radiospektroskopiya* [Radiospectroscopy]. Moscow: Izd-vo Inostrannoy literatury, 1959, 754 p. [In Russian]
2. Abragam A. *Yadernyy magnetizm* [Nuclear magnetism]. Moscow: Izd-vo Inostrannoy literatury, 1963, 528 p. [In Russian]
3. Breit G. *Phys. Rev.* 1929, vol. 34, iss. 553. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.553>.
4. Landau L. D. *Phys. Z. Sowjet Sow. Phys.* 1935, vol. 8, iss. 487.
5. Bethe H., Fermi E. *Z. Physik.* 1932, vol. 77, pp. 296–306.
6. Landau L. D., Lifshits E. M. *Teoreticheskaya fizika: ucheb. posob: v 10 t. T. II. Teoriya polya* [Theoretical physics: teaching aid: in 10 volumes. Volume 2. Field theory]. Moscow: Fizmatgiz, 2003, 536 p. [In Russian]
7. Shamoninna E., Solymar L. *Waves in Metamaterial.* Oxford: Oxford Univ. Press, 2009.
8. Lagar'kov A. N., Sarychev A. K., Kisel' V. N., Tartakovskiy G. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Advances in physical sciences]. 2009, vol. 179 (9), pp. 1018–1027. [In Russian]
9. Gadomskiy O. N. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Advances in physical sciences]. 2009, vol. 170 (11), pp. 1145–1179. [In Russian]
10. Gadomskiy O. N., Nagibarov V. R., Solovarov N. K. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 1972, vol. 63, pp. 813–819. [In Russian]
11. Drake G. W. F. *Phys. Rev. A*. 1972, vol. 5, iss. 5, p. 1979. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.5.1979>
12. Lazur V., Myhalyna S. I., Reity O. K. *Phys. Rev. A.* 2010, vol. 81, no. 6, p. 062707.
13. Akhiezer A. I., Berestetskii V. B. *Kvantovaya elektrodinamika* [Quantum electrodynamics]. Moscow: Fizmatgiz, 1959, 656 p. [In Russian]

Гадомский Олег Николаевич

доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра радиофизики
и электроники, Ульяновский
государственный университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: gadomsky@mail.ru

Gadomskiy Oleg Nikolaevich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of radiophysics and electronics, Ulyanovsk
State University (42 L'va Tolstogo
street, Ulyanovsk, Russia)

Мусич Дмитрий Олегович

студент, Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: zokeraf@mail.ru

Musich Dmitriy Olegovich

Student, Ulyanovsk State University
(42 L'va Tolstogo street, Ulyanovsk,
Russia)

Образец цитирования:

Гадомский, О. Н. Спин-спиновое взаимодействие пространственно разнесенных электронных спинов в поле электромагнитного излучения / О. Н. Гадомский, Д. О. Мусич // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 57–68. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-5.

ВЛИЯНИЕ γ -ОБЛУЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕТОДИОДОВ НА ОСНОВЕ InGaN/GaN

Аннотация.

Актуальность и цели. Несмотря на то, что структуры на основе InGaN/GaN прочно завоевали рынок светодиодной продукции, остаются нерешенными некоторые вопросы изменения электрических и оптических характеристик светодиодов на их основе под действием внешних факторов: температуры, тока, излучения и др. Наибольший интерес вызывает изменение интенсивности излучения структуры под действием внешних факторов, т.е. механизм возникновения и эволюции каналов безызлучательной рекомбинации. Целью данной работы является исследование влияния γ -излучения на вольт-амперные и ампер-яркостные характеристики структур с квантовыми ямами на основе InGaN/GaN.

Материалы и методы. Для решения поставленной цели были измерены вольт-амперные и ампер-яркостные характеристики структуры на основе InGaN/GaN в диапазоне токов до 30 мА при комнатной температуре и дозах облучения 0–0,4 МРад. Измерения электрических и оптических характеристик проводились в одном цикле, при регистрации ампер-яркостной характеристики выходным сигналом выступал фототок обратносмещенного фотодиода. Для анализа полученных вольт-амперных характеристик использовалась обобщенная модель рекомбинации, которая позволяет описать процесс токопереноса в пространственно неупорядоченной структуре, когда одной из стадий процесса является туннелирование.

Результаты. Проведен анализ вольт-амперных характеристик структур на основе InGaN/GaN при комнатной температуре для доз облучения γ -квантами 0–0,4 МРад. Обнаружено существенное изменение вольт-амперных характеристик под действием облучения в диапазоне напряжений до 3,1 В. Изменение вольт-амперных характеристик вызывает изменение зависимостей дифференциального показателя наклона β от напряжения и $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$. Обнаружено изменение ампер-яркостных характеристик, которое согласуется с модификацией электрических свойств под действием облучения γ -квантами.

Выводы. В диапазоне напряжений $2,1 \text{ В} \leq U \leq 3,1 \text{ В}$ при дозе облучения 0,2 МРад наблюдается участок $I_r(U) \sim \exp\left(\frac{eU}{2kT}\right)$, что связано с распадом комплексов Mg–H, и дезактивация водородом обнаруженного рекомбинационного центра. Данная гипотеза подтверждается изменением амплитуды экстремума на зависимости $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$, которая используется для определения

наличия рекомбинационных центров в исследуемой структуре, и поведением ампер-яркостных характеристик с увеличением дозы облучения образцов.

Ключевые слова: светодиод, квантовая яма, вольт-амперная характеристика, ампер-яркостная характеристика, γ -излучение.

L. N. Vostretsova, A. A. Adamovich

THE EFFECT OF γ -RADIATION ON THE ELECTRICAL AND OPTICAL CHARACTERISTICS OF InGaN / GaN LEDS

Abstract.

Background. Despite the fact that InGaN / GaN-based structures have firmly conquered the LED market, some issues remain unresolved about how the electrical and optical characteristics of LEDs based on them change under the influence of external factors: temperature, current, radiation, etc. Of greatest interest is the change in the radiation intensity of the structure under the influence of external factors, i.e. mechanism of emergence and evolution of nonradiative recombination channels. The purpose of this work is to study the effect of γ -radiation on the volt-ampere and ampere-brightness characteristics of structures with quantum wells based on InGaN / GaN.

Materials and methods. To achieve this goal, the volt-ampere and ampere-brightness characteristics of the structure based on InGaN / GaN were measured in the range of currents up to 30 mA at room temperature and radiation doses of 0–0.4 MRad. The measurements of the electrical and optical characteristics were carried out in one cycle; when registering the ampere-brightness characteristic, the output signal was the photocurrent of the reverse-biased photodiode. To analyze the obtained volt-ampere characteristics, a generalized recombination model was used, which makes it possible to describe the process of current transfer in a spatially disordered structure, when tunneling is one of the stages of the process.

Results. The volt-ampere characteristics of InGaN / GaN-based structures are analyzed at room temperature for γ -ray irradiation doses of 0–0.4 MRad. A significant change in the volt-ampere characteristics under the action of irradiation in the voltage range up to 3.1 V. A change in volt-ampere characteristics causes a change in the dependences of the differential slope index β on voltage and $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$.

A change in the ampere-brightness characteristics is found, which is consistent with the modification of the electrical properties under the action of irradiation with γ -quanta.

Conclusions. In the voltage range at an irradiation dose of 0.2 MRad, a region $I_r(U) \sim \exp\left(\frac{eU}{2kT}\right)$ is observed, which is associated with the decomposition of Mg–H complexes, and hydrogen deactivation of the detected recombination center. This hypothesis is confirmed by a change in the amplitude of the extremum on the dependence $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$, which is used to determine the presence of recombination centers in the structure under study, and the behavior of the ampere-brightness characteristics with increasing sample irradiation dose.

Keywords: LED, quantum well, volt-ampere characteristic, ampere-brightness characteristic, γ -radiation.

1. Актуальность и цели работы

Несмотря на то, что структуры на основе InGaN/GaN прочно завоевали рынок светодиодной продукции, остаются нерешенными некоторые вопросы изменения электрических и оптических характеристик светодиодов (СД) на их основе под действием внешних факторов: температуры, тока, излучения и др. Наибольший интерес вызывает изменение интенсивности излучения структуры под действием внешних факторов, т.е. механизм возникновения и эволюции каналов безызлучательной рекомбинации.

В настоящее время достаточно подробно исследовано падение эффективности СД-структур на основе InGaN/GaN в области больших токов. Так, в работах [1–3] это явление связывается с безызлучательной Оже-рекомбинацией, в статьях [4–8] обнаружена безызлучательная рекомбинация в барьерной области, темп которой увеличивается с ростом тока через образец из-за возрастания туннельной составляющей токопереноса. Кроме этого, в работе [9] обнаружено уменьшение времени жизни неравновесных носителей заряда для процесса безызлучательной рекомбинации.

Открытым остается вопрос модификации характеристик структур на основе InGaN/GaN под действием облучения. В статье [10] показано, что световой поток синих и зеленых СД на основе InGaN/GaN при облучении гамма-квантами ^{60}Co уменьшается с увеличением дозы. В работах [11, 12] обнаружено увеличение интенсивности максимума спектра электролюминесценции [11] и КПД СД [12] InGaN/GaN в определенном диапазоне доз гамма-облучения, что связывается с упорядочиванием границы раздела гетероструктуры.

Целью данной работы является исследование влияния γ -излучения на вольт-амперные и ампер-яркостные характеристики структур с квантовыми ямами на основе InGaN/GaN.

2. Методика эксперимента

Объектом исследования являются ультрафиолетовые светодиоды (длина волны 405 нм при комнатной температуре) на основе InGaN/GaN. Вольт-емкостным методом установлено наличие одной квантовой ямы в исследуемых структурах.

Измерения вольт-амперных (ВАХ) и ампер-яркостных (АЯХ) характеристик проводилось в одном цикле автоматизированной установкой. При регистрации напряжения учитывалось сопротивление амперметра R_0 , т.е. напряжение на p - n -переходе $U_{pn} = U - I \cdot R_0$, где I – ток, измеряемый в цепи, U – напряжение на источнике питания. АЯХ снималась как обратный ток ВАХ кремниевого фотодиода ФД-263-01 при постоянном обратном напряжении. Спектральная чувствительность используемого фотодиода 0,4–1,1 мкм, темновой обратный ток не более 1 нА. Несмотря на то, что исследуемая структура излучает на краю спектральной чувствительности фотодиода ФД-263-01, подбор взаимного расположения свето- и фотодиода позволил добиться фототока порядка 0,1 мА при рабочем токе СД.

3. Результаты эксперимента

На рис. 1 представлены прямые ВАХ исследуемых структур на основе InGaN/GaN, облученных дозами гамма-квантов 0–0,4 Мрад. Перед облучени-

ем была проверена сопоставимость ВАХ разных диодов из одной партии. Установлено, что в диапазоне напряжений 1,2–3,5 В ВАХ идентичны, что дает возможность анализировать влияние дозы облучения на характеристики исследуемой структуры.

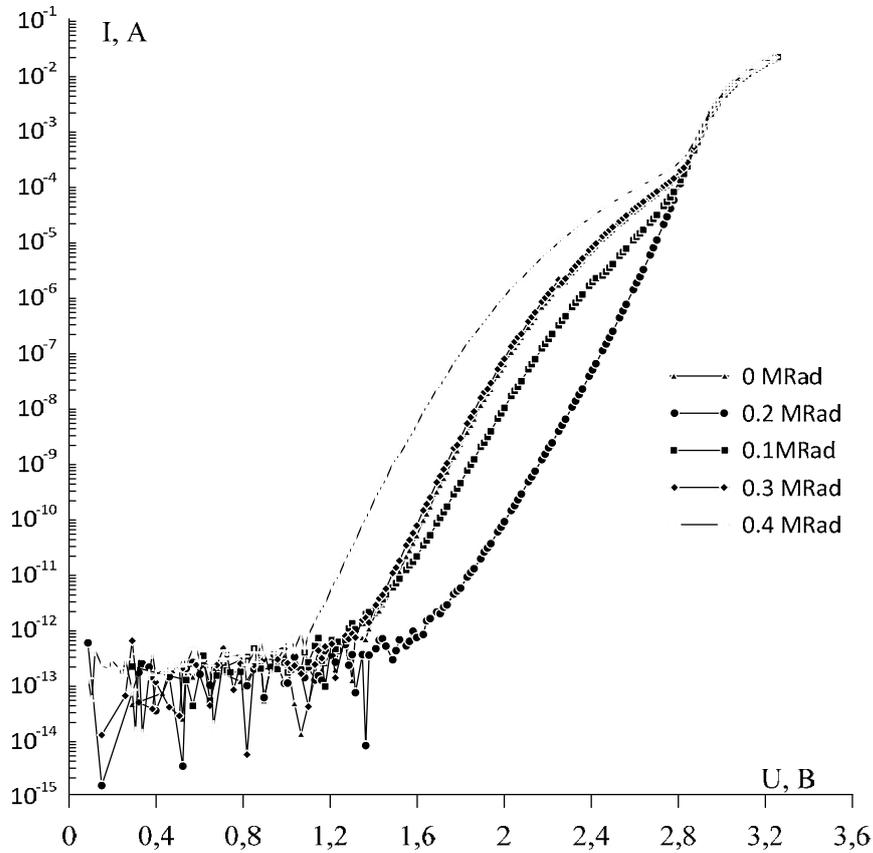


Рис. 1. Вольт-амперные характеристики структуры на основе InGaN/GaN с дозой облучения 0–0,4 Мрад

На ВАХ исследуемой структуры (рис. 1) можно выделить несколько участков:

- при напряжении меньше 2,8 В наблюдается неэкспоненциальное возрастание тока с увеличением напряжения на образце;
- в диапазоне $2,8 \text{ В} \leq U \leq 3,1 \text{ В}$ наблюдается участок, на котором

$$I \sim \exp\left(\frac{qU}{2kT}\right),$$

- при напряжении более 3,1 В зависимость тока от напряжения меняется на $I \sim \exp(\alpha U)$, где $\alpha = 5,1 \text{ В}^{-1}$.

Следует отметить, что облучение оказывает влияние на участок ВАХ до 3,1 В. При дозе 0,2 Мрад наблюдается переход в экспоненциальный участок в диапазоне напряжений $2,0 \text{ В} \leq U \leq 3,1 \text{ В}$, где $I \sim \exp\left(\frac{qU}{2kT}\right)$. Дальней-

шее увеличение дозы приводит к возврату отклонения от экспоненциального роста тока в указанном диапазоне напряжений.

Гетероструктуры на основе InGaN/GaN являются наноразупорядоченными структурами, в которых существует пространственное разделение электронов и дырок, следовательно, одной из стадий рекомбинационного процесса является туннельный токоперенос. В работах [13, 14] предлагается модель рекомбинации в таких структурах, учитывающая, кроме классических процессов генерации и рекомбинации, рассмотренных еще в рекомбинационной модели Шокли – Рида, процесс туннелирования. Установлено [13], что ВАХ полупроводниковых наноразупорядоченных структур содержат участки, на которых ток обусловлен туннельно-рекомбинационными процессами.

В работах [14–16] для анализа процессов, участвующих в формировании токопереноса, вводится приведенная скорость рекомбинации $R_{пр}$, которая рассматривается как физическая величина, обратная времени жизни носителей заряда в области пространственного заряда (ОПЗ):

$$R_{пр} = \sum_{m=1}^s R_{прm}(U) = \sum_{m=1}^s \frac{c_{nm}c_{pm} [\exp(eU/2kT) + 1] \omega N_m^2}{t_{nm}(E_{tm})t_{pm}(E_{tm}) + \omega N_m [t_{nm}(E_{tm}) + t_{pm}(E_{tm})]}, \quad (1)$$

где $R_{прm}(U)$ – приведенная скорость рекомбинации m -локального состояния; c_n и c_p – коэффициенты захвата электронов и дырок локализованными состояниями; n и p – концентрация электронов на дне зоны проводимости

либо дырок у потолка валентной зоны; $n_1 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{kT}\right)$ – параметр,

характеризующий скорость эмиссии электронов; $p_1 = N_v \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{kT}\right)$ –

параметр, характеризующий скорость эмиссии дырок; E_c – энергия дна зоны проводимости; E_v – энергия потолка валентной зоны; N – концентрация локальных состояний в запрещенной зоне; ω – вероятность туннельного перехода; $t_n = c_n [n + n_1]$; $t_p = c_p [p + p_1]$.

В работах [16, 17] рекомендуется для определения количества рекомбинационных центров, участвующих в формировании тока в структуре, анализировать зависимость от напряжения дифференциального показателя наклона прямой ВАХ:

$$\beta = \frac{q}{kT} \left(\frac{d \ln I}{dU} \right)^{-1} = \frac{qI}{kT} \left(\frac{dI}{dU} \right)^{-1}, \quad (2)$$

где q – заряд электрона; k – постоянная Больцмана; T – температура окружающей среды, К; I и U – ток и напряжение на исследуемой структуре.

Количество рекомбинационных центров в исследуемых структурах соответствует количеству экстремумов (максимумов и минимумов) на зависи-

мости $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$.

На рис. 2 приведены зависимости дифференциального показателя наклона и его производной от напряжения для исследуемых структур на основе InGaN/GaN при разных дозах облучения.

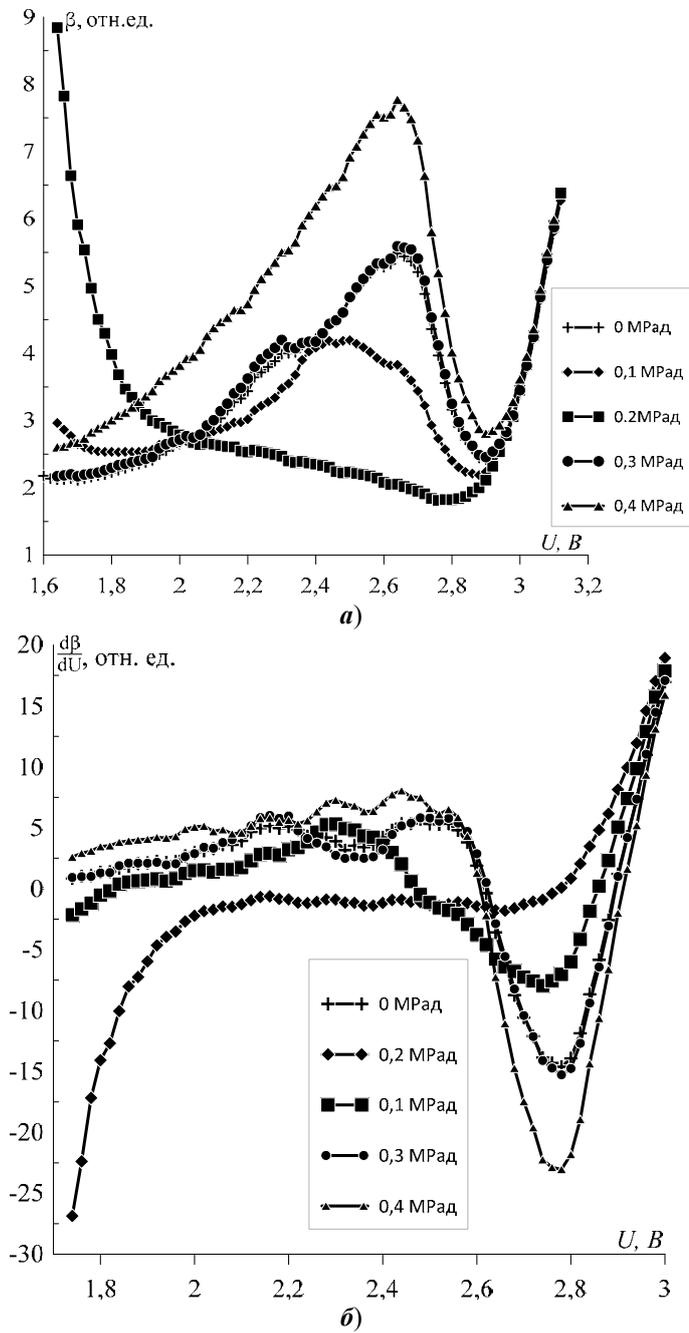


Рис. 2. График зависимости дифференциального показателя наклона ВАХ от напряжения при разных дозах облучения исследуемых структур на основе InGaN/GaN (а); график зависимости $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$ при разных дозах облучения исследуемых структур на основе InGaN/GaN (б)

Из рис. 2 видно, что зависимость $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$ имеет один максимум, следовательно, можем в формуле (1) положить $m = 1$. Как видно из рис. 2, б, облучение оказывает существенное влияние на поведение максимума при $U_{\max} = 2,78$ В (для необлученного образца). Сначала мы наблюдаем уменьшение амплитуды этого максимума (доза облучения 0,1 МРад) вплоть до полного исчезновения (доза облучения 0,2 МРад), а затем увеличение амплитуды этого максимума с увеличением дозы облучения (0,25–0,4 МРад).

Можно предположить, по аналогии с работой [18], что в результате облучения происходит распад комплексов Mg–H и дезактивация водородом обнаруженного рекомбинационного центра. С ростом дозы облучения наблюдается вытеснение водорода из исследуемой структуры и активация рекомбинационного центра.

Также в работах [13, 19] показано, что при выполнении условия

$$\sqrt{c_n c_p} n_i \exp\left(\frac{qU}{2kT}\right) \ll \omega N, \quad (3)$$

когда туннельная компонента превалирует над рекомбинационной, ВАХ наноразупорядоченных полупроводниковых структур описывается выражением

$$I_r(U) \sim R_{np}(U) \cdot \exp\left(\frac{eU}{2kT}\right), \quad (4)$$

где $R_{np} = \frac{N\sqrt{c_p c_n}}{2}$ – слабо зависящая от напряжения функция. Этот участок мы и наблюдаем на ВАХ исследуемой структуры в диапазоне напряжений $2,1 \text{ В} \leq U \leq 3,1 \text{ В}$ при дозе облучения 0,2 МРад. Этот участок отсутствует в необлученном образце и при других дозах облучения, что подтверждает гипотезу об дезактивации рекомбинационного центра в структуре. Дезактивация рекомбинационного центра приводит к выполнению условия (3) в исследуемых структурах.

Обнаруженное изменение электрических характеристик исследуемой структуры на основе InGaN/GaN подтверждается ампер-яркостными характеристиками, приведенными на рис. 3.

Заключение

В работе исследовано влияние облучения на электрические (ВАХ) и оптические (АЯХ) характеристики СД-структур на основе InGaN/GaN. Выявлено изменение ВАХ в диапазоне напряжений менее 3,1 В. В диапазоне напряжений $2,1 \text{ В} \leq U \leq 3,1 \text{ В}$ при дозе облучения 0,2 МРад наблюдается участ

сток $I_r(U) \sim \exp\left(\frac{eU}{2kT}\right)$. Этот участок отсутствует в необлученном образце и при других дозах облучения. Можно предположить распад комплексов Mg–H и дезактивацию водородом обнаруженного рекомбинационного центра.

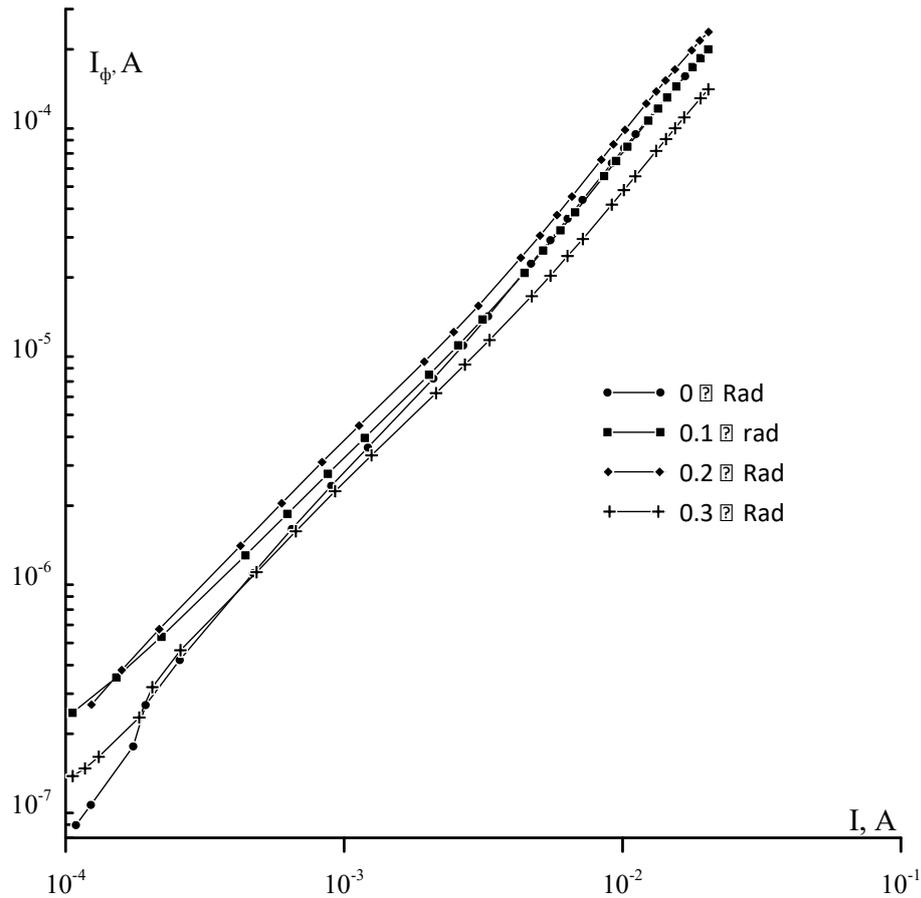


Рис. 3. Ампер-яркостные характеристики исследуемых структур на основе InGaN/GaN при разных дозах облучения

С ростом дозы облучения наблюдается вытеснение водорода из исследуемой структуры и активация рекомбинационного центра. Данная гипотеза подтверждается изменением амплитуды экстремума на зависимости $\frac{d\beta}{dU} = f(U)$, которая используется для определения наличия рекомбинационных центров в исследуемой структуре, и поведением АЯХ с увеличением дозы облучения образцов.

Библиографический список

1. Auger recombination in InGaN measured by photoluminescence / Y. C. Shen, G. O. Mueller, S. Watanabe, N. F. Gardner, A. Munkholm, M. R. Krames // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – Vol. 91. – P. 141101.
2. Direct measurement of Auger electrons emitted from a semiconductor light-emitting diode under electrical injection: identification of the dominant mechanism for efficiency droop / J. Iveland, L. Martinelly, J. Peretti, J. S. Speck, C. Weisbuch // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110. – P. 177–406.
3. Origin of electrons emitted into vacuum from InGaN light emitting diodes / J. Iveland, M. Piccardo, L. Martinelly, J. Peretti, J. W. Choi, N. Young, S. Nakamura, J. S. Speck, C. Weisbuch // *Appl. Phys. Lett.* – 2014. – Vol. 105. – P. 052–103.

4. **Бочкарева, Н. И.** Влияние глубоких центров на конфайнмент носителей в квантовых ямах InGaN/GaN и эффективность светодиодов / Н. И. Бочкарева, Ю. Г. Шретер // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 52, № 7. – С. 796–803.
5. Temperature dependence of the electrical activity of localized defects in InGaN -based light emitting diodes / M. Pavesi, M. Manfredi, F. Rossi, M. Meneghini, E. Zanoni, U. Zehnder, U. Strauss // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 89 (4). – P. 041917.
6. New developments in green LEDs / M. Peter, A. Laubsch, W. Bergbauer, T. Meyer, M. Sabathil, J. Baur, B. Hahn // Phys. Status Solidi A. – 2009. – Vol. 206 (6). – P. 1125–1129.
7. **Bochkareva, N. I.** Efficiency droop and incomplete carrier localization in InGaN/GaN quantum well light-emitting diodes / N. I. Bochkareva, Y. T. Rebane, Y. G. Shreter // Appl. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 103 (19). – P. 191101.
8. **Бочкарева, Н. И.** Падение эффективности GAN -светодиодов при высоких плотностях тока: туннельные токи утечки и неполная латеральная локализация носителей в квантовых ямах INGAN/GAN / Н. И. Бочкарева, Ю. Т. Ребане, Ю. Г. Шретер // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, № 8. – С. 1107–1115.
9. **Бочкарева, Н. И.** Рост скорости рекомбинации Шокли – Рида – Холла в квантовых ямах InGaN/GaN как основной механизм падения эффективности светодиодов при высоких уровнях инжекции / Н. И. Бочкарева, Ю. Т. Ребане, Ю. Г. Шретер // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49, № 12. – С. 1714–1719.
10. **Градобоев, А. В.** Дegradация светодиодов на основе гетероструктур InGaN/GaN при облучении гамма-квантами / А. В. Градобоев, П. В. Рубанов, И. М. Скакова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – № 1–2. – С. 190–194.
11. Люминесценция GaN и GaAs диодов при n - γ -облучении / В. П. Шукайло, С. В. Оболенский, Н. В. Басаргина, И. В. Ворожцова, С. М. Дубровских, О. В. Ткачев // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. – 2012. – № 5 (1). – С. 60–64.
12. **Грушко, Н. С.** Влияние гамма-излучения на электрофизические параметры светодиодов на основе InGaN/GaN / Н. С. Грушко, А. П. Солонин // Прикладная физика. – 2011. – № 1. – С. 92–95.
13. Tunneling recombination in semiconductor structures with nanoscale disorder / S. V. Bulyarsky, Yu. V. Rud', L. N. Vostretsova, A. S. Kagarmenov, O. A. Trifonov // Semiconductors. – 2009. – Vol. 43 (4). – P. 440–446.
14. **Булярский, С. В.** Обобщенная модель рекомбинации в неоднородных полупроводниковых структурах / С. В. Булярский, Н. С. Грушко // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2000. – Т. 118, № 5. – С. 1222.
15. **Булярский, С. В.** Рекомбинационная спектроскопия глубоких центров в GaP светодиодах / С. В. Булярский, Н. С. Грушко, А. В. Лакалин // Журнал технической физики. – 1998. – № 32. – С. 1193.
16. **Булярский, С. В.** Генерационно-рекомбинационные процессы в активных элементах / С. В. Булярский, Н. С. Грушко. – Москва : МГУ, 1995. – 23 с.
17. **Булярский, С. В.** Инновационные методы диагностики / С. В. Булярский. – Ульяновск, 2006. – 203 с.
18. **Вергелес, П. С.** Исследование влияния облучения электронным пучком в РЭМ на катодолюминесценцию и наведенный ток в структурах с множественными квантовыми ямами InGaN/GaN // П. С. Вергелес, Н. М. Шмидт, Е. Б. Якимов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – № 10. – С. 33–36.
19. **Вострецова, Л. Н.** Вольт-амперные характеристики структур на основе InGaN/GaN при высоком уровне инжекции / Л. Н. Вострецова, Т. Ю. Кузнецова,

А. С. Амброзевич // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2019. – № 2 (50). – С. 75–85.

References

1. Shen Y. C., Mueller G. O., Watanabe S., Gardner N. F., Munkholm A., Krames M. R. *Appl. Phys. Lett.* 2007, vol. 91, p. 141101.
2. Iveland J., Martinelly L., Peretti J., Speck J. S., Weisbuch C. *Phys. Rev. Lett.* 2013, vol. 110, pp. 177–406.
3. Iveland J., Piccardo M., Martinelli L., Peretti J., Choi J. W., Young N., Nakamura S., Speck J. S., Weisbuch C. *Appl. Phys. Lett.* 2014, vol. 105, pp. 052–103.
4. Bochkareva N. I., Shreter Yu. G. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2015, vol. 52, no. 7, pp. 796–803. [In Russian]
5. Pavesi M., Manfredi M., Rossi F., Meneghini M., Zanoni E., Zehnder U., Strauss U. *Appl. Phys. Lett.* 2006, vol. 89 (4), p. 041917.
6. Peter M., Laubsch A., Bergbauer W., Meyer T., Sabathil M., Baur J., Hahn B. *Phys. Status Solidi A*. 2009, vol. 206 (6), pp. 1125–1129.
7. Bochkareva N. I., Rebane Y. T., Shreter Y. G. *Appl. Phys. Lett.* 2013, vol. 103 (19), p. 191101.
8. Bochkareva N. I., Rebane Yu. T., Shreter Yu. G. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2014, vol. 48, no. 8, pp. 1107–1115. [In Russian]
9. Bochkareva N. I., Rebane Yu. T., Shreter Yu. G. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2015, vol. 49, no. 12, pp. 1714–1719. [In Russian]
10. Gradoboev A. V., Rubanov P. V., Skakova I. M. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika* [University proceedings. Physics]. 2011, no. 1–2, pp. 190–194. [In Russian]
11. Shukaylo V. P., Obolenskiy S. V., Basargina N. V., Vorozhtsova I. V., Dubrovskikh S. M., Tkachev O. V. *Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N. I. Lobachevskogo* [Bulletin of Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod]. 2012, no. 5 (1), pp. 60–64. [In Russian]
12. Grushko N. S., Solonin A. P. *Prikladnaya fizika* [Applied physics]. 2011, no. 1, pp. 92–95. [In Russian]
13. Bulyarskiy S. V., Rud' Yu. V., Vostretsova L. N., Kagarmanov A. S., Trifonov O. A. *Semiconductors*. 2009, vol. 43 (4), pp. 440–446.
14. Bulyarskiy S. V., Grushko N. S. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 2000, vol. 118, no. 5, p. 1222. [In Russian]
15. Bulyarskiy S. V., Grushko N. S., Lakalin A. V. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Journal of applied physics]. 1998, no. 32, p. 1193. [In Russian]
16. Bulyarskiy S. V., Grushko N. S. *Generatsionno-rekombinatsionnye protsessy v aktivnykh elementakh* [Generation-recombination processes in active elements]. Moscow: MGU, 1995, 23 p. [In Russian]
17. Bulyarskiy S. V. *Innovatsionnye metody diagnostiki* [Innovative diagnostic methods]. Ulyanovsk, 2006, 203 p. [In Russian]
18. Vergeles P. S., Shmidt N. M., Yakimov E. B. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neytronnye issledovaniya* [Surface. X-ray, synchrotron and neutron research]. 2011, no. 10, pp. 33–36. [In Russian]
19. Vostretsova L. N., Kuznetsova T. Yu., Ambrozevich A. S. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2019, no. 2 (50), pp. 75–85. [In Russian]

Вострецова Любовь Николаевна

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра инженерной физики,
Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: Kapiton04@yandex.ru

Vostretsova Lyubov' Nikolaevna

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of engineering physics,
Ulyanovsk State University (42 L'va
Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Адамович Артем Александрович

магистрант, Ульяновский
государственный университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: artem.adamovich@bk.ru

Adamovich Artem Aleksandrovich

Master's degree student, Ulyanovsk State
University (42 L'va Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

Образец цитирования:

Вострецова, Л. Н. Влияние γ -облучения на электрические и оптические характеристики светодиодов на основе InGaN/GaN / Л. Н. Вострецова, А. А. Адамович // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 69–79. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-6.

СПОСОБ УВЕЛИЧЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ СМЕСИТЕЛЯ С Понижением частоты И ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ МАТЕРИАЛОВ НА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС

Аннотация.

Актуальность и цели. В настоящее время одним из актуальных вопросов является увеличение быстродействия устройств твердотельной электроники (диоды, полевые и биполярные транзисторы...). Для увеличения быстродействия данных устройств представляет интерес поиск материалов с большими значениями подвижностей носителей заряда. Один из способов уменьшения размеров элементов интегральных схем является их формирование в тонкопленочных гетероструктурах. В данном случае возможно использование неоднородности (многослойности) гетероструктуры и необходима оптимизация легирования электронных материалов, а также развитие эпитаксиальной технологии с целью улучшения свойств данных материалов (включая анализ механических напряжений). Альтернативным способом уменьшения размеров элементов интегральных схем является использование лазерного и микроволнового типов отжига. Основной целью данной работы является поиск возможностей уменьшения размеров сформированных в многослойных структурах полевых транзисторов в составе смесителя с понижением частоты, а также увеличение их плотности. Сопутствующей целью данной работы является формирование аналитической методики анализа массопереноса, позволяющей учесть изменение параметров процессов одновременно в пространстве и во времени, а также нелинейность рассматриваемого процесса.

Материалы и методы. Предложена аналитическая методика анализа массопереноса, позволяющая учесть изменение параметров процессов одновременно в пространстве и во времени, а также нелинейность рассматриваемого процесса.

Результаты. Сформулированы условия для уменьшения размеров полевых транзисторов в составе смесителя с понижением частоты, а также увеличения их плотности. Предложена аналитическая методика анализа массопереноса, позволяющая учесть изменение параметров процессов одновременно в пространстве и во времени, а также нелинейность рассматриваемого процесса.

Выводы. Уменьшение размеров полевых транзисторов, а также увеличение их плотности происходит в многослойной структуре со специально подобранной конфигурацией при условии оптимизации отжига.

Ключевые слова: схема смесителя с понижением частоты, оптимизация формирования, увеличение степени интеграции элементов.

Е. Л. Панкратов

A METHOD FOR INCREASING THE DENSITY OF THE MIXER ELEMENTS WITH UNDERFREQUENCY

© Панкратов Е. Л., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

AND THE EFFECT OF MATERIAL MODIFICATION ON THE TECHNOLOGICAL PROCESS

Abstract.

Background. Currently, one of actual problems of solid-state electronic is increasing of performance of devices (diodes, field-effect and bipolar transistors...). To increase the performance it is attracted an interest to determine materials with higher values of charge carrier mobilities. Another problem is decreasing of dimensions of elements of integrated circuit is to form them in thin-film heterostructures. In this case, it is possible to use heterogeneity (multilayer) of the heterostructure and it is necessary to optimize the doping of electronic materials, as well as to develop epitaxial technology to improve of properties of these materials (including the analysis of mismatch-induced stresses). An alternative way to decrease of dimensions of integrated circuit elements is using laser and microwave types of annealing. Main aim of this paper is determination of possibility to decrease dimensions of field-effect transistors manufactured in multilayer structures framework of downconversion mixer circuit. The complimented purpose of this work is development of analytical approach for analysis of mass transport, which to takes into account the variation of parameters of considered process simultaneously in space and time, as well as the nonlinearity of the considered process.

Materials and methods. Introduced framework this paper analytical approach for analysis of mass transport, which to takes into account the variation of parameters of considered process simultaneously in space and time, as well as the nonlinearity of the considered process.

Results. We formulated conditions for decreasing of dimensions of field-effect transistors framework a downconversion mixer circuit and at the same time to increase their density. An analytical approach has been introduced for analysis of mass transport, which to takes into account the variation of parameters of considered process simultaneously in space and time, as well as the nonlinearity of the considered process

Conclusions. Dimensions' decreasing of field-effect transistors and increasing of their density could be obtained in a multilayer structure with a specific configuration and by optimization of annealing.

Keywords: downconversion mixer circuit, optimization of manufacturing, increasing of element integration rate.

Введение

Одной из интенсивно решаемых задач является повышение быстродействия электронных устройств [1–6]. Быстродействие рассматриваемых устройств может быть увеличено за счет использования материалов, имеющих большие значения подвижностей носителей заряда [7–10]. Для уменьшения размеров элементов в составе интегральных схем они могут формироваться в составе тонкопленочных гетероструктур [3–5, 11]. Это позволяет использовать неоднородность гетероструктуры в виде ее многослойности. Но при использовании гетероструктур необходима оптимизация легирования их материалов [12] и развитие технологии ее роста [13–15]. В качестве альтернативного метода уменьшения размеров элементов в составе интегральных схем можно использовать лазерный или микроволновый отжиг [16–18]. В этом случае используется неоднородность легируемого материала, возникающая за счет неоднородности температуры отжига.

В данной статье нами предложена методика, в рамках которой можно сформировать полевые транзисторы, входящие в состав смесителя с понижением частоты. Предлагаемая методика приводит к уменьшению размеров транзисторов, одновременно увеличивается и их плотность. Также сформулировано условие, при котором уменьшаются механические напряжения в гетероструктурах. В рамках предлагаемой методики рассматривается гетероструктура, включающая в свой состав подложку, эпитаксиальный и буферный слои (рис. 1) [19]. Эпитаксиальный слой содержит секции, сформированные из других материалов. В этих секциях формируется необходимый тип проводимости (n или p) с помощью диффузионного или ионного типов легирования. Далее примесь и/или радиационных дефектов отжигаются. Длительность отжига выбирается оптимальной. Основная цель статьи: поиск условий увеличения степени интеграции элементов рассматриваемого смесителя. Сопутствующая цель: поиск условий уменьшения механических напряжений в рассматриваемой гетероструктуре и поиск математического аппарата, позволяющего увеличить адекватность прогноза рассматриваемого технологического процесса.

1. Методика анализа

В рамках решения сформулированных во введении целей необходимо найти решение второго закона Фика [1, 20–23]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_S}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} C(x, y, W, t) dW \right] + \\ & + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_S}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} C(x, y, W, t) dW \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right], \end{aligned} \quad (1)$$

и провести его анализ. Данное решение описывает изменение концентрации примеси $C(x, y, z, t)$ в пространстве и времени. Уравнение (1) необходимо дополнить начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \\ \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{x=L_y} = 0, \quad \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{x=L_z} = 0, \\ C(x, y, z, 0) = f_C(x, y, z). \end{aligned}$$

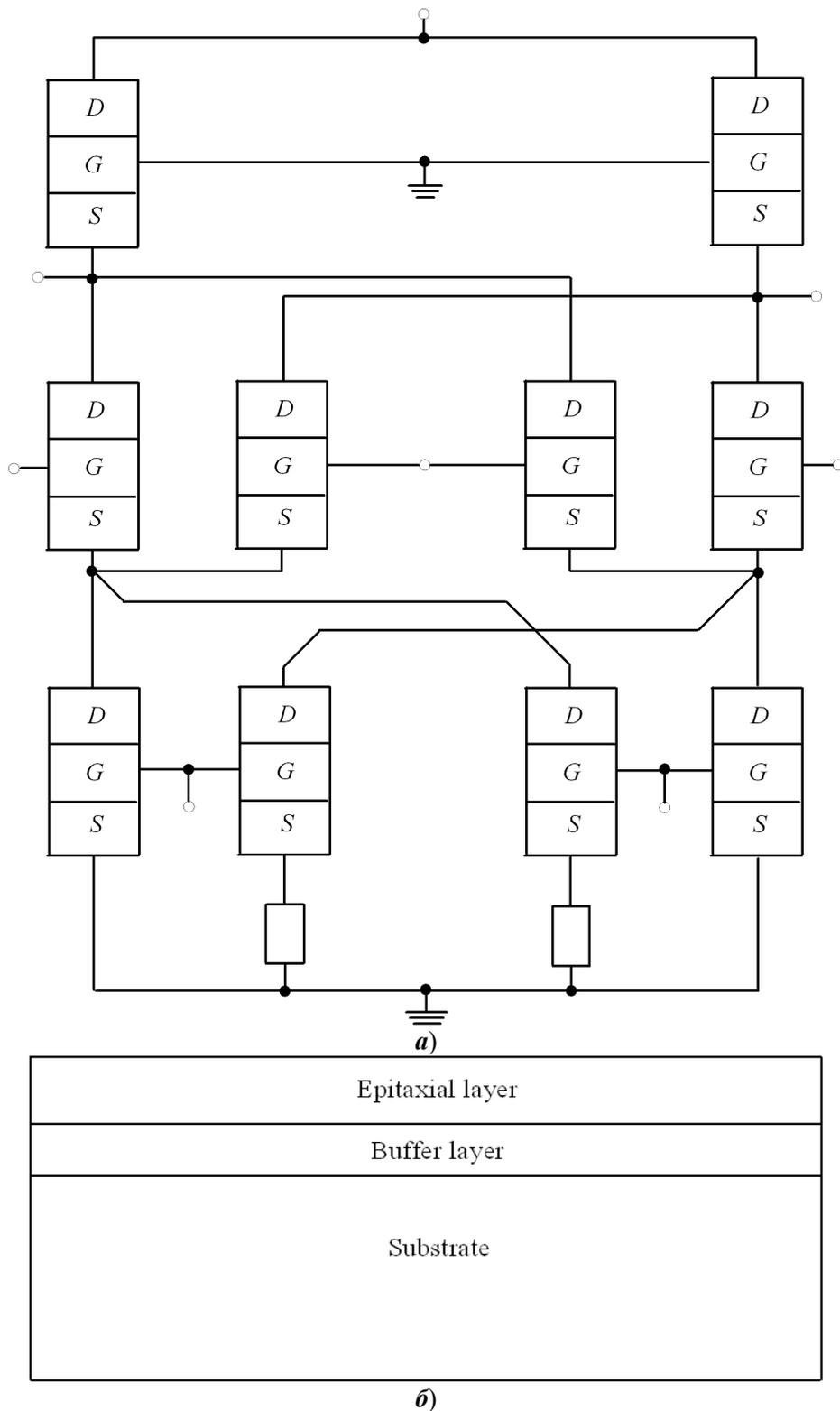


Рис. 1. Рассматриваемая схема смесителя [19] (а); гетероструктура, в состав которой входят подложка, буферный и эпитаксиальный слои (вид сбоку) (б)

Такие граничные условия соответствуют отсутствию потока примеси через внешние границы гетероструктуры. В уравнении (1) и сопутствующих условиях введены обозначения: символ Ω описывает атомный вес примеси;

символ ∇_S описывает поверхностный градиент; интеграл $\int_0^{L_z} C(x, y, z, t) dz$

описывает поверхностную концентрацию примеси на границах раздела слоев гетероструктуры (ось Oz и границы раздела перпендикулярны друг другу); функции $\mu_1(x, y, z, t)$ и $\mu_2(x, y, z, t)$ описывают химические потенциалы, учитывающие механические напряжения, напряжения в гетероструктуре и пористость ее материалов; параметр D описывает коэффициент объемной диффузии; параметр D_S описывает коэффициент поверхностной диффузии, вызванной механическими напряжениями в гетероструктуре. Величина коэффициентов диффузии принимает разные значения в разных материалах, изменяется с изменением температуры, зависит от концентрации примеси. Эмпирические зависимости рассматриваемых коэффициентов от параметров имеют вид [24–26]:

$$D_C = D_L(x, y, z, T) \left[1 + \xi \frac{C^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right],$$

$$D_S = D_{SL}(x, y, z, T) \left[1 + \xi_S \frac{C^\gamma(x, y, z, t)}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \times$$

$$\times \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right], \quad (2)$$

где функции $D_L(x, y, z, T)$ и $D_{SL}(x, y, z, T)$ описывают зависимости коэффициентов диффузии от пространственных координат x , y и z , а также температуры отжига T ; функция $P(x, y, z, T)$ описывает зависимость предела растворимости примеси от пространственных координат и температуры отжига; принимающий целые значения параметр $\gamma \in [1, 3]$ определяется свойствами материалов гетероструктуры; функция $V(x, y, z, t)$ описывает изменение концентрации радиационных вакансий с равновесным распределением V^* в пространстве и времени. Изменения концентраций радиационных дефектов в пространстве и времени определялись путем решения второго закона Фика в следующей форме [20–23, 25–27]:

$$\frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial x} \right] +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial z} \right] -$$

$$\begin{aligned}
& -k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) - k_{I,V}(x, y, z, T) I(x, y, z, t) V(x, y, z, t) + \\
& \quad + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} I(x, y, W, t) dW \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} I(x, y, W, t) dW \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right], \quad (3) \\
& \quad \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial z} \right] - \\
& - k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) - k_{I,V}(x, y, z, T) I(x, y, z, t) V(x, y, z, t) + \\
& \quad + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{VS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} V(x, y, W, t) dW \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{VS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} V(x, y, W, t) dW \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right].
\end{aligned}$$

Граничные и начальные условия для искомых концентраций предст-
вимы в следующей форме:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} &= 0, \\
\left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} &= 0, \\
\left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} &= 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} &= 0,
\end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} = 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0,$$

$$V(x_1 + V_n t, y_1 + V_n t, z_1 + V_n t, t) = V^* \left(1 + \frac{2 \ell a^3}{kT \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}} \right),$$

$$I(x, y, z, 0) = f_I(x, y, z), \quad V(x, y, z, 0) = f_V(x, y, z). \quad (4)$$

В последних соотношениях и далее в статье функция $I(x, y, z, t)$ описывает изменение концентрации междоузельных атомов с равновесным распределением I^* в пространстве и времени; функции $D_I(x, y, z, T)$, $D_V(x, y, z, T)$, $D_{IS}(x, y, z, T)$, $D_{VS}(x, y, z, T)$ описывают зависимости коэффициентов объемной и поверхностной диффузий точечных радиационных дефектов от пространственных координат и температуры; квадратичные относительно искомым концентраций члены уравнений (3) учитывают генерацию дивакансий и аналогичных комплексов междоузельных атомов [26]; функция $k_{I,V}(x, y, z, T)$ описывает зависимость параметра рекомбинации точечных дефектов от пространственных координат и температуры отжига; функции $k_{I,I}(x, y, z, T)$ и $k_{V,V}(x, y, z, T)$ описывают зависимости параметров образования комплексов точечных дефектов от пространственных координат и температуры отжига; параметры k , a и ℓ описывают соответственно постоянную Больцмана, межатомное расстояние и удельную поверхностную энергию. Со временем часть пор может быть поглощена другими порами или распасться на вакансии. Распределения дивакансий $\Phi_V(x, y, z, t)$ и аналогичных комплексов междоузельных атомов $\Phi_I(x, y, z, t)$ в пространстве и времени определялись как решения следующей системы уравнений [25, 26]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\ & + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_I(x, y, W, t) dW \right] + \\ & + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_I(x, y, W, t) dW \right] + k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t), \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
&+ \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\
&+ \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_V(x, y, W, t) dW \right] + \\
&+ \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_V(x, y, W, t) dW \right] + \\
&+ k_{V, V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) + \\
&+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, t).
\end{aligned}$$

Граничные и начальные условия для искомых концентраций представимы в следующей форме:

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \\
\left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_I(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0, \\
\left. \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial x} \right|_{x=L_x} = 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \\
\left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial y} \right|_{y=L_y} &= 0, \quad \left. \frac{\partial V(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi_V(x, y, z, t)}{\partial z} \right|_{z=L_z} = 0, \\
\Phi_I(x, y, z, 0) &= f_{\Phi_I}(x, y, z), \\
\Phi_V(x, y, z, 0) &= f_{\Phi_V}(x, y, z).
\end{aligned} \tag{6}$$

Функции описывают зависимости коэффициентов объемной и поверхностной диффузий комплексов точечных радиационных дефектов от пространственных координат и температуры; функции $k_I(x, y, z, T)$ и $k_V(x, y, z, T)$ описывают аналогичные зависимости параметров распада дивакансий и аналогичных комплексов междоузельных атомов.

Химический потенциал μ_1 определяется соотношением [20]:

$$\mu_1 = E(z)\Omega\sigma_{ij}[u_{ij}(x,y,z,t) + u_{ji}(x,y,z,t)]/2, \quad (7)$$

где параметр E обозначает модуль Юнга (модуль растяжения); параметры σ_{ij} и $u_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$ описывают тензоры напряжений и деформаций; компоненты тензора напряжений u_i , u_j описывают компоненты $u_x(x,y,z,t)$, $u_y(x,y,z,t)$ и $u_z(x,y,z,t)$ вектора смещений $\vec{u}(x,y,z,t)$; величины x_i , x_j обозначают пространственные координаты x , y , z . Соотношение для химического потенциала μ_1 (7) с учетом рассмотренных параметров принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \mu_1(x,y,z,t) = & \left[\frac{\partial u_i(x,y,z,t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(x,y,z,t)}{\partial x_i} \right] \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i(x,y,z,t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(x,y,z,t)}{\partial x_i} \right] - \varepsilon_0 \delta_{ij} + \right. \\ & \left. + \frac{\sigma(z)\delta_{ij}}{1-2\sigma(z)} \left[\frac{\partial u_k(x,y,z,t)}{\partial x_k} - 3\varepsilon_0 \right] - K(z)\beta(z)[T(x,y,z,t) - T_0] \delta_{ij} \right\} \frac{\Omega}{2} E(z). \end{aligned}$$

В данном соотношении параметр σ обозначает коэффициент Пуассона; параметр $\varepsilon_0 = (a_s - a_{EL})/a_{EL}$ обозначает параметр несоответствия решетки; параметры a_s , a_{EL} обозначают постоянные решеток подложки и эпитаксиального слоя; параметр K обозначает модуль всестороннего сжатия; параметр β обозначает коэффициент теплового расширения; параметр T_r обозначает совпадающую с комнатной равновесную температуру. Компоненты вектора смещений $\vec{u}(x,y,z,t)$ определяются как решения системы уравнений [21]:

$$\begin{aligned} \rho(z) \frac{\partial^2 u_x(x,y,z,t)}{\partial t^2} &= \frac{\partial \sigma_{xx}(x,y,z,t)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}(x,y,z,t)}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}(x,y,z,t)}{\partial z}, \\ \rho(z) \frac{\partial^2 u_y(x,y,z,t)}{\partial t^2} &= \frac{\partial \sigma_{yx}(x,y,z,t)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}(x,y,z,t)}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}(x,y,z,t)}{\partial z}, \\ \rho(z) \frac{\partial^2 u_z(x,y,z,t)}{\partial t^2} &= \frac{\partial \sigma_{zx}(x,y,z,t)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}(x,y,z,t)}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}(x,y,z,t)}{\partial z}. \end{aligned}$$

В данных уравнениях введены обозначения:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & K(z)\delta_{ij} \frac{\partial u_k(x,y,z,t)}{\partial x_k} - K(z)\beta(z)[T(x,y,z,t) - T_r] + \\ & + \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial u_i(x,y,z,t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(x,y,z,t)}{\partial x_i} - \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{\partial u_k(x,y,z,t)}{\partial x_k} \right], \end{aligned}$$

функция $\rho(z)$ описывает пространственную зависимость плотности материалов гетероструктуры в направлении, перпендикулярном границам раздела ее слоев, параметр δ_{ij} обозначает символ Кронекера. С учетом рассмотренных соотношений уравнения для компонент вектора смещений принимают вид

$$\begin{aligned}
 \rho(z) \frac{\partial^2 u_x(x, y, z, t)}{\partial t^2} &= \left\{ K(z) + \frac{5E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2 u_x(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \\
 &+ \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial x \partial y} + \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \times \\
 &\times \left[\frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right] + \left[K(z) + \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right] \times \\
 &\times \frac{\partial^2 u_z(x, y, z, t)}{\partial x \partial z} - K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x}, \\
 \rho(z) \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial t^2} &= \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x(x, y, z, t)}{\partial x \partial y} \right] - \\
 &- \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} K(z) \beta(z) + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial u_y(x, y, z, t)}{\partial z} + \frac{\partial u_z(x, y, z, t)}{\partial y} \right] \right\} + \\
 &+ \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial y^2} \left\{ \frac{5E(z)}{12[1+\sigma(z)]} + K(z) \right\} + \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \times \\
 &\times \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial y \partial z} + K(z) \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial x \partial y}, \quad (8) \\
 \rho(z) \frac{\partial^2 u_z(x, y, z, t)}{\partial t^2} &= \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2 u_z(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \right. \\
 &+ \left. \frac{\partial^2 u_x(x, y, z, t)}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_y(x, y, z, t)}{\partial y \partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(z) \left[\frac{\partial u_x(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{\partial u_y(x, y, z, t)}{\partial y} + \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \frac{\partial u_x(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \right\} + \frac{1}{6} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{1+\sigma(z)} \left[6 \frac{\partial u_z(x, y, z, t)}{\partial z} - \frac{\partial u_x(x, y, z, t)}{\partial x} - \right. \right. \\
 &\left. \left. - \frac{\partial u_y(x, y, z, t)}{\partial y} - \frac{\partial u_z(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \right\} - K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z}.
 \end{aligned}$$

Граничные и начальные условия для искомых компонент представимы в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}(0, y, z, t)}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial \bar{u}(L_x, y, z, t)}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial \bar{u}(x, 0, z, t)}{\partial y} = 0; \\ \frac{\partial \bar{u}(x, L_y, z, t)}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial \bar{u}(x, y, 0, t)}{\partial z} = 0; \quad \frac{\partial \bar{u}(x, y, L_z, t)}{\partial z} = 0; \\ \bar{u}(x, y, z, 0) = \bar{u}_0; \quad \bar{u}(x, y, z, \infty) = \bar{u}_0. \end{aligned}$$

Решение уравнения (1), описывающее изменение концентрации примеси в пространстве и времени, определялось методом осреднения функциональных поправок [28]. Предварительно для удобства решения учтем начальные условия не отдельно в условиях, а в исходных уравнениях (1), (3) и (5). В этом случае рассматриваемые уравнения преобразуются к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[D \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\ + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_S}{k T} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} C(x, y, W, t) dW \right] + \\ + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_S}{k T} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} C(x, y, W, t) dW \right], \quad (1a) \\ \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\ + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} I(x, y, W, t) dW \right] + \\ + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} I(x, y, W, t) dW \right] - k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -k_{I,V}(x,y,z,T)I(x,y,z,t)V(x,y,z,t) + f_I(x,y,z)\delta(t), \quad (3a) \\
& \frac{\partial V(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_V(x,y,z,T) \frac{\partial V(x,y,z,t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_V(x,y,z,T) \frac{\partial V(x,y,z,t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_V(x,y,z,T) \frac{\partial V(x,y,z,t)}{\partial z} \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{VS}}{kT} \nabla_S \mu_1(x,y,z,t) \int_0^{L_z} V(x,y,W,t) dW \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu_1(x,y,z,t) \int_0^{L_z} I(x,y,W,t) dW \right] - k_{I,I}(x,y,z,T)I^2(x,y,z,t) - \\
& - k_{I,V}(x,y,z,T)I(x,y,z,t)V(x,y,z,t) + f_V(x,y,z)\delta(t), \\
& \frac{\partial \Phi_I(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_I}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_I(x,y,z,t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_I}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_I(x,y,z,t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_I}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_I(x,y,z,t)}{\partial z} \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x,y,z,t) \int_0^{L_z} \Phi_I(x,y,W,t) dW \right] + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x,y,z,t) \int_0^{L_z} \Phi_I(x,y,W,t) dW \right] + k_I(x,y,z,T)I(x,y,z,t) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x,y,z,t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x,y,z,t)}{\partial y} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x,y,z,t)}{\partial z} \right] + k_{I,I}(x,y,z,T)I^2(x,y,z,t) + f_{\Phi_I}(x,y,z)\delta(t), \quad (5a) \\
& \frac{\partial \Phi_V(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_V}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_V(x,y,z,t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_V}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_V(x,y,z,t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_V}(x,y,z,T) \frac{\partial \Phi_V(x,y,z,t)}{\partial z} \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +\Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_V(x, y, W, t) dW \right] + \\
 & +\Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \Phi_I(x, y, W, t) dW \right] + k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t) + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) + f_{\Phi_V}(x, y, z) \delta(t).
 \end{aligned}$$

Далее для определения первых приближений искомым концентраций примеси в рамках метода осреднения функциональных поправок заменим искомые функции $C(x, y, z, t)$, $I(x, y, z, t)$, $V(x, y, z, t)$, $\Phi_I(x, y, z, t)$ и $\Phi_V(x, y, z, t)$ в правых частях последних уравнений (1a), (3a) и (5a) на их пока неизвестные значения $\alpha_{1\rho}$. Такая замена позволяет получить уравнения для первых приближений рассматриваемых концентраций $C(x, y, z, t)$, $I(x, y, z, t)$, $V(x, y, z, t)$, $\Phi_I(x, y, z, t)$ и $\Phi_V(x, y, z, t)$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial C_1(x, y, z, t)}{\partial t} & = \alpha_{1C} \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[z \frac{D_S}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \right] + \\
 + \alpha_{1C} \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[z \frac{D_S}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \right] & + f_C(x, y, z) \delta(t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
 + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right], \quad (1b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial I_1(x, y, z, t)}{\partial t} & = \alpha_{1I} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \right] + \\
 + \alpha_{1I} \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left[z \frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \right] & + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
 + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\
 + f_I(x, y, z) \delta(t) - \alpha_{1I}^2 k_{I,I}(x, y, z, T) - \alpha_{1I} \alpha_{1V} k_{I,V}(x, y, z, T), \quad (3b)
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial V_1(x, y, z, t)}{\partial t} = \alpha_{1V} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{VS}}{kT} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & +\alpha_{IV}\Omega\frac{\partial}{\partial y}\left[z\frac{D_{VS}}{kT}\nabla_S\mu_1(x,y,z,t)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{D_{VS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial x}\right]+ \\
 & +\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{D_{VS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{D_{VS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+ \\
 & +f_V(x,y,z)\delta(t)-\alpha_{IV}^2k_{V,V}(x,y,z,T)-\alpha_{IV}\alpha_{IV}k_{I,V}(x,y,z,T), \\
 & \frac{\partial\Phi_{IV}(x,y,z,t)}{\partial t}=\alpha_{IV}z\Omega\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{D_{IVS}}{kT}\nabla_S\mu_1(x,y,z,t)\right]+ \\
 & +\alpha_{IV}z\Omega\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{D_{IVS}}{kT}\nabla_S\mu_1(x,y,z,t)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial x}\right]+ \\
 & +\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+ \\
 & +f_{\Phi_I}(x,y,z)\delta(t)+k_I(x,y,z,T)I(x,y,z,t)+k_{I,I}(x,y,z,T)I^2(x,y,z,t), \quad (5b) \\
 & \frac{\partial\Phi_{IV}(x,y,z,t)}{\partial t}=\alpha_{IV}z\Omega\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{D_{IVS}}{kT}\nabla_S\mu_1(x,y,z,t)\right]+ \\
 & +\alpha_{IV}z\Omega\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{D_{IVS}}{kT}\nabla_S\mu_1(x,y,z,t)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial x}\right]+ \\
 & +\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial y}\right]+\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{D_{IVS}}{\bar{V}kT}\frac{\partial\mu_2(x,y,z,t)}{\partial z}\right]+ \\
 & +f_{\Phi_V}(x,y,z)\delta(t)+k_V(x,y,z,T)V(x,y,z,t)+k_{V,V}(x,y,z,T)V^2(x,y,z,t).
 \end{aligned}$$

Интегрирование обеих частей уравнений (1b), (3b) и (5b) приводит к окончательным выражениям для концентраций $C(x,y,z,t)$, $I(x,y,z,t)$, $V(x,y,z,t)$, $\Phi_I(x,y,z,t)$ и $\Phi_V(x,y,z,t)$ в следующей форме:

$$\begin{aligned}
 C_1(x,y,z,t) & =\alpha_{IC}\Omega\frac{\partial}{\partial x}\int_0^t D_{SL}(x,y,z,T)\frac{z}{kT}\left[1+\zeta_1\frac{V(x,y,z,\tau)}{V^*}+\zeta_2\frac{V^2(x,y,z,\tau)}{(V^*)^2}\right]\times \\
 & \times\nabla_S\mu_1(x,y,z,\tau)\left[1+\frac{\xi_S\alpha_{IC}^\gamma}{P^\gamma(x,y,z,T)}\right]d\tau+\alpha_{IC}\frac{\partial}{\partial y}\int_0^t D_{SL}(x,y,z,T)\times \\
 & \times\left[1+\frac{\xi_S\alpha_{IC}^\gamma}{P^\gamma(x,y,z,T)}\right]\Omega\nabla_S\mu_1(x,y,z,\tau)\frac{z}{kT}\left[1+\zeta_1\frac{V(x,y,z,\tau)}{V^*}+\zeta_2\frac{V^2(x,y,z,\tau)}{(V^*)^2}\right]d\tau+
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + f_C(x, y, z), \quad (1c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_1(x, y, z, t) & = \alpha_{1I} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \\
 & + \alpha_{1I} z \Omega \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{IS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{IS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{IS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \\
 & + f_I(x, y, z) - \alpha_{1I}^2 \int_0^t k_{I,I}(x, y, z, T) d\tau - \alpha_{1I} \alpha_{1V} \int_0^t k_{I,V}(x, y, z, T) d\tau, \quad (3c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_1(x, y, z, t) & = \alpha_{1V} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \\
 & + \alpha_{1V} z \Omega \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{IS}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{VS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{VS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{VS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \\
 & + f_V(x, y, z) - \alpha_{1V}^2 \int_0^t k_{V,V}(x, y, z, T) d\tau - \alpha_{1I} \alpha_{1V} \int_0^t k_{I,V}(x, y, z, T) d\tau,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Phi_{1I}(x, y, z, t) & = \alpha_{1\Phi_I} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau \alpha_{1\Phi_I} z + f_{\Phi_I}(x, y, z) + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \int_0^t k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, \tau) d\tau + \\
& \quad + \int_0^t k_{I, I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, \tau) d\tau, \quad (5c) \\
\Phi_{IV}(x, y, z, t) & = \alpha_{1\Phi_V} z \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, \tau) d\tau \alpha_{1\Phi_V} z + f_{\Phi_V}(x, y, z) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \int_0^t k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, \tau) d\tau + \\
& \quad + \int_0^t k_{V, V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, \tau) d\tau.
\end{aligned}$$

Средние значения рассмотренных приближений определяются стандартно [28]:

$$\alpha_{1\rho} = \frac{1}{\Theta L_x L_y L_z} \int_0^{\Theta} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \rho_1(x, y, z, t) dz dy dx dt. \quad (9)$$

После подстановки выражений (1c), (3c) и (5c) в (9) получаем выражения для рассматриваемых средних значений концентраций в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\alpha_{1C} & = \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_C(x, y, z) dz dy dx, \\
\alpha_{1I} & = \sqrt{\frac{(a_3 + A)^2}{4a_4^2} - 4 \left(B + \frac{\Theta a_3 B + \Theta^2 L_x L_y L_z a_1}{a_4} \right)} - \frac{a_3 + A}{4a_4}, \\
\alpha_{1V} & = \frac{1}{S_{IV00}} \left[\frac{\Theta}{\alpha_{1I}} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_I(x, y, z) dz dy dx - \alpha_{1I} S_{II00} - \Theta L_x L_y L_z \right],
\end{aligned}$$

где

$$S_{\rho\rho ij} = \int_0^{\Theta} (\Theta - t) \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} k_{\rho,\rho}(x, y, z, T) I_1^i(x, y, z, t) V_1^j(x, y, z, t) dz dy dx dt,$$

$$a_4 = S_{II00} (S_{IV00}^2 - S_{II00} S_{VV00}), \quad a_3 = S_{IV00} S_{II00} + S_{IV00}^2 - S_{II00} S_{VV00},$$

$$a_2 = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_V(x, y, z) dz dy dx \times S_{IV00} S_{IV00}^2 +$$

$$+ S_{IV00} \Theta L_x^2 L_y^2 L_z^2 + 2 S_{VV00} S_{II00} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_I(x, y, z) dz dy dx - \Theta L_x^2 L_y^2 L_z^2 S_{VV00} -$$

$$- S_{IV00}^2 \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_I(x, y, z) dz dy dx, \quad a_1 = S_{IV00} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_I(x, y, z) dz dy dx,$$

$$a_0 = S_{VV00} \left[\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_I(x, y, z) dz dy dx \right]^2, \quad A = \sqrt{8y + \Theta^2 \frac{a_3^2}{a_4^2} - 4\Theta \frac{a_2}{a_4}},$$

$$B = \frac{\Theta a_2}{6a_4} + \sqrt[3]{\sqrt{q^2 + p^3} - q} - \sqrt[3]{\sqrt{q^2 + p^3} + q},$$

$$q = \frac{\Theta^3 a_2^3}{24 a_4^2} \left(4a_0 - \Theta L_x L_y L_z \frac{a_1 a_3}{a_4} \right) - \Theta^2 \frac{a_0}{8 a_4^2} \left(4\Theta a_2 - \Theta^2 \frac{a_3^2}{a_4} \right) -$$

$$- \frac{\Theta^3 a_2^3}{54 a_4^3} - L_x^2 L_y^2 L_z^2 \frac{\Theta^4 a_1^2}{8 a_4^2}, \quad p = \Theta^2 \frac{4a_0 a_4 - \Theta L_x L_y L_z a_1 a_3}{12 a_4^2} - \frac{\Theta a_2}{18 a_4},$$

$$\alpha_{1\Phi_I} = \frac{R_{I1}}{\Theta L_x L_y L_z} + \frac{S_{II20}}{\Theta L_x L_y L_z} + \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_{\Phi_I}(x, y, z) dz dy dx,$$

$$\alpha_{1\Phi_V} = \frac{R_{V1}}{\Theta L_x L_y L_z} + \frac{S_{VV20}}{\Theta L_x L_y L_z} + \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} f_{\Phi_V}(x, y, z) dz dy dx,$$

где $R_{\rho i} = \int_0^{\Theta} (\Theta - t) \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} k_I(x, y, z, T) I_1^i(x, y, z, t) dz dy dx dt.$

Приближения следующих порядков рассматриваемых концентраций определим стандартно, используя метод осреднения функциональных поправок [28]. В рамках данного метода для определения приближения искомым концентраций n -го порядка заменим в правых частях уравнений (1а), (3а),

(5a) функции $C(x, y, z, t)$, $I(x, y, z, t)$, $V(x, y, z, t)$, $\Phi_I(x, y, z, t)$ и $\Phi_V(x, y, z, t)$ на сумму средних значений рассматриваемых приближений и приближений предыдущего порядка: $\alpha_{np} + \rho_{n-1}(x, y, z, t)$. Тогда получаем уравнения для нахождения вторых приближений рассматриваемых концентраций:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C_2(x, y, z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, t)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \times \right. \\
&\times \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right] D_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_1(x, y, z, t)}{\partial x} \Bigg\} + \\
&+ \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right] \frac{\partial C_1(x, y, z, t)}{\partial y} D_L(x, y, z, T) \times \right. \\
&\times \left. \left[1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, t)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, t)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, t)}{(V^*)^2} \right] \times \right. \\
&\times D_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_1(x, y, z, t)}{\partial z} \left. \left[1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, t)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right] \right\} + f_C(x, y, z) \delta(t) + \\
&+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} k T} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\
&+ \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{D_S}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2C} + C(x, y, W, t)] dW \right\} + \\
&+ \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{D_S}{k T} \nabla_S \mu_1(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2C} + C(x, y, W, t)] dW \right\}, \quad (1d) \\
\frac{\partial I_2(x, y, z, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
&+ \frac{\partial}{\partial y} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, t)}{\partial z} \right] -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -k_{I,I}(x, y, z, T)[\alpha_{1I} + I_1(x, y, z, t)]^2 - k_{I,V}(x, y, z, T) \times \\
 & \quad \times [\alpha_{1I} + I_1(x, y, z, t)][\alpha_{1V} + V_1(x, y, z, t)] + \\
 & \quad + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2I} + I_1(x, y, W, t)] dW \times \right. \\
 & \quad \left. \times \frac{D_{IS}}{kT} \right\} + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{D_{IS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2I} + I_1(x, y, W, t)] dW \right\} + \\
 & \quad + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} d\tau + \\
 & \quad + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} d\tau, \tag{3d} \\
 & \quad \frac{\partial V_2(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
 & \quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, t)}{\partial z} \right] - \\
 & \quad - k_{V,V}(x, y, z, T)[\alpha_{1V} + V_1(x, y, z, t)]^2 - k_{I,V}(x, y, z, T)[\alpha_{1I} + I_1(x, y, z, t)] \times \\
 & \quad \times [\alpha_{1V} + V_1(x, y, z, t)] + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2V} + V_1(x, y, W, t)] dW \frac{D_{VS}}{kT} \right\} + \\
 & \quad + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{D_{VS}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} [\alpha_{2V} + V_1(x, y, W, t)] dW \right\} + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \times \\
 & \quad \times \frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} d\tau, \\
 & \quad \frac{\partial \Phi_{2I}(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
 & \quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{D_{\Phi_{IS}}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \times \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \int_0^{L_z} \left[\alpha_{2\Phi_I} + \Phi_{1I}(x, y, W, t) \right] dW \Bigg\} + k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, t) + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \left[\alpha_{2\Phi_I} + \Phi_{1I}(x, y, W, t) \right] dW \right\} + \\
& + k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + f_{\Phi_I}(x, y, z) \delta(t), \quad (5d) \\
& \frac{\partial \Phi_{2V}(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \times \right. \\
& \times \int_0^{L_z} \left[\alpha_{2\Phi_V} + \Phi_{1V}(x, y, W, t) \right] dW \Bigg\} + k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, t) + \\
& + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, t) \int_0^{L_z} \left[\alpha_{2\Phi_V} + \Phi_{1V}(x, y, W, t) \right] dW \right\} + \\
& + k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + f_{\Phi_V}(x, y, z) \delta(t).
\end{aligned}$$

Интегрирование обеих частей уравнений (1d), (3d) и (5d) приводит соотношения для вторых приближений функций $C(x, y, z, t)$, $I(x, y, z, t)$, $V(x, y, z, t)$, $\Phi_I(x, y, z, t)$ и $\Phi_V(x, y, z, t)$ к следующему виду:

$$C_2(x, y, z, t) = \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \left\{ 1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, \tau)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right\} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, \tau)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, \tau)}{(V^*)^2} \right] D_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_1(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t D_L(x, y, z, T) \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, \tau)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, \tau)}{(V^*)^2} \right] \frac{\partial C_1(x, y, z, \tau)}{\partial y} \times \\
 & \times \left\{ 1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, t)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right\} + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \left[1 + \zeta_1 \frac{V(x, y, z, \tau)}{V^*} + \zeta_2 \frac{V^2(x, y, z, \tau)}{(V^*)^2} \right] \times \\
 & \times D_L(x, y, z, T) \frac{\partial C_1(x, y, z, \tau)}{\partial z} \left\{ 1 + \xi \frac{[\alpha_{2C} + C_1(x, y, z, \tau)]^\gamma}{P^\gamma(x, y, z, T)} \right\} d\tau + f_C(x, y, z) + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_S}{kT} \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \int_0^{L_z} [\alpha_{2C} + C_1(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \Omega \frac{D_S}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2C} + C_1(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{CS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right], \tag{1e}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2(x, y, z, t) &= \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t D_I(x, y, z, T) \frac{\partial I_1(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau - \\
 & - \int_0^t k_{I,I}(x, y, z, T) [\alpha_{2I} + I_1(x, y, z, \tau)]^2 d\tau - \int_0^t k_{I,V}(x, y, z, T) \times \\
 & \times [\alpha_{2I} + I_1(x, y, z, \tau)] [\alpha_{2V} + V_1(x, y, z, \tau)] d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \Omega \frac{D_{IS}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2I} + I_1(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \int_0^{L_z} [\alpha_{2I} + I_1(x, y, W, \tau)] \times \\
& \times \Omega \frac{D_{IS}}{kT} dW d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{IS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + f_I(x, y, z), \quad (3e) \\
V_2(x, y, z, t) = & \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t D_V(x, y, z, T) \frac{\partial V_1(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau - \\
& - \int_0^t k_{V,V}(x, y, z, T) [\alpha_{2V} + V_1(x, y, z, \tau)]^2 d\tau - \\
& - \int_0^t k_{I,V}(x, y, z, T) [\alpha_{2I} + I_1(x, y, z, \tau)] [\alpha_{2V} + V_1(x, y, z, \tau)] d\tau + \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \Omega \frac{D_{VS}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2V} + V_1(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \int_0^{L_z} [\alpha_{2V} + V_1(x, y, W, \tau)] \times \\
& \times \Omega \frac{D_{VS}}{kT} dW d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial y} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{D_{VS}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, t)}{\partial z} \right] + f_V(x, y, z), \\
\Phi_{2I}(x, y, z, t) = & \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, \tau)}{\partial y} \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times D_{\Phi_I}(x, y, z, T) d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t D_{\Phi_I}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1I}(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2\Phi_I} + \Phi_{1I}(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2\Phi_I} + \Phi_{1I}(x, y, W, \tau)] dW \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) d\tau + \\
 & + \int_0^t k_{I,I}(x, y, z, T) I^2(x, y, z, \tau) d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{\Phi_I S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + f_{\Phi_I}(x, y, z) + \\
 & + \int_0^t k_I(x, y, z, T) I(x, y, z, \tau) d\tau, \tag{5e}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Phi_{2V}(x, y, z, t) = & \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, \tau)}{\partial y} \times \\
 & \times D_{\Phi_V}(x, y, z, T) d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t D_{\Phi_V}(x, y, z, T) \frac{\partial \Phi_{1V}(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) \frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2\Phi_V} + \Phi_{1V}(x, y, W, \tau)] dW d\tau + \\
 & + \Omega \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{kT} \int_0^{L_z} [\alpha_{2\Phi_V} + \Phi_{1V}(x, y, W, \tau)] dW \nabla_S \mu(x, y, z, \tau) d\tau + \\
 & + \int_0^t k_{V,V}(x, y, z, T) V^2(x, y, z, \tau) d\tau + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial x} d\tau + \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial y} d\tau + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \frac{D_{\Phi_V S}}{\bar{V} kT} \frac{\partial \mu_2(x, y, z, \tau)}{\partial z} d\tau + \\
 & + f_{\Phi_V}(x, y, z) + \int_0^t k_V(x, y, z, T) V(x, y, z, \tau) d\tau.
 \end{aligned}$$

Средние значения рассматриваемых приближений второго порядка определяются стандартно с помощью следующего соотношения [28]:

$$\alpha_{2\rho} = \frac{1}{\Theta L_x L_y L_z} \int_0^{\Theta L_x} \int_0^{\Theta L_y} \int_0^{\Theta L_z} [\rho_2(x, y, z, t) - \rho_1(x, y, z, t)] dz dy dx dt. \quad (10)$$

Использование в соотношении (10) выражений (1d), (3d) и (5d) позволяет определить соотношения для искомым средних величин $\alpha_{2\rho}$. Данные соотношения представимы в следующей форме:

$$\alpha_{2C} = 0, \alpha_{2\Phi I} = 0, \alpha_{2\Phi V} = 0,$$

$$\alpha_{2V} = \sqrt{\frac{(b_3 + E)^2}{4b_4^2} - 4 \left(F + \frac{\Theta a_3 F + \Theta^2 L_x L_y L_z b_1}{b_4} \right)} - \frac{b_3 + E}{4b_4},$$

$$\alpha_{2I} = \frac{C_V - \alpha_{2V}^2 S_{VV00} - \alpha_{2V} (2S_{VV01} + S_{IV10} + \Theta L_x L_y L_z) - S_{VV02} - S_{IV11}}{S_{IV01} + \alpha_{2V} S_{IV00}},$$

где

$$b_4 = \frac{1}{\Theta L_x L_y L_z} S_{IV00}^2 S_{VV00} - \frac{1}{\Theta L_x L_y L_z} S_{VV00}^2 S_{II00},$$

$$b_3 = -\frac{S_{II00} S_{VV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (2S_{VV01} + S_{IV10} + \Theta L_x L_y L_z) +$$

$$+ \frac{S_{IV00} S_{VV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (S_{IV01} + 2S_{II10} + S_{IV01} + \Theta L_x L_y L_z) +$$

$$+ \frac{S_{IV00}^2}{\Theta L_x L_y L_z} (2S_{VV01} + S_{IV10} + \Theta L_x L_y L_z) - \frac{S_{IV00}^2 S_{IV10}}{\Theta^3 L_x^3 L_y^3 L_z^3},$$

$$b_2 = \frac{S_{II00} S_{VV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (S_{VV02} + S_{IV11} + C_V) - (S_{IV10} - 2S_{VV01} + \Theta L_x L_y \times$$

$$\times L_z)^2 + \frac{S_{IV01} S_{VV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (\Theta L_x L_y L_z + 2S_{II10} + S_{IV01}) +$$

$$+ \frac{S_{IV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (S_{IV01} + 2S_{II10} + 2S_{IV01} + \Theta L_x L_y \times$$

$$\times L_z) (2S_{VV01} + \Theta L_x L_y L_z + S_{IV10}) - \frac{S_{IV00}^2}{\Theta L_x L_y L_z} (C_V - S_{VV02} - S_{IV11}) +$$

$$+ \frac{C_I S_{IV00}^2}{\Theta^2 L_x^2 L_y^2 L_z^2} - \frac{2S_{IV10}}{\Theta L_x L_y L_z} S_{IV00} S_{IV01},$$

$$\begin{aligned}
 b_1 &= S_{II00} \frac{S_{IV11} + S_{VV02} + C_V}{\Theta L_x L_y L_z} (2S_{VV01} + S_{IV10} + \Theta L_x L_y L_z) + \frac{S_{IV01}}{\Theta L_x L_y L_z} (\Theta L_x L_y \times \\
 &\quad \times L_z + 2S_{II10} + S_{IV01}) (2S_{VV01} + S_{IV10} + \Theta L_x L_y L_z) - \frac{S_{IV10} S_{IV01}^2}{\Theta L_x L_y L_z} - \\
 &\quad - \frac{S_{IV00}}{\Theta L_x L_y L_z} (3S_{IV01} + 2S_{II10} + \Theta L_x L_y L_z) (C_V - S_{VV02} - S_{IV11}) + 2C_I S_{IV00} S_{IV01}, \\
 b_0 &= \frac{S_{II00}}{\Theta L_x L_y L_z} (S_{IV00} + S_{VV02})^2 - \frac{S_{IV01}}{L_x L_y L_z} \frac{1}{\Theta} (\Theta L_x L_y L_z + 2S_{II10} + S_{IV01}) \times \\
 &\quad \times (C_V - S_{VV02} - S_{IV11}) + 2C_I S_{IV01}^2 - S_{IV01} \frac{C_V - S_{VV02} - S_{IV11}}{\Theta L_x L_y L_z} \times \\
 &\quad \times \frac{1}{\Theta} (\Theta L_x L_y L_z + 2S_{II10} + S_{IV01}) (C_V - S_{VV02} - S_{IV11}) + 2C_I S_{IV01}^2 - \\
 &\quad - S_{IV01} \frac{C_V - S_{VV02} - S_{IV11}}{\Theta L_x L_y L_z} S_{IV01} (\Theta L_x L_y L_z + 2S_{II10} + S_{IV01}), \\
 C_I &= \frac{\alpha_{IV} \alpha_{IV}}{\Theta L_x L_y L_z} S_{IV00} + \frac{\alpha_{IV}^2 S_{II00}}{\Theta L_x L_y L_z} - \frac{S_{II20} S_{II20}}{\Theta L_x L_y L_z} - \frac{S_{IV11}}{\Theta L_x L_y L_z},
 \end{aligned}$$

$$C_V = \alpha_{IV} \alpha_{IV} S_{IV00} + \alpha_{IV}^2 S_{VV00} - S_{VV02} - S_{IV11}, \quad E = \sqrt{8y + \Theta^2 \frac{a_3^2}{a_4} - 4\Theta \frac{a_2}{a_4}},$$

$$F = \frac{\Theta a_2}{6a_4} + \sqrt[3]{\sqrt{r^2 + s^3} - r} - \sqrt[3]{\sqrt{r^2 + s^3} + r},$$

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{\Theta^3 b_2}{24b_4^2} \left(4b_0 - \Theta L_x L_y L_z \frac{b_1 b_3}{b_4} \right) - \frac{\Theta^3 b_2^3}{54b_4^3} - b_0 \frac{\Theta^2}{8b_4^2} \times \\
 &\quad \times \left(4\Theta b_2 - \Theta^2 \frac{b_3^2}{b_4} \right) - L_x^2 L_y^2 L_z^2 \frac{\Theta^4 b_1^2}{8b_4^2}, \quad s = \Theta^2 \frac{4b_0 b_4 - \Theta L_x L_y L_z b_1 b_3}{12b_4^2} - \frac{\Theta b_2}{18b_4}.
 \end{aligned}$$

Далее определим компоненты вектора смещений. Для этого необходимо решить уравнения системы (8). Первые приближения рассматриваемых компонент определим методом осреднения функциональных поправок. Для этого заменим искомые функции в правой части рассматриваемых уравнений на пока неизвестные средние значения α_i . В результате такой замены получаем уравнения для определения искомых приближений:

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = -K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x},$$

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = -K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y},$$

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = -K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z}.$$

Решение данных уравнений может быть получено интегрированием обеих частей уравнения по времени t . В окончательной форме искомые приближения могут быть представлены в следующем виде:

$$u_{1x}(x, y, z, t) = u_{0x} + K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta -$$

$$-K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\infty \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta,$$

$$u_{1y}(x, y, z, t) = u_{0y} + K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial y} \int_0^t \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta -$$

$$-K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial y} \int_0^\infty \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta,$$

$$u_{1z}(x, y, z, t) = u_{0z} + K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial z} \int_0^t \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta -$$

$$-K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial z} \int_0^\infty \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta.$$

Приближения следующих порядков рассматриваемых компонент определяются стандартно: с помощью замены искомым компонент в правой части рассматриваемых уравнений суммой $\alpha_i + u_i(x, y, z, t)$ [28]. В результате данной замены получаем следующие уравнения для определения вторых приближений искомым компонент вектора смещений:

$$\begin{aligned} \rho(z) \frac{\partial^2 u_{2x}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = & \left\{ K(z) + \frac{5E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2 u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \\ & + \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial x \partial y} + \\ & \times \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial x \partial y} + \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial z^2} \right] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} K(z) \beta(z) + \left\{ K(z) + \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2 u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial x \partial z}, \\
 & \rho(z) \frac{\partial^2 u_{2y}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x \partial y} \right] - \\
 & -\frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} K(z) \beta(z) + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial z} + \frac{\partial u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial y} \right] \right\} + \\
 & + \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y^2} \left\{ \frac{5E(z)}{12[1+\sigma(z)]} + K(z) \right\} + \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \times \\
 & \quad \times \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y \partial z} + K(z) \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial x \partial y}, \\
 & \rho(z) \frac{\partial^2 u_{2z}(x, y, z, t)}{\partial t^2} = \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2 u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial y^2} + \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\partial^2 u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y \partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(z) \left[\frac{\partial u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x} + \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y} + \frac{\partial u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \right\} + \frac{E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \times \\
 & \times \frac{\partial}{\partial z} \left[6 \frac{\partial u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial z} - \frac{\partial u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x} - \frac{\partial u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y} - \frac{\partial u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] - \\
 & \quad \left. \frac{\partial u_{1x}(x, y, z, t)}{\partial x} - \frac{\partial u_{1y}(x, y, z, t)}{\partial y} - \frac{\partial u_{1z}(x, y, z, t)}{\partial z} \right] \left\{ \frac{E(z)}{1+\sigma(z)} - \right. \\
 & \quad \left. - K(z) \beta(z) \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial z} \right\}.
 \end{aligned}$$

Интегрирование полученных уравнений по времени t позволяет получить соотношения для искомым приближений в окончательной форме:

$$\begin{aligned}
 u_{2x}(x, y, z, t) &= \frac{1}{\rho(z)} \left\{ K(z) + \frac{5E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^t \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \\
 & + \frac{1}{\rho(z)} \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^t \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{E(z)}{2\rho(z)} \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} \int_0^t \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_0^t \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \times \\
& \times \frac{1}{1+\sigma(z)} + \frac{1}{\rho(z)} \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \int_0^t \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \left\{ K(z) + \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} - \\
& - K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \times \\
& \times \frac{1}{\rho(z)} \left\{ K(z) + \frac{5E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} - \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \times \\
& \times \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \frac{1}{\rho(z)} - \frac{E(z)}{2\rho(z)[1+\sigma(z)]} \times \\
& \times \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] - \\
& - \frac{1}{\rho(z)} \left\{ K(z) + \frac{E(z)}{3[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + u_{0x} + K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \times \\
& \quad \times \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\vartheta \int_0^t T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta, \\
& u_{2y}(x, y, z, t) = \frac{E(z)}{2\rho(z)[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \times \frac{1}{1+\sigma(z)} + \\
& + \frac{K(z)}{\rho(z)} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{1}{\rho(z)} \left\{ \frac{5E(z)}{12[1+\sigma(z)]} + K(z) \right\} \times \\
& \times \frac{\partial^2}{\partial y^2} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{1}{2\rho(z)} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{1+\sigma(z)} \left[\frac{\partial}{\partial z} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^\vartheta \int_0^t u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \right\} - K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \int_0^\vartheta \int_0^t T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \left\{ \frac{E(z)}{6[1+\sigma(z)]} - K(z) \right\} \frac{1}{\rho(z)} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \\
 & - \frac{E(z)}{2\rho(z)} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \times \\
 & \quad \times \frac{1}{1+\sigma(z)} - K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \frac{K(z)}{\rho(z)} \times \\
 & \quad \times \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \frac{1}{\rho(z)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \times \\
 & \quad \times \left\{ \frac{5E(z)}{12[1+\sigma(z)]} + K(z) \right\} - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{1+\sigma(z)} \left[\frac{\partial}{\partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \right\} \frac{1}{2\rho(z)} - \\
 & - \frac{1}{\rho(z)} \left\{ K(z) - \frac{E(z)}{6[1+\sigma(z)]} \right\} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + u_{0y}, \\
 & \quad u_z(x, y, z, t) = \frac{E(z)}{2[1+\sigma(z)]} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \right. \\
 & \quad + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \\
 & \quad \left. + \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \frac{1}{\rho(z)} + \frac{1}{\rho(z)} \times \\
 & \quad \times \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(z) \left[\frac{\partial}{\partial x} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \frac{\partial}{\partial y} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial}{\partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right] \right\} + \frac{1}{6\rho(z)} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{E(z)}{1+\sigma(z)} \left[6 \frac{\partial}{\partial z} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1x}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \frac{\partial}{\partial y} \int_0^\vartheta \int_0^\vartheta u_{1y}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta - \right. \right.
 \end{aligned}$$

$$\left. -\frac{\partial}{\partial z} \int_0^{\infty} \int_0^{\vartheta} u_{1z}(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta \right\} - K(z) \frac{\beta(z)}{\rho(z)} \frac{\partial}{\partial z} \int_0^{\infty} \int_0^{\vartheta} T(x, y, z, \tau) d\tau d\vartheta + u_{0z}.$$

В данной статье во втором приближении по методу осреднения функциональных поправок определены концентрации примеси, точечных радиационных дефектов и их простейших комплексов, а также проекций вектора смещения на координатные оси. Второго приближения обычно достаточно для формулировки качественных выводов и ряда количественных результатов. Аналитические расчеты проверялись их сопоставлением с результатами, полученными путем численного моделирования.

2. Результаты анализа

Полученные в предыдущем разделе соотношения позволили анализировать рассмотренные концентрации с учетом механических напряжений и изменения пористости материалов гетероструктуры. На рис. 2 и 3 приведены типичные пространственные распределения концентрации примеси при различных значениях коэффициента диффузии.

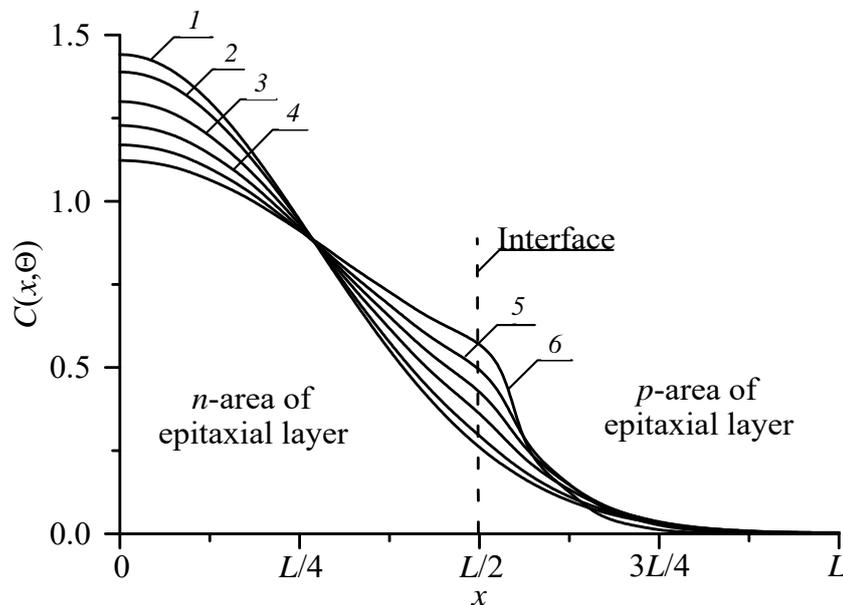


Рис. 2. Распределения концентрации примеси, введенной с помощью диффузии в рассмотренной на рис. 1 гетероструктуре перпендикулярно границе раздела между ее слоями. С увеличением номера кривой увеличивается разница между значениями коэффициента диффузии примеси в материалах гетероструктуры

Рисунок 2 соответствует диффузионному типу легирования. Рисунок 3 соответствует ионному типу легирования. Приведенные на рис. 2 и 3 распределения получены для большего значения коэффициента диффузии в легируемой области по сравнению с нелегируемой областью. Рисунки 2 и 3 показывают, что различие свойств в разных слоях гетероструктуры позволяет получить увеличение компактности распределений концентраций примесей.

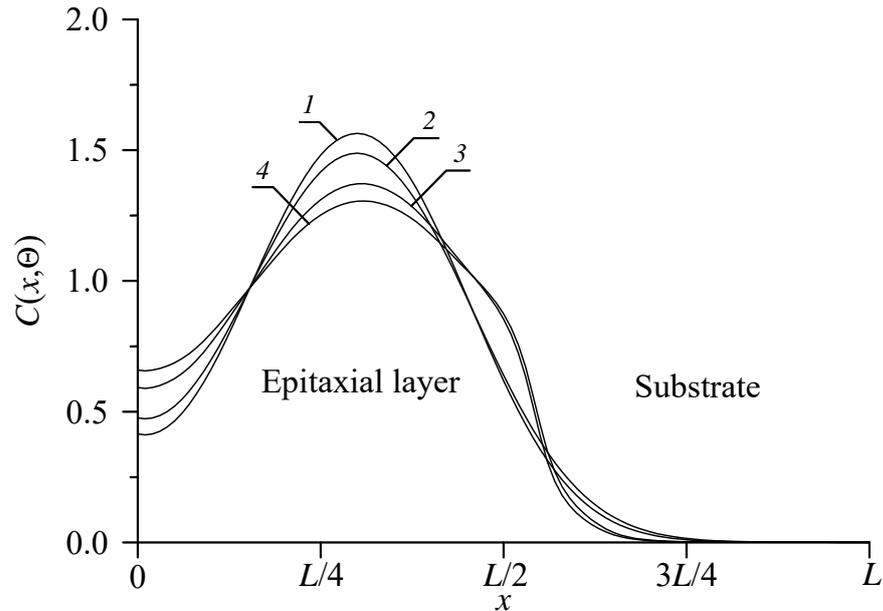


Рис. 3. Распределения концентрации примеси, введенной с помощью ионной имплантации в рассмотренной на рис. 1 гетероструктуре перпендикулярно границе раздела между ее слоями. С увеличением номера кривой увеличивается разница между значениями коэффициента диффузии примеси в материалах гетероструктуры. Кривые 1 и 3 соответствуют отжигу длительностью $\Theta = 0,0048(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)/D_0$ (D_0 – среднее значение коэффициента диффузии). Кривые 2 и 4 соответствуют отжигу длительностью $\Theta = 0,0057(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)/D_0$

Одновременно увеличивается равномерность распределения примеси в обогащенной ею области. Следует также заметить, что в данном случае необходимо оптимизировать длительность отжига: небольшая длительность отжига не позволяет примеси достичь границы раздела между слоями гетероструктуры (в этом случае происходит распространение примеси в однородном материале); в случае большой длительности отжига примесь в гетероструктуру проникает слишком глубоко и ее распределение оказывается слишком равномерным. В этой ситуации необходим выбор компромиссной длительности отжига. Оптимальное значение длительности отжига определим в рамках ранее введенного критерия [29–37]. Для использования рассматриваемого критерия необходимо аппроксимировать реальное пространственное распределение концентрации примеси скачкообразной функцией (рис. 4 и 5). Далее искомые значения оптимальной длительности отжига определялись минимизацией следующей среднеквадратической ошибки:

$$U = \frac{1}{L_x L_y L_z} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} [C(x, y, z, \Theta) - \psi(x, y, z)] dz dy dx, \quad (15)$$

где функция $\psi(x, y, z)$ описывает рассмотренную ранее скачкообразную аппроксимирующую функцию.

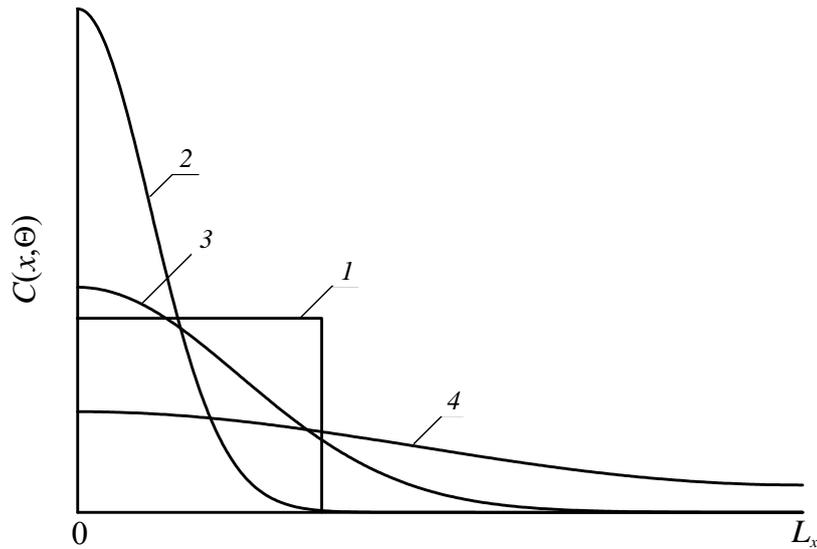


Рис. 4. Пространственные распределения введенной диффузионно примеси. Кривая 1 описывает желательное идеальное распределение концентрации примеси. Кривые 2–4 описывают реальные пространственные распределения примеси при различных значениях длительности отжига

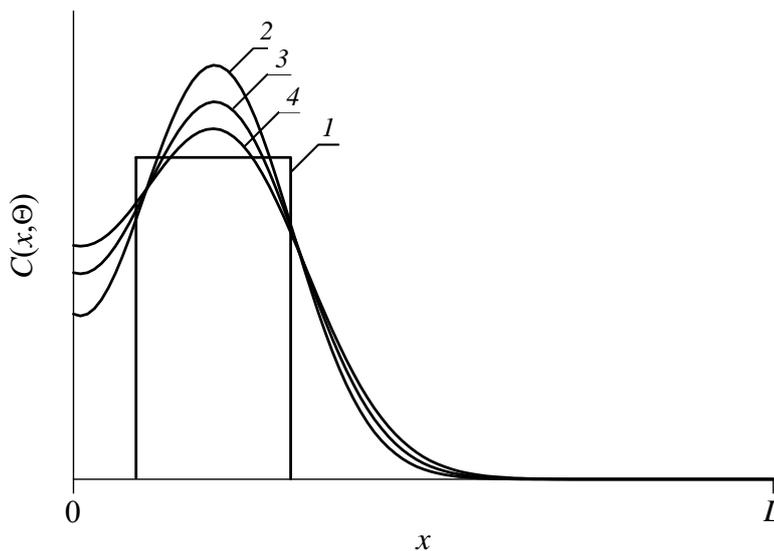


Рис. 5. Пространственные распределения примеси, введенной с помощью ионной имплантации. Кривая 1 описывает желательное идеальное распределение концентрации примеси. Кривые 2–4 описывают реальные пространственные распределения примеси при различных значениях длительности отжига

Полученные оптимальные значения длительности отжига приведены на рис. 6 (при диффузионном легировании) и рис. 7 (при ионном легировании). Необходимо отметить, что ионное легирование приводит к необходимости отжига радиационных дефектов. Данный отжиг приводит к уширению распределения примеси. В идеальной ситуации в течение отжига дефектов примесь достигнет границы раздела между слоями гетероструктуры. Если при-

мель не успевает достичь данной границы за время отжига дефектов, то представляет интерес дополнительный отжиг примеси. В этой ситуации значение оптимальной длительности отжига имеет меньшие значения в случае ионного легирования по сравнению с диффузионным.

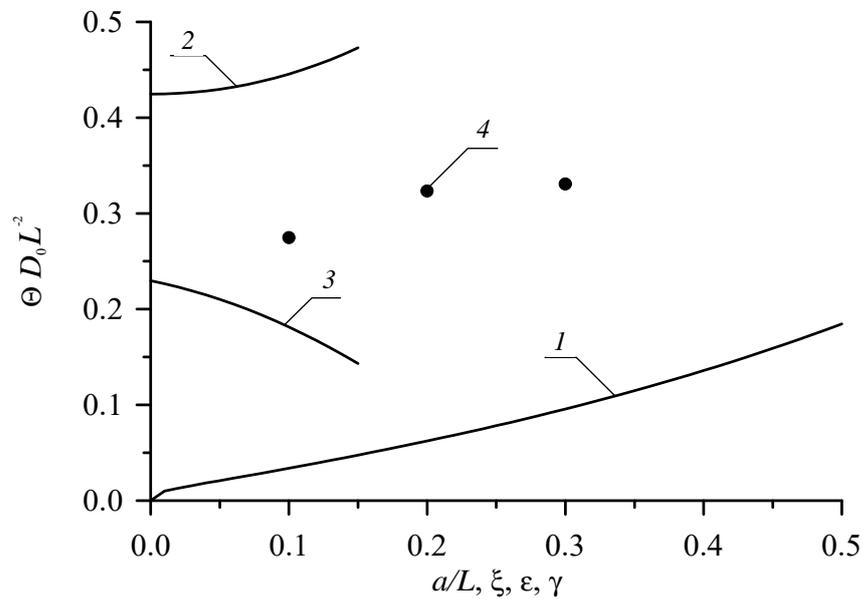


Рис. 6. Зависимости нормированной оптимальной длительности отжига в случае диффузионного легирования от различных параметров гетероструктуры. Кривая 1 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от отношения a/L и $\xi = \gamma = 0$ при попарном равенстве коэффициентов диффузии. Кривая 2 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра ε при $a/L=1/2$ и $\xi = \gamma = 0$. Кривая 3 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра ξ при $a/L=1/2$ и $\varepsilon = \gamma = 0$. Кривая 4 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра γ при $a/L=1/2$ и $\varepsilon = \xi = 0$

Также представляет интерес изменение пространственных распределений примесей в легированных частях гетероструктуры под влиянием механических напряжений. В случае выполнения неравенства $\varepsilon_0 < 0$ распределение примеси сжимается. В противном случае (при выполнении неравенства $\varepsilon_0 > 0$) выполняется противоположный эффект: уширение распределения концентрации примеси. С удалением от границы раздела между слоями влияние механических напряжений уменьшается. Описанное сжатие распределения примеси возможно частично компенсировать с помощью лазерного отжига [37]. Механические изменения в гетероструктурах изменяют величину оптимального значения длительности отжига, сохраняя качественный вид зависимостей, представленных на рис. 6 и 7. В то же время пористость материалов гетероструктуры приводит к уменьшению механических напряжений. Для иллюстрации этого уменьшения на рис. 8 показаны распределения концентраций вакансий в пористых и непористых материалах. На рис. 9 приведена зависимость перпендикулярной к границе между материалами гетероструктуры компоненты вектора смещений u_z в пористых и непористых материалах.

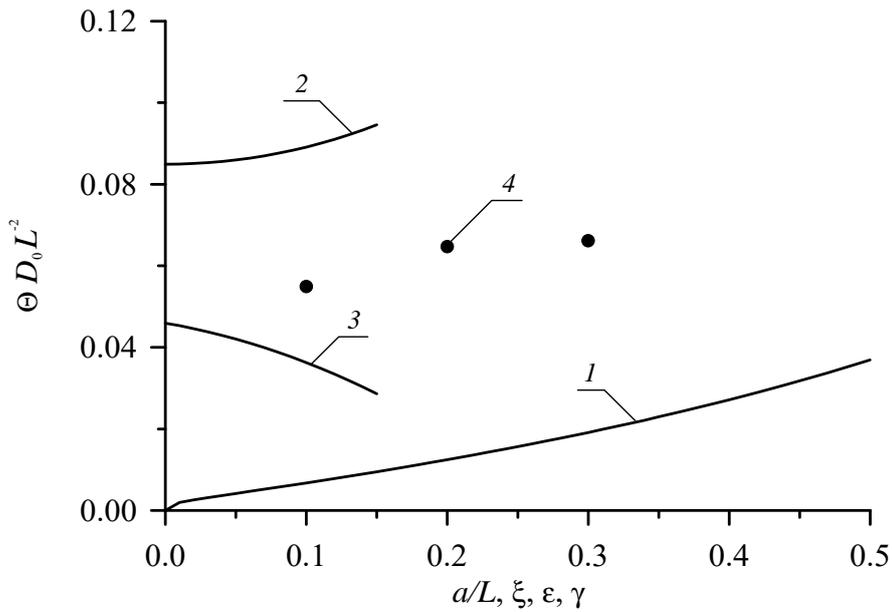


Рис. 7. Зависимости нормированной оптимальной длительности отжига в случае ионного легирования от различных параметров гетероструктуры. Кривая 1 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от отношения a/L и $\xi = \gamma = 0$ при попарном равенстве коэффициентов диффузии. Кривая 2 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра ϵ при $a/L=1/2$ и $\xi = \gamma = 0$. Кривая 3 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра ξ при $a/L=1/2$ и $\epsilon = \gamma = 0$. Кривая 4 описывает зависимость оптимальной длительности отжига от параметра γ при $a/L=1/2$ и $\epsilon = \xi = 0$

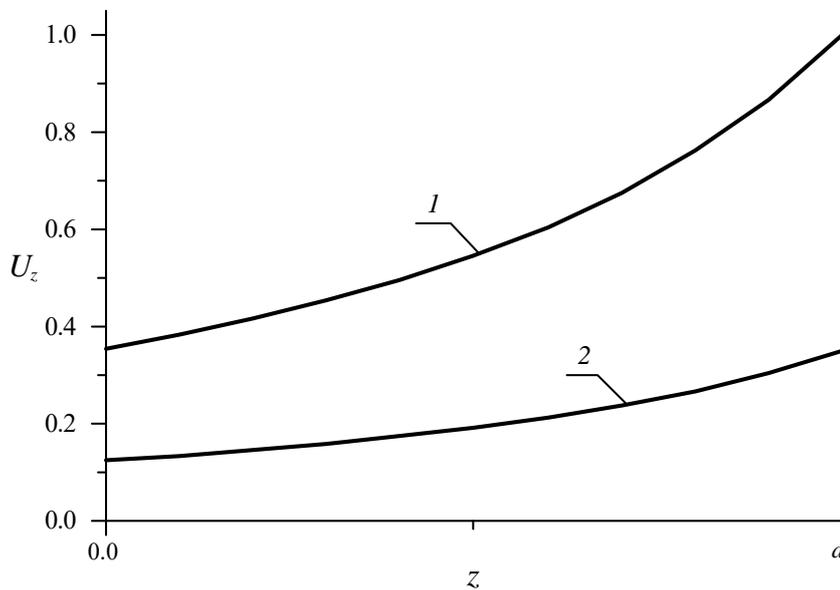


Рис. 8. Пространственные распределения компоненты u_z от координаты z в непористом и пористом эпитаксиальных слоях (соответственно кривые 1 и 2)

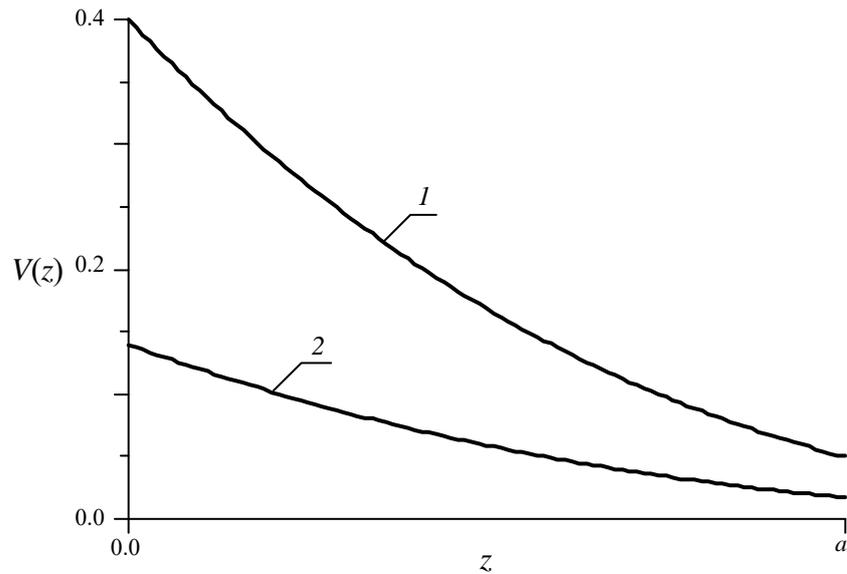


Рис. 9. Пространственные распределения концентрации вакансий от координаты z в непористом и пористом эпитаксиальных слоях (соответственно кривые 1 и 2)

Заключение

В настоящей статье предложена методика увеличения степени интеграции полевых гетеротранзисторов в смесителе с понижением частоты. Сформулирована рекомендация для выбора оптимальной длительности отжига примеси и уменьшения механических напряжений гетероструктуры. Предложен аналитический метод анализа массо- и теплопереноса, позволяющий учитывать изменения параметров и в пространстве, и во времени одновременно, а также нелинейность данных процессов.

Библиографический список

1. **Лачин, В. И.** Электроника / В. И. Лачин, Н. С. Савелов. – Ростов-на-Дону : Феникс, 2001. – 446 с.
2. **Полищук, А.** Программируемые аналоговые ИС Anadigm: весь спектр аналоговой электроники на одном кристалле. Первое знакомство / А. Полищук // Современная электроника. – 2004. – № 12. – С. 8–11.
3. **Волович, Г.** Современные модели интегральных операционных усилителей / Г. Волович // Современная электроника. – 2006. – № 2. – С. 10–17.
4. **Керенцев, А.** Конструктивно-технологические особенности MOSFET полевых транзисторов / А. Керенцев, В. Ланин // Силовая электроника. – 2008. – № 1. – С. 34–38.
5. Диоды с барьером Шоттки Au-TiVx-n-6H-SiC: особенности токопереноса в выпрямляющих и невыпрямляющих контактах / А. О. Агеев, А. Е. Беляев, Н. С. Болтовец, В. Н. Иванов, Р. В. Конакова, Я. Я. Кудрик, П. М. Литвин, В. В. Миленин, А. В. Саченко // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43 (7). – С. 897–903.
6. High-performance InGaP/GaAs pnp δ -doped heterojunction bipolar transistor / J.-H. Tsai, Sh.-Y. Chiu, W.-Sh. Lour, D.-F. Guo // Semiconductors. – 2009. – Vol. 43 (7). – P. 939–942.
7. Образование донорных центров при отжиге кремния, имплантированного диспрозием и гольмием / О. В. Александров, А. О. Захарьин, Н. А. Соболев, Е. И. Шек,

- М. М. Маковийчук, Е. О. Паршин // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32 (9). – С. 1029–1032.
8. **Ермолович, И. Б.** Особенности рекомбинационных процессов в пленках CdTe, изготовленных при различных температурных режимах роста и последующих отжигах / И. Б. Ермолович, В. В. Миленин, Р. А. Редько, С. М. Редько // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43 (8). – С. 1016–1020.
 9. Enhancing the efficiency of SnS solar cells via band-offset engineering with a zinc oxysulfide buffer layer / P. Sinsermsuksakul, K. Hartman, S. B. Kim, J. Heo, L. Sun, H. N. Park, R. Chakraborty, T. Buonassisi, R. G. Gordon // Appl. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 102 (5). – P. 053901–053905.
 10. Shallow acceptor complexes in p-type ZnO / J. G. Reynolds, C. L. Reynolds, Jr. A. Mohanta, J. F. Muth, J. E. Rowe, H. O. Everitt, D. E. Aspnes // Appl. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 102 (15). – P. 152114–152118.
 11. Исследование технологических процессов изготовления мощных высоковольтных биполярных транзисторов с решеткой включений в коллекторной области / Н. И. Волокобинская, И. Н. Комаров, Т. В. Матюхина, В. И. Решетников, А. А. Руш, И. В. Фалина, А. С. Ястребов // Физика и техника полупроводников. – 2001. – Т. 35 (8). – С. 1013–1017.
 12. **Pankratov, E. L.** Doping of materials during manufacture p-n-junctions and bipolar transistors. Analytical approaches to model technological approaches and ways of optimization of distributions of dopants / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // Reviews in Theoretical Science. – 2013. – Vol. 1 (1). – P. 58–82.
 13. **Кукушкин, С. А.** Эпитаксиальный рост оксида цинка методом молекулярного наслаивания на подложках SiC/Si / С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, А. И. Романычев // Физика твердого тела. – 2016. – Vol. 58 (7). – P. 1398–1402.
 14. **Trukhanov, E. M.** Long-range stresses generated by misfit dislocations in epitaxial films / E. M. Trukhanov, A. V. Kolesnikov, I. D. Loshkarev // Russian Microelectronics. – 2015. – Vol. 44 (8). – P. 552–558.
 15. **Pankratov, E. L.** On optimization of regimes of epitaxy from gas phase. some analytical approaches to model physical processes in reactors for epitaxy from gas phase during growth films / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // Reviews in Theoretical Science. – 2015. – Vol. 3 (4). – P. 365–398.
 16. Dopant distribution in the recrystallization transient at the maximum melt depth induced by laser annealing / K. K. Ong, K. L. Pey, P. S. Lee, A. T. S. Wee, X. C. Wang, Y. F. Chong // Appl. Phys. Lett. – 2006. – Vol. 89 (17). – P. 172111–172114.
 17. **Wang, H. T.** Pulsed laser annealing of Be-implanted GaN / H. T. Wang, L. S. Tan, E. F. Chor // J. Appl. Phys. – 2005. – Vol. 98 (9). – P. 094901–094905.
 18. Диффузионные процессы в полупроводниковых структурах при микроволновом отжиге / Ю. В. Быков, А. Г. Еремеев, Н. А. Жарова, И. В. Плотников, К. И. Рыбаков, М. Н. Дроздов, Ю. Н. Дроздов, В. Д. Скупов // Известия вузов. Радиофизика. – 2003. – Т. 43 (3). – С. 836–843.
 19. **Tytgat, M.** A 90-GHz receiver in 40-nm CMOS for plastic waveguide links / M. Tytgat, N. van Thienen, P. Reynaert // Analog. Integr. Circ. Sig. Process. – 2015. – Vol. 83. – P. 55–64.
 20. **Zhang, Y. W.** Numerical simulation of island formation in a coherent strained epitaxial film system / Y. W. Zhang, A. F. Bower // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1999. – Vol. 47 (11). – P. 2273–2297.
 21. **Ландау, Л. Д.** Теоретическая физика : в 10 т. Т. 7. Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Физматлит, 2001. – 264 с.
 22. The Wulff Shape of Alumina / M. Kitayama, T. Narushima, W. C. Carter, R. M. Cannon, A. M. Glaeser // J. Am. Ceram. Soc. – 2000. – Vol. 83 (10). – P. 2561–2583.
 23. **Черемской, П. Г.** Поры в твердом теле / П. Г. Черемской, В. В. Слезов, В. И. Бетехтин. – Москва : Энергратомиздат, 1990. – 376 с.

24. **Готра, З. Ю.** Технология микроэлектронных устройств / З. Ю. Готра. – Москва : Радио и связь, 1991. – 528 с.
25. **Fahey, P. M.** Point defects and dopant diffusion in silicon / P. M. Fahey, P. B. Griffin, J. D. Plummer // *Rev. Mod. Phys.* – 1989. – Vol. 61 (2). – P. 289–388.
26. **Винецкий, В. Л.** Радиационная физика полупроводников / В. Л. Винецкий, Г. А. Холодарь. – Киев : Наукова Думка, 1979. – 335 с.
27. **Мынбаева, М. Г.** О высокотемпературном диффузионном легировании пористого SiC / М. Г. Мынбаева, А. А. Лаврентьев, Е. Н. Мохов, К. Д. Мынбаев // *Письма в журнал технической физики.* – 2008. – Т. 34 (17). – С. 13–19.
28. **Соколов, Ю. Д.** Об определении динамических усилий в шахтных подъемных канатах / Ю. Д. Соколов // *Прикладная Механика.* – 1955. – Т. 1 (1). – С. 23–35.
29. **Pankratov, E. L.** Dopant diffusion dynamics and optimal diffusion time as influenced by diffusion-coefficient nonuniformity / E. L. Pankratov // *Russian Microelectronics.* – 2007. – Vol. 36 (1). – P. 33–39.
30. **Pankratov, E. L.** Redistribution of dopant during annealing of radiative defects in a multilayer structure by laser scans for production of an implanted-junction rectifiers / E. L. Pankratov // *Int. J. Nanoscience.* – 2008. – Vol. 7 (4-5). – P. 187–197.
31. **Pankratov, E. L.** Doping of materials during manufacture p-n-junctions and bipolar transistors. Analytical approaches to model technological approaches and ways of optimization of distributions of dopants / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // *Reviews in Theoretical Science.* – 2013. – Vol. 1 (1). – P. 58–82.
32. **Pankratov, E. L.** Decreasing of quantity of radiation defects in an implanted-junction rectifiers by using overlayers / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // *Int. J. Micro-Nano Scale Transp.* – 2012. – Vol. 3 (3). – P. 119–130.
33. **Pankratov, E. L.** Optimization of manufacturing of emitter-coupled logic to decrease surface of chip / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // *International Journal of Modern Physics B.* – 2015. – Vol. 29 (5). – P. 1550023-1–1550023-12.
34. **Pankratov, E. L.** On approach to optimize manufacturing of bipolar heterotransistors framework circuit of an operational amplifier to increase their integration rate. Influence mismatch-induced Stress / E. L. Pankratov // *J. Comp. Theor. Nanoscience.* – 2017. – Vol. 14 (10). – P. 4885–4899.
35. **Pankratov, E. L.** An approach to increase the integration rate of planar drift heterobipolar transistors / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // *Materials science in semiconductor processing.* – 2015. – Vol. 34. – P. 260–268.
36. **Pankratov, E. L.** An approach to manufacture of bipolar transistors in thin film structures. On the method of optimization / E. L. Pankratov, E. A. Bulaeva // *Int. J. Micro-Nano Scale Transport.* – 2014. – Vol. 4 (1). – P. 17–31.
37. **Pankratov, E. L.** Increasing of the sharpness of p-n-junctions by laser pulses / E. L. Pankratov // *Nano.* – 2011. – Vol. 6 (1). – P. 31–40.

References

1. Lachin V. I., Savelov N. S. *Elektronika* [Electronics]. Rostov-on-Don: Feniks, 2001, 446 p. [In Russian]
2. Polishchuk A. *Sovremennaya elektronika* [Modern electronics]. 2004, no. 12, pp. 8–11. [In Russian]
3. Volovich G. *Sovremennaya elektronika* [Modern electronics]. 2006, no. 2, pp. 10–17. [In Russian]
4. Kerentsev A., Lanin V. *Silovaya elektronika* [Power electronics]. 2008, no. 1, pp. 34–38. [In Russian]
5. Ageev A. O., Belyaev A. E., Boltovets N. S., Ivanov V. N., Konakova R. V., Kudrik Ya. Ya., Litvin P. M., Milenin V. V., Sachenko A. V. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2009, vol. 43 (7), pp. 897–903. [In Russian]

6. Tsai J.-H., Chiu Sh.-Y., Lour W.-Sh., Guo D.-F. *Semiconductors*. 2009, vol. 43 (7), pp. 939–942.
7. Aleksandrov O. V., Zakhar'in A. O., Sobolev N. A., Shek E. I., Makoviychuk M. M., Parshin E. O. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 1998, vol. 32 (9), pp. 1029–1032. [In Russian]
8. Ermolovich I. B., Milenin V. V., Red'ko R. A., Red'ko S. M. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2009, vol. 43 (8), pp. 1016–1020. [In Russian]
9. Sinsermsuksakul P., Hartman K., Kim S. B., Heo J., Sun L., Park H. H., Chakraborty R., Buonassisi T., Gordon R. G. *Appl. Phys. Lett.* 2013, vol. 102 (5), pp. 053901–053905.
10. Reynolds J. G., Reynolds C. L., Mohanta Jr. A., Muth J. F., Rowe J. E., Everitt H. O., Aspnes D. E. *Appl. Phys. Lett.* 2013, vol. 102 (15), pp. 152114–152118.
11. Volokobinskaya N. I., Komarov I. N., Matyukhina T. V., Reshetnikov V. I., Rush A. A., Falina I. V., Yastrebov A. S. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2001, vol. 35 (8), pp. 1013–1017. [In Russian]
12. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Reviews in Theoretical Science*. 2013, vol. 1 (1), pp. 58–82.
13. Kukushkin S. A., Osipov A. V., Romanychev A. I. *Fizika tverdogo tela*. [Solid-state physics] 2016, vol. 58 (7), pp. 1398–1402. [In Russian]
14. Trukhanov E. M., Kolesnikov A. V., Loshkarev I. D. *Russian Microelectronics*. 2015, vol. 44 (8), pp. 552–558.
15. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Reviews in Theoretical Science*. 2015, vol. 3 (4), pp. 365–398.
16. Ong K. K., Pey K. L., Lee P. S., Wee A. T. S., Wang X. C., Chong Y. F. *Appl. Phys. Lett.* 2006, vol. 89 (17), pp. 172111–172114.
17. Wang H. T., Tan L. S., Chor E. F. *J. Appl. Phys.* 2005, vol. 98 (9), pp. 094901–094905.
18. Bykov Yu. V., Eremeev A. G., Zharova N. A., Plotnikov I. V., Rybakov K. I., Drozdov M. N., Drozdov Yu. N., Skupov V. D. *Izvestiya vuzov. Radiofizika* [University proceedings. Radiophysics]. 2003, vol. 43 (3), pp. 836–843. [In Russian]
19. Tytgat M., van Thienen N., Reynaert P. *Analog. Integr. Circ. Sig. Process.* 2015, vol. 83, pp. 55–64.
20. Zhang Y. W., Bower A. F. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1999, vol. 47 (11), pp. 2273–2297.
21. Landau L. D., Lifshits E. M. *Teoreticheskaya fizika: v 10 t. T. 7. Teoriya uprugosti* [Theoretical physics: in 10 volumes. Volume 7. Theory of elasticity]. Moscow: Fizmatlit, 2001, 264 p. [In Russian]
22. Kitayama M., Narushima T., Carter W. C., Cannon R. M., Glaeser A. M. *J. Am. Ceram. Soc.* 2000, vol. 83 (10), pp. 2561–2583.
23. Cheremskoy P. G., Slezov V. V., Betekhtin V. I. *Pory v tverdom tele* [Pores in a solid]. Moscow: Energratomizdat, 1990, 376 p. [In Russian]
24. Gotra Z. Yu. *Tekhnologiya mikroelektronnykh ustroystv* [Microelectronic device technology]. Moscow: Radio i svyaz', 1991, 528 p. [In Russian]
25. Fahey P. M., Griffin P. B., Plummer J. D. *Rev. Mod. Phys.* 1989, vol. 61 (2), pp. 289–388.
26. Vinetskiy V. L., Kholodar' G. A. *Radiatsionnaya fizika poluprovodnikov* [Radiation physics of semiconductors]. Kiev: Naukova Dumka, 1979, 335 p. [In Russian]
27. Mynbaeva M. G., Lavrent'ev A. A., Mokhov E. N., Mynbaev K. D. *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki* []. 2008, vol. 34 (17), pp. 13–19. [In Russian]
28. Sokolov Yu. D. *Prikladnaya Mekhanika* [Applied mechanics]. 1955, vol. 1 (1), pp. 23–35. [In Russian]
29. Pankratov E. L. *Russian Microelectronics*. 2007, vol. 36 (1), pp. 33–39.
30. Pankratov E. L. *Int. J. Nanoscience*. 2008, vol. 7 (4-5), pp. 187–197.

31. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Reviews in Theoretical Science*. 2013, vol. 1 (1), pp. 58–82.
32. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Int. J. Micro-Nano Scale Transp.* 2012, vol. 3 (3), pp. 119–130.
33. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *International Journal of Modern Physics B*. 2015, vol. 29 (5), pp. 1550023-1–1550023-12.
34. Pankratov E. L. *J. Comp. Theor. Nanoscience*. 2017, vol. 14 (10), pp. 4885–4899.
35. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Materials science in semiconductor processing*. 2015, vol. 34, pp. 260–268.
36. Pankratov E. L., Bulaeva E. A. *Int. J. Micro-Nano Scale Transport*. 2014, vol. 4 (1), pp. 17–31.
37. Pankratov E. L. *Nano*. 2011, vol. 6 (1), pp. 31–40.

Панкратов Евгений Леонидович

доктор физико-математических наук, доцент, кафедра математических и естественнонаучных дисциплин, Нижегородский государственный университет имени Н. И. Лобачевского (Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина 23); профессор, кафедра высшей математики, Нижегородский государственный технический университет имени Р. Е. Алексева (Россия, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24)

E-mail: elp2004@mail.ru

Pankratov Evgeniy Leonidovich

Doctor of physical and mathematical sciences, associate professor, sub-department of mathematical and natural sciences, Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod (23 Gagarina avenue, Nizhny Novgorod, Russia); professor, sub-department of higher mathematics, Nizhny Novgorod State Technical University named after R. E. Alekseyev (24 Minina street, Nizhny Novgorod, Russia)

Образец цитирования:

Панкратов, Е. Л. Способ увеличения плотности элементов смесителя с понижением частоты и влияние модификации материалов на технологический процесс / Е. Л. Панкратов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 80–118. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-7.

РАСЧЕТ ПОСТОЯННЫХ МАДЕЛУНГА ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ ИОННОЙ СВЯЗИ В КРИСТАЛЛАХ ОКСИДОВ С КУБИЧЕСКОЙ, ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ И РОМБИЧЕСКОЙ СИНГОНИЯМИ

Аннотация.

Актуальность и цели. Постоянная Маделунга играет важную роль в понимании свойств и поведения кристаллических твердых тел, поскольку связывает электростатический потенциал в ионных кристаллических решетках с их параметрами. Сейчас в данной области продолжают исследования по увеличению скорости расчета, разработке новых алгоритмов расчета с более быстрой сходимостью рядов и расчету постоянных Маделунга для сложных кристаллических структур. В последнее время при расчете постоянных Маделунга большое внимание уделяется методу Харрисона и методам, развитым на его основе, например метод Харрисона – Сычева. Целью настоящей работы является применение метода Харрисона – Сычева к расчету постоянной Маделунга, необходимой для оценки ионной энергии связи в оксидах и природных алюмосиликатах, содержащихся в глинах. Глина выбрана в качестве объекта исследования, так как она является основой для многих функциональных материалов. Особый интерес представляет описание фазовых превращений в оксидах с помощью анализа изменения энергий связи в элементарных решетках.

Материалы и методы. Глина представляет собой дисперсную систему, состоящую из химических соединений с аморфной и кристаллической структурой. Рассматриваются кристаллы оксидов, входящие в химический состав монтмориллонитовых глин. Оценка ионной энергии связи в оксидах с кубической, тетрагональной и ромбической сингониями по формуле Борна – Ланде предполагает расчет постоянных Маделунга, для этого используется метод Харрисона – Сычева.

Результаты. Представлено применение усовершенствованного метода Харрисона (Харрисона – Сычева) для кристаллов оксидов с кубической сингонией, содержащихся в монтмориллонитовой глине. Описан способ применения метода Харрисона – Сычева для кристаллов оксидов с тетрагональной и ромбической сингонией. Проведен расчет постоянных Маделунга для тетрагональной ячейки оксида титана и хлорида кальция со структурой рутила. Проведено сравнение экспериментальных и расчетных данных; показано, что результаты расчета согласуются с экспериментальными результатами при низком значении относительной ошибки. Показано, что метод Харрисона – Сычева пригоден для расчета постоянных Маделунга для кристаллов с тетрагональной сингонией.

Выводы. Результаты расчета согласуются с экспериментальными данными при низком значении относительной ошибки. На основании этого можно сделать вывод о том, что усовершенствованный метод Харрисона – Сычева пригоден для расчета постоянных Маделунга для кристаллов с тетрагональной сингонией.

Ключевые слова: постоянная Маделунга, метод Харрисона-Сычева, ионная энергия связи, кристаллография, сингония.

V. N. Makarov

CALCULATION OF THE MADELUNG CONSTANT FOR ESTIMATING THE IONIC BOND ENERGY IN OXIDE CRYSTALS WITH CUBIC, TETRAGONAL, AND RHOMBIC CRYSTAL SYSTEMS

Abstract.

Background. The Madelung constants play an important role in the study of properties and behavior of crystalline solids as it relates the electrostatic potential of ionic crystal lattices with their parameters. Current research in this field aim to increase the speed of calculation, to develop of new algorithms with better series convergence, and to calculate the Madelung constants for more complex crystal structures. Recent calculations of the Madelung constants are focused on implementations of the Harrison method and methods developed on its basis, for example, on the Harrison-Sychev method. The purpose of this work is to apply the Harrison-Sychev method to a calculation of the Madelung constant, which is required to estimate the ionic bond energy in oxides and natural aluminosilicates contained in clays. Clay was chosen as the research object as it is used as a basis for many functional materials. Analysis of changes of binding energy within elementary lattices caused by phase transitions in oxides is of a special interest.

Materials and methods. Clay is a dispersed system consisting of chemical compounds with an amorphous and crystalline structure. This research discusses the crystals of oxides that are part of the chemical composition of montmorillonite clays. Evaluation of the ionic bond energy in oxides with cubic, tetragonal, and rhombic crystal systems using the Born-Landé formula involves calculation of the Madelung constants. The Harrison-Sychev method was used in this research.

Results. The work presents an application of the improved Harrison (Harrison-Sychev) method for oxide crystals with a cubic crystal system, which are found in montmorillonite clay. The implementation of the Harrison-Sychev method for oxide crystals with tetragonal and rhombic crystal system is described in details. The Madelung constants are calculated for the tetragonal cell of titanium oxide and calcium chloride with a rutile structure. Theoretical and experimental data were compared and they were found to agree for a low value of the relative error. It is shown that the Harrison-Sychev method is suitable for calculation of the Madelung constants for crystals with a tetragonal crystal system.

Conclusions. The calculation results agree with the experimental data with a low value of the relative error. This allows one to claim that the improved Harrison-Sychev method is suitable for calculation of the Madelung constants for crystals with a tetragonal syngony.

Keywords: the Madelung constant, the Harrison-Sychev method, ionic bond energy, crystallography, crystal system.

Введение

Постоянная Маделунга A_M играет важную роль в понимании свойств и поведения кристаллических твердых тел, поскольку связывает электростатический потенциал в ионных кристаллических решетках с их параметрами. Величина A_M является ключевым параметром, определяющим энергию и ста-

бильность кристаллической структуры. Оригинальная работа Маделунга была опубликована в 1918 г. [1], а константы Маделунга для простых кристаллов с кубическими сингониями были рассчитаны более 50 лет назад. Однако в данной области продолжают исследования, которые можно условно разделить на два направления. Первое – это увеличение скорости расчета A_M , разработка алгоритмов расчета с более быстрой сходимостью рядов. Второе – расчет постоянных Маделунга для сложных кристаллических структур. Обзор второго направления исследований подробно был рассмотрен автором в [2].

Существует множество методов расчета постоянных Маделунга, наиболее используемый из которых – метод Эвальда и методы, которые его развивают. Однако все они имеют ряд недостатков, основными из которых являются математическая сложность (требуются вычисления тройных сумм от весьма сложных выражений) и недостаточно высокая сходимость рядов. Дополнительная трудность в методе Эвальда связана с выбором оптимального «обрезающего фактора», который выделяет для расчета некую область в кристалле [3]. В работе [4] сообщалось, что метод не подходит для геометрии нанолита ($2D + h$) и простых наноструктур.

В последнее время при расчете постоянных Маделунга большое внимание уделяется методу Харрисона [5] (и методам, развитым на его основе). Часто его называют «метод расширяющихся кубов» – «the method of expanding cubes» (EC). Математическая сущность данного метода наиболее полно раскрыта в работе [6].

Автор рассматривает способ усовершенствования метода Харрисона путем введения матричной математической модели описания кристаллов. Эта модель предлагает способ описания кристаллической структуры с учетом симметрии куба, что позволяет сократить объем исходных данных, характеризующих трехмерную структуру вещества, а также улучшение сходимости рядов. Усовершенствованный метод Харрисона путем введения матричной математической модели описания кристаллов впервые предложил М. С. Сычев [7], поэтому автор настоящей работы предлагает называть этот метод – методом Харрисона – Сычева. Подробная понятийная база данного метода представлена в работах [7, 8]. К сожалению, у метода есть существенный недостаток – он применим лишь для кубической сингонии.

Целью настоящей работы является применение метода Харрисона – Сычева к расчету постоянной Маделунга, необходимой для оценки ионной энергии связи в оксидах и природных алюмосиликатах. Особый интерес представляет описание фазовых превращений в оксидах с помощью анализа изменения энергий связи элементарных решеток. Данное направление исследований можно назвать «энергетическим подходом».

1. Оксиды с кубической сингонией

Рассмотрим кубические сингонии (как первый этап превращения) оксидов, содержащихся в монтмориллонитовой глине Оренбургской области, химический состав которой представлен в табл. 1.

Глина представляет собой дисперсную систему, состоящую из химических соединений с аморфной и кристаллической структурой. В настоящей статье рассматриваются кристаллы оксидов, входящие в химический состав глин. Данный объект исследования выбран по причине того, что глина является основой для многих функциональных материалов [9], поэтому очень

важно знать о структурных и энергетических изменениях, происходящих в материале.

Таблица 1

Химический состав монтмориллонитовой глины [9]

SiO ₂	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Na ₂ O	K ₂ O	потери при прокаливании	Σ, %
55,90	9,51	0,86	18,63	0,72	2,05	1,90	3,24	7,08	99,89

Для расчета энергии связи в кубических элементарных ячейках используем формулу Борна – Ланде [10]:

$$U = -\frac{A_M \cdot N_a \cdot k \cdot Z^+ \cdot Z^- \cdot e^2}{r_{св}} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right), \quad (1)$$

где A_M – постоянная Маделунга; $N_a = 6,022 \cdot 10^{23}$ [моль⁻¹] – число Авагадро; $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \approx 9 \cdot 10^9$ [Н·м²/Кл²] – кулоновская постоянная в системе СИ; Z^+ и Z^- [10⁻¹⁹ Кл] – приведенные заряды положительного и отрицательного иона; $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ [Кл] – элементарный заряд; $r_{св}$ [нм] – длина энергии связи; n – показатель Борна.

Формула (1) используется для расчета энергии связи в ионных кристаллах двухкомпонентных систем. В рассматриваемых оксидах (табл. 1) присутствуют ионная, ковалентная и незначительная доля металлической связи. Доля каждой связи была описана в работе [11], поэтому, зная ее величину, можно оценить величину всей энергии решетки (табл. 2).

Таблица 2

Доля химических связей в оксидах [11]

Вид связи, %	Si-O	Fe-O	Ti-O	Al-O	Ca-O	Mg-O	Na-O	K-O
Ковалентная	51,70	46,33	40,15	46,75	34,68	38,63	32,61	31,72
Металлическая	22,40	23,12	24,08	23,05	25,16	24,35	25,67	25,91
Ионная	25,90	30,54	35,76	30,20	40,16	37,02	41,72	42,37

Для расчета постоянной Маделунга автор использовал 10 000 базовых кристаллических структур [8]. Базовая кристаллическая структура (БКС) – куб с правильно расположенными и периодически повторяющимися узлами, состоящая из 8 элементарных примитивных ячеек, содержащих 27 узлов (рис. 1). В такой первичной БКС узлы располагаются в вершинах, центрах граней и центрах ребер. Каждая последующая базовая кристаллическая структура увеличивается в размерах по трем направлениям на половину длины или длину ребра. Более подробное обсуждение БКС приведено в [8].

Значения показателя Борна в справочной литературе приводятся для химических соединений с ионной связью, поэтому значения показателя Борна для оксидов кремния, алюминия и железа отсутствуют [12]. Учитывая подобие электронного строения химических структур (рис. 2) [13], автор условно

принимает, что химические элементы в третьей и четвертой группах четвертого периода формируют ионы с показателем Борна $n = 8$, а для химических элементов восьмой группы четвертого периода $n = 9,5$. Распределение значений показателя Борна приведено на рис. 2 и в табл. 3. Каждое значение показателя выделено определенным цветом.

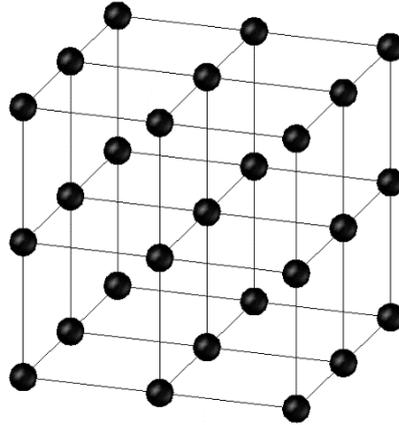


Рис. 1. Первичная базовая кристаллическая структура, содержащая 27 узлов

Li 3 Литий 6,939	Be 4 Бериллий 9,0122	B 5 Бор 10,811	C 6 Углерод 12,01115	N 7 Азот 14,0067	O 8 Кислород 15,9994	F 9 Фтор 18,9984	Ne 10 Неон 20,179
Na 11 Натрий 22,9898	Mg 12 Магний 24,305	Al 13 Алюминий 26,9815	Si 14 Кремний 28,086	P 15 Фосфор 30,9738	S 16 Сера 32,064	Cl 17 Хлор 35,453	Ar 18 Аргон 39,248
K 19 Калий 39,102	Ca 20 Кальций 40,08	Sc 21 Скандий 44,956	Ti 22 Титан 47,90	V 23 Ванадий 50,942	Cr 24 Хром 51,996	Mn 25 Марганец 54,9380	Fe 26 Железо 55,847
29 63,546	Cu 29 Медь 65,37	Zn 30 Цинк 65,37	Ga 31 Галлий 69,72	Ge 32 Германий 72,59	As 33 Мышьяк 74,9216	Se 34 Селен 78,96	Br 35 Бром 79,904
Rb 37 Рубидий 85,47	Sr 38 Стронций 87,62	39 88,905	Y 39 Иттрий 88,905	Zr 40 Цирконий 91,22	Nb 41 Ниобий 92,906	Mo 42 Молибден 95,94	Tc 43 Технеций [99]
47 107,868	Ag 47 Серебро 107,868	48 112,40	Cd 48 Кадмий 112,40	In 49 Индий 114,82	Sn 50 Олово 118,69	Sb 51 Сурьма 121,75	Te 52 Теллур 127,60
Cs 55 Цезий 132,905	Ba 56 Барий 137,34	57 138,91	La* 57 Лантан 138,91	Hf 72 Гафний 178,49	Ta 73 Тантал 180,948	74 183,85	W 74 Вольфрам 183,85
						75 186,2	Re 75 Рений 186,2
							54 131,30
							Xe 54 Ксенон 131,30
							86 83,80
							Kr 36 Криптон 83,80
							101,07 101,07
							Ru 44 Рутений 101,07

Рис. 2. Распределение значений показателя Борна в таблице Менделеева

Таблица 3

Распределение значений показателя Борна в таблице Менделеева (пояснение к рис. 2)

Ионы	Показать Борна, n	Цвет
$O^{2-}, F^-, Ne^+, Na^+, Mg^{2+}$	7 [12]	Красный
Al^{3+}, Si^{4+}	8	Серый
$S^{2-}, Cl^-, Ar^+, K^+, Ca^{2+}, Cu^{2+}$	9 [12]	Зеленый
$Ti^{4+}, Fe^{2+}, Fe^{3+}$	9,5	Фиолетовый
$Br^-, Kr^+, Rb^+, Ag^+, Ba^{2+}$	10 [12]	Синий

Положительно заряженные ионы, входящие в химический состав монтмориллонитсодержащей глины, образуют четыре группы, в каждую из кото-

рых входят два иона с одинаковыми показателями Борна. В первом приближении химический состав природных алюмосиликатов связан с получившейся электронной конфигурацией. Однако при более детальном анализе других химических соединений, которые, например, приведены в работе [14], данное распределение нарушается. Основные данные, необходимые для расчета энергии связи, сведены в табл. 4.

Таблица 4

Основные характеристики элементарных ячеек оксидов

Оксид	n	$Z^+, Z^- \cdot 10^{-19}$ Кл	Параметр ячейки, a , нм	Длина связи, $r_{св}$, нм	Структурный тип	A_M
SiO ₂ [19]	7,50	4 ⁺ , 2 ⁻	0,712	0,160	$Fd\bar{3}m$ (SiO ₂)	2,85094
Al ₂ O ₃ [17]	7,50	3 ⁺ , 2 ⁻	0,795	0,199	$Fd\bar{3}m$ (BeF ₂)	4,62798
FeO [15]	8,25	2 ⁺ , 2 ⁻	0,436	0,218	$Fm\bar{3}m$ (NaCl)	1,74761
γ -Fe ₂ O ₃ [18]	8,25	3 ⁺ , 2 ⁻	0,835	0,182	$Fd\bar{3}m$ (BeF ₂)	3,27247
TiO ₂ [20]	8,25	4 ⁺ , 2 ⁻	0,475	0,206	$Fm\bar{3}m$ (CaF ₂)	2,67480
K ₂ O [16]	8,00	1 ⁺ , 2 ⁻	0,644	0,279	$Fm\bar{3}m$ (CaF ₂)	2,67475
CaO [21]	8,00	2 ⁺ , 2 ⁻	0,481	0,241	$Fm\bar{3}m$ (NaCl)	1,74761
Na ₂ O [22]	7,00	1 ⁺ , 2 ⁻	0,555	0,240	$Fm\bar{3}m$ (CaF ₂)	2,67475
MgO [23]	7,00	2 ⁺ , 2 ⁻	0,421	0,211	$Fm\bar{3}m$ (NaCl)	1,74761

Результаты расчета энергии связи по формуле (1) и экспериментальные результаты приведены в табл. 5.

Таблица 5

Энергии связей рассматриваемых оксидов

Оксид	Результат расчета U , кДж/моль	Результат эксперимента U_0 , кДж/моль	Расхождение расчетных данных с экспериментальными $\pm \epsilon$, %
SiO ₂	- 17 160	-	-
Al ₂ O ₃	- 16 815	- 15 916 [24]	6
FeO	- 3 917	- 3 865 [25, 26]	1
Fe ₂ O ₃	- 13 136	- 14 774 [26]	11
TiO ₂	- 12 680	- 12 054 [26]	5
K ₂ O	- 2 333	- 2 232 [25]	5
CaO	- 3 533	- 3 401 [25]	4
Na ₂ O	- 2 650	- 2 478 [25]	7
MgO	- 3 954	- 3 791 [25]	4

Видно, что минимальное расхождение расчетных данных с экспериментальными наблюдается у оксидов FeO, MgO, TiO₂, CaO и K₂O (от 1 до 5 %), а максимальное – у Fe₂O₃. Вероятно, максимальное расхождение для Fe₂O₃ (11 %) объясняется тем, что в этой решетке существует два типа связи – ионная и ковалентная, при этом доля ковалентной связи составляет около 56 % [27]. Для других рассматриваемых оксидов доля ионной связи больше ковалентной, что объясняет минимальное расхождение расчетных данных

с экспериментальными. Следовательно, подход выбора значений показателя Борна вполне удовлетворителен.

Небольшие расхождения расчетных данных с экспериментальными подтверждают применимость метода Харрисона – Сычева для кубических сингоний. Для соединений с низкосимметричными кристаллическими структурами данный метод требует усовершенствования.

2. Оксиды с тетрагональной и ромбической сингониями

Рассмотрим усовершенствованный автором настоящей работы метод Харрисона – Сычева, позволяющий использовать его для расчета энергии кристаллических решеток с сингониями средней и низшей симметрией: тетрагональными и ромбическими. Пусть a , b и c – параметры кристаллической решетки, при этом $a \neq b \neq c$ для ромбической и $a \neq b = c$ – для тетрагональной сингонии. Тогда для расчета энергии ионного взаимодействия нужно привести исходную кристаллическую решетку к кубической:

$$\begin{cases} \tau = a \cdot n_1, \\ \tau = b \cdot n_2, \\ \tau = c \cdot n_3, \end{cases} \quad (2)$$

где τ – сторона большого куба, используемого в методе Харрисона – Сычева; n_1, n_2, n_3 – количество кристаллических решеток, составляющих куб, при этом (рис. 3) $n_i \in N$.

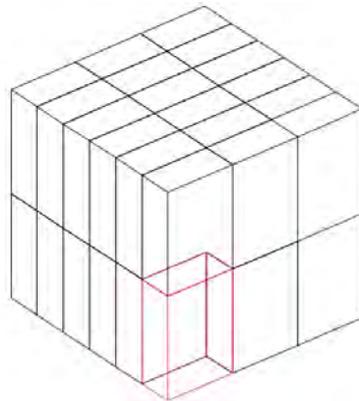


Рис. 3. Куб, сложенный из элементарных ячеек с ромбической сингонией. В качестве примера взяты параметры ячейки $a = 10$ пм; $b = 5$ пм; $c = 15$ пм; при этом $n_1 = 3$, $n_2 = 6$, $n_3 = 2$; $\tau = 30$ Å

Сторона большого куба представляет собой наименьшее общее кратное (НОК) для количества кристаллических структур, составляющих куб: $\text{НОК}(a, b) = \tau$ – для тетрагональной сингонии; $\text{НОК}(a, b, c) = \tau$ – для ромбической сингонии.

Тогда количество элементарных ячеек вдоль направления a , b и c равно:

$$n_1 = \frac{\tau}{a}; \quad n_2 = \frac{\tau}{b}; \quad n_3 = \frac{\tau}{c}. \quad (3)$$

В расчетах предлагается использовать параметры элементарной ячейки порядка 10^{-12} м и округлять полученные значения до целого. Подобный подход увеличивает точность и удобство расчетов.

Дальнейшие рассуждения применимы только к тетрагональной сингонии. На следующем этапе нужно увеличить число строк и столбцов матрицы для описания большого куба и формирования структурных матриц, матриц электрического заряда и универсальных количественных матриц. Более подробное обсуждение терминологии метода Харрисона – Сычева представлено в [5, 7, 8]. Для этого найдем число строк и столбцов матрицы:

$$\begin{aligned} & (a_1 \cdot n_1 - (n_1 - 1) \times c_1 \cdot n_3 - (n_3 - 1)), \\ & (n_1 (a_1 - 1) \times n_3 (c_1 - 1)) = (a_2 \times c_2), \end{aligned} \quad (4)$$

где a_1 и c_1 – число строк и столбцов для исходных матриц; a_2 и c_2 – число строк и столбцов для матриц, описывающих большой куб.

Для формирования квадратных матриц должно выполняться условие:

$$n_1 (a_1 - 1) = n_3 (c_1 - 1) \text{ или } n_3 = n_1 \frac{a_1 - 1}{c_1 - 1}.$$

Если данное условие не выполняется, используется соотношение

$$c_3 = a_3 = \max(a_2, c_2), \quad (5)$$

где a_3 и c_3 – число строк и столбцов соответственно для матриц, описывающих большой куб, при невыполнении условия формирования квадратных матриц.

Далее формируем структурные матрицы, матрицы электрического заряда и универсальную количественную матрицу [7, 8] размерностью a_2 и c_2 (или a_3 и c_3 при невыполнении условия формирования квадратных матриц). Величина постоянной Маделунга рассчитывается для большого куба, поэтому найдем переход к постоянной Маделунга для элементарной ячейки с тетрагональной сингонией:

$$A_{M(\text{тетр.})} = \frac{A_{M(\text{куб.})}}{n_1^2 \cdot n_3}. \quad (6)$$

Такой подход позволит детально проанализировать кулоновскую энергию оксидов и описать процесс их полиморфного превращения в рамках энергетического подхода. Описанный метод предполагает некоторую величину систематической ошибки, когда не выполняется условие формирования квадратных матриц, но величина ошибки незначительна. В качестве примера вычислим постоянную Маделунга для элементарной ячейки оксида титана со структурой рутила (рис. 4), в которой доля ионной связи больше ковалентной [28]. Параметры элементарной ячейки: $a = b = 459$ пм и $c = 296$ пм [28]. Кристаллическая структура оксида титана задается с помощью **семи** структурных матриц местоположения частиц и **семи** матриц электрических зарядов. Их поэлементное умножение дает следующий результат:

$$M_1 \circ C_1 = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}; \quad M_2 \circ C_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$M_3 \circ C_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}; M_4 \circ C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$M_5 \circ C_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; M_6 \circ C_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$M_1 \circ C_1 = M_7 \circ C_7.$$

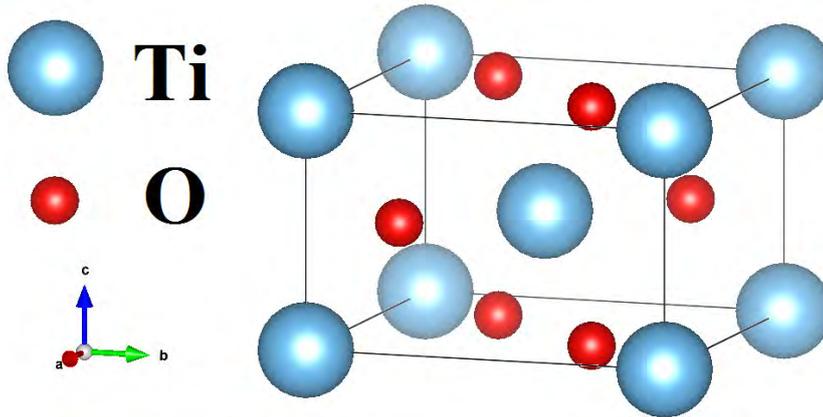


Рис. 4. Элементарная ячейка оксида титана со структурой рутила

Следовательно, $a_1 = 7$ и $c_1 = 3$.

Тогда сторона большого куба равна:

$$\text{НОК}(a, c) = \text{НОК}(459, 296) = 135864. \tag{7}$$

Количество элементарных ячеек вдоль направлений a , b и c :

$$n_1 = \frac{\tau}{a} = 296; n_2 = n_1; n_3 = \frac{\tau}{c} = 459. \tag{8}$$

Размерность матрицы для большого куба составляет:

$$(a_2 \times c_2) = (919 \times 1777). \tag{9}$$

В рассматриваемом примере условие формирования квадратных матриц не выполняется, так как $n_3 = 3n_1$. Тогда размерность квадратной матрицы для описания большого куба равна:

$$c_3 = a_3 = \max(919, 1777) = 1777.$$

Получаем квадратные матрицы размерностью (1777×1777) .

После формирования матриц и применения метода Харрисона – Сычева вычисляем постоянную Маделунга для большого куба. Она равна $1,84 \cdot 10^8$. Используя формулу (6), получаем, что для тетрагональной ячейки оксида ти-

тана со структурой рутила постоянная Маделунга равна $A_M = 2,28388$. По формуле (1), используя экспериментальные данные энергий ионной связи, найдем среднее значение постоянной Маделунга и сравним результаты расчета с экспериментальными. Автором настоящей работы были проведены расчеты значений A_M для хлорида кальция и оксида титана со структурой рутила. Полученные результаты приведены в табл. 6.

Таблица 6
Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений постоянных Маделунга для ячеек со структурой рутила

Химическое соединение	Эксперимент			Расчет	
	Энергия ионной связи, кДж/моль	Значение A_M	Среднее значение A_M	A_M	Относительная ошибка, $\pm \epsilon$, %
TiO ₂	13347 [29]	2,61602	2,53233	2,28388	12
	12493 [29]	2,44863			
CaCl ₂	2271 [25]	2,52311	2,47367	2,28388	8
	2182 [25]	2,42423			

Заключение

Таким образом, результаты расчета согласуются с экспериментальными при низком значении относительной ошибки. На основании этого можно сделать вывод о том, что усовершенствованный метод Харрисона – Сычева пригоден для расчета постоянных Маделунга для кристаллов с тетрагональной сингонией. Данный метод реализован автором настоящей работы в программе для ЭВМ «Расчет постоянной Маделунга для кубических и тетрагональных сингоний» (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020611518).

При рассмотрении кристаллов с ромбической сингонией также можно использовать формулу (4) для формирования матриц при описании большого куба. Основной сложностью является расчет количества БКС, чтобы сформировать кубическую структуру. Можно использовать условие

$$L = \max(a_2, c_2), \tag{10}$$

и значение A_M для ромбической ячейки определить как

$$A_{M(\text{ромб.})} = \frac{A_{M(\text{куб.})}}{n_1 \cdot n_2 \cdot n_3}. \tag{11}$$

Однако данная тема требует большего изучения и формирования специального программного обеспечения.

Библиографический список

1. **Madelung, E.** Das elektrische feld in systemen von regelmaessig angeordneten punktladungen / E. Madelung // Phys. Zs. – 1918. – Vol. 19. – P. 524–533.
2. **Макаров, В. Н.** К вопросу об актуальности расчета постоянных Маделунга / В. Н. Макаров // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сб. тр. Всерос. науч.-метод. конф. – Оренбург, 2019. – С. 2258–2262.

3. **Crandall, R. E.** Elementary function expansions for Madelung constants / R. E. Crandall, J. P. Buhler // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1987. – Vol. 20 (16). – P. 5497–5510.
4. **Lamba, S.** Dipolar interaction energy for a system of magnetic nanoparticles / S. Lamba // *Phys. Stat. Sol. B.* – 2004. – Vol. 241 (13). – P. 3022–3028.
5. **Harrison, W. A.** Simple calculation of Madelung constants / W. A. Harrison // *Physical Review B.* – 2006. – № 73. – P. 212103–212104.
6. **Zhao, Q.** Harmonic surface mapping algorithm for fast electrostatic sums / Q. Zhao, J. Liang, Z. Xu // *The Journal of Chemical Physics.* – 2018. – № 149. – P. 84111–84120.
7. **Сычев, М. С.** Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток : дис. ... канд. техн. наук / Сычев М. С. – Благовещенск, 2014.
8. **Макаров, В. Н.** Расчет постоянной Маделунга для оксидов железа, алюминия и калия с кубической сингонией / В. Н. Макаров, О. Н. Каныгина // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : сб. тр. материалы Всерос. науч.-метод. конф. – Оренбург, 2019. – С. 2916–2923.
9. **Каныгина, О. Н.** Высокотемпературные фазовые превращения в железосодержащих глинах Оренбуржья / О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова, Д. А. Лазарев, Е. В. Сальникова // *Вестник Оренбургского государственного университета.* – 2010. – № 6. – С. 113–118.
10. **Хьюи, Д.** Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность : пер. с англ. / под ред. Б. Д. Степина, Р. А. Лидина. – Москва : Химия, 1987. – С. 696.
11. Соотношение компонент связей элемент-кислород (Э-О) как основа прогнозирования их способности к образованию цепей в полимерных оксидах и оценки их некоторых свойств / О. С. Сироткин и др. // *Вестник Казанского технологического университета.* – 2012. – № 15 (13). – С. 31–35.
12. **Хаускрофт, К.** Современный курс общей химии : в 2 т. : пер. с англ. / К. Хаускрофт, Э. Констебл. – Москва : Мир, 2002. – Т. 1. – С. 540.
13. **Корольков, Д. В.** Теоретическая химия / Д. В. Корольков, Г. А. Скоробогатов. – Санкт-Петербург : Изд-во Санкт-Петербургского университета, 2005. – С. 656.
14. **Stucki, J. W.** Iron in Soils and Clay Minerals / J. W. Stucki, B. A. Goodman, U. Schwertmann // Published in cooperation with NATO Scientific Affairs Division. – 1985. – P. 903.
15. High-Pressure Synthesis of the Stoichiometric Compound FeO / T. Katsura et al. // *Journal of Chemical Physics.* – 1967. – Vol. 47. – P. 4559–4560.
16. **Sabrowsky, H.** Darstellung und Kristallstruktur von KNaO und RbNaO / H. Sabrowsky, U. Schröer // *Zeitschrift für Naturforschung B.* – 1982. – Vol. 37 (7). – P. 818–819.
17. Tetragonal structure model for boehmite-derived γ -alumina / G. Paglia et al. // *Physical Review B.* – 2003. – Vol. 68 (14). – P. 144110–144121.
18. Химическая технология неорганических веществ : в 2 кн. : учеб. пособие / Т. Г. Ахметов, Р. Т. Порфирьева, Л. Г. Гайсин и др. – Москва : Высшая школа, 2002. – Кн. 2. – С. 533.
19. **Hatch, D. M.** The α - β phase transition in cristobalite, SiO₂. Symmetry analysis, domain structure, and the dynamical nature of the β -phase / D. M. Hatch, S. Ghose // *Phys. Chem. Minerals.* – 1991. – Vol. 17 (6). – P. 554–562.
20. **Mattesini, M.** Cubic TiO₂ as a potential light absorber in solar-energy conversion / M. Mattesini // *Physical Review B.* – 2004. – Vol. 70. – P. 115101.
21. **Bouibes, A.** A route to possible civil engineering materials: the case of high-pressure phases of lime. / A. Bouibes, A. Zaoui // *Scientific Reports.* – 2015. – Vol. 5 (1). – P. 12330.

22. **Zintl, E.** Gitterstruktur der Oxide, sulfide, selenide und telluride des lithiums, natriums und kaliums / E. Zintl, A. Harder, B. Dauth // *Zeitschrift Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie.* – 1934. – Vol. 40 (8). – P. 588–593.
23. Dislocations and Plastic Deformation in MgO Crystals: A Review / J. Amodeo et al. // *Crystals.* – 2018. – Vol. 8 (6). – P. 240.
24. **Liu, D.** Lattice Energy Estimation for Inorganic Ionic Crystals / D. Liu, S. Zhang, Z. Wu // *Inorganic Chemistry.* – 2003. – Vol. 42 (7). – P. 2465–2469.
25. **Kaya, S.** Simple Method for the Calculation of Lattice Energies of Inorganic Ionic Crystals Based on the Chemical Hardness / S. Kaya, C. A. Kaya // *Inorganic Chemistry.* – 2015. – Vol. 54 (17). – P. 8207–8213.
26. **Mu, L.** Topological research on lattice energies for inorganic compounds / L. Mu, C. Feng, H. He // *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry.* – 2006. – Vol. 56 (1). – P. 97–111.
27. **Sherman, D. M.** The electronic structures of Fe coordination sites in iron oxides: Applications to spectra, bonding, and magnetism / D. M. Sherman // *Physics and Chemistry of Minerals.* – 1985. – Vol. 12 (3). – P. 161–175.
28. **Uberuaga, B. P.** Defects in rutile and anatase polymorphs of TiO₂: kinetics and thermodynamics near grain boundaries / B. P. Uberuaga, X.-M. Bai // *J Phys Condens Matter.* – 2011. – Vol. 23 (43). – P. 435004.
29. **Glasser, L.** Lattice Energies and Unit Cell Volumes of Complex Ionic Solids / L. Glasser, H. D. B. Jenkins // *J. Am. Chem. Soc.* – 2000. – Vol. 122. – P. 632–638.

References

1. Madelung E. *Phys. Zs.* 1918, vol. 19, pp. 524–533.
2. Makarov V. N. *Universitetskiy kompleks kak regional'nyy tsentr obrazovaniya, nauki i kul'tury: sb. tr. Vseros. nauch.-metod. konf.* [The university complex as a regional center of education, science and culture: proceedings of the All-Russian scientific and methodological conference]. Orenburg, 2019, pp. 2258–2262. [In Russian]
3. Crandall R. E., Buhler J. P. *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987, vol. 20 (16), pp. 5497–5510.
4. Lamba S. *Phys. Stat. Sol. B.* 2004, vol. 241 (13), pp. 3022–3028.
5. Harrison W. A. *Physical Review B.* 2006, no. 73, pp. 212103–212104.
6. Zhao Q., Liang J., Xu Z. *The Journal of Chemical Physics.* 2018, no. 149, pp. 84111–84120.
7. Sychev M. S. *Modelirovanie strukturnykh parametrov kubicheskikh kristallicheskikh reshetok: dis. kand. tekhn. nauk* [Modeling the structural parameters of cubic crystal lattices: dissertation to apply for the degree of the candidate of engineering sciences]. Blagoveshchensk, 2014. [In Russian]
8. Makarov V. N., Kanygina O. N. *Universitetskiy kompleks kak regional'nyy tsentr obrazovaniya, nauki i kul'tury: sb. tr. materialy Vseros. nauch.-metod. konf.* [The university complex as a regional center of education, science and culture: proceedings of the All-Russian scientific and methodological conference]. Orenburg, 2019, pp. 2916–2923. [In Russian]
9. Kanygina O. N., Chetverikova A. G., Lazarev D. A., Sal'nikova E. V. *Vestnik Orenburgskogo gosudarstvennogo universiteta* [Bulletin of Orenburg State University]. 2010, pp. 113–118. [In Russian]
10. Kh'yui D. *Neorganicheskaya khimiya. Stroenie veshchestva i reaktivnaya sposobnost': per. s angl.* [Inorganic chemistry. Substance structure and reactivity: translated from English]. Moscow: Khimiya, 1987, p. 696. [In Russian]
11. Sirotkin O. S. et al. *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of Kazan Technological University]. 2012, no. 15 (13), pp. 31–35. [In Russian]
12. Khauskroft K., Konstebel E. *Sovremennyy kurs obshchey khimii: v 2 t.: per. s angl.* [A contemporary course of general chemistry: in 2 volumes: translated from English]. Moscow: Mir, 2002, vol. 1, p. 540. [In Russian]

13. Korol'kov D. V., Skorobogatov G. A. *Teoreticheskaya khimiya* [Theoretical chemistry]. Saint-Petersburg: Izd-vo Sankt-Peterburgskogo universiteta, 2005, p. 656. [In Russian]
14. Stucki J. W., Goodman B. A., Schwertmann U. *Published in cooperation with NATO Scientific Affairs Division*. 1985, p. 903.
15. Katsura T. et al. *Journal of Chemical Physics*. 1967, vol. 47, pp. 4559–4560.
16. Sabrowsky H., Schröer U. *Zeitschrift für Naturforschung B* [Journal of Nature Research B]. 1982, vol. 37 (7), pp. 818–819.
17. Paglia G. et al. *Physical Review B*. 2003, vol. 68 (14), pp. 144110–144121.
18. Akhmetov T. G., Porfir'eva R. T., Gaysin L. G. et al. *Khimicheskaya tekhnologiya neorganicheskikh veshchestv: v 2 kn: ucheb. posobie* [Chemical technology of inorganic substances: in 2 books: teaching aid]. Moscow: Vysshaya shkola, 2002, bk. 2, p. 533. [In Russian]
19. Hatch D. M., Ghose S. *Phys. Chem. Minerals*. 1991, vol. 17 (6), pp. 554–562.
20. Mattesini M. *Physical Review B*. 2004, vol. 70, p. 115101.
21. Bouibes A., Zaoui A. *Scientific Reports*. 2015, vol. 5 (1), p. 12330.
22. Zintl E., Harder A., Dauth B. *Zeitschrift Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie* [Journal of electrochemistry and applied physical chemistry]. 1934, vol. 40 (8), pp. 588–593.
23. Amodeo J. et al. *Crystals*. 2018, vol. 8 (6), p. 240.
24. Liu D., Zhang S., Wu Z. *Inorganic Chemistry*. 2003, vol. 42 (7), pp. 2465–2469.
25. Kaya S., Kaya C. A. *Inorganic Chemistry*. 2015, vol. 54 (17), pp. 8207–8213.
26. Mu L., Feng C., He H. *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*. 2006, vol. 56 (1), pp. 97–111.
27. Sherman D. M. *Physics and Chemistry of Minerals*. 1985, vol. 12 (3), pp. 161–175.
28. Ueberuaga B. P., Bai X.-M. *J Phys Condens Matter*. 2011, vol. 23 (43), p. 435004.
29. Glasser L., Jenkins H. D. B. *J. Am. Chem. Soc.* 2000, vol. 122, pp. 632–638.

Макаров Валерий Николаевич

аспирант, Оренбургский
государственный университет
(Россия, г. Оренбург, пр. Победы, 13)

E-mail: makarsvet13@gmail.com

Makarov Valeriy Nikolaevich

Postgraduate student, Orenburg State
University (13 Pobedy avenue,
Orenburg, Russia)

Образец цитирования:

Макаров, В. Н. Расчет постоянных Маделунга для оценки энергии ионной связи в кристаллах оксидов с кубической, тетрагональной и ромбической сингониями / В. Н. Макаров // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 119–131. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-8.

**КВАНТОВОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ С ДИССИПАЦИЕЙ:
ПРИЛОЖЕНИЕ К ТУННЕЛЬНОМУ ТРАНСПОРТУ
ДЛЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК
В СИСТЕМЕ СОВМЕЩЕННОГО АСМ/СТМ В УСЛОВИЯХ
ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ (ОБЗОР). ЧАСТЬ II**

Аннотация.

Приведен краткий обзор работ, развивающих науку о квантовом туннелировании с диссипацией, а также ее приложения к различным задачам физики конденсированного состояния, в частности, квантовой мезоскопии наноструктур. Рассмотрено также обобщение метода инстантонов на случай примесных квазистационарных состояний в квантовых молекулах, описываемых в модели двухъямного осцилляторного потенциала. Продемонстрирована гибкость метода инстантонов, позволяющая в сочетании с физикой низкоразмерных систем получать решение задач об оптических и транспортных свойствах квантовых молекул с примесными квазистационарными состояниями в аналитической форме, а также учесть влияние внешних полей. Часть I статьи представлена в № 1 за 2017 г.

Ключевые слова: диссипативное туннелирование, электрическое поле, квантовая молекула.

V. D. Krevchik, M. B. Semenov, P. V. Krevchik

**QUANTUM TUNNELING WITH DISSIPATION:
AN APPLICATION TO TUNNEL TRANSPORT
FOR SEMICONDUCTOR QUANTUM DOTS IN A COMBINED
AFM / STM SYSTEM UNDER EXTERNAL ELECTRIC
FIELD CONDITIONS (REVIEW). PART II.**

Abstract.

A brief review of articles developing the quantum tunneling with dissipation theory, as well as its applications to various problems in condensed matter physics, in particular, quantum mesoscopy of nanostructures, has been presented. A generalization of the instanton method to the case of impurity quasistationary states in quantum molecules described in the model of a double-well oscillatory potential has been also considered. The flexibility of the instanton method is demonstrated, which allows, in combination with the physics of low-dimensional systems, to obtain the solution of problems on the optical and transport properties of quantum molecules with impurity quasistationary states in an analytical form, as well as to take into account the effect of external fields. Part I of the article is presented in № 1 for 2017.

Keywords: dissipative tunneling, electric field, quantum molecule.

Введение

В последние годы наблюдается все возрастающий интерес к оптическим свойствам туннельно-связанных полупроводниковых наноструктур с примесными квазистационарными состояниями (обзор дан в [1]). Этот интерес имеет двойкий характер, так как, с одной стороны, туннельные структуры с примесными состояниями привлекательны с точки зрения создания новых источников стимулированного излучения на основе внутрицентровых оптических переходов и дальнейшее развитие оптоэлектроники требует поиска эффективных методов управления временем жизни примесных состояний. С другой стороны, сочетание оптических и туннельных измерений может служить важным инструментом для исследования новых эффектов, связанных с электрон-фононным взаимодействием и межчастичными корреляциями в низкоразмерных системах.

При изучении задач туннельного распада часто рассматриваются потенциалы типа «кубической параболы» с состояниями как вблизи дна ямы, так и вблизи вершины барьера (при этом часто одномерные задачи обобщаются на многомерный случай). Помимо классических задач α -распада и мономолекулярных реакций диссоциации, уместно вспомнить известную задачу Франца – Келдыша (ионизация в полях лазерного излучения, состояния вблизи границы непрерывного спектра во внешнем поле), а также развитие науки о квантовом туннелировании с диссипацией применительно к системам с контактами Джозефсона. Сюда же примыкает знаменитая задача Ландау – Зинера (преддиссоциация), магнитный пробой (Займан), эффект Яна – Теллера, спектроскопия переходного состояния в реальном времени (Зивейл) и др. В моделях с двухъямными потенциалами (в том числе асимметричными) изучаются реакции изомеризации, динамическая водородная связь в биологии, а также изомеризация в бистабильных системах (на примере фотохромных материалов). Особый интерес представляют пары связанных бистабильных систем, а также модели квантовых бифуркаций в таких системах [2–9]. Начиная с 1980-х гг. активно изучаются системы и модели туннельно-связанных квантовых точек (КТ) и нитей (КН) [1–129]. Актуальным также оказывается экспериментальное изучение кластеров с небольшим числом степеней свободы методом спектроскопии высокого разрешения (например, реакции изомеризации в газах с молекулами с малым числом степеней свободы). Теоретически важной задачей является рассмотрение перехода от регулярных состояний к эргодическим в упомянутых модельных потенциалах [10]. Исторически начиная с работ Ландау, Вигнера и Зельдовича изучалось квазиклассическое квантование, а также комплексные собственные значения энергии, комплексное время, инстантонные траектории. В многомерных задачах, как правило, рассматривается система « $V(x)$ + гармонический термостат» с бистабильной связью. Устанавливается связь свойств термостата (появление статистики) с броуновским движением (феноменологическое уравнение Ланжевена и Ливилля – фон Неймана, флуктуационно-диссипационная теорема, модель Крамерса и ее обобщения), изучаются различные типы состояний – регулярные вблизи дна ямы и эргодические вблизи вершины барьера. Формулируются соответствующие постулаты в спектроскопии и квантовой динамике. Изучаются модели и системы с динамическим и статистическим хаосом, в том

числе распадные 2D-потенциалы [2, 4–7, 10]. При всех существующих достижениях в этой области на сегодняшний момент остается ряд серьезных проблем (квантовая проблема Ландау – Зинера, проблема возникновения распадных состояний в «нераспадных» потенциалах [2, 6, 7, 10], квантовая динамика открытых систем [10] и др.), которые требуют своего разрешения.

В работе [11] сообщается о транспорте электронов через искусственную молекулу (КМ), образованную двумя туннельно-связанными КТ, которые латерально включены в двумерную электронную систему гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Когерентные молекулярные состояния в связанных точках зондируются с участием фотонного туннелирования (РАТ). При частоте выше 10 ГГц авторы наблюдали четкую РАТ как результат резонанса между микроволновыми фотонами и молекулярными состояниями. При частоте ниже 8 ГГц наблюдалась выраженная суперпозиция фононного и фотонного туннелирования. Когерентная суперпозиция молекулярных состояний сохраняется при возбуждении акустических фононов. КМ определяются сочетанием двух КТ, что приводит к образованию когерентных электронных состояний в этой КМ. В качестве управляемой двухуровневой системы двойные КТ предлагаются для реализации единичного квантового бита в твердотельных системах. Одним из препятствий для такого применения является значительная дефазировка, индуцируемая исходными полупроводниковыми материалами. Таким образом, исследование процессов диссипации в этих наноструктурах имеет большое значение. Использование такой двойной КТ в режиме слабой связи с контактами ($\Gamma_{1,r} \rightarrow 0$) минимизирует расфазировку молекулярных состояний с помощью электрон-электронного взаимодействия, и тогда можно изучить взаимодействие между ограниченными молекулярными состояниями и дискретными фононными модами в пределах КТ. Как показано на рис. 1, пять пар контактов Шоттки изготовлены посредством электронно-лучевой литографии при испарении золота на поверхности гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. При приложении соответствующих отрицательных напряжений к этим контактам формируются двойные КТ, образующиеся в двумерной электронной системе (2DES), расположенной ниже поверхности на 90 нм. Левый и правый туннельные барьеры определяют туннельную связь двух КТ с контактами стока и источника соответственно. Кондактанс связи (G_C) между КТ контролируется напряжением на центральном затворе (V_t) (рис. 1). При 4,2 К концентрация носителей в 2DES составляет $1,7 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$, подвижность электронов равна $80 \text{ м}^2/\text{Vs}$, что дает среднюю длину свободного пробега около 5 мкм, что почти на порядок больше, чем эффективные диаметры КТ (~0,6 мкм). 2DES охлаждаются до температуры термостата 140 мК с помощью холодильника $^3\text{He}/^4\text{He}$. Для связи микроволнового излучения с КТ авторы использовали герцевские проволочные антенны, примерно на 1 см превышающие размер КТ, подключенные к микроволновому генератору HP83711A.

В работе [12] изучается сопровождаемое фононами туннелирование электронов в полупроводниковых КМ, состоящих из КТ. В частности, рассчитана синглет-синглетная релаксация в двухэлектронной легированной структуре. Влияние кулоновского взаимодействия обсуждается путем сравнения с одноэлектронной системой. Найдено, что скорость релаксации достигает близких значений в двух случаях, но кулоновское взаимодействие при-

водит к сдвигу максимума в сторону больших расстояний между КТ. Исследуется разница между электрон-фононным взаимодействием деформационного потенциала и пьезоэлектрической связью. Показано, что фонон-индуцированное туннелирование между двухэлектронными синглетными состояниями является быстрым процессом, происходящим на временных масштабах порядка нескольких десятков пикосекунд. Связанные КТ, часто называемые КМ, в последнее время привлекают большое внимание в связи с их потенциальным применением в различных реализациях систем квантовых вычислений. Полупроводниковые КМ встроены в твердофазное состояние среды, что приводит к взаимодействию электрона с фононным резервуаром.

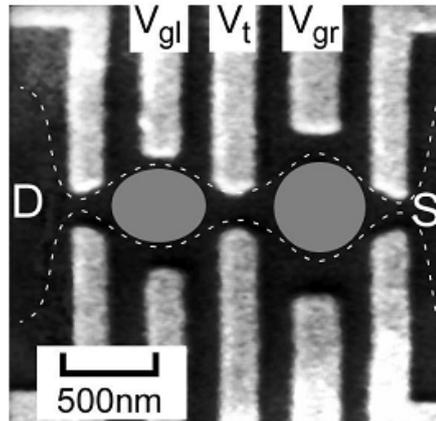


Рис. 1. График двойной КТ под сканирующим электронным микроскопом. Пунктирные линии схематично показывают край 2DEG. Формируются две туннельно-связанные КТ [11]

Наличие фононной связи между энергетическими собственными уровнями в КМ приводит к новым эффектам в физике этих структур по сравнению с отдельными КТ. В частности, если низшие состояния соответствуют локализации электронов в двух различных КТ, то релаксация между этими состояниями имеет характер фононного туннелирования, состоящего в передаче электрона от одной КТ к другой. Такие процессы реализуются в случае взаимодействия между связыванием носителей с фононами и туннельной связью между КТ, что является желательным элементом многих идей по применению КМ для квантовых вычислений. Фононное туннелирование было тщательно изучено в случае КМ, легированных одним электроном. Для конкретной системы с КМ из GaAs рассчитывались скорости фононной релаксации. Показано, что в областях параметров, где релаксация является эффективной, она включает в себя перенос заряда между КТ. Таким образом, она представляет собой процесс фононного туннелирования. Изучалось также то, как кулоновское взаимодействие в двухэлектронной системе влияет на релаксацию электронов по сравнению со случаем КМ с примесью одного электрона. Показано, что наличие одного электрона сильно влияет на туннелирование другого. В результате скорости фононного туннелирования электронов для двух легированных случаев (с одним или двумя электронами) значительно отличаются, что особенно очевидно в их зависимости от расстояния между КТ,

образующими КМ. Рассматривались электроны, взаимодействующие с акустическими фоннными модами через деформационный потенциал и пьезоэлектрическое связывание, и было выявлено их существенное влияние на туннелирование в КМ. Показано, что пьезоэлектрический механизм в результате значительного изменения распределения зарядов имеет большое значение в рассматриваемой системе и для некоторых диапазонов параметров КМ это даже доминирующий вклад в релаксацию. Найдено, что фоннное туннелирование оказывается сильным в связанных КТ, и его нужно учитывать при разработке схем квантовых вычислений для систем с КМ.

В работе [13] изучается сопровождаемое фононами электронное туннелирование через двойную КТ, связанную с параллельными ферромагнитными электродами. Были получены вольт-амперные характеристики системы с помощью техники неравновесной функции распределения, основанной на уравнении движения. Установлено, что дополнительные фонно-индуцированные резонансные пики появляются в спектральной функции по обе стороны от основных резонансов, соответствующих квантовым уровням энергии КТ. Показано, что резонансы молекулярного типа воспроизводятся в фоннных боковых зонах дифференциальной проводимости. Также прогнозируется значительное повышение фонно-индуцированного туннельного магнетосопротивления, а также колебания туннельного магнетосопротивления.

В работе [14] сообщается о фотон-фоннонном туннельном переходе в линейном массиве КТ, которые могут быть интерпретированы при рассмотрении полной трехмерной заряженной диаграммы устойчивости. Такие туннельные переходы потенциально способствуют утечке для кубитов, определенных в этой системе. Детальное понимание этих переходов очень важно, поскольку они становятся более сложными для анализа и масштабируются как массивы КТ. В частности, заряженные сенсоры, используемые для считывания как зарядовых, так и спиновых кубитов, как было показано, являются источником фононов. Чтобы уменьшить такие эффекты, полезно знать, какие фотон- или фонно-туннельные переходы доступны для системы. Сканирующая электронная микрограмма устройства, подобного использованному в эксперименте, показана на рис. 2. Electrodes напряжения смещения (Ti-Au) сформированы на поверхности гетероструктуры GaAs/AlGaAs электростатически и определяют тройную КТ (пунктирные окружности) путем выборочного разрушения двумерного электронного газа (2DEG), расположенного на 85 нм ниже поверхности. Другая соседняя КТ (изображенная сплошной окружностью), образованная аналогичным образом, функционирует как емкостно-связанный зарядовый сенсор тройной КТ. В случае расположения на склоне кулоновского пика проводимость через сенсорную КТ очень чувствительна к количеству зарядов на тройной КТ. Один из контактов сенсорной КТ, подключенный к LC-контуре, позволяет повторно провести радиочастотные рефлектометрические измерения проводимости. Высокочастотные линии подключены диагонально с помощью выходов LP и RP (рис. 2). Микроволновое возбуждение прикладывается только к выходу LP. Устройство охлаждают внутри до базовой температуры 55 мК. Все измерения проводились при нулевом магнитном поле.

В работе [15] теоретически изучается релаксация фононов и туннелирование в системе, состоящей из КТ, которая соединена с квантовой ямой

(КЯ). В рамках метода волнового вектора (k - p method) в сочетании с методом исключения Lowdin (the Lowdin elimination) вычисляются электронные состояния.

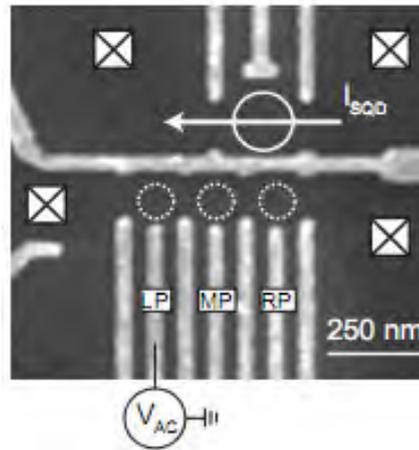


Рис. 2. СЭМ-изображение образца, похожего на используемый для измерений.

Пунктирные круги указывают на линейную тройную КТ, сплошной круг обозначает КТ, выполняющую роль зарядового датчика, квадраты указывают резервуары Ферми в 2DEG (для двумерного электронного газа), которые связывались через омические контакты. Ток через КТ-датчик (белая стрелка), а также его радиочастотные отражения контролируются и используются для определения зарядовой заселенности тройной КТ [14]

Рассчитываются скорости акустической релаксации фононов между состояниями в КЯ и в КТ и изучается полученная кинетика электронов. Авторы показали, что эффективность перехода существенно зависит от геометрии системы. Также показывается, что при некоторых условиях эффективность перехода может уменьшаться с температурой. КТ были предложены для реализации различных оптических приборов. В частности, лазеры на КТ обнаруживают целый ряд преимуществ: низкий пороговый ток, широкую спектральную перестройку частоты или высокую температуру потери чувствительности. Тем не менее проблема, связанная с концепцией КТ-лазера, состоит в низкой плотности носителей тока внутри КТ, что приводит к низкой эффективности. Для того чтобы обойти эту проблему, были разработаны структуры туннельной инжекции. Из-за высокой плотности состояний КЯ являются хорошими резервуарами носителей для КТ. В правильно спроектированной системе связанных КЯ–КТ носители могут быть инжектированы с высокой скоростью, что значительно увеличивает оптическую эффективность. Спектры носителей тока, а также туннельная связь широко исследованы в системах двойных КТ. Однако энергетическая структура в системе КЯ–КТ существенно отличается от этого случая из-за наличия квази-континуума состояний в КЯ. Взаимодействие носителей с фононами приводит к релаксации между состояниями, что может приводить к туннельному переносу, сопровождаемому фононами, между двумя структурами, т.е. захвату носителей в КТ. Существенная роль фононов в процессе инжекции носителей в системе КЯ–КТ подтверждается экспериментами, которые показывают, что величина

скорости релаксации значительно увеличивается, когда разность энергий между состояниями КТ и КЯ становится сравнима с энергией продольных оптических (ЛО) фононов. Захват носителей между структурами различной размерности изучали теоретически для различных систем и различными методами (золотое правило Ферми, кинетика Больцмана, формализм функции Грина и метод полной квантовой кинетики) с участием продольных ЛО-фононов (в том числе двухфононных эффектов), включая метод кулоновской динамики. Процесс захвата, связанный с туннелированием между КЯ и КТ, был проанализирован в рамках модели, включающей влияние продольных ЛО-фононов и Оже-эффектов и основанной на относительно простой модели волновых функций.

В работе [16] теоретически рассмотрен магнитотранспорт через КТ, туннельно-связанные с объемным контактом. Было показано [16], что в случае туннельного магнитотранспорта $3D \rightarrow 0D$ поведение амплитуд токовых резонансов связано с величиной орбитального момента каждого уровня в КТ, через который осуществляется туннелирование. Как следствие, туннелирование при наличии магнитного поля через состояния отдельных КТ может сильно подавляться. Это позволяет извлекать из экспериментальных кривых ценную информацию о природе волновых функций КТ, вовлеченных в электронный транспорт. При туннелировании из $2D$ -аккумулирующего слоя в КТ наличие магнитного поля значительно увеличивает величину отдельных резонансов.

В работе авторов из мезоскопической физической лаборатории Пекинского университета [17] исследовалось резонансное туннелирование через связанные двойные КЯ при наличии электрон-фононного взаимодействия методом неравновесных функций Грина. Получена аналитическая формула для туннельного тока при постоянном приложенном напряжении. Исследовано влияние «излучаемых» и «поглощаемых» фононов на процесс туннелирования. Показано, что в ряде случаев, когда туннелирование сопровождается «излучением» фононов, оно подавляется из-за принципа запрета Паули; туннелирование, сопровождающееся «поглощением» фононов, наоборот, преобладает. На рис. 3 приведена теоретически рассчитанная вольт-амперная туннельная характеристика, на которой выделена «упругая» (точечная кривая) и «неупругая» (пунктирно-точечная кривая) часть.

Для изучения мезоскопических систем в современной физике конденсированного состояния часто используются наномеханические резонаторы с диапазоном частот от нескольких МГц до единиц ГГц. В работе [18] анализируется роль диссипации при туннелировании двухуровневых систем для золотых наномеханических резонаторов (экспериментальная схема представлена на рис. 4). Показано, что при температурах от 30 до 500 мК диссипация возрастает с ростом температуры по закону $T^{1/2}$, тогда как при более высоких температурах наступает режим «насыщения».

В работе [19] о резонансном туннелировании в диссипативной среде авторы приводят экспериментальные данные по туннелированию через единственный квантовый уровень в КТ, сформированной из углеродной нанотрубки, связанной с резистивными металлическими контактами (схема эксперимента представлена на рис. 5). Эти контакты служат диссипативной средой, подавляющей процесс туннелирования. В режиме последовательного тунне-

лирования высота пиков одноэлектронного кондактанса возрастает с понижением температуры, хотя и в масштабе более слабом, чем обычная зависимость $\sim T^{-1}$. Показано, что в режиме резонансного туннелирования (при температурах более низких, чем ширина уровня) ширина пика достигает насыщения, тогда как высота пика начинает уменьшаться. Оказалось, что высота пиков демонстрирует немонотонную температурную зависимость. Авторы связывают такое необычное поведение с наличием перехода между последовательным и резонансным режимами туннелирования через единичный квантовый уровень в диссипативной среде.

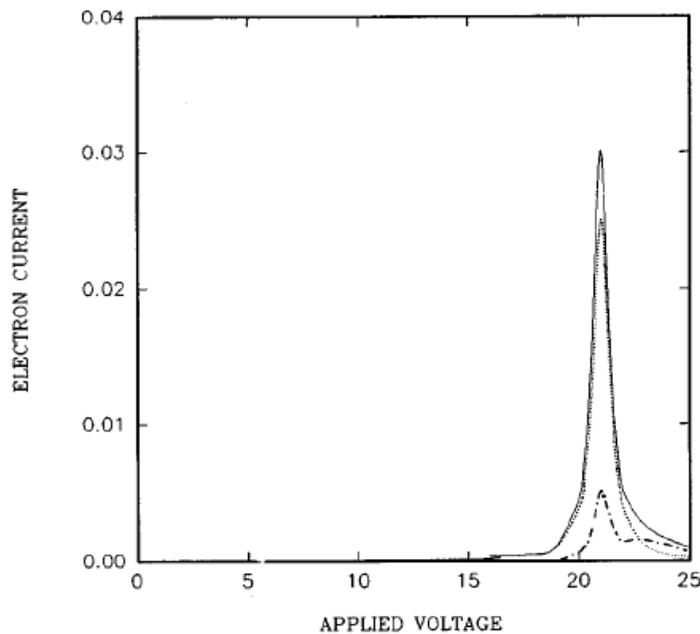


Рис. 3. Теоретически рассчитанная вольт-амперная туннельная характеристика [17]

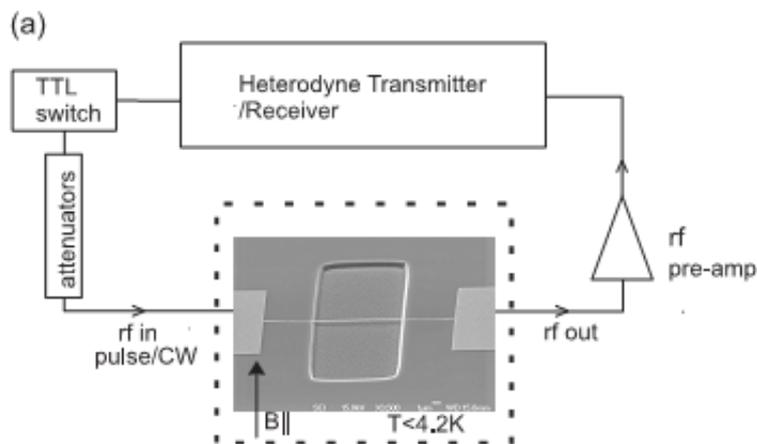


Рис. 4. Экспериментальная схема в работе [18]

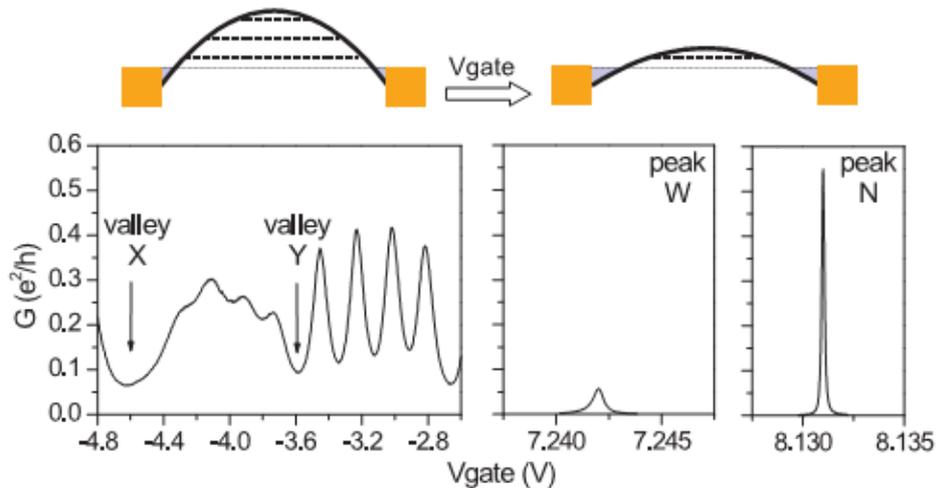


Рис. 5. Верхняя часть схемы: барьеры Шотки (светло-серые треугольники) становятся шире и менее прозрачными, как только приложено напряжение V_{gate} : зависимость дифференциального кондактанса КТ нанотрубки от приложенного отрицательного напряжения V_{gate} (при большой прозрачности контакта); ясно видны две 4-электронные «оболочки». Отметки “X” и “Y” обозначают широкие «долины», в которых измерялись данные второго рисунка ($T = 5$ К. b,c). На этом рисунке представлена та же самая КТ в режиме малой прозрачности контакта, при той же базовой температуре [19]

В книге авторов из Кембриджского университета «Транспорт в наноструктурах» [20] демонстрируется важность влияния эмиссии фононов в резонансных туннельных диодах, в которых носители заряда в КЯ оказываются далеко от равновесного состояния. Обычно можно было бы ожидать, что носители заряда могут проходить баллистически через двойные барьеры (или КЯ) без потери энергии. Однако во многих случаях оказывается возможным процесс испускания фононов. Это может происходить, когда напряжение превышает значение, необходимое для появления нормального пика тока, так что частицы, входящие в КЯ, лежат выше достижимого уровня на выходе (одна из которых туннелирует через второй барьер, покидая его в зоне проводимости на выходе из структуры). Этот эффект значительно усиливается, когда более низкое состояние энергии оказывается действительно связанным состоянием в КЯ, что приводит к распределению потенциала, в котором наиболее сильное падение потенциала происходит через входящий барьер, тогда как связанное состояние лежит достаточно близко к уровню Ферми в выходном барьере. Такое расположение вольт-амперных кривых представлено на рис. 6. Здесь температура равна 4 К, резонансно-туннельный диод внедрен в «мезо-форму» диаметром около 100 нм. КЯ имеет ширину 11,7 нм, тогда как барьеры – толщину порядка 5,6 нм. Существенный резонансный туннельный пик проявляется при напряжении около 70 мВ, а другой пик (гораздо меньший) появляется при напряжении 170 мВ. Этот пик значительно усиливается в присутствии магнитного поля, ориентированного параллельно направлению тока. Обычно при туннелировании электрона через барьер сохраняется импульс переноса.

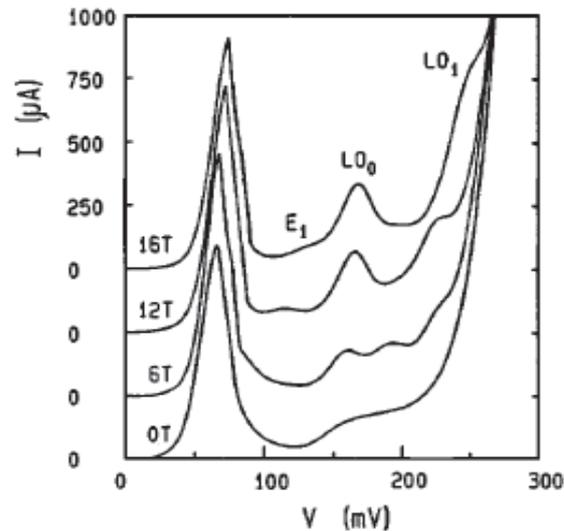


Рис. 6. Вольт-амперные характеристики резонансного туннельного диода в продольном магнитном поле при 4 К (Eaves et al. *Physics of Quantum Electronic Devices* / ed. F. Capasso, New York, Springer-Verlag, 1990)

Однако в случае испускания фононов этого не наблюдается. Магнитное поле помогает квантовать поперечный импульс, проявляющий туннельный пик, отвечающий за туннелирование, сопровождаемое фононами. Очень слабый пик, обозначенный как «Е» на рисунке, предполагается из-за нерезонансного туннельного перехода между n -м уровнем Ландау в эмиттере и $(n + 1)$ -м уровнем Ландау в КЯ. Такой переход происходит благодаря эффекту ионизации примесей или «шероховатости интерфейса». Пики, обозначенные LO_p , соответствуют переходу с n -го уровня Ландау в эмиттере в $(n+p)$ -й уровень Ландау в КЯ через испускание единичного оптического фонона. Относительные амплитуды основного резонансного туннельного пика и отмеченных других пиков обеспечивают качественную индикацию вклада различных процессов переноса заряда в измеряемый ток. Вклад магнитного поля оказывается существенным при наблюдении туннельных токов, сопровождаемых фононами. На рис. 7 представлена другая серия измерений для резонансного туннельного диода на GaAs/AlGaAs при 1,8 К. Вольт-амперные кривые при значении индукции магнитного поля 8 Тл демонстрируют основной резонансный пик при 144 мВ и первый вспомогательный пик, обозначенный как LO , при 245 мВ. Этот вспомогательный пик может быть отнесен к туннелированию, сопровождаемому процессом испускания единичного фонона. В отсутствие магнитного поля все еще остается индикация процесса, но пик гораздо менее выражен и размазан по энергии. Этот пик усиливается сокращением в фазовом пространстве, которое возникает во внешнем магнитном поле. Вставленные кривые показывают, как пики меняются с усилением магнитного поля. Хотя в спектре существует несколько пиков, только первый пик не смещается в магнитном поле. Как было показано, эти дополнительные пики возникают из-за переходов, которые дают изменения индекса уровней Ландау в процессе туннелирования и одновременно включают испускание оптических фононов.

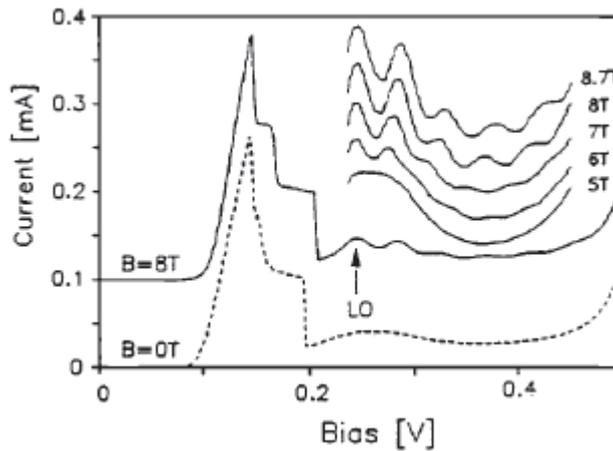


Рис. 7. Вольт-амперные характеристики при 1,8 К для резонансного туннельного диода на GaAs/AlGaAs при различных значениях индукции магнитного поля. Пик, обозначенный как LO, является фононной репликой основного пика (Yoo et al. J. Soc. Sci. Technol. В. 1990. 8, 370)

В работе [21] изучены мезоскопические эффекты в туннелировании между параллельными КН. При этом рассматривались фазово-контактные системы двух параллельных КН, туннельно-связанных через барьер конечной ширины. Обычная пертурбативная (по теории возмущений) трактовка туннелирования не работает в этой модели даже в диффузионном пределе, когда длина L области связи превышает характерный масштаб L_t , устанавливаемый туннелированием. Решение задачи рассеяния для протяженного туннельного барьера позволяет вычислить туннельные кондактансы как функции приложенного напряжения и магнитного поля. При этом учитывались эффекты зарядки в КН под действием приложенного напряжения. Было обнаружено, что эти эффекты оказываются важными при изучении $1D \rightarrow 0D$ туннельного транспорта.

В работе [22] рассматривались конечно-размерные эффекты при туннелировании между параллельными КН. При этом были представлены результаты как теоретических вычислений, так и экспериментального измерения, что позволило выявить конечно-размерные эффекты в туннелировании между двумя параллельными КН, изготовленными на расщепленном крае бислоя гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Наблюдаемые осцилляции в дифференциальном кондактансе как функции приложенного напряжения и магнитного поля дают прямую информацию о форме потенциала конфайнмента. Накладываемые модуляции показывают существование двух различных скоростей возбуждения, как и ожидается при спин-зарядовом разделении.

В работе [23] вычислялся стационарный ток через две пары КТ, взаимодействующих через обычный фононный термостат (рис. 8). Численные и аналитические решения master equation в стационарном пределе показали, что туннельный ток может как увеличиваться, так и уменьшаться за счет диссипативного взаимодействия со средой – термостатом. Этот эффект тесно связан с коллективной спонтанной эмиссией фононов (эффект Дике, Dicke super- and subradiance effect) и генерацией «кросс-когерентности» с перепутыванием

(entanglement) синглетных и триплетных состояний зарядов между КТ. Также обсуждается включение механизма неупругого туннельного тока, с помощью которого ток в одной паре КТ контролирует ток в другой паре КТ.

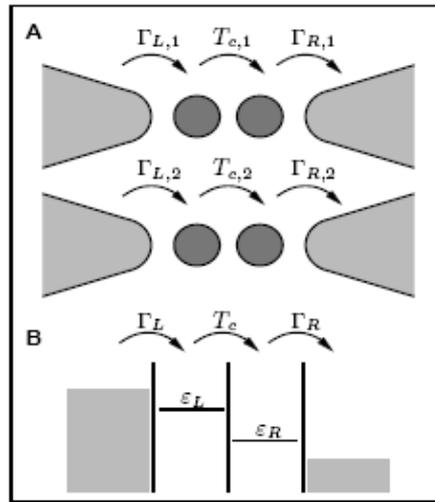


Рис. 8. Пара КМ (две пары КТ), взаимодействующих через обычный фоновый термостат [24]

Таким образом, проблема управляемого туннельного транспорта в низкоразмерных системах является актуальной и представлена достаточно широким спектром экспериментальных работ [11, 13, 14, 17, 19, 22]. В настоящее время альтернативой квантовым методам расчета вероятности туннелирования может служить метод инстантонов, выдвинутый А. М. Поляковым и С. Колманом (обзор дан в [2]), который позволяет учесть влияние матрицы-среды на процесс туннельного переноса. Теория квантового туннелирования с диссипацией применительно к системам с контактами Джозефсона была развита Э. Дж. Леггетом, А. И. Ларкиным, Ю. Н. Овчинниковым и др. [2]. В работах В. А. Бендерского, Е. В. Ветошкина и Е. И. Каца на основе инстантонного подхода разработан квазиклассически точный метод, позволяющий решить задачу о туннельных расщеплениях для симметричных двухъямных потенциалов в широкой области энергий от основного состояния до состояний, расположенных вблизи вершины барьера. Метод инстантонов оказался продуктивным в расчетах вероятности туннелирования для КМ с $H^{(-)}$ -подобными квазистационарными примесными состояниями [2], где в сочетании с методом потенциала нулевого радиуса удалось получить основные результаты в аналитическом виде и проанализировать влияние туннельного распада на оптические свойства КТ. Необходимость учета взаимодействия КМ в квазиуменьшенной структуре, а также влияния локальных фоновых мод на полевою зависимость вероятности диссипативного туннелирования требует дальнейшего развития метода инстантонов применительно к оптике низкоразмерных туннельных структур с примесными квазистационарными состояниями.

Как известно [1], примеси в объемных полупроводниках и в полупроводниковых наноструктурах могут являться причиной образования не только локализованных состояний, энергия которых лежит в запрещенной зоне, но и

квазистационарных состояний, энергии которых находятся в разрешенных зонах (в случае наноструктур – выше дна удерживающего потенциала). При этом локализованное состояние может стать квазистационарным, если у него появляется конечное время жизни (например, из-за наличия туннельного распада).

В течение последнего десятилетия интенсивно изучались лазеры на внутрицентровых переходах, для того чтобы показать их потенциал в качестве источников терагерцового излучения. Было показано, что факторами, ограничивающими их эффективность, являются относительно короткие времена жизни верхних уровней лазера (около 200 нс для природного и около 235 нс для моноизотопного кремния-28(28-Si) [25]), сложность внутрицентральной релаксации и неэффективная накачка. Наибольшие реализованные значения усиления [26] находятся в диапазонах порядка или даже несколько больше, чем достигнутые с квантовыми каскадными терагерцовыми лазерами, но требуемые большие оптические мощности накачки или резонансная оптическая накачка оказываются недоступными в стандартных лабораториях. Для генерации с инверсией лучшая лазерная эффективность была получена для легированного нейтронами компенсированного кремниевого кристалла при одноосном напряжении, тогда как для рамановской генерации изотопически очищенные кристаллы кремния-28 оказались наилучшим материалом.

В работе [27] проведено экспериментальное исследование свойств кремниевых терагерцовых лазеров на внутрицентровых примесных переходах. Следует отметить, что первый кремниевый лазер был зарегистрирован в 2000 г. Он был основан на примесных переходах водородоподобного донора фосфора в монокристаллическом кремнии. С тех пор было продемонстрировано несколько лазеров на основе других доноров элементов V группы в кремнии. Эти лазеры работают при низких температурах решетки при оптической накачке в среднем инфракрасном диапазоне и излучают свет на дискретных длинах волн в диапазоне от 250 до 50 мкм (от 1,2 до 6,9 ТГц). Дипольные разрешенные оптические переходы между отдельными возбужденными состояниями замещающих доноров элементов V группы используются для кремниевых лазеров терагерцового типа. Инверсная населенность достигается за счет специфических электрон-фононных взаимодействий внутри примесного атома. Это приводит к долгоживущим и короткоживущим возбужденным состояниям донорных центров. Частоту лазера можно подстроить с помощью внешнего магнитного поля или путем приложения сжимающей силы к лазерному кристаллу. Другой тип терагерцового лазера использует вынужденное резонансное рассеяние рамановского типа фотонов с помощью комбинационно-активного внутрицентрального электронного перехода. Изменяя частоту лазерной накачки, можно непрерывно изменять частоту комбинационного рамановского кремниевого лазера, по меньшей мере, между 4,5 и 6,4 ТГц. Недавно была получена генерация из кремния, легированного бором *p*-типа. Кроме того, фундаментальные аспекты лазерного процесса дают новую информацию об особенностях электронного захвата мелкими примесными центрами в кремнии, временах жизни неравновесных носителей в возбужденных примесных состояниях и электрон-фононном взаимодействии.

Известно, что оптически возбуждаемые твердотельные лазеры на основе оптических переходов атомов, встроенных в твердотельные решетки, на

сегодня являются самыми мощными и надежными источниками [27]. Ключевой характеристикой, обеспечивающей такой высокий коэффициент усиления лазера в твердых телах, является чрезвычайно большое время жизни верхнего лазерного уровня, вплоть до нескольких миллисекунд. Основной причиной таких длительных времен жизни являются большие энергетические разрывы между атомными уровнями, принимающими участие в лазерной генерации. В терагерцовом частотном диапазоне в сотни раз меньшие энергетические промежутки становятся по порядку величины сравнимыми с тепловыми искажениями в решетке. Это предотвращает простое масштабирование лазерных механизмов, успешно реализованных в инфракрасном диапазоне с твердотельными (внутрицентровыми переходами) и полупроводниковыми (запрещенными переходами) лазерами в терагерцовый диапазон. Например, 1–5 ТГц квантовые каскадные лазеры на основе GaAs используют инверсию на основе уровней внутризонной проводимости с типичным временем жизни не более нескольких пикосекунд [28]. Эти короткие времена жизни электронов в гетероструктурных полупроводниковых лазерах обусловлены делокализацией электронных уровней, которые представляют собой электронные поддиапазоны с континуумом состояния, по крайней мере, в одном пространственном измерении. Единственные энергетические щели терагерцового диапазона между локализованными уровнями, доступными в твердых телах, представлены в запрещенной зоне водородоподобными примесными центрами в полупроводниках. Предполагалось, что времена жизни таких уровней на порядок превышают времена жизни межподзонных уровней в гетероструктурах и, следовательно, потенциально они могут служить для лазерной терагерцовой генерации твердотельного типа. Ожидалось, что низкие потери решеточного поглощения в таких элементарных полупроводниках, как кремний и германий, вместе с их большей теплопроводностью смогут обеспечить минимальные оптические потери.

Разработка твердотельных источников излучения терагерцового спектрального диапазона является актуальной задачей в связи с широкой областью их потенциального применения: информационные технологии, медицина, связь, физические исследования материалов и структур [29]. Работ по исследованию терагерцового излучения, связанного с переходами носителей заряда между уровнями примесных центров в полупроводниковых наноструктурах, немного (см., например, [30, 31]). Так, в работе [30] описано терагерцовое излучение в продольном электрическом поле из структур с квантовыми ямами GaAs/AlGaAs с участием резонансных состояний примеси, которые возникали вследствие размерного квантования. В работе [31] исследовано терагерцовое излучение из структур с легированными квантовыми ямами GaAs/AlGaAs в условиях межзонного оптического возбуждения электронно-дырочных пар в структурах *n*-типа и при примесном пробое в продольном электрическом поле в структурах *p*-типа. Необходимо отметить, что источники терагерцового излучения на примесных переходах в структурах с квантовыми точками могут быть более привлекательными из-за возможности более эффективного управления энергией ионизации примеси и, соответственно, временем жизни квазистационарных примесных состояний при изменении параметров самих структур и окружающей матрицы.

Настоящий обзор посвящен развитию теории 1D-диссипативного туннелирования применительно к полупроводниковым КТ в системе совмещен-

ного АСМ/СТМ с учетом влияния двух локальных фононных мод во внешнем электрическом поле.

Осциллирующий и неосциллирующий режимы 1D-диссипативного туннелирования с участием двух локальных фононных мод во внешнем электрическом поле

Квантовое туннелирование оказывается важным при исследовании электронного транспорта через молекулярные нити, структуры с квантовыми точками или ямами, а также в низкотемпературных химических реакциях. Многие из отмеченных систем рассматриваются с позиций инстантонного подхода. Вычисление константы туннелирования, основанное на инстантонном приближении, делает все перечисленные явления в некотором смысле «подобными». В химических реакциях константа скорости предполагает экспоненциальную эволюцию для вероятности переноса, тогда как в электронных приборах константа скорости определяет туннельный ток. В работе Ю. Н. Овчинникова [32] было показано, что проводимость гранулированных металлических пленок связана с процессами туннелирования между соседними гранулами и что взаимодействие с термостатом, обеспечивающее реальный переход в состояния, локализованные в «соседнем» кластере, достаточно мало. Таким образом, характеристики туннельного тока в изучаемых системах можно рассматривать в пределе сравнительно «слабой» диссипации, но достаточной для обеспечения «распадности» двухъямного осцилляторного потенциала, используемого в предлагаемой модели. Кроме того, существенный вклад в туннельный ток может внести вероятность туннелирования, оцененная с точностью до предэкспоненциального фактора.

Среди экспериментально подтвержденных ранее эффектов диссипативного туннелирования – наблюдаемый единичный пик при одной из полярностей внешнего электрического поля в системе АСМ/СТМ на туннельных вольт-амперных характеристиках (ВАХ) для КТ из циркония и коллоидного золота, что качественно отвечает единичному пику на полевой зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования в пределе слабой диссипации (без учета влияния локальных фононных мод матрицы). Учет одной локальной фононной моды приводит к тому, что упомянутый пик, отвечающий случаю симметричного двухъямного осцилляторного потенциала при определенном значении напряженности внешнего электрического поля, становится неустойчивым. Однако появляется дополнительный устойчивый пик, обусловленный наличием взаимодействия с выделенной осцилляторной фононной модой [2]. В рамках рассмотренных ранее теоретических моделей 1D- и 2D-диссипативного туннелирования с учетом влияния одной локальной фононной моды не удалось качественно объяснить ряд полученных экспериментальных ВАХ для полупроводниковых КТ. В данном разделе предпринята попытка «улучшить» теоретический подход путем учета двух локальных фононных мод в вероятности 1D-диссипативного туннелирования, расчет которой выполнен в рамках метода инстантонов при наличии внешнего электрического поля и конечной температуры.

Рассмотрим общую схему расчета вероятности 1D-диссипативного туннелирования в одноинстантонном приближении во внешнем электрическом поле [2, 3].

Учет влияния электрического поля на симметричный двухъямный модельный осцилляторный потенциал можно представить в виде

$$U(q) = \frac{\omega_0^2}{2}(q-a)^2\theta(q) + \frac{\omega_0^2}{2}(q+a)^2\theta(-q) - |e|Eq. \quad (1)$$

Электрическое поле меняет симметрию потенциала, и происходит сдвигка минимумов:

$$1) \quad q > 0; \quad U_1 = \frac{\omega_0^2}{2}(q-a)^2 - |e|Eq = \frac{\omega_0^2}{2}(q-a^*)^2 - a|e|Eq - \frac{|e|E}{2\omega_0^2}, \quad \text{где}$$

$$a^* = a + \frac{|e|E}{\omega_0^2};$$

$$2) \quad q < 0; \quad U_2 = \frac{\omega_0^2}{2}(q+a)^2 - |e|Eq = \frac{\omega_0^2}{2}(q+a^{**})^2 + a|e|Eq - \frac{|e|E}{2\omega_0^2}, \quad \text{где}$$

$$a^{**} = a - \frac{|e|E}{\omega_0^2}.$$

Тогда перенормированный потенциал приобретает следующий вид:

$$U = \left[\frac{\omega_0^2}{2}(q-a^*)^2 - a|e|Eq \right] \theta(q) + \left[\frac{\omega_0^2}{2}(q+a^{**})^2 + a|e|Eq \right] \theta(-q). \quad (2)$$

Величины смещенных минимумов равны:

$$U_1(a^*) = -a|e|E - \frac{|e|^2 E^2}{2\omega_0^2}, \quad U_2(-a^{**}) = a|e|E - \frac{|e|^2 E^2}{2\omega_0^2},$$

а смещение минимумов оказывается пропорциональным полю:

$$|\Delta U| = U_2 - U_1 = 2a|e|E \Rightarrow |\Delta U| \sim E. \quad (3)$$

При этом смещения минимумов оказываются одинаковыми по величине:

$$\Delta q_1 = a^* - a = \frac{|e|E}{\omega_0^2}, \quad \Delta q_2 = -a^{**} + a = \frac{|e|E}{\omega_0^2}.$$

В рассматриваемой модели вершина потенциального барьера фиксируется:

$$U(0) = \frac{\omega_0^2 a^2}{2},$$

но происходит соответствующая сдвигка величины левого минимума, и, как следствие, эффективно уменьшается барьер:

$$\Delta U_2 = U(0) - U_2(-a^{**}) = \frac{\omega_0^2 a^2}{2} - a|e|E + \frac{|e|^2 E^2}{2\omega_0^2} = \frac{|e|^2}{2\omega_0^2} \left(E - \frac{a}{|e|} \omega_0^2 \right)^2. \quad (4)$$

Так как при последующем рассмотрении предполагается использование квазиклассического инстантонного приближения при вычислении вероятности туннелирования в двухъямном осцилляторном потенциале, то будем считать, что величина барьера не может быть слишком малой по сравнению с длиной подбарьерного переноса, следовательно, возникает естественное ограничение на величину напряженности электрического поля, которое в обычных единицах принимает вид: $E \ll a\omega_0^2 / |e| \Rightarrow E \ll ma\omega_0^2 / |e|$.

Для того чтобы воспользоваться стандартной моделью для определения вероятности диссипативного туннелирования, будем использовать следующие обозначения для перенормированного двухъямного осцилляторного потенциала во внешнем электрическом поле: $q_1 = b^* = b + \frac{|e|E}{\omega_0^2}$,

$q_0 = a^* = a - \frac{|e|E}{\omega_0^2}$. Тогда модельный перенормированный 1D-потенциал мож-

но представить в стандартном виде. С учетом результатов, полученных ранее, модельный гамильтониан системы может быть записан как

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2} + v_1(y_1) + y_1 \sum_{\alpha=2}^N C_{\alpha} y_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=2}^N (p_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 y_{\alpha}^2), \quad (5)$$

где

$$v_1(y_1) = \left(\frac{1}{2} \omega_1^2 y_1^2 + \lambda y_1 \right) \theta \left(-\frac{\Delta I}{2\lambda} - y_1 \right) + \left(\frac{1}{2} \omega_1^2 y_1^2 - \lambda y_1 - \Delta I \right) \theta \left(\frac{\Delta I}{2\lambda} + y_1 \right). \quad (6)$$

Вероятность туннелирования частицы в единицу времени может быть найдена в квазиклассическом приближении. Необходимо, чтобы дебройлевская длина волны частицы была много меньше характерного линейного масштаба потенциала. Для этого вполне достаточно, чтобы высота барьера была много больше энергии нулевых колебаний в яме начального состояния. Кроме квазиклассического приближения, мы должны предположить квазистационарность распада, т.е. ширина уровня Γ , с которого туннелирует частица, должна быть много меньше энергии нулевых колебаний.

Находим 1D-квазиклассическое действие в одноинстантонном приближении с учетом влияния матрицы среды-термостата:

$$S_B = 2\omega_0^2 (q_0 + q_1) q_0 \tau_0 - \frac{2\omega_0^2 (q_0 + q_1)^2 \tau_0^2}{\beta} - \frac{4\omega_0^4 (q_0 + q_1)^2}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{v_n^2 (v_n^2 + \omega_0^2 + \zeta_n)}. \quad (7)$$

Предэкспоненциальный множитель определяется вкладом траекторий, близко расположенных от инстантона. Для этого мы должны разложить дей-

ствии до квадратичного члена по отклонениям $q - q_B$ и проинтегрировать в функциональном пространстве. Тогда вероятность туннелирования в единицу времени можно записать как

$$\Gamma = B \exp(-S_B), \tag{8}$$

$$B = \left[\frac{S_0}{2\pi} \frac{\det \left(\frac{\delta^2 S}{\delta q^2} \right)_{q=-q_0}}{\det' \left(\frac{\delta^2 S}{\delta q^2} \right)_{q=q_B(\tau)}} \right]^{1/2}, \tag{9}$$

$$S_0 = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} \dot{q}_B^2(\tau) d\tau, \tag{10}$$

а \det' означает, что нулевое собственное значение, соответствующее нулевой моде инстантона, опущено.

Отметим, что вывод этой формулы предполагает приближение идеального инстантонного газа

$$\Gamma \ll (\Delta\tau)^{-1}, \tag{11}$$

где $\Delta\tau$ – ширина перехода от положительного значения траектории к отрицательному.

Вычисление предэкспоненциального множителя в рассматриваемой модели приводит к результату

$$B = \frac{2\omega_0^2 (q_0 + q_1)^2}{(2\pi\beta)^{1/2}} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{\lambda_{0n}} \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2v_n \tau_0}{\lambda_{0n}} \right)^{-1/2}. \tag{12}$$

Рассмотрим (7) с учетом взаимодействия с одной локальной фононной моды (ω_L). Для упрощения будем предполагать это взаимодействие достаточно малым, т.е. $\frac{C}{\omega_0^2} \ll 1$ и $\frac{C}{\omega_L^2} \ll 1$. В этом случае

$$D(v_n) = -\frac{C^2}{v_n^2 + \omega_L^2}, \text{ где } v_n = \frac{2\pi n}{\beta}; \zeta_n = \frac{C^2 v_n^2}{\omega_L^2 (\omega_L^2 + v_n^2)}.$$

Тогда можно получить выражение для квазиклассического действия с учетом локальной моды среды-термостата в приведенных обезразмеренных переменных:

$$\frac{S}{a^2 \omega} = \frac{1}{2} (b^* + 1)(3 - b^*) \tau_0^{*'} - \frac{(b^* + 1)^2 (\tau_0^{*'})^2}{2\beta^*} - \frac{(b^* + 1)^2}{2\tilde{\gamma}'} \left\{ \frac{(1 - \tilde{x}_2')}{\sqrt{\tilde{x}_1'}} \left[\text{cth} \beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'} - \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{\operatorname{sh} \beta^* \sqrt{\tilde{x}'_1}} \left\{ \operatorname{ch} \left((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}'_1} \right) - \operatorname{ch} \left(\beta^* \sqrt{\tilde{x}'_1} \right) \right\} + \operatorname{ch} \left((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}'_1} \right) \Big] - \\
 & -\frac{(1 - \tilde{x}'_1)}{\sqrt{\tilde{x}'_2}} \left[\operatorname{cth} \beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2} - \frac{1}{\operatorname{sh} \beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2}} \left\{ \operatorname{ch} \left((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}'_2} \right) - \operatorname{ch} \left(\beta^* \sqrt{\tilde{x}'_2} \right) \right\} + \right. \\
 & \left. + \operatorname{ch} \left((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}'_2} \right) \right] \Big\}, \tag{13}
 \end{aligned}$$

где $\tau_0^* = 2\omega\tau^* = \operatorname{arcsch} \left[\frac{1-b^*}{1+b^*} \operatorname{sh} \beta^* \right] + \beta^*$, $\beta^* = \frac{\beta\omega}{2}$; $b^* = \frac{q_1}{q_0}$ – перенормированный параметр асимметрии. Кроме того, влияние локальной моды среды-термостата учитывается через следующие параметры:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\gamma}' = \frac{\tilde{\gamma}}{\omega^2} &= \sqrt{\left[\frac{\omega_L^2}{\omega^2} + 1 + \frac{C^2}{\omega_L^2 \omega^2} \right]^2 - 4 \frac{\omega_L^2}{\omega^2}} = \sqrt{[\omega_L^* + 1 + C^*]^2 - 4 \frac{\omega_L^2}{\omega^2}}, \\
 \tilde{x}'_{1,2} &= \frac{\tilde{x}_{1,2}}{\omega_0^2} = \frac{\gamma_{1,2}}{\omega_0^2},
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 &= \frac{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) - \sqrt{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right)^2 - 4\omega_0^2 \omega_L^2}}{2} > 0, \\
 \gamma_2 &= \frac{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) + \sqrt{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right)^2 - 4\omega_0^2 \omega_L^2}}{2} > 0.
 \end{aligned}$$

Для расчета предэкспоненциального фактора с учетом влияния локальной моды среды-термостата ω_L используем полученное ранее общее выражение (12). При этом, как и в случае вычисления квазиклассического инстантонного (евклидового) действия с учетом локальной моды ω_L , мы используем, что

$$D(v_n) = - \sum_{\alpha=2}^N \frac{C_\alpha^2}{\omega_\alpha^2 + v_n^2} \Big|_{\omega_L} \rightarrow - \frac{C^2}{\omega_L^2 + v_n^2} = - \frac{C^2}{\omega_L^2} + \xi_n,$$

где

$$\xi_n = \frac{C^2}{\omega_L^2} - \frac{C^2}{\omega_L^2 + v_n^2}; \quad v_n = \frac{2\pi n}{\beta}; \quad \beta = \frac{\hbar}{kT}, \quad \lambda_{0n} = v_n^2 + \omega_0^2 + \xi_n.$$

Тогда для вычисления предэкспоненциального фактора мы учтем, что в общем выражении для B (12) происходит следующее преобразование выражений:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{v_n^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} - \frac{C^2}{\omega_L^2 + v_n^2}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1/2(1 - \cos 2v_n \tau_0)}{v_n^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} - \frac{C^2}{\omega_L^2 + v_n^2}} = \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \frac{(v_n^2 + \omega_L^2)(1 - \cos 2v_n \tau_0)}{v_n^2(v_n^2 + \omega_L^2) + \omega_0^2(v_n^2 + \omega_L^2) + \frac{C^2}{\omega_L^2}(v_n^2 + \omega_L^2) - C^2} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(\alpha + \omega_L^2)(1 - \cos 2v_n \tau_0)}{\alpha^2 + \alpha \left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) + \omega_0^2 \omega_L^2} = \frac{(\alpha + \omega_L^2)(1 - \cos 2v_n \tau_0)}{(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2)}, \end{aligned}$$

где

$$\alpha = v_n^2 = \frac{4\pi^2 n^2}{\beta^2}, \quad \alpha_{1,2} = \frac{-\left(\omega_0^2 + \omega_L^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) \pm \sqrt{\left(\omega_0^2 + \omega_L^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right)^2 - 4\omega_0^2 \omega_L^2}}{2}.$$

Выражение в знаменателе (12) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} &\left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2v_n \tau_0}{v_n^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} - \frac{C^2}{\omega_L^2 + v_n^2}} \right]^{-1/2}; \quad v_n = \frac{2\pi n}{\beta}, \quad \alpha = v_n^2; \\ &\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2v_n \tau_0 (v_n^2 + \omega_L^2)}{\alpha(\alpha + \omega_L^2) + \omega_0^2(\alpha + \omega_L^2) + \frac{C^2}{\omega_L^2}(\alpha + \omega_L^2) - C^2} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos \frac{4\pi\tau_0}{\beta} n(\alpha + \omega_L^2)}{\alpha^2 + \alpha \left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2} \right) + \omega_0^2 \omega_L^2} = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos \frac{4\pi\tau_0}{\beta} n(\alpha + \omega_L^2)}{(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2)}, \end{aligned}$$

где $\alpha_{1,2}$ определены выше.

Вводя, как и в случае вычисления действия с учетом локальной моды среды-термостата, коэффициенты

$$\gamma_1 = -\alpha_1 = \frac{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right) - \sqrt{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right)^2 - 4\omega_0^2\omega_L^2}}{2} > 0,$$

$$\gamma_2 = -\alpha_2 = \frac{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right) + \sqrt{\left(\omega_L^2 + \omega_0^2 + \frac{C^2}{\omega_L^2}\right)^2 - 4\omega_0^2\omega_L^2}}{2} > 0,$$

а также учитывая, что

$$\frac{\alpha + \omega_L^2}{(\alpha - \alpha_1)(\alpha - \alpha_2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{B}{v_n^2 - \alpha_1} + \frac{D}{v_n^2 - \alpha_2} \right),$$

где

$$A = -\frac{(\omega_L^2 + \alpha_1)}{\alpha_2 - \alpha_1} = -\frac{(\omega_L^2 - \gamma_1)}{\gamma_1 - \gamma_2};$$

$$D = \frac{\omega_L^2 + \alpha_2}{\alpha_2 - \alpha_1} = \frac{\omega_L^2 - \gamma_2}{\gamma_1 - \gamma_2},$$

получаем окончательное аналитическое выражение для предэкспоненты с учетом влияния локальной моды среды-термостата:

$$\begin{aligned} \tilde{B}^* = & \frac{2\omega_0^2(a+b)^2}{(2\pi\beta)^{1/2}} \left\{ \frac{A}{2\gamma_1} \left[\sqrt{\gamma_1} \beta \operatorname{cth} \left(\frac{\sqrt{\gamma_1} \beta}{2} \right) - 1 \right] + \frac{D}{2\gamma_2} \left[\sqrt{\gamma_2} \beta \operatorname{cth} \left(\frac{\sqrt{\gamma_2} \beta}{2} \right) - 1 \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ \frac{A}{2} \left[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_1}} \frac{\operatorname{ch} \left(\sqrt{\gamma_1} \left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \right)}{\operatorname{sh} \frac{\sqrt{\gamma_1} \beta}{2}} - \frac{1}{\gamma_1} \right] + \frac{D}{2} \left[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_2}} \frac{\operatorname{ch} \left(\sqrt{\gamma_2} \left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \right)}{\operatorname{sh} \frac{\sqrt{\gamma_2} \beta}{2}} - \frac{1}{\gamma_2} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} + \\ & + \left(\frac{A}{2} \left[\frac{1}{\gamma_1} - \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_1}} \frac{\operatorname{ch} \left[\sqrt{\gamma_1} \left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \right]}{\operatorname{sh} \frac{\sqrt{\gamma_1} \beta}{2}} \right] + \frac{D}{2} \left[\frac{1}{\gamma_2} - \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_2}} \frac{\operatorname{ch} \left[\sqrt{\gamma_2} \left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \right]}{\operatorname{sh} \frac{\sqrt{\gamma_2} \beta}{2}} \right] \right) \times \\ & \times \left\{ \frac{A}{2} \left[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_1}} \frac{\operatorname{ch} \left(\sqrt{\gamma_1} \left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0 \right) \right)}{\operatorname{sh} \frac{\sqrt{\gamma_1} \beta}{2}} - \frac{1}{\gamma_1} \right] + \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{D}{2} \left[\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma_2}} \frac{\operatorname{ch}\left(\sqrt{\gamma_2}\left(\frac{\beta}{2} - 2\tau_0\right)\right)}{\operatorname{sh}\frac{\sqrt{\gamma_2}\beta}{2}} - \frac{1}{\gamma_2} \right] \left. \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Для последующих численных оценок используем введение безразмерных параметров $\omega_L^* = \left(\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)^2$, $C^* = \left(\frac{C}{\omega_L \omega_0}\right)^2$,

$$\begin{aligned} \gamma_{1,2} &= \omega_0^2 \left[\frac{\left(\frac{\omega_L^2}{\omega_0^2} + 1 + \frac{C^2}{\omega_L^2 \omega_0^2}\right) \mp \sqrt{\left(\frac{\omega_L^2}{\omega_0^2} + 1 + \frac{C^2}{\omega_L^2 \omega_0^2}\right)^2 - \frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}}}{2} \right] = \\ &= \omega_0^2 \left[\frac{(\omega_L^* + 1 + C^*) \mp \sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*}}{2} \right]; \\ \sqrt{\gamma_{1,2}} &= \omega_0 \sqrt{\frac{\left(\frac{\omega_L^2}{\omega_0^2} + \frac{C^2}{\omega_L^2 \omega_0^2} + 1\right) \mp \sqrt{\left(\frac{\omega_L^2}{\omega_0^2} + \frac{C^2}{\omega_L^2 \omega_0^2} + 1\right)^2 - \frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}}}{2}} = \\ &= \omega_0 \sqrt{\frac{(\omega_L^* + 1 + C^*) \mp \sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*}}{2}}, \end{aligned}$$

при этом:

$$\begin{aligned} A &= -\frac{(\omega_L^2 - \gamma_1)}{\gamma_1 - \gamma_2} = \frac{\omega_L^* - \frac{1}{2} \left[(\omega_L^* + 1 + C^*) - \sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*} \right]}{2\sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*}}, \\ D &= \frac{(\omega_L^2 - \gamma_2)}{\gamma_1 - \gamma_2} = \frac{\omega_L^* - \frac{1}{2} \left[(\omega_L^* + 1 + C^*) + \sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*} \right]}{2\sqrt{(\omega_L^* + 1 + C^*)^2 - 4\omega_L^*}}; \\ \tau^* &= \frac{\tau_1 + \tau_2}{2} = \frac{1}{2\omega} \tau_0 = \frac{1}{2\omega} \left[\operatorname{arcsch} \left[\frac{1-b^*}{1+b^*} \operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{2} \right] + \frac{\beta}{4} \right]. \end{aligned}$$

Условие (11) ограничивает применимость рассматриваемого приближения.

Расчет вероятности 1D-диссипативного туннелирования для случая осциллирующего и неосциллирующего режимов туннельного переноса в квантовой молекуле с учетом влияния двух локальных фононных мод

Во введении была рассмотрена общая схема расчета вероятности 1D-диссипативного туннелирования, на основе которой в данном разделе при учете влияния двух локальных фононных мод будут аналитически получены формулы для случаев осциллирующего и неосциллирующего режимов 1D-туннельного переноса. Рассмотрим (8) с учетом взаимодействия с двумя локальными фононными модами ($\omega_{L1} = \omega_2$ и $\omega_{L2} = \omega_3$). Для упрощения будем предполагать это взаимодействие достаточно малым, т.е. $\frac{C}{\omega_0^2} \ll 1$

и $\frac{C}{\omega_L^2} \ll 1$. В этом случае

$$\zeta_n = v_n^2 \sum_{\alpha=2}^N \frac{C_\alpha^2}{\omega_\alpha^2 (\omega_\alpha^2 + v_n^2)},$$

где $v_n = \frac{2\pi n}{\beta}$; $\beta = \frac{\hbar}{kT}$;

$$\zeta_n = v_n^2 \frac{C_2^2}{\omega_2^2 (\omega_2^2 + v_n^2)} + v_n^2 \frac{C_3^2}{\omega_3^2 (\omega_3^2 + v_n^2)}; \quad \sin^2 v_n \tau_0 = \frac{1}{2} (1 - \cos 2v_n \tau_0).$$

В результате сумма в последнем слагаемом выражения (8) перепишется в виде $U = U_1 - U_2$, где

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{v_n^2 (v_n^2 + \omega_0^2 + v_n^2 \frac{C_2^2}{\omega_2^2 (\omega_2^2 + v_n^2)} v_n^2 + \frac{C_3^2}{\omega_3^2 (\omega_3^2 + v_n^2)})}; \quad (15)$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos 2v_n \tau_0}{v_n^2 \left(v_n^2 + \omega_0^2 + v_n^2 \frac{C_2^2}{\omega_2^2 (\omega_2^2 + v_n^2)} v_n^2 + \frac{C_3^2}{\omega_3^2 (\omega_3^2 + v_n^2)} \right)}. \quad (16)$$

Обозначим $v_n^2 = x$ и преобразуем выражение в знаменателе:

$$\begin{aligned} & x \left[(x + \omega_0^2) \omega_2^2 \omega_3^2 (x + \omega_2^2)(x + \omega_3^2) + x C_2^2 \omega_3^2 (x + \omega_3^2) + x C_3^2 \omega_2^2 (x + \omega_2^2) \right] = \\ & = x \left[\omega_2^4 \omega_3^4 x + \omega_2^2 \omega_3^2 x^3 + \omega_2^2 \omega_3^2 x^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega_2^4 \omega_3^4 \omega_0^2 + \omega_2^2 \omega_3^2 \omega_0^2 x^2 + \right. \\ & \left. + \omega_2^2 \omega_3^2 \omega_0^2 x (\omega_2^2 + \omega_3^2) + C_2^2 \omega_3^4 x + C_2^2 \omega_3^2 x^2 + C_3^2 \omega_2^4 x + C_3^2 \omega_2^2 x^2 \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= x \left[\omega_2^2 \omega_3^2 x^3 + x^2 \left\{ \omega_2^2 \omega_3^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega_0^2 \omega_2^2 \omega_3^2 + C_2^2 \omega_3^2 + C_3^2 \omega_2^2 \right\} + \right. \\
&\quad \left. + x \left\{ \omega_2^4 \omega_3^4 + \omega_0^2 \omega_2^2 \omega_3^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + C_2^2 \omega_3^4 + C_3^2 \omega_2^4 \right\} + \omega_0^2 \omega_2^4 \omega_3^4 \right] = \\
&\quad = x \omega_2^2 \omega_3^2 \left[x^3 + x^2 \left\{ \omega_2^2 + \omega_3^2 + \omega_0^2 + \frac{C_2^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2}{\omega_3^2} \right\} + \right. \\
&\quad \left. + x \left\{ \omega_2^2 \omega_3^2 + \omega_0^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + \frac{C_2^2 \omega_3^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2 \omega_2^2}{\omega_3^2} \right\} + \omega_0^2 \omega_2^2 \omega_3^2 \right].
\end{aligned}$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned}
A &= \omega_2^2 + \omega_3^2 + \omega_0^2 + \frac{C_2^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2}{\omega_3^2}, \\
B_\omega &= \omega_2^2 \omega_3^2 + \omega_0^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + \frac{C_2^2 \omega_3^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2 \omega_2^2}{\omega_3^2}, \quad C = \omega_0^2 \omega_2^2 \omega_3^2,
\end{aligned}$$

тогда выражение в знаменателе первого слагаемого в (8) примет вид

$$x \omega_2^2 \omega_3^2 \underbrace{[x^3 + Ax^2 + B_\omega x + C]}_{=0} = x \omega_2^2 \omega_3^2 (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3).$$

Обозначим

$$Q = \frac{A^2 - 3B_\omega}{9}; \quad R = \frac{2A^3 - 9AB_\omega + 27C}{54}; \quad S = Q^3 - R^2; \quad \Phi = \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{R}{\sqrt{Q^3}} \right).$$

Если $S > 0$, тогда

$$\begin{aligned}
x_1 &= -2\sqrt{Q} \cos(\Phi) - \frac{A}{3}; \quad x_2 = -2\sqrt{Q} \cos\left(\Phi + \frac{2}{3}\pi\right) - \frac{A}{3}; \\
x_3 &= -2\sqrt{Q} \cos\left(\Phi - \frac{2}{3}\pi\right) - \frac{A}{3}.
\end{aligned} \tag{17}$$

И первая сумма в (8) преобразуется к виду

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_2^2 \omega_3^2 (\omega_2^2 + v_n^2)(\omega_3^2 + v_n^2)}{v_n^2 \omega_2^2 \omega_3^2 (v_n^2 - x_1)(v_n^2 - x_2)(v_n^2 - x_3)}. \tag{18}$$

Выражение (18) разобьем на простые дроби:

$$\frac{\beta_0}{x} + \frac{\gamma}{x - x_1} + \frac{\varphi}{x - x_2} + \frac{\Delta}{x - x_3} = \frac{x^2 + x(\omega_2^2 + \omega_3^2) + \omega_2^2 \omega_3^2}{x(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)},$$

где

$$\beta_0 = -\frac{\omega_2^2 \omega_3^2}{x_1 x_2 x_3},$$

$$\Delta = \frac{x_3^2}{(x_3 - x_2)(x_1 - x_3)} \left\{ \frac{\omega_2^2 \omega_3^2}{x_1 x_2 x_3} \left(\frac{x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3}{x_2 x_3} - 1 \right) + \frac{\omega_2^2 + \omega_3^2}{x_2 x_3} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{x_3} \left(1 + \frac{\omega_2^2 \omega_3^2}{x_1 x_2 x_3} \left[\frac{x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3}{x_2 x_3} + (x_2 + x_3 - x_1) \right] \right) + \frac{(\omega_2^2 + \omega_3^2)(x_2 + x_3)}{x_2 x_3} \right\},$$

$$\varphi = \frac{x_2}{x_3(x_2 - x_1)} \left\{ \Delta \frac{x_2}{x_3} (x_1 - x_3) - 1 - \frac{\omega_2^2 \omega_3^2}{x_1 x_2 x_3} (x_2 + x_3 - x_1) - \right.$$

$$\left. - \frac{x_2 + x_3}{x_2 x_3} \left\{ \omega_2^2 + \omega_3^2 + \frac{\omega_2^2 \omega_3^2}{x_1 x_2 x_3} (x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3) \right\} \right\},$$

$$\gamma = \frac{1}{x_2 x_3} \left\{ \omega_2^2 + \omega_3^2 - \Delta x_1 x_2 - \varphi x_1 x_3 - \beta_0 (x_2 x_3 + x_1(x_2 + x_3)) \right\}, \quad v_n = \frac{2\pi n}{\beta}. \quad (19)$$

В итоге U_1 преобразуется к виду

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\beta_0}{v_n^2} + \frac{\gamma}{v_n^2 - x_1} + \frac{\varphi}{v_n^2 - x_2} + \frac{\Delta}{v_n^2 - x_3} \right);$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_0}{v_n^2} = \beta_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^2}{4\pi^2 n^2} = \beta_0 \frac{\beta^2}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \beta_0 \frac{\beta^2}{24};$$

$$x_1 = -2\sqrt{Q} \cos \varphi - \frac{A}{3} = -x_{10} = -\left(2\sqrt{Q} \cos \varphi + \frac{A}{3} \right).$$

Если $x_1 < 0$, то

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma}{v_n^2 + x_{10}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\gamma}{\frac{\beta^2}{4\pi^2 n^2} + x_{10}} =$$

$$= \frac{\gamma \beta^2}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 + \frac{x_{10} \beta^2}{4\pi^2}} = \frac{\gamma \beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{2x_{10} \beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{10}} \beta} \operatorname{ctg} \left(\frac{\sqrt{x_{10}} \beta}{2\pi} \right) \right]; \quad \tilde{x}_{10}^2 = \frac{x_{10} \beta^2}{4\pi^2},$$

$$x_2 = -2\sqrt{Q} \cos \left(\Phi + \frac{2}{3} \pi \right) - \frac{A}{3} = -x_{20}, \quad \tilde{x}_{20}^2 = \frac{x_{20} \beta^2}{4\pi^2},$$

$$x_3 = -2\sqrt{Q}\cos\left(\Phi - \frac{2}{3}\pi\right) - \frac{A}{3} = -x_{30}, \quad \tilde{x}_{30}^2 = \frac{x_{30}\beta^2}{4\pi^2}.$$

Если $x_1 > 0, x_2 > 0, x_3 > 0$, то

$$U_1 = \frac{1}{2} \left\{ \beta_0 \frac{\beta^2}{24} + \frac{\gamma\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{2x_1\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \operatorname{ctg}\left(\frac{\sqrt{x_1}\beta}{2}\right) \right] + \frac{\varphi\beta^2}{4\pi^2} \times \right. \\ \left. \times \left[-\frac{4\pi^2}{2x_2\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \operatorname{ctg}\left(\frac{\sqrt{x_2}\beta}{2}\right) \right] + \frac{\Delta\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{2x_3\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \operatorname{ctg}\left(\frac{\sqrt{x_3}\beta}{2}\right) \right] \right\}. \quad (20)$$

Перейдем к вычислению U_2 :

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\beta_0 \cos 2v_n T_0}{v_n^2} + \frac{\gamma \cos 2v_n T_0}{v_n^2 - x_1} + \frac{\varphi \cos 2v_n T_0}{v_n^2 - x_2} + \frac{\Delta \cos 2v_n T_0}{v_n^2 - x_3} \right); \\ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta_0 \cos^2 \frac{2\pi T_0 n}{\beta}}{4\pi^2 n^2} = \frac{1}{2} \frac{\beta^2 \beta_0}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos^2 \frac{2\pi T_0}{\beta} n}{n^2} = \\ = \frac{1}{2} \left[\frac{\beta^2 \beta_0}{4\pi^2} \frac{1}{12} \left(3 \frac{(4\pi T_0)^2}{\beta} - 6\pi \frac{4\pi T_0}{\beta} + 2\pi^2 \right) \right] + \\ + \frac{1}{2} \gamma \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos \frac{4\pi T_0 n}{\beta}}{4\pi^2 n^2 - x_1} = \frac{1}{2} \frac{\beta^2 \gamma}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos \frac{4\pi T_0}{\beta} n}{n^2 - \frac{x_1 \beta^2}{4\pi^2}} = \\ = \frac{1}{2} \frac{\beta^2 \gamma}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi T_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_1 \beta^2} \right\}.$$

При $x_1, x_2, x_3 > 0$ U_2 дает

$$U_2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\beta_0 \beta^2}{48} \left(3 \frac{(4\pi T_0)^2}{\beta} - \frac{24\pi^2 T_0}{\beta} + 2\pi^2 \right) + \right. \\ \left. + \frac{\gamma\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi T_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} \right\} + \right. \\ \left. + \frac{\varphi\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi T_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_2 \beta^2} \right\} + \right.$$

$$+ \frac{\Delta\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi T_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_3\beta^2} \right\}. \quad (21)$$

Квазиклассическое действие с учетом двух локальных фононных мод сводится к выражению вида

$$S_B = 2\omega_0^2(a+b)a\tau_0 - \frac{2}{\beta}\omega_0^2(a+b)^2\tau_0^2 - \frac{4}{\beta}\omega_0^4(a+b)^2\{U_1 + U_2\},$$

где

$$\tau_0 = \frac{1}{2\omega_0} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{b-a}{b+a} \operatorname{sh} \frac{\omega_0\beta}{4} \right] + \frac{\beta}{4} = \frac{1}{2\omega_0} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{\frac{b}{a}-1}{\frac{b}{a}+1} \operatorname{sh} \frac{\omega_0\beta}{4} \right] + \frac{\beta}{4},$$

или

$$\tau_0^* = \tau_0\omega_0 = \frac{1}{2} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{b^*-1}{b^*+1} \operatorname{sh} \beta^* \right] + \beta^*; \quad \tau_0^* = \tau\omega_0; \quad \beta^* = \frac{\omega_0\beta}{4}.$$

Окончательно перенормированное выражение для 1D-квазиклассического инстантонного действия с учетом двух локальных мод среды-термостата для случая осциллирующего режима туннельного переноса принимает вид

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{10} = \frac{S_{10}}{\omega_0 a^2} = & 2(b^*+1)\tau_0^* - \frac{1}{2\beta^*}(b^*+1)^2\tau_0^{*2} - \frac{(b^*+1)^2}{\beta^*} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{2} \left[\beta_0\omega_0^2 \left(\frac{\beta\omega_0}{4} \right)^2 \frac{2}{3} + 4 \frac{\gamma\omega_0^2 \left(\frac{\beta\omega_0}{4} \right)^2}{\pi^2} \left[\frac{4\pi^2}{2x_1\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \operatorname{ctg} \left(\frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right) \right] + \right. \right. \\ & + 4 \frac{\phi\omega_0^2\beta^{*2}}{\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{2x_2\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \operatorname{ctg} \left(\frac{\sqrt{x_2}\beta}{2\pi} \right) \right] + \\ & \left. + 4 \frac{\Delta\omega_0^2\beta^{*2}}{\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{2x_3\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \operatorname{ctg} \left(\frac{\sqrt{x_3}\beta}{2\pi} \right) \right] \right\} - \\ & - \frac{1}{2} \left[\beta_0\omega_0^2 \left(\frac{\beta\omega_0}{4} \right)^2 \frac{1}{3} \left(3 \left(\frac{4\pi\tau_0\omega_0}{\beta\omega_0} \right)^2 - \frac{6\pi^2\tau_0\omega_0}{\beta\omega_0} + 2\pi^2 \right) + \frac{4\gamma\omega_0^2 \left(\frac{\beta\omega_0}{4} \right)^2}{\pi^2} \right] \times \\ & \times \left\{ \frac{\omega_0\pi^2}{4\sqrt{x_1}\beta\omega_0} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0\omega_0}{\beta\omega_0} \right) \frac{\sqrt{x_1}2\beta\omega_0}{\omega_0\pi 4} \right] \operatorname{cosec} \frac{2\sqrt{x_1}\beta\omega_0}{\omega_0} + \frac{\omega_0^2\pi^2}{8x_1\beta\omega_0} \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4\phi\omega_0^2\beta^{*2}}{\pi^2} \left\{ \frac{\omega_0\pi^2 4}{4\sqrt{x_2}\beta^*} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0^*\omega_0}{\beta^*} \right) \frac{\sqrt{x_2} 2\beta^*}{\omega_0\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{2\sqrt{x_2}}{\omega_0} \beta^* + \frac{\omega_0^2\pi^2}{8x_2\beta^{*2}} \right\} + \\
& + \frac{4\Delta\omega_0^2\beta^{*2}}{\pi^2} \left\{ \frac{\omega_0\pi^2 4}{4\sqrt{x_3}\beta^*} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0^*\omega_0}{\beta^*} \right) \frac{\sqrt{x_3} 2\beta^*}{\omega_0\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{2\sqrt{x_3}}{\omega_0} \beta^* + \frac{\omega_0^2\pi^2}{8x_3\beta^{*2}} \right\} \Bigg\}. \quad (22)
\end{aligned}$$

Или для неосциллирующего режима переноса:

$$S_B = 2(1+b)a\tau_0 - \frac{1}{2\beta} \omega_0^2 (1+b)^2 \tau_0^{*2} - \frac{\omega_0^4 (1+b)^2 \{U_1 - U_2\}}{\beta},$$

где

$$\tau_0 = \frac{1}{2\omega_0} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{b-a}{b+a} \operatorname{sh} \frac{\omega_0\beta}{4} \right] + \frac{\beta}{4} = \frac{1}{2\omega_0} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{\frac{b}{a}-1}{\frac{b}{a}+1} \operatorname{sh} \frac{\omega_0\beta}{4} \right] + \frac{\beta}{4},$$

или

$$\tau_0^* = \omega_0\tau_0 = \frac{1}{2} \operatorname{Arcsh} \left[\frac{b^*-1}{b^*+1} \operatorname{sh} \beta^* \right] + \beta^*.$$

Если $x_1, x_2, x_3 < 0$ ($x_{10}, x_{20}, x_{30} > 0$), то

$$\begin{aligned}
U_1 &= \frac{1}{2} \left\{ \beta_0 \frac{\beta^2}{24} + \frac{\gamma\beta^2}{4\pi^2} \left[\frac{1}{2\tilde{x}_{10}^2} + \frac{\pi}{2\tilde{x}_{10}} \operatorname{cth}(\pi\tilde{x}_{10}) \right] + \right. \\
& + \left. \frac{\phi\beta^2}{4\pi^2} \left[\frac{1}{2\tilde{x}_{20}^2} + \frac{\pi}{2\tilde{x}_{20}} \operatorname{cth}(\pi\tilde{x}_{20}) \right] + \frac{\Delta\beta^2}{4\pi^2} \left[\frac{1}{2\tilde{x}_{30}^2} + \frac{\pi^2}{2\tilde{x}_{30}} \operatorname{cth}(\pi\tilde{x}_{30}) \right] \right\}; \\
U_2 &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\beta_0\beta^2}{48} \left(3 \left(\frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right)^2 - \frac{24\pi^2\tau_0}{\beta} + 2\pi^2 \right) + \right. \\
& + \frac{\gamma\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{10}}\beta} \operatorname{ch} \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{10}}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{10}}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{10}\beta^2} \right\} + \\
& + \frac{\phi\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{20}}\beta} \operatorname{ch} \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{20}}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{20}}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{20}\beta^2} \right\} + \\
& + \left. \frac{\Delta\beta^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{30}}\beta} \operatorname{ch} \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{30}}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{30}}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{30}\beta^2} \right\} \right\}.
\end{aligned}$$

Перейдем к вычислению предэкспоненциального фактора с учетом двух локальных фононных мод:

$$B = \frac{2\omega_0^2(a+b)^2}{(2\pi\beta)^2} \frac{\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{\lambda_{0n}}}{\left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2v_n \tau_0}{\lambda_{0n}} \right]^2}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_{0n} &= v_n^2 + \omega_0^2 + \zeta_n, \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{v_n^2 + \omega_0^2 + \frac{v_n^2 C_2^2}{\omega_2^2(\omega_2^2 + v_n^2)} + \frac{v_n^2 C_3^2}{\omega_3^2(\omega_3^2 + v_n^2)}} &= \\ = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(1 - \cos 2v_n \tau_0) \omega_2^2 \omega_3^2 (\omega_2^2 + v_n^2) (\omega_3^2 + v_n^2)}{(\omega_0^2 + v_n^2) \omega_2^2 \omega_3^2 (\omega_2^2 + v_n^2) (\omega_3^2 + v_n^2) + v_n^2 C_2^2 \omega_3^2 (\omega_3^2 + v_n^2) + v_n^2 C_3^2 \omega_2^2 (\omega_2^2 + v_n^2)} &= \\ x = v_n^2 & \\ = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(1 - \cos 2v_n \tau_0) (\omega_2^2 + v_n^2) (\omega_3^2 + v_n^2)}{x^3 + Ax^2 + B_\omega x + C}, & \quad (24) \end{aligned}$$

где введены обозначения:

$$\begin{aligned} A &= \omega_2^2 + \omega_3^2 + \omega_0^2 + \frac{C_2^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2}{\omega_3^2}, \\ B_\omega &= \omega_2^2 \omega_3^2 + \omega_0^2 (\omega_2^2 + \omega_3^2) + \frac{C_2^2 \omega_3^2}{\omega_2^2} + \frac{C_3^2 \omega_2^2}{\omega_3^2}, \quad C = \omega_0^2 \omega_2^2 \omega_3^2; \end{aligned}$$

обозначим также:

$$Q = \frac{A^2 - 3B_\omega}{9}; \quad R = \frac{2A^3 - 9AB_\omega + 27C}{54}; \quad S = Q^3 - R^2; \quad \Phi = \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{R}{\sqrt{Q^3}} \right).$$

При $S > 0$:

$$\begin{aligned} x_1 &= -2\sqrt{Q} \cos(\Phi) - \frac{A}{3}, \\ x_2 &= -2\sqrt{Q} \cos\left(\Phi + \frac{2}{3}\pi\right) - \frac{A}{3}, \end{aligned}$$

$$x_3 = -2\sqrt{Q}\cos\left(\Phi - \frac{2}{3}\pi\right) - \frac{A}{3}.$$

Разложим знаменатель соотношения (24):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(\omega_2^2 + v_n^2)(\omega_3^2 + v_n^2)}{(v_n^2 - x_1)(v_n^2 - x_2)(v_n^2 - x_3)} &= \frac{D}{v_n^2 - x_1} + \frac{E}{v_n^2 - x_2} + \frac{F}{v_n^2 - x_3}, \\ F &= \left\{ (\omega_2^2 + \omega_3^2 + x_2 + x_3)[x_2 x_3(x_1 + x_3) - x_1 x_3(x_2 + x_3)] + \right. \\ &\quad \left. + (x_2 - x_1)[(x_2 + x_3)\omega_2^2 \omega_3^2 + x_2 x_3(\omega_2^2 + \omega_3^2)] \right\} \cdot \{ (x_2 - x_1) \times \\ &\quad \times [x_1 x_2(x_2 + x_3) - x_2 x_3(x_1 + x_2)] - (x_1 - x_3)[x_2 x_3(x_1 + x_3) - x_1 x_3(x_2 + x_3)] \}^{-1}, \\ E &= \frac{\omega_2^2 + \omega_3^2 + x_2 + x_3 + F(x_1 - x_3)}{x_2 - x_1}; \quad D = -\frac{\omega_2^2 + \omega_3^2 + E(x_1 + x_3) + F(x_1 + x_2)}{x_2 + x_3}, \\ \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D}{v_n^2 - x_1} &= \frac{D}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{\beta^2} - x_1} = \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2 - \frac{x_1\beta^2}{4\pi^2}} = \\ &= \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2 - \frac{x_1\beta^2}{4\pi^2}} \right] \quad (\text{при } x_1 > 0) \\ &= \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{2\pi^2}{x_1\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} \right\} \right]. \end{aligned}$$

Сумма, содержащая $\cos 2v_n \tau_0$, дает в этом случае

$$= -\frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_1\beta^2} \right\} \right]. \quad (25)$$

В итоге безразмерный предэкспоненциальный фактор в вероятности 1D-диссипативного туннелирования с учетом влияния двух локальных фононных мод для случая осциллирующего режима туннельного переноса определяется суммами двух типов:

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \frac{B}{a^2 \omega^{3/2}} = \frac{2\omega_0^2 \left(\frac{b}{a} + 1 \right)^2}{(2\pi\beta)^{1/2}} \frac{V_1}{(V_2)^{1/2}}, \\ V_1 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 v_n \tau_0}{\lambda_{0n}} = \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{2\pi^2}{x_1\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} \right\} \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{2} \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{2\pi^2}{x_{20}\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2} \right\} \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{2\pi^2}{x_{30}\beta^2} - \frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2} \right\} \right] - \\
 & - \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_1\beta^2} \right\} \right] - \\
 & - \frac{1}{2} \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_2\beta^2} \right\} \right] - \\
 & - \frac{1}{2} \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_3\beta^2} \right\} \right],
 \end{aligned}$$

$$V_2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos 2\nu_n \tau_0}{\lambda_{0n}} =$$

$$\begin{aligned}
 & = \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_1}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_1}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_1\beta^2} \right\} \right] + \\
 & + \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_2}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_2}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_2\beta^2} \right\} \right] + \\
 & + \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ -\frac{\pi^2}{\sqrt{x_3}\beta} \cos \left[\left(\pi - \frac{4\pi\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2\pi} \right] \operatorname{cosec} \frac{\sqrt{x_3}\beta}{2} + \frac{2\pi^2}{x_3\beta^2} \right\} \right]. \quad (26)
 \end{aligned}$$

Или для неосциллирующего режима переноса:

$$\tilde{B} = \frac{B}{a^2 \omega_0^{3/2}} = \frac{2(b^* + 1)^2}{(2\pi\beta^*)^{1/2}} \frac{\tilde{V}_1}{\tilde{V}_2^{1/2}},$$

$$\begin{aligned}
 V_1 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \nu_n \tau_0}{\lambda_{0n}} & = \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta} + 2 \left\{ \frac{2\pi^2}{x_{10}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{10}}\beta} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{x_{10}}\beta}{2} \right\} \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ \frac{2\pi^2}{x_{20}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{20}}\beta} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{x_{20}}\beta}{2} \right\} \right] +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ \frac{2\pi^2}{x_{30}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{30}\beta}} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{x_{30}\beta}}{2} \right\} \right] - \\
& - \frac{1}{2} \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta^2} + 2 \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{10}\beta}} \operatorname{ch} \left[\left(1 - \frac{4\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{10}\beta}}{2} \right] \operatorname{cosech} \frac{x_{10}\beta}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{10}\beta^2} \right\} \right] - \\
& - \frac{1}{2} \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{20}\beta}} \operatorname{ch} \left[\left(1 - \frac{\tau_0^*}{\beta^*} \right) \frac{\sqrt{x_{20}\beta}}{2} \right] \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{20}\beta}}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{20}\beta^2} \right\} \right] - \\
& - \frac{1}{2} \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{30}\beta}} \operatorname{ch} \left[\left(1 - \frac{4\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{30}\beta}}{2} \right] \times \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \times \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{30}\beta}}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{30}\beta^2} \right\} \right], \tag{27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_2 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\cos v_n \tau_0}{\lambda_{0n}} = \frac{D\beta^2}{4\pi^2} \times \\
& \times \left[-\frac{4\pi^2}{x_1\beta} + \left\{ \frac{\pi^2}{x_{10}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{10}\beta}} \operatorname{ch} \left[\left(1 - \frac{4\tau_0}{\beta} \right) \frac{\sqrt{x_{10}\beta}}{2} \right] \operatorname{cosech} \frac{\sqrt{x_{10}\beta}}{2} - \frac{2\pi^2}{x_{10}\beta^2} \right\} \right] + \\
& + \frac{1}{2} \frac{E\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_2\beta^2} + 2 \left\{ \frac{2\pi^2}{x_{20}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{20}\beta}} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{x_{20}\beta}}{2} \right\} \right] + \\
& + \frac{1}{2} \frac{F\beta^2}{4\pi^2} \left[-\frac{4\pi^2}{x_3\beta^2} + 2 \left\{ \frac{2\pi^2}{x_{30}\beta^2} + \frac{\pi^2}{\sqrt{x_{30}\beta}} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{x_{30}\beta}}{2} \right\} \right]. \tag{28}
\end{aligned}$$

В результате аналитически найдены выражения для вероятности 1D-туннельного переноса с учетом влияния двух локальных фононных мод среды-термостата во внешнем электрическом поле при конечной температуре для случаев осциллирующего и неосциллирующего режимов туннелирования.

Сравнение теоретических кривых зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования во внешнем электрическом поле с экспериментальными туннельными ВАХ для InAs/GaAs КТ

Методы сканирующей зондовой микроскопии, в том числе сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ) широко применяются для исследования морфологии, атомной структуры и энергетического спектра квантоворазмерных полупроводниковых структур.

Метод СТМ на поперечных сколах в сверхвысоком вакууме (СВВ) был применен для измерения локальной плотности состояний (ЛПС) в квантовых ямах. Настоящая работа была инициирована экспериментом, проведенным в Казанском физико-техническом институте им. Е. К. Завойского Казанского научного центра РАН (при участии Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского), по измерению туннельных вольт-амперных характеристик полупроводниковых квантовых точек InAs/GaAs(001), где были обнаружены несколько неэквидистантных пиков, интерпретированных нами ранее в рамках модели 1D-диссипативного туннелирования с учетом одной локальной фононной моды. При этом предложенная теоретическая модель позволила выявить только два единичных пика, один из которых оказался неустойчивым, что не вполне соответствовало имеющимся экспериментальным данным. Необходимо отметить, что особенности наблюдаемых туннельных ВАХ обычно интерпретируются в рамках модели резонансного туннелирования. В данной работе выдвинуто и теоретически обосновано предположение о том, что в режиме слабой диссипации возможен механизм туннельного переноса с участием двух локальных фононных мод окружающей матрицы [33, 34]. Этот нерезонансный механизм туннельного переноса, характерный для металлических КТ, может иметь место в легированных КТ в условиях, когда концентрацию носителей заряда можно менять в достаточно широких пределах с помощью внешнего электрического поля.

Для туннельной спектроскопии размерно-квантованных состояний в поверхностных КТ InAs/GaAs применялся метод комбинированной СТМ/АСМ в СВВ [33, 34]. Образцы для исследований пространственного и энергетического распределения ЛПС в КТ InAs методом туннельной АСМ были выращены на подложках n^+ -GaAs(001) марки АГЧО, легированных Sn, методом МОС-гидридной эпитаксии при атмосферном давлении к.ф.-м.н. Б. Н. Звонковым в Научно-исследовательском физико-техническом институте Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского.

Схема эксперимента представлена на рис. 9.

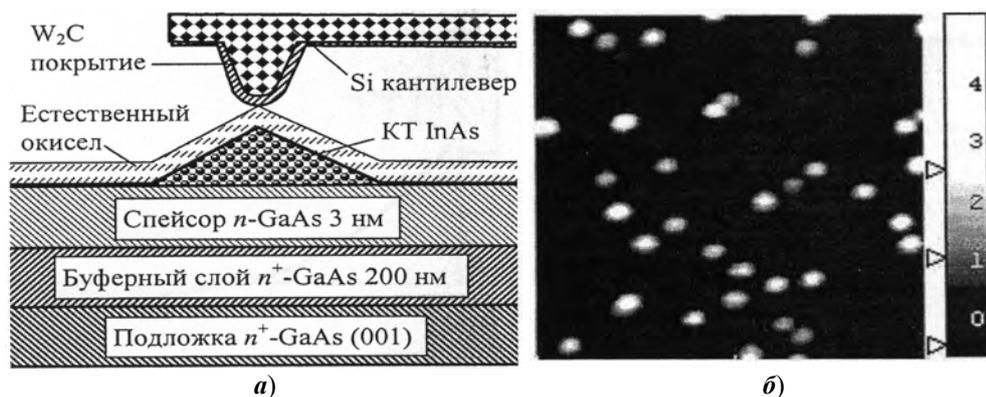


Рис. 9. Схема измерения токового изображения поверхностных КТ InAs/GaAs [33]: *a* – схема измерения токового изображения поверхностных КТ InAs/GaAs; *b* – АСМ-изображение поверхности КТ InAs/GaAs. Размер кадра $750 \times 750 \text{ нм}^2$, диапазон высот 5,9 нм

Схема исследуемых образцов представлена на рис. 9,а. Буферные слои n-GaAs толщиной ≈ 200 нм, легированные Si (концентрацией доноров $N_D \sim 10^{18} \text{см}^{-3}$), выращивались при температуре 650°C , на их поверхности выращивались спейсерные слои нелегированного n-GaAs ($N_D \sim 10^{15} \text{см}^{-3}$) толщиной ≈ 3 нм, необходимые для формирования треугольного потенциального барьера между КТ и n⁺-GaAs буферным слоем. КТ InAs формировались по механизму Странски – Крастанова при 530°C . Номинальная толщина осажденного слоя InAs составляла ≈ 5 монослоев (МС) или $\approx 1,5$ нм, температура роста – 540°C .

Эксперимент проводился при комнатной температуре в условиях СВВ при помощи сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) Omicron UHV AFM/STM VT в составе СВВ комплекса Omicron Multi Probe P. Базовое давление в камере СЗМ составляло $\sim 10^{-10}$ Торр. Поверхность образца, покрытого естественным окислом, образовавшимся в процессе переноса из ростовой установки в СВВ-камеру для СЗМ-исследований, сканировалась р⁺-Si АСМ-зондом с покрытием W₂C в контактном режиме (рис. 9,а), между n⁺-GaAs подложкой и АСМ-зондом прикладывалась разность потенциалов V_g . В эксперименте регистрировались пространственные распределения силы тока между АСМ-зондом и образцом I_t как функция координаты АСМ-зонда в плоскости поверхности образца x, y (токовые изображения) при постоянном значении $V_g = \text{const}$. ВАХ контакта АСМ-зонда к поверхности КТ получались посредством измерения серии токовых изображений КТ при различных значениях V_g .

На рис. 9,б представлено АСМ-изображение поверхности исследуемого образца. Поверхностные КТ имели высоту $h = 5\text{--}6$ нм. Заметим, что латеральные размеры КТ на рис. 9,б значительно превышают ожидаемые для КТ, имеющих форму четырехгранной пирамиды, ограниченной плоскостями (101) для указанных значений h (10–12 нм), что связано с эффектом конволюции вследствие конечных размеров радиуса кривизны острия используемых АСМ-зондов $R_p \approx 35$ нм. На рис. 10,а приведено АСМ-изображение отдельной КТ, а на рис. 10,б–д – ее токовые изображения, полученные при различных значениях V_g , соответствующих максимумам на ВАХ контакта зонда к поверхности КТ, приведенной на рис. 11. ВАХ измерялась в точке, соответствующей вершине КТ.

Наблюдаемое увеличение тока I в местах, соответствующих контакту зонда с поверхностью КТ InAs/GaAs, могло быть связано с резонансным туннелированием электронов из АСМ-зонда в подложку через размерно-квантованные электронные состояния в КТ [33, 34]. Систему «АСМ-зонд – КТ – подложка» можно рассматривать как резонансно-туннельный диод, в котором металлическое покрытие АСМ-зонда играет роль эмиттера, буферный слой n⁺-GaAs – роль коллектора, а потенциальные барьеры образованы соответственно пленкой окисла на поверхности КТ и частью области пространственного заряда контакта зонд–образец, находящейся между буферным слоем и КТ (рис. 12).

Полученные токовые изображения $I(x, y)$, показанные на рис. 10,б-з, отражают пространственное распределение ЛПС в плоскости поверхности образца (x, y) [33, 34]:

$$\rho(x, y, E) \propto \sum_{n_1 n_2 n_3=0}^{N_1 N_2 N_3} |\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y)|, \quad (29)$$

где $\Psi_{n_1 n_2 n_3}$ – огибающие волновых функций размерно квантованных электронных состояний в КТ $|n_1 n_2 n_3\rangle$ (волновые функции $\Psi_{n_1 n_2 n_3}$ считаются вырожденными по спину).

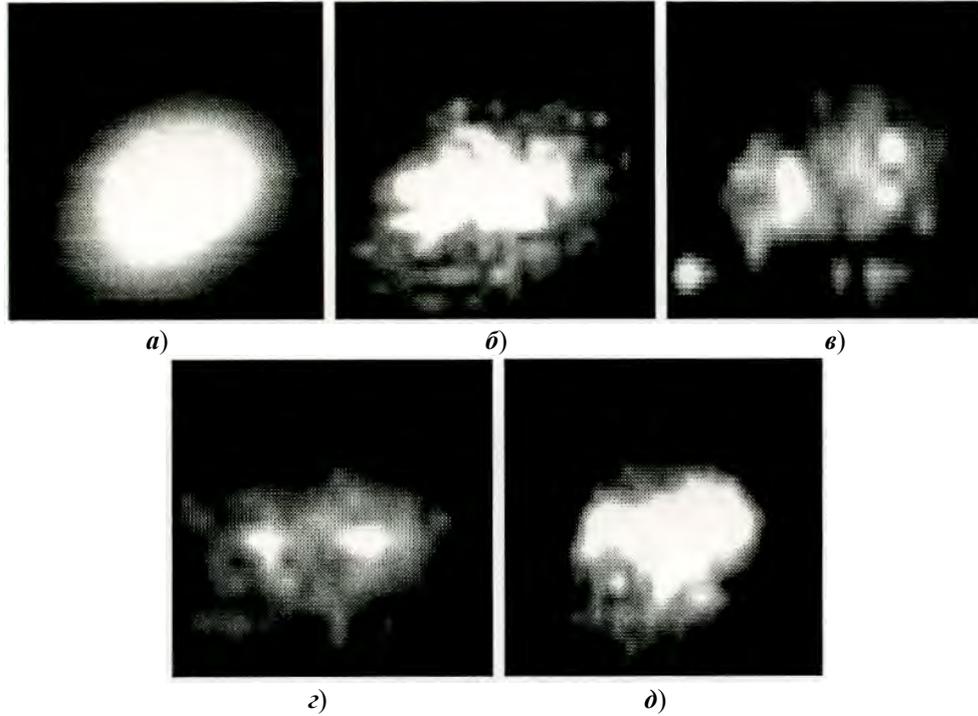


Рис. 10. АСМ-изображение (а) и токовые изображения (б–е) КТ InAs/GaAs. V_g В: б – 2,3; в – 2,6; г – 3,1; д – 3,7. Размер кадра $90 \times 90 \text{ нм}^2$ [33]

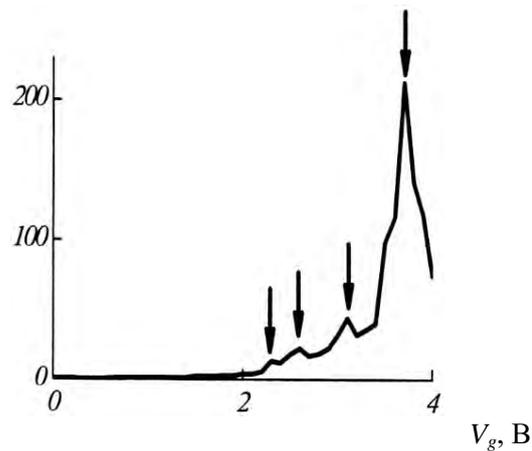


Рис. 11. ВАХ контакта АСМ-зонда к поверхности КТ в точке, соответствующей вершине КТ (рис. 10,а) [33]

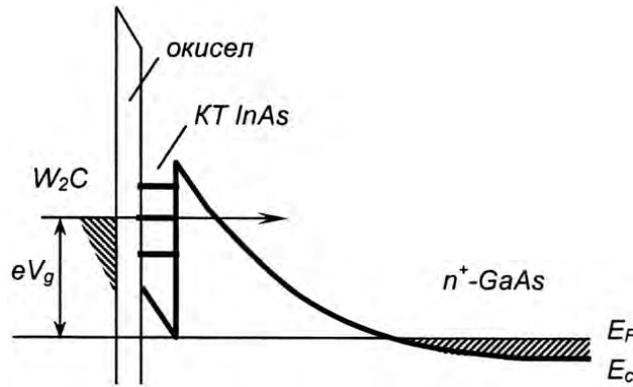


Рис. 12. Зонная диаграмма металлизированного АСМ-зонда с поверхностью КТ InAs/ n^+ -GaAs [34]

Суммирование в (29) ведется по состояниям, энергия которых $E_{n_1 n_2 n_3} < E_F + eV_g$, т.е. лежащим ниже уровня Ферми в материале зонда (рис. 12). Токовое изображение на рис. 10,б имеет округлую форму, соответствующую симметрии основного электронного состояния в пирамидальных КТ InAs/GaAs (001) [33, 34]. Токовые изображения на рис. 10,в,г имеют два выраженных максимума и могут быть сопоставлены с возбужденными состояниями в КТ, которые имеют p -симметрию [33]. Токовое изображение на рис. 10,д имеет более сложную структуру. Асимметрия волновых функций основного и возбужденного состояний в КТ, имеющих форму четырехгранной пирамиды, ограненной плоскостями (101), в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ объясняется в [33] влиянием пьезополя, которое понижает симметрию квантового потенциала в КТ с C_{4v} до C_{2v} . В исследованной структуре КТ были вытянуты в направлении $\langle 110 \rangle$ (см. рис. 9,б и 10,а), перпендикулярном направлению разориентации подложки. Подобная асимметрия КТ в первую очередь обуславливает пространственное распределение ЛПС $\rho(x, y)$ в КТ. Также можно отметить, что огранка КТ незаметна, что, по-видимому, обусловлено эффектом конволюции вследствие конечного радиуса закругления острия АСМ-зонда [33].

На туннельных спектрах КТ (см. рис. 11) были обнаружены пики, связанные с туннелированием электронов из заполненных электронных состояний под уровнем Ферми в материале покрытия АСМ-зонда W_2C на размерно-квантованные уровни в КТ. При интерпретации туннельных спектров КТ следует учитывать, что эксперименты проводились при комнатной температуре, следовательно, в данных условиях возможны процессы диссипативного туннелирования электронов с поглощением или испусканием фононов. Ранее при интерпретации туннельных спектров КТ InAs/GaAs(001) данный фактор не учитывался [33].

Качественное сравнение теоретической кривой вероятности 1D-диссипативного туннелирования (с учетом влияния одной локальной фононной моды в полупроводниковой матрице) и экспериментальной ВАХ для КТ InAs/GaAs(001) представлено на рис. 13, где видно, что из серии неэквидистантных пиков на экспериментальной ВАХ с теоретическими качественно

совпадают только два, но один из них в рассматриваемой модели оказался неустойчивым. Данный результат указывает на необходимость уточнения теоретической модели для адекватного описания экспериментальных данных по туннельной спектроскопии КТ. В то же время известно, что в GaAs существуют два вида оптических фононов: поперечные (TO) с энергией $\hbar\Omega \approx 34$ МэВ и продольные (LO) с $\hbar\Omega \approx 38$ МэВ. Данное обстоятельство обуславливает целесообразность рассмотрения двух локальных фононных мод окружающей матрицы в режиме слабой диссипации.

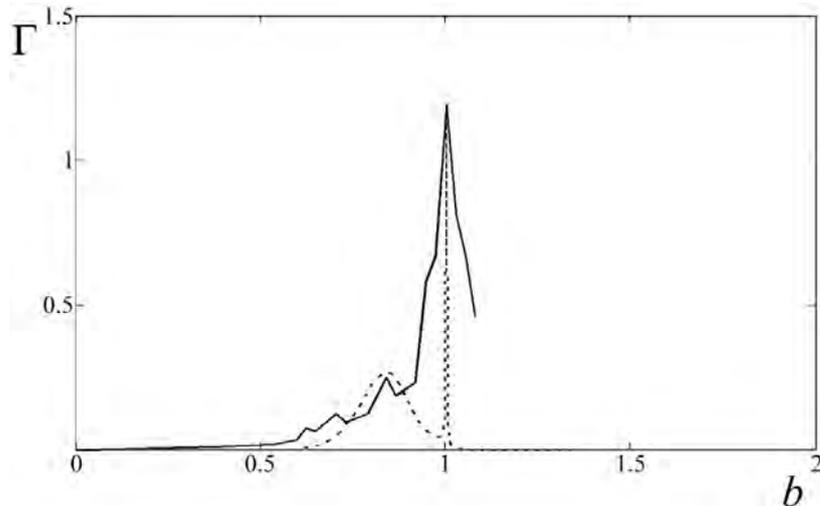


Рис. 13. Сравнение теоретических кривых (пунктирные линии) в модели 1D-диссипативного туннелирования для $\Gamma = B \exp(-S)$ с учетом влияния одной локальной моды среды-термостата с экспериментальными кривыми ВАХ для полупроводниковых квантовых точек из InAs/GaAs (сплошные линии)

Качественное сравнение модельной кривой вероятности 1D-диссипативного туннелирования ($\Gamma = B \exp(-S)$ с учетом влияния двух локальных фононных мод среды-термостата) и экспериментальной ВАХ для полупроводниковых КТ из InAs/GaAs представлено на рис. 14. При этом характерный неэквидистантный спектр пиков на экспериментальных ВАХ (для полупроводниковых квантовых точек из InAs/GaAs) и соответствующие пики на теоретической зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования с учетом влияния двух локальных фононных мод среды-термостата от напряженности приложенного электрического поля качественно совпали гораздо лучше, чем это наблюдалось в модели, учитывающей влияние только одной локальной фононной моды.

Теоретические расчеты показали, что в зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования от напряженности внешнего электрического поля при конечной температуре и фиксированных параметрах окружающей матрицы возможен как осциллирующий, так и неосциллирующий режим туннельного переноса (рис. 14, 15). Осциллирующий режим обусловлен обменом энергией туннелирующего электрона с двумя фононами, в результате чего могут образовываться состояния, различающиеся временем жизни, интерференция которых наряду с «подстройкой» под них стартового

энергетического уровня во внешнем электрическом поле может давать соответствующие осцилляции полевой зависимости вероятности туннелирования. С ростом константы взаимодействия с контактной средой (с увеличением ее «вязкости») эта интерференция оказывается подавленной и реализуется неосциллирующий режим диссипативного туннелирования.

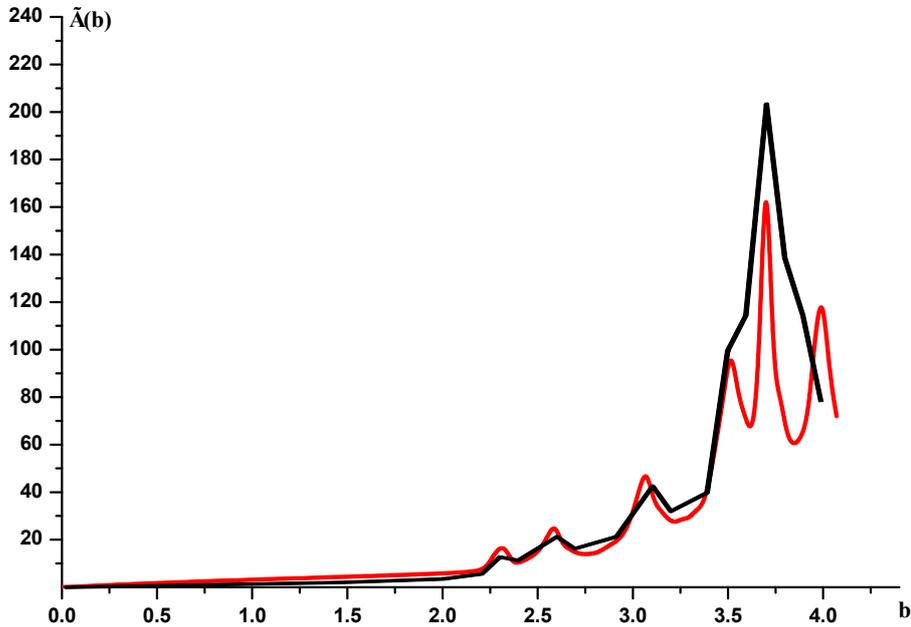


Рис. 14. Сравнение теоретических кривых (светлая линия) в 1D-модели диссипативного туннелирования для $\Gamma = B \exp(-S)$ с учетом влияния двух локальных мод среды-термостата с экспериментальными кривыми ВАХ для полупроводниковых квантовых точек из InAs/GaAs (темная линия)

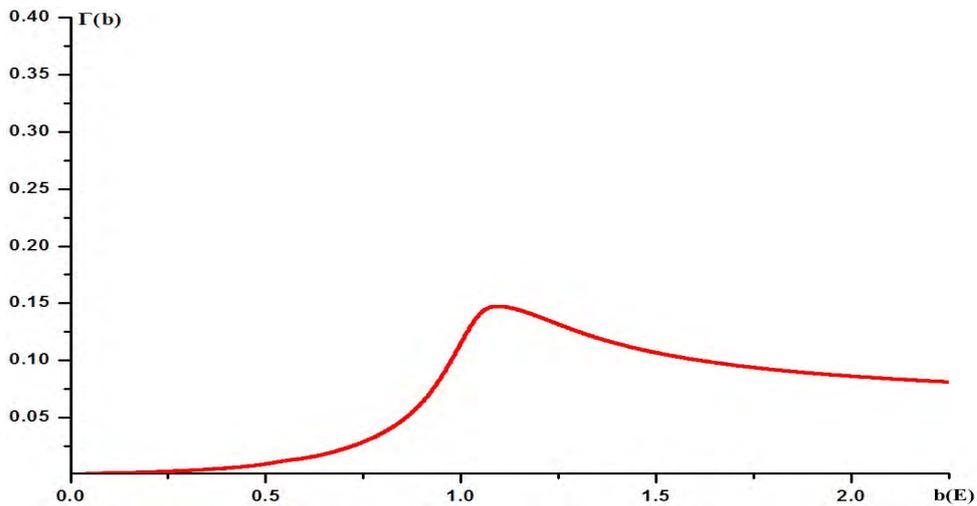


Рис. 15. Теоретическая кривая для вероятности 1D-диссипативного туннелирования в неосциллирующем режиме переноса

Таким образом, проведенный анализ продемонстрировал качественное соответствие расчетных кривых для вероятности туннелирования с некоторыми экспериментальными ВАХ в схемах исследования управляемых характеристик проводимости отдельных полупроводниковых квантовых точек InAs/GaAs. И хотя некоторые особенности на экспериментальных туннельных ВАХ интерпретировались ранее другими авторами [33] как эффекты консервативного (резонансного) туннелирования, качественное сравнение полученных теоретических полевых зависимостей с экспериментальными ВАХ позволило сделать вывод о реализации в отдельных случаях эффектов диссипативного туннелирования.

Заключение

Аналитически рассчитана вероятность 1D-диссипативного туннелирования в приближении разреженного газа пар «инстантон – антиинстантон» с точностью до предэкспоненциального фактора с учетом влияния двух локальных фононных мод для двухъямного модельного осцилляторного потенциала во внешнем электрическом поле при конечной температуре.

Показано, что характерный неэквидистантный спектр пиков на экспериментальных ВАХ (для полупроводниковых квантовых точек из InAs/GaAs) и соответствующие пики на теоретической зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования с учетом влияния двух локальных фононных мод среды-термостата от напряженности приложенного электрического поля качественно совпадают гораздо лучше, чем это наблюдалось в модели, учитывающей влияние только одной локальной фононной моды.

Теоретически выявлены осциллирующий и неосциллирующий режимы 1D-диссипативного туннельного переноса с учетом влияния двух локальных фононных мод, при этом качественное соответствие с экспериментальной туннельной ВАХ для полупроводниковых квантовых точек из InAs/GaAs наблюдалось только в случае осциллирующего режима одномерного диссипативного туннелирования.

Учет влияния двух локальных фононных мод приводит к реализации как осциллирующего, так и неосциллирующего режимов 1D-диссипативного туннелирования. Выявлено качественное соответствие полевой зависимости вероятности 1D-диссипативного туннелирования в случае осциллирующего режима туннельного переноса с экспериментальными туннельными ВАХ для InAs/GaAs КТ, обусловленное существенным вкладом механизма диссипативного туннелирования.

Библиографический список

1. **Алешкин, В. Я.** Примесные резонансные состояния в полупроводниках (обзор) / В. Я. Алешкин, Л. В. Гавриленко, М. А. Одноблюдов, И. Н. Ясиевич // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42, № 8. – С. 899–922.
2. Управляемое диссипативное туннелирование. Туннельный транспорт в низкоразмерных системах : монография, посвященная памяти академика РАН А. И. Ларкина / Э. Дж. Леггет, Ю. Н. Овчинников, В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, П. В. Кревчик и др. ; под редакцией Нобелевского лауреата Э. Дж. Леггета – Москва : Физматлит, 2012. – 495 с.
3. **Дахновский, Ю. И.** Низкотемпературные химические реакции как туннельные системы с диссипацией / Ю. И. Дахновский, А. А. Овчинников, М. Б. Семенов

- нов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1987. – Т. 92, № 3. – С. 955–967.
4. Two-dimensional tunnel correlations with dissipation/ A. K. Aringazin, Yu. I. Dahnovsky, V. D. Krevchik, M. B. Semenov, A. A. Ovchinnikov, K. Yamamoto // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 68. – P. 155426-1–155426-12.
 5. **Ивлев, Б. И.** Распад метастабильных состояний при наличии близких подбарьерных траекторий / Б. И. Ивлев, Ю. Н. Овчинников // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1987. – Т. 93, № 2 (8). – С. 668–679.
 6. **Жуковский, В. Ч.** Квантовые эффекты в мезоскопических системах Ч. I. Квантовое туннелирование с диссипацией. / В. Ч. Жуковский, В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, А. И. Тернов. – Москва : Изд-во физического ф-та МГУ, 2002. – 108 с.
 7. Введение в современную мезоскопию / А. К. Арынгазин, Ю. И. Дахновский, В. Ч. Жуковский, В. Д. Кревчик, А. А. Овчинников, М. Б. Семенов, А. И. Тернов. – Пенза : Изд-во ПГУ, 2003. – 570 с.
 8. **Golovach, V. N.** Transport through a double quantum dot in the sequential- and co- tunneling regimes / V. N. Golovach, Loss Daniel. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0308241>.
 9. **Alexandrov, A. S.** Bi-stable tunneling current through a molecular quantum dot / A. S. Alexandrov, A. M. Bratkovsky, R. S. Williams. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0204387>.
 10. **Benderskii, V. A.** Chemical Dynamics at Low Temperatures / V. A. Benderskii, D. E. Makarov, C. A. Wight. – New York : Willey-Interscience, 1994. – P. 385.
 11. **Qin, H.** Superposition of photon- and phonon- assisted tunneling in coupled quantum dots / H. Qin, A. W. Holleitner, K. Eberl, R. H. Blick. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0011155>.
 12. **Grodecka, A.** Phonon-assisted tunneling between singlet states in two-electron quantum dot molecules / A. Grodecka, P. Machnikowski, J. Forstner. – URL: [arXiv:0803.1734v2](https://arxiv.org/abs/0803.1734v2) [cond-mat.mes-hall]
 13. **Trocha, P.** Phonon-Assisted Electronic Transport through Double Quantum Dot System Coupled to Ferromagnetic Leads / P. Trocha, W. Rudzinski // *ACTA PHYSICA POLONICA A*. – 2013. – Vol. 124, № 5. – P. 843–845.
 14. **Braakman, F. R.** Photon- and phonon-assisted tunneling in the three-dimensional charge stability diagram of a triple quantum dot array / F. R. Braakman, P. Barthelemy, Ch. Reichl, W. Wegscheider, L. M. K. Vandersypen. – URL: [arXiv:1303.2533v1](https://arxiv.org/abs/1303.2533v1) [cond-mat.mes-hall]
 15. **Mielnik-Pyszcorski, A.** Phonon-assisted tunnelling of electrons in a quantum well-quantum dot injection structure / A. Mielnik-Pyszcorski, K. Gawarecki, P. Machnikowski. – URL: [arXiv:1405.5067v1](https://arxiv.org/abs/1405.5067v1) [cond-mat.mes-hall]
 16. **Jouault, B.** The theory of magneto – transport in quantum dots: 3D – 0D and 2D – 0D tunneling and selection rules for the angular momentum / B. Jouault, M. Voero, G. Faini, J. C. Inkson. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/9809071> (дата обращения: 30.05.2015).
 17. **Li-jun, Liu.** Resonant tunneling through a coupled double quantum well in the presence of electron-phonon interaction / Liu Li-jun, Yuan-tai Du, and Hong Zhou, Tsung-han Lin // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 54, № 3. – P. 1953–1958.
 18. **Venkatesan, A.** Dissipation due to tunneling two-level systems in gold nanomechanical resonators / A. Venkatesan. – URL: [arXiv:0912.1281v1](https://arxiv.org/abs/0912.1281v1) [cond-mat.mes-hall]
 19. **Bomze, Yu.** Resonant Tunneling in a Dissipative Environment / Yu. Bomze. – URL: [arXiv:1010.1527v1](https://arxiv.org/abs/1010.1527v1) [cond-mat.mes-hall]
 20. **Ferry, D. K.** Transport in Nanostructures / David K. Ferry, Stephen M. Goodnick, Jonathan Bird. – URL: <http://www.cambridge.org/9780521877480>

21. **Boese, D.** Mesoscopic effects in tunneling between parallel quantum wires / D. Boese, M. Governale, A. Rosch, U. Zuelicke // *Phys. Rev. B.* – 2001. – Vol. 64. – P. 085315. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0103372> (дата обращения: 29.05.2015).
22. **Tserkovnyak, Y.** Finite – size effects in tunneling between parallel quantum wires / Y. Tserkovnyak, B. I. Halperin, O. M. Auslaender, A. Yacoby // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 89. – P. 136805. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0204387> (дата обращения: 29.05.2015).
23. **Foa Torres, L. E. F.** Coherent versus sequential electron tunneling in quantum dots / L. E. F. Foa Torres, C. H. Lewenkopf, H. M. Pastawski. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0306148> (дата обращения: 29.05.2015).
24. **Vorrath, T.** Dicke Effect in the Tunnel Current through two Double Quantum Dots / T. Vorrath, T. Brandes // *Phys. Rev. B.* – 2003. – Vol. 68. – P. 035309. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0305439>.
25. Isotope effect on the lifetime of the $2p\ 0$ state in phosphorus-doped silicon / H.-W. Hübers, S. G. Pavlov, S. A. Lynch et al. // *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 88. – P. 035201.
26. Terahertz gain on shallow donor transitions in silicon / R. Kh. Zhukavin, V. N. Shastin, S. G. Pavlov et al. // *J. Appl. Phys.* – 2007. – Vol. 102. – P. 093104.
27. **Hübers, H.-W.** Terahertz silicon lasers based on intracenter impurity transitions / H.-W. Hübers, S. G. Pavlov, R. Kh. Zhukavin, V. N. Shastin // *Terahertz Science and Technology.* – 2014. – Vol. 7, № 4. – P. 172–180
28. Terahertz semiconductor heterostructure laser / R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram et al. // *Nature.* – 2002. – Vol. 417. – P. 156–159.
29. **Tonouchi, M.** Cutting-edge THz technology / M. Tonouchi // *Nature Photonics.* – 2007. – Vol. 1, № 2. – P. 97–105.
30. Излучение и фотопроводимость в квантовых ямах GaAs/AlGaAs n-типа в терагерцовой области спектра: роль резонансных состояний / Д. А. Фирсов, В. А. Шальгин, В. Ю. Паневин, Г. А. Мелентьев, А. Н. Софронов и др. // *Физика и техника полупроводников.* – 2010 – Т. 44, № 11. – С. 1443–1446.
31. Терагерцовое излучение, связанное с примесными переходами электронов в квантовых ямах при оптической и электрической накачке / Д. А. Фирсов, Л. Е. Воробьев, В. Ю. Паневин, А. Н. Софронов, Р. М. Балагула, И. С. Махов, Д. В. Козлов, А. П. Васильев // *Физика и техника полупроводников.* – 2015. – Т. 49, № 1. – С. 30–34.
32. **Овчинников, Ю. Н.** Проводимость гранулированных металлических пленок / Ю. Н. Овчинников // *Журнал экспериментальной и теоретической физики* – 2007. – Т. 131, № 2. – С. 286–290.
33. Резонансное туннелирование электронов через нанокластеры, сформированные в стабилизированном диоксиде циркония методом ионной имплантации / Д. А. Антонов, Г. А. Вугальтер, О. Н. Горшков, А. П. Касаткин, Д. О. Филатов, М. Е. Шенина // *Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского.* Серия: Физика твердого тела. – 2007. – № 3. – С. 55–60.
34. Резонансное туннелирование с участием фононов и его фононный контроль / В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, Д. О. Филатов, П. В. Кревчик и др. // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2016. – Т. 104, № 6. – С. 406–412.
35. **Gorokhov, D. A.** Ultrasharp crossover from quantum to classical decay in a quantum dot flanked by a double – barrier tunneling structure / D. A. Gorokhov, da Silveira Rava A. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308023> (дата обращения: 29.05.2015).
36. **Thielmann, A.** Shot noise in tunneling transport through molecules and quantum dots / A. Thielmann, M. H. Hettler, J. König, G. Schön // *Phys. Rev. B.* – 2003. –

- Vol. 68. – P. 115105. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0302621> (дата обращения: 29.05.2015).
37. **Ханин, Ю. Н.** Резонансное Г-Х-туннелирование в однобарьерных гетероструктурах GaAs/AlAs/GaAs / Ю. Н. Ханин, Е. Е. Вдовин, Ю. В. Дубровский // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38, № 4. – С. 436–447.
 38. **Бурдов, В. А.** Динамический контроль электронных состояний в двойной квантовой точке в условиях слабой диссипации / В. А. Бурдов, Д. С. Соленов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2004. – Т. 125, № 3. – С. 684–692.
 39. **Caldeira, A. O.** Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems / A. O. Caldeira, A. J. Leggett // Phys. Rev. Lett. – 1981. – Vol. 46, № 4. – P. 211–214.
 40. **Ларкин, А. И.** Квантовое туннелирование с диссипацией / А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1983. – Т. 37, № 7. – С. 322–325.
 41. **Тернов, И. М.** Квантовая механика и макроскопические эффекты / И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский, А. В. Борисов. – Москва : Изд-во МГУ, 1993. – 198 с.
 42. **Ландау, Л. Д.** Теоретическая физика : учеб. пособие : в 10 т. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Наука, 1989.
 43. **Имри, Й.** Введение в мезоскопическую физику / Й. Имри. – Москва : Физматлит, 2002. – 304 с.
 44. **Caldeira, A. O.** Quantum tunnelling in a dissipative system / A. O. Caldeira, A. J. Leggett // Ann. of Phys. – 1983. – Vol. 149, № 2. – P. 374–456.
 45. **York, J. T.** Control of electron current by double-barrier structures using pulsed laser fields / J. T. York, R. D. Coalson, Yu. Dahnovsky // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 235321-1–235321-8.
 46. **Kiselev, M. N.** Resonance Kondo tunneling through a double quantum dot at finite bias / M. N. Kiselev, K. Kikoin, L. W. Molenkamp // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 155323. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308619> (дата обращения: 30.05.2015).
 47. **Sprekeler, H.** Coulomb effects in tunneling through a quantum dot stack / H. Sprekeler, G. Kiesslich, A. Wacker, E. Schoell. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0309696> (дата обращения: 30.05.2015).
 48. **Tavares Marcos, R. S.** Tunneling effects on impurity spectral function in coupled asymmetric quantum wires / R. S. Tavares Marcos, G. Q. Hai, G. E. Marques – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308191> (дата обращения: 30.05.2015).
 49. Voltage – controlled spin selection in a magnetic resonant tunneling diode / A. Slobodskyy, C. Gould, T. Slobodskyy, C. R. Becker, G. Schmidt, L. W. Molenkamp. – URL: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0305124> (дата обращения: 29.05.2015).
 50. Real-time detection of single-electron tunneling using a quantum point contact / L. M. K. Vandersypen, J. M. Elzerman, R. N. Schouten, L. H. Willems van Beveren, R. Hanson, L. P. Kouwenhoven // Applied Physics Letters. – 2004. – Vol. 85, № 19. – P. 4394–4396.
 51. Observation of photon – assisted tunneling through a quantum dot / L. P. Kouwenhoven, S. Jauhar, J. Orenstein, P. L. McEuen, Y. Nagamune, J. Motohisa, H. Sakaki // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 73, № 25. – P. 3443–3446.
 52. Shell-tunneling spectroscopy of the single – particle energy levels of insulating quantum dots / E. P. A. M. Bakkers, Z. Hens, A. Zunger, A. Franceschetti, L. P. Kouwenhoven, L. Gurevich, D. Vanmaekelbergh // Nano Letters. – 2001. – Vol. 1, № 10. – P. 551–556.

53. Межподзонное поглощение света в селективно легированных двойных туннельно связанных квантовых ямах / В. Л. Зерова, В. В. Капаев, Л. Е. Воробьев, Д. А. Фирсов, S. Schmidt, Е. А. Зибик, А. Seilmeier, E. Towe // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38, № 12. – С. 1455–1462.
54. **Хабаров, Ю. В.** Исследования физических явлений в полупроводниковых наноструктурах с использованием планарно-неоднородных слоев. Фотолуминесценция туннельно-связанных квантовых ям / Ю. В. Хабаров, В. В. Капаев, В. А. Петров // Физика и техника полупроводников. – 2004. – Т. 38, № 4. – С. 455–464.
55. Межподзонное поглощение света в гетероструктурах с двойными туннельно-связанными квантовыми ямами GaAs/AlGaAs / Л. Е. Воробьев, В. Ю. Паневин, Н. К. Федосов, Д. А. Фирсов, В. А. Шалыгин, В. В. Капаев, S. Hanna, S. Schmidt, E. A. Zibik, A. Seilmeier // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, № 1. – С. 49–52.
56. **Ханин, Ю. Н.** Нулевые аномалии транспортных характеристик однобарьерных гетероструктур GaAs/AlAs/GaAs как проявление резонансного туннелирования между параллельными двумерными электронными газами и подавление резонансного туннелирования в магнитном поле как проявление кулоновской щели в туннельной плотности состояний / Ю. Н. Ханин, Ю. В. Дубровский, Е. Е. Вдовин // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37, № 6. – С. 717–723.
57. Influence of energy level alignment on tunneling between coupled quantum dots / D. Dixon, L. P. Kouwenhoven, P. L. McEuen, Y. Nagamune, J. Motohisa, H. Sakaki // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 53, № 19. – P. 12625–12628.
58. Time-resolved tunneling of single electrons between Landau levels in a quantum dot / N. C. Van der Vaart, van Steveninck M. P. de Ruyter, L. P. Kouwenhoven, A. T. Johnson, Yu. V. Nazarov, C. J. P. M. Harmans, C. T. Foxon // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 73, № 2. – P. 320–323.
59. **Nitzan, A.** Electron transmission through molecules and molecular interfaces / A. Nitzan // Annual Reviews of Physical Chemistry. – 2001. – Vol. 52. – P. 681–750.
60. **Benjamin, I.** Asymmetric tunneling through ordered molecular layers / I. Benjamin, D. Evans, A. Nitzan // Journal of Chemical Physics. – 1997. – Vol. 106. – P. 1291–1293.
61. **Ireneusz, W.** Tunnel magnetoresistance of quantum dots coupled to ferromagnetic leads in the sequential and cotunneling regimes / W. Ireneusz, König Jürgen, Martinek Jan, Barnas Józef, Schön Gerd // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72. – P. 115334. – DOI 10.1103/PhysRevB.72.115334,
62. **Könemann, J.** Tunneling resonances in quantum dots: Coulomb interaction modifies the width / J. Könemann, B. Kubala, J. König, R. J. Haug. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0506505>
63. **Kwapinski, T.** Photon-assisted electron transport through a three-terminal quantum dot system with nonresonant tunneling channels / T. Kwapinski, R. Taranko, E. Taranko. – URL : <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501634>
64. **Thielmann, A.** Co-tunneling current and shot noise in quantum dots / A. Thielmann, M. H. Hettler, J. König, G. Schön. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501534>
65. **Huettel, A. K.** Control of the tunnel splitting in a one-electron double quantum dot / A. K. Huettel. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501012>
66. Single-shot readout of electron spin states in a quantum dot using spin-dependent tunnel rates / R. Hanson, L. H. Willemsvan Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F. H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, L. M. K. Vandersypen. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0412768>

67. **Rudzinski, W.** Spin effects in electron tunnelling through a quantum dot coupled to non-collinearly polarized ferromagnetic leads / W. Rudzinski, J. Barnas, R. Swirkowicz, M. Wilczynski. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0409386>
68. Spin-dependent Andreev reflection tunneling through a quantum dot with intradot spin-flip scattering / Xiufeng Cao, Yaoming Shi, Xiaolong Song, Shiping Zhou, Hao Chen. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0409180>
69. **Rontani, M.** Imaging quasi-particle wavefunctions in quantum dots via tunneling spectroscopy / M. Rontani, E. Molinari // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 71. – P. 233106. – URL: [g http://www.arxiv.org/cond-mat/0408454](http://www.arxiv.org/cond-mat/0408454).
70. Determination of the tunnel rates through a few-electron quantum dot / R. Hanson, I. T. Vink, D. P. DiVincenzo, L. M. K. Vandersypen, J. M. Elzerman, L. H. Willems van Beveren, L. P. Kouwenhoven. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407793>
71. Shot noise of inelastic tunneling through quantum dot systems / Bing Dong, H. L. Cui, X. L. Lei, J. Norman, M. Horing // *Phys. Rev. B.* – 2005. – Vol. 71. – P. 45331. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407655>
72. Coulomb and Spin blockade of two few-electrons quantum dots in series in the co-tunneling regime / M. Ciorga, M. Pioro-Ladrière, P. Zawadzki, J. Lapointe, Z. Wasilewski, A. S. Sachrajda. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407071>
73. **Djuric, I.** Shot noise in resonant tunneling through an interacting quantum dot with intradot spin-flip scattering / I. Djuric, Bing Dong, H. L. Cui // *IEEE transactions on Nanotechnology* 4. – 2005. – Vol. 71. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0406679>
74. **Ryndyk, D. A.** Inelastic resonant tunneling through single molecules and quantum dots: spectrum modification due to nonequilibrium effects / D. A. Ryndyk, J. Keller. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0406181>
75. Single-dot spectroscopy via elastic single-electron tunneling through a pair of coupled quantum dots / T. Ota, K. Ono, M. Stopa, T. Hatano, S. Tarucha, H.Z. Song, Y. Nakata, T. Miyazawa, T. Ohshima, N. Yokoyama // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93. – P. 066801. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0405545>
76. Time-dependent resonant tunneling for a parallel-coupled double quantum dots / Bing Dong, I. Djuric, H. L. Cui, X. L. Lei // *J. Phys.: Cond. Matter* 16. – 2004. – P. 4303. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403741>.
77. **Villas-Boas, J. M.** Selective coherent destruction of tunneling in a quantum-dot array / J. M. Villas-Boas, E. Sergio Ulloa, Studart Nelson // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 70. – P. 041302 (R). – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403447>
78. **Villas-Boas, J. M.** Coherent control of tunneling in a quantum dot molecule / J. M. Villas-Boas, A. O. Govorov, E. Sergio Ulloa // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 125342. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403445>
79. Shot noise in tunneling through a single quantum dot / A. Nauen, F. Hohls, N. Maire, K. Pierz, R. J. Haug. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403108>
80. **Bing Dong.** Photon-Phonon-assisted tunneling through a single-molecular quantum dot / Bing Dong, H. L. Cui, X. L. Lei // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 205315. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0402684>
81. **Sprekeler, H.** Coulomb effects in tunneling through a quantum dot stack / H. Sprekeler, G. Kiesslich, A. Wacker, E. Schoell // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 125328. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0309696>
82. **Sprekeler, H.** Positive Correlations in Tunneling through coupled Quantum Dots / H. Sprekeler, G. Kiesslich, A. Wacker, E. Schoell // *Semicond. Sci. Technol.* – 2004. – Vol. 19. – P. S37. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0309027>
83. **Kiselev, M. N.** Resonance Kondo Tunneling through a Double Quantum Dot at Finite Bias / M. N. Kiselev, K. Kikoin, L.W. Molenkamp // *Phys. Rev. B.* – 2003. – P. 155323. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0308619>

84. **Taranko, R.** Influence of microwave fields on the electron transport through a quantum dot in the presence of a direct tunneling between leads / R. Taranko, T. Kwapinski, E. Taranko. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0304121>
85. **Björn, Kubala.** Aharonov-Bohm interferometry with quantum dots: scattering approach versus tunneling picture / Björn Kubala, Jürgen König // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 67. – P. 205303. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0212536>
86. **Kuzmenko, T.** Two-channel Kondo tunneling in triple quantum dot / T. Kuzmenko, K. Kikoin, Y. Avishai // Europhys. Lett. – 2003. – Vol. 64. – P. 218. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0211281>
87. Correlated tunneling in intramolecular carbon nanotube quantum dots / M. Thorwart, M. Grifoni, G. Cuniberti, H. W. Ch. Postma, C. Dekker // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P. 196402. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0210511>
88. Tuning the onset voltage of resonant tunneling through InAs quantum dots by growth parameters / I. Hapke-Wurst, U. Zeitler, U. F. Keyser, K. Pierz, Z. Ma, R. J. Haug. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0210375>
89. Shot Noise in Tunneling through a Quantum Dot Array / G. Kiesslich, A. Wacker, E. Schoell, A. Nauen, F. Hohls, R. J. Haug // Phys. Status Solidi (C). – 2003. – P. 1293. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0209523>
90. **David, M.** Spontaneous spin polarized tunneling current through a quantum dot array / M. David, T. Kuo, Y. C. Chang. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0209499>
91. **Osamu, Sakai.** Study on the Kondo effect in the tunneling phenomena through a quantum dot / Osamu Sakai, Wataru Izumida. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0208505>
92. **Aldea, A.** Tunneling properties of quantum dot arrays in strong magnetic field / A. Aldea, V. Moldoveanu, B. Tanatar. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0207632>
93. **Rojt, P.** Luttinger liquid behavior in tunneling through a quantum dot at zero magnetic field / P. Rojt, Y. Meir, A. Auerbach. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0207113>
94. **Kiselev, M. N.** Electric Field Induced Kondo Tunneling Through Double Quantum Dot / M. N. Kiselev, K. Kikoin, L. W. Molenkamp. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206503>
95. **Cardamone, D. M.** Coherence and Decoherence in Tunneling between Quantum Dots / D. M. Cardamone, C. A. Stafford, B. R. Barrett // Phys. Stat. Sol. (B). – 2002. – Vol. 230. – P. 419. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206294>
96. **Kuzmenko, T.** Dynamical symmetries in Kondo tunneling through complex quantum dots / T. Kuzmenko, K. Kikoin, Y. Avishai // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P. 156602. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206050>
97. **Chen, Yueh-Nan.** Resonant tunneling of quantum dot in a microcavity / Chen Yueh-Nan, Chuu Der-San // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 165316. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0204188>
98. **Yi-feng, Yang.** Submergence of the Sidebands in the Photon-assisted Tunneling through a Quantum Dot Weakly Coupled to Luttinger Liquid Leads / Yi-feng, Yang, Tsung-han Lin. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0203244>
99. **Ping Zhang.** Magnetoresistance of a mesoscopic tunneling quantum dot / Ping Zhang, Qi-Kun Xue, X. C. Xie. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0201465>
100. **Bing Dong.** Kondo effect and anti-ferromagnetic correlation in transport through tunneling-coupled double quantum dots / Bing Dong, X. L. Lei. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0112500>
101. **Renzoni, F.** Charge transport through quantum dots via time-varying tunnel couplings / F. Renzoni, T. Brandes. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0109335>

102. **Qing-feng Sun.** Double quantum dots: interdot interactions, co-tunneling, and Kondo resonances without spin / Qing-feng Sun, Hong Guo // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 66. – P. 155308. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0109145>
103. **Avishai, Y.** Kondo tunneling through a biased quantum dot / Y. Avishai, K. Kikoin – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0105206>
104. **Qing-feng Sun.** Excess Kondo resonance in a quantum dot device with normal and superconducting leads: the physics of Andreev-normal co-tunneling / Qing-feng Sun, Hong Guo, Tsung-han Lin // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87. – P. 176601. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0105120>
105. **Wegewijs, M. R.** Inelastic co-tunneling through an excited state of a quantum dot / M. R. Wegewijs, Yu. V. Nazarov. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103579>
106. **Shi, J.** Dephasing Effect in Photon-Assisted Resonant Tunneling through Quantum Dots / J. Shi, Zh. Ma, X. C. Xie. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103537>
107. **Katz, D.** Control of charging in resonant tunneling through InAs nanocrystal quantum dots / D. Katz, O. Millo, Shi-Hai Kan, U. Banin. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103110>
108. Resonant Tunnelling through InAs Quantum Dots in Tilted Magnetic Fields: Experimental Determination of the g-factor Anisotropy / J. M. Meyer, I. Hapke-Wurst, U. Zeitler, R. J. Haug, K. Pierz // *Physica Status Solidi (B).* – 2001. – Vol. 224, № 3. – P. 685. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0009348>
109. **Fujisawa, T.** Inelastic tunneling in a double quantum dot coupled to a bosonic environment / T. Fujisawa, Wilfred G. van der Wiel, Leo P. Kouwenhoven // *Physica E.* – 2000. – Vol. 7. – P. 413. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0007199>
110. Magnetic-field-induced singularities in spin dependent tunneling through InAs quantum dots / I. Hapke-Wurst, U. Zeitler, H. Frahm, A. G. M. Jansen, R. J. Haug, K. Pierz // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol. 62, № 19. – P. 12621. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0003400>
111. **Burkard, G.** Spin interactions and switching in vertically tunnel-coupled quantum dots / G. Burkard, G. Seelig, D. Loss // *Phys. Rev. B.* – 2000. – Vol. 62. – P. 2581. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9910105>
112. **Rodrigues, E. S.** Non Linear Effects in Resonant Tunneling Through a Quantum Dot / E. S. Rodrigues, E. V. Anda, P. Orellana. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9903384>
113. **Partoens, B.** Interplay between tunneling and exchange effects in the two electron double quantum dot molecule / B. Partoens, A. Matulis, F. M. Peeters. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9902240>
114. **Kaminski, A.** Mesoscopic fluctuations of tunneling through double quantum dots / A. Kaminski, L. I. Glazman. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9810237>
115. **Jouault, B.** The theory of magneto-transport in quantum dots: 3D-0D and 2D-0D tunnelling and selection rules for the angular momentum / B. Jouault, M. Boero, G. Faini, J. C. Inkson. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9809071>
116. **Kicheon, K.** Effect of Quantum Confinement on Electron Tunneling through a Quantum Dot / K. Kicheon, B. I. Min. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9703128>
117. **Aleiner, I. L.** Dephasing and the Orthogonality Catastrophe in Tunneling through a Quantum Dot: the «Which Path?» Interferometer / I. L. Aleiner, Ned S. Wingreen, Meir Yigal. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9702001>
118. **Matveev, K. A.** Coulomb Blockade of Tunneling Through a Double Quantum Dot / K. A. Matveev, L. I. Glazman, H. U. Baranger. – URL: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9512082>
119. Резонансное туннелирование дырок в двухбарьерных структурах с квантовыми точками InAs в центре квантовой ямы GaAs / Е. Н. Морозова, О. Н. Макаров-

- ский, В. А. Волков, Ю. В. Дубровский, Л. Turyanska, Е. Е. Вдовин, А. Patané, L. Eaves, M. Henini // *Физика и техника полупроводников*. – 2005. – Т. 39, № 5. – С. 573–576.
120. **Галкин, Н. Г.** Внутризонное поглощение электромагнитного излучения квантовыми наноструктурами с параболическим потенциалом конфайнмента / Н. Г. Галкин, В. А. Маргулис, А. В. Шорохов // *Физика твердого тела*. – 2001. – Т. 43, № 3. – С. 511–519.
121. **Гейлер, В. А.** Проводимость квантовой проволоки в продольном магнитном поле / В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, Л. И. Филина // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 1998. – Т. 113, № 4. – С. 1377–1396.
122. **Ullien, D.** The effect of the number of parallel DNA molecules on electric charge – transport through “standing DNA” / D. Ullien, H. Cohen, D. Porath // *Nanotechnology*. – 2007. – Vol. 18, № 42. – P. 424015(1–4).
123. **Yanagi, H.** Nanofabrication of gold particles in glass films by AFM-assisted local reduction / H. Yanagi, T. Ohno // *Langmuir*. – 1999. – Vol. 15, № 14. – P. 4773–4776.
124. **Buchkov, A. M.** 0.4 and 0.7 conductance anomalies in quantum point contacts / A. M. Buchkov, T. M. Stace // *Nanotechnology*. – 2007. – Vol. 18. – P. 185403-1–185403-5.
125. **Манцевич, В. Н.** «Неравновесные эффекты и нестационарный электронный транспорт в полупроводниковых наноструктурах с межчастичным взаимодействием : дис. ... д-ра физ.-мат. наук : 01.04.10 / Манцевич В. Н. – Москва : Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 2014. – 337 с.
126. Влияние внешнего электрического поля на оптические свойства квантовой молекулы с резонансными состояниями / В. Ч. Жуковский, В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, М. Б. Семенов, Р. В. Зайцев // *Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия*. – 2013. – № 1. – С. 52–59.
127. Влияние внешнего электрического поля на оптические свойства квантовой молекулы с резонансным u - состоянием D_2^- -центра / В. Ч. Жуковский, В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, М. Б. Семенов, Р. В. Зайцев // *Вестник Московского университета. Серия 3: Физика. Астрономия*. – 2013. – № 5. – С. 58–64.
128. **Галицкий, В. М.** Задачи по квантовой механике / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. – 2-е изд. – Москва, 1992. – 880 с.
129. **Бейтмен, Г.** Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. – Москва, 1973. – Т. 1, 2.

References

1. Aleshkin V. Ya., Gavrilenko L. V., Odnoblyudov M. A., Yassievich I. N. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2008, vol. 42, no. 8, pp. 899–922. [In Russian]
2. Legget E. Dzh., Ovchinnikov Yu. N., Krevchik V. D., Semenov M. B., Krevchik P. V. et al. *Upravlyaemoe dissipativnoe tunnelirovanie. Tunnel'nyy transport v nizko-razmernykh sistemakh: monografiya, posvyashchennaya pamyati akademika RAN A. I. Larkina* [Controlled dissipative tunneling. Tunnel transport in low-dimensional systems: monograph commemorating A. L. Larkin, academician of the Russian Academy of Sciences]. Moscow: Fizmatlit, 2012, 495 p. [In Russian]
3. Dakhnovskiy Yu. I., Ovchinnikov A. A., Semenov M. B. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 1987, vol. 92, no. 3, pp. 955–967. [In Russian]
4. Aringazin A. K., Dahnovsky Yu. I., Krevchik V. D., Semenov M. B., Ovchinnikov A. A., Yamamoto K. *Physical Review B*. 2003, vol. 68, pp. 155426-1–155426-12.

5. Ivlev B. I., Ovchinnikov Yu. N. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 1987, vol. 93, no. 2 (8), pp. 668–679. [In Russian]
6. Zhukovskiy V. Ch., Krevchik V. D., Semenov M. B., Ternov A. I. *Kvantovye efekty v mezoskopicheskikh sistemakh Ch. I. Kvantovoe tunnelirovanie s dissipatsiyey* [Quantum effects in mesoscopic systems. Part 1. Quantum tunneling with dissipation]. Moscow: Izd-vo fizicheskogo f-ta MGU, 2002, 108 p. [In Russian]
7. Aryngazin A. K., Dakhnovskiy Yu. I., Zhukovskiy V. Ch., Krevchik V. D., Ovchinnikov A. A., Semenov M. B., Ternov A. I. *Vvedenie v sovremennuyu mezoskopiku* [Introduction to modern mesoscopy]. Penza: Izd-vo PGU, 2003, 570 p. [In Russian]
8. Golovach V. N., Loss Daniel *Transport through a double quantum dot in the sequential- and co-tunneling regimes*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0308241>.
9. Alexandrov A. S., Bratkovsky A. M., Williams R. S. *Bi-stable tunneling current through a molecular quantum dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0204387>.
10. Benderskii V. A., Makarov D. E., Wight C. A. *Chemical Dynamics at Low Temperatures*. New York: Willey-Interscience, 1994, p. 385.
11. Qin H., Holleitner A. W., Eberl K., Blick R. H. *Superposition of photon- and phonon-assisted tunneling in coupled quantum dots*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0011155>.
12. Grodecka A., Machnikowski P., Forstner J. *Phonon-assisted tunneling between singlet states in two-electron quantum dot molecules*. Available at: [arXiv:0803.1734v2](https://arxiv.org/abs/0803.1734v2) [cond-mat.mes-hall]
13. Trocha P., Rudzinski W. *ACTA PHYSICA POLONICA A*. 2013, vol. 124, no. 5, pp. 843–845.
14. Braakman F. R., Barthelemy P., Reichl Ch., Wegscheider W., Vandersypen L. M. K. *Photon- and phonon-assisted tunneling in the three-dimensional charge stability diagram of a triple quantum dot array*. Available at: [arXiv:1303.2533v1](https://arxiv.org/abs/1303.2533v1) [cond-mat.mes-hall]
15. Mielnik-Pyszczorski A., Gawarecki K., Machnikowski P. *Phonon-assisted tunnelling of electrons in a quantum well-quantum dot injection structure*. Available at: [arXiv:1405.5067v1](https://arxiv.org/abs/1405.5067v1) [cond-mat.mes-hall]
16. Jouault B., Boero M., Faini G., Inkson J. C. *The theory of magneto – transport in quantum dots: 3D – 0D and 2D – 0D tunneling and selection rules for the angular momentum*. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/9809071> (accessed 30.05.2015).
17. Li-jun Liu., Du Yuan-tai, Zhou Hong, Lin Tsung-han *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 54, no. 3, pp. 1953–1958.
18. Venkatesan A. *Dissipation due to tunneling two-level systems in gold nanomechanical resonators*. Available at: [arXiv:0912.1281v1](https://arxiv.org/abs/0912.1281v1) [cond-mat.mes-hall]
19. Bomze Yu. *Resonant Tunneling in a Dissipative Environment*. Available at: [arXiv:1010.1527v1](https://arxiv.org/abs/1010.1527v1) [cond-mat.mes-hall]
20. Ferry D. K., Goodnick S. M., Bird J. *Transport in Nanostructures*. Available at: <http://www.cambridge.org/9780521877480>
21. Boese D., Governale M., Rosch A., Zuelicke U. *Phys. Rev. B*. 2001, vol. 64, p. 085315. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0103372> (accessed 29.05.2015).
22. Tserkovnyak Y., Halperin B. I., Auslaender O. M., Yacoby A. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 89, pp. 136805. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0204387> (accessed 29.05.2015).

23. Foa Torres L. E. F., Lewenkopf C. H., Pastawski H. M. *Coherent versus sequential electron tunneling in quantum dots*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0306148> (accessed 29.05.2015).
24. Vorrath T., Brandes T. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 68, p. 035309. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0305439>.
25. Hübers H.-W., Pavlov S. G., Lynch S. A. et al. *Phys. Rev. B*. 2013, vol. 88, p. 035201.
26. Zhukavin R. Kh., Shastin V. N., Pavlov S. G. et al. *J. Appl. Phys.* 2007, vol. 102, p. 093104.
27. Hübers H.-W., Pavlov S. G., Zhukavin R. Kh., Shastin V. N. *Terahertz Science and Technology*. 2014, vol. 7, no. 4, pp. 172–180
28. Köhler R., Tredicucci A., Beltram F. et al. *Nature*. 2002, vol. 417, pp. 156–159.
29. Tonouchi M. *Nature Photonics*. 2007, vol. 1, no. 2, pp. 97–105.
30. Firsov D. A., Shalygin V. A., Panevin V. Yu., Melent'ev G. A., Sofronov A. N. et al. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2010, vol. 44, no. 11, pp. 1443–1446. [In Russian]
31. Firsov D. A., Vorob'ev L. E., Panevin V. Yu., Sofronov A. N., Balagula R. M., Makhov I. S., Kozlov D. V., Vasil'ev A. P. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2015, vol. 49, no. 1, pp. 30–34. [In Russian]
32. Ovchinnikov Yu. N. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 2007, vol. 131, no. 2, pp. 286–290. [In Russian]
33. Antonov D. A., Vugal'ter G. A., Gorshkov O. N., Kasatkin A. P., Filatov D. O., Shenina M. E. *Vestnik Nizhegorodskogo universiteta im. N. I. Lobachevskogo. Seriya: Fizika tverdogo tela* [Bulletin of Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod. Series: Solid state physics]. 2007, no. 3, pp. 55–60. [In Russian]
34. Krevchik V. D., Semenov M. B., Filatov D. O., Krevchik P. V. et al. *Pis'ma v Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Letters to the Journal of experimental and theoretical physics]. 2016, vol. 104, no. 6, pp. 406–412. [In Russian]
35. Gorokhov D. A., da Silveira Rava A. *Ultrasharp crossover from quantum to classical decay in a quantum dot flanked by a double – barrier tunneling structure*. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308023> (accessed 29.05.2015).
36. Thielmann A., Hettler M. H., König J., Schön G. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 68, p. 115105. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0302621> (accessed 29.05.2015).
37. Khanin Yu. N., Vdovin E. E., Dubrovskiy Yu. V. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2004, vol. 38, no. 4, pp. 436–447. [In Russian]
38. Burdov V. A., Solenov D. S. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 2004, vol. 125, no. 3, pp. 684–692. [In Russian]
39. Caldeira A. O., Leggett A. J. *Phys. Rev. Lett.* 1981, vol. 46, no. 4, pp. 211–214.
40. Larkin A. I., Ovchinnikov Yu. N. *Pis'ma v Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Letters to the Journal of experimental and theoretical physics]. 1983, vol. 37, no. 7, pp. 322–325. [In Russian]
41. Ternov I. M., Zhukovskiy V. Ch., Borisov A. V. *Kvantovaya mekhanika i makroskopicheskie efekty* [Quantum mechanics and macroscopic effects]. Moscow: Izd-vo MGU, 1993, 198 p. [In Russian]
42. Landau L. D., Lifshits E. M. *Teoreticheskaya fizika: ucheb. posobie: v 10 t. T. 3. Kvantovaya mekhanika. Nerelyativistskaya teoriya* [Theoretical physics: teaching aid: in 10 volumes. Volume 3. Quantum mechanics. Nonrelativistic theory]. Moscow: Nauka, 1989. [In Russian]
43. Imri Y. *Vvedenie v mezoskopicheskuyu fiziku* [Introduction to mesoscopic physics]. Moscow: Fizmat-lit, 2002, 304 p. [In Russian]

44. Caldeira A. O., Leggett A. J. *Ann. of Phys.* 1983, vol. 149, no. 2, pp. 374–456.
45. York J. T., Coalson R. D., Dahnovsky Yu. *Phys. Rev. B.* 2002, vol. 65, pp. 235321-1–235321-8.
46. Kiselev M. N., Kikoin K., Molenkamp L. W. *Phys. Rev. B.* 2003, vol. 68, p. 155323. Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308619> (accessed 30.05.2015).
47. Sprekeler H., Kiesslich G., Wacker A., Schoell E. *Coulumb effects in tunneling through a quantum dot stack.* Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0309696> (accessed 30.05.2015).
48. Tavares Marcos R. S., Hai G. Q., Marques G. E. *Tunneling effects on impurity spectral function in coupled asymmetric quantum wires.* Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0308191> (accessed 30.05.2015).
49. Slobodskyy A., Gould C., Slobodskyy T., Becker C. R., Schmidt G., Molenkamp L. W. *Voltage – controlled spin selection in a magnetic resonant tunneling diode.* Available at: <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0305124> (accessed 29.05.2015).
50. Vandersypen L. M. K., Elzerman J. M., Schouten R. N., L. H. Willems van Beveren, Hanson R., Kouwenhoven L. P. *Applied Physics Letters.* 2004, vol. 85, no. 19, pp. 4394–4396.
51. Kouwenhoven L. P., Jauhar S., Orenstein J., McEuen P. L., Nagamune Y., Motohisa J., Sakaki H. *Phys. Rev. Lett.* 1994, vol. 73, no. 25, pp. 3443–3446.
52. Bakkers E. P. A. M., Hens Z., Zunger A., Franceschetti A., Kouwenhoven L. P., Gurevich L., Vanmaekelbergh D. *Nano Letters.* 2001, vol. 1, no. 10, pp. 551–556.
53. Zerova V. L., Kapaev V. V., Vorob'ev L. E., Firsov D. A., Schmidt S., Zibik E. A., Seilmeier A., Towe E. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2004, vol. 38, no. 12, pp. 1455–1462. [In Russian]
54. Khabarov Yu. V., Kapaev V. V., Petrov V. A. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2004, vol. 38, no. 4, pp. 455–464. [In Russian]
55. Vorob'ev L. E., Panevin V. Yu., Fedosov N. K., Firsov D. A., Shalygin V. A., Kapaev V. V., Hanna S., Schmidt S., Zibik E. A., Seilmeier A. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2005, vol. 39, no. 1, pp. 49–52. [In Russian]
56. Khanin Yu. N., Dubrovskiy Yu. V., Vdovin E. E. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2003, vol. 37, no. 6, pp. 717–723. [In Russian]
57. Dixon D., Kouwenhoven L. P., McEuen P. L., Nagamune Y., Motohisa J., Sakaki H. *Phys. Rev. B.* 1996, vol. 53, no. 19, pp. 12625–12628.
58. Van der Vaart N. C., van Steveninck M. P. de Ruyter, Kouwenhoven L. P., Johnson A. T., Nazarov Yu. V., Harmans C. J. P. M., Foxon C. T. *Phys. Rev. Lett.* 1994, vol. 73, no. 2, pp. 320–323.
59. Nitzan A. *Annual Reviews of Physical Chemistry.* 2001, vol. 52, pp. 681–750.
60. Benjamin I., Evans D., Nitzan A. *Journal of Chemical Physics.* 1997, vol. 106, pp. 1291–1293.
61. Ireneusz W., König Jürgen, Martinek Jan, Barnas Józef, Schön Gerd *Phys. Rev. B.* 2005, vol. 72, p. 115334. DOI 10.1103/PhysRevB.72.115334,
62. Könenmann J., Kubala B., König J., Haug R. J. *Tunneling resonances in quantum dots: Coulomb interaction modifies the width.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0506505>
63. Kwapinski T., Taranko R., Taranko E. *Photon-assisted electron transport through a three-terminal quantum dot system with nonresonant tunneling channels.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501634>
64. Thielmann A., Hettler M. H., König J., Schön G. *Co-tunneling current and shot noise in quantum dots.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501534>

65. Huettel A. K. *Control of the tunnel splitting in a one-electron double quantum dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0501012>
66. Hanson R., L. H. Willems van Beveren, Vink I. T., Elzerman J. M., Naber W. J. M., Koppens F. H. L., Kouwenhoven L. P., Vandersypen L. M. K. *Single-shot readout of electron spin states in a quantum dot using spin-dependent tunnel rates*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0412768>
67. Rudzinski W., Barnas J., Swirkowicz R., Wilczynski M. *Spin effects in electron tunnelling through a quantum dot coupled to non-collinearly polarized ferromagnetic leads*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0409386>
68. Xiufeng Cao, Yaoming Shi, Xiaolong Song, Shiping Zhou, Hao Chen *Spin-dependent Andreev reflection tunneling through a quantum dot with intradot spin-flip scattering*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0409180>
69. Rontani M., Molinari E. *Phys. Rev. B*. 2005, vol. 71, pp. 233106. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0408454>.
70. Hanson R., Vink I. T., DiVincenzo D. P., Vandersypen L. M. K., Elzerman J. M., L. H. Willems van Beveren, Kouwenhoven L. P. *Determination of the tunnel rates through a few-electron quantum dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407793>
71. Bing Dong, Cui H. L., Lei X. L., Norman J., Horing M. *Phys. Rev. B*. 2005, vol. 71, p. 45331. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407655>
72. Ciorga M., Pioro-Ladrière M., Zawadzki P., Lapointe J., Wasilewski Z., Sachrajda A. S. *Coulomb and Spin blockade of two few-electrons quantum dots in series in the co-tunneling regime*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0407071>
73. Djuric I., Bing Dong, Cui H. L. *IEEE transactions on Nanotechnology* 4. 2005, vol. 71. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0406679>
74. Ryndyk D. A., Keller J. *Inelastic resonant tunneling through single molecules and quantum dots: spectrum modification due to nonequilibrium effects*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0406181>
75. Ota T., Ono K., Stopa M., Hatano T., Tarucha S., Song H. Z., Nakata Y., Miyazawa T., Ohshima T., Yokoyama N. *Phys. Rev. Lett.* 2004, vol. 93, p. 066801. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0405545>
76. Bing Dong, Djuric I., Cui H. L., Lei X. L. *J. Phys.: Cond. Matter* 16. 2004, p. 4303. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403741>.
77. Villas-Boas J. M., Ulloa E. Sergio, Nelson Studart *Phys. Rev. B*. 2004, vol. 70, p. 041302 (R). Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403447>
78. Villas-Boas J. M., Govorov A. O., Ulloa E. Sergio *Phys. Rev. B*. 2004, vol. 69, p. 125342. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403445>
79. Nauen A., Hohls F., Maire N., Pierz K., Haug. R. J. *Shot noise in tunneling through a single quantum dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0403108>
80. Bing Dong, Cui H. L., Lei X. L. *Phys. Rev. B*. 2004, vol. 69, p. 205315. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0402684>
81. Sprekeler H., Kiesslich G., Wacker A., Schoell E. *Phys. Rev. B*. 2004, vol. 69, p. 125328. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0309696>
82. Sprekeler H., Kiesslich G., Wacker A., Schoell E. *Semicond. Sci. Technol.* 2004, vol. 19, p. S37. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0309027>
83. Kiselev M. N., Kikoin K., Molenkamp L.W. *Phys. Rev. B*. 2003, p. 155323. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0308619>
84. Taranko R., Kwapinski T., Taranko E. *Influence of microwave fields on the electron transport through a quantum dot in the presence of a direct tunneling between leads*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0304121>
85. Björn Kubala., Jürgen König *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 67, p. 205303. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0212536>

86. Kuzmenko T., Kikoin K., Avishai Y. *Europhys. Lett.* 2003, vol. 64, p. 218. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0211281>
87. Thorwart M., Grifoni M., Cuniberti G., Postma H. W. Ch., Dekker C. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 89, p. 196402. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0210511>
88. Hapke-Wurst I., Zeitler U., Keyser U. F., Pierz K., Ma Z., Haug R. J. *Tuning the onset voltage of resonant tunneling through InAs quantum dots by growth parameters.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0210375>
89. Kiesslich G., Wacker A., Schoell E., Nauen A., Hohls F., Haug R. J. *Phys. Status Solidi (C)*. 2003, p. 1293. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0209523>
90. David M., Kuo T., Chang Y. C. *Spontaneous spin polarized tunneling current through a quantum dot array.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0209499>
91. Osamu Sakai., Wataru Izumida *Study on the Kondo effect in the tunneling phenomena through a quantum dot.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0208505>
92. Aldea A., Moldoveanu V., Tanatar B. *Tunneling properties of quantum dot arrays in strong magnetic field.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0207632>
93. Rojt P., Meir Y., Auerbach A. *Luttinger liquid behavior in tunneling through a quantum dot at zero magnetic field.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0207113>
94. Kiselev M. N., Kikoin K., Molenkamp L. W. *Electric Field Induced Kondo Tunneling Through Double Quantum Dot.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206503>
95. Cardamone D. M., Stafford C. A., Barrett B. R. *Phys. Stat. Sol. (B)*. 2002, vol. 230, p. 419. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206294>
96. Kuzmenko T., Kikoin K., Avishai Y. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 89, p. 156602. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0206050>
97. Chen Yueh-Nan., Chuu Der-San *Phys. Rev. B*. 2002, vol. 66, p. 165316. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0204188>
98. Yi-feng Yang, Tsung-han Lin *Submergence of the Sidebands in the Photon-assisted Tunneling through a Quantum Dot Weakly Coupled to Luttinger Liquid Leads.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0203244>
99. Ping Zhang, Qi-Kun Xue, Xie X. C. *Magnetoresistance of a mesoscopic tunneling quantum dot.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0201465>
100. Bing Dong, Lei X. L. *Kondo effect and anti-ferromagnetic correlation in transport through tunneling-coupled double quantum dots.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0112500>
101. Renzoni F., Brandes T. *Charge transport through quantum dots via time-varying tunnel couplings.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0109335>
102. Qing-feng Sun, Hong Guo *Phys. Rev. B*. 2002, vol. 66, p. 155308. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0109145>
103. Avishai Y., Kikoin K. *Kondo tunneling through a biased quantum dot.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0105206>
104. Qing-feng Sun, Hong Guo, Tsung-han Lin *Phys. Rev. Lett.* 2001, vol. 87, p. 176601. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0105120>
105. Wegewijs M. R., Nazarov Yu. V. *Inelastic co-tunneling through an excited state of a quantum dot.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103579>
106. Shi J., Ma Zh., Xie X. C. *Dephasing Effect in Photon-Assisted Resonant Tunneling through Quantum Dots.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103537>
107. Katz D., Millo O., Shi-Hai Kan, Banin U. *Control of charging in resonant tunneling through InAs nanocrystal quantum dots.* Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0103110>
108. Meyer J. M., Hapke-Wurst I., Zeitler U., Haug R. J., Pierz K. *Physica Status Solidi (B)*. 2001, vol. 224, no. 3, p. 685. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0009348>

109. Fujisawa T., Wilfred G. van der Wiel, Kouwenhoven Leo P. *Physica E*. 2000, vol. 7, p. 413. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0007199>
110. Hapke-Wurst I., Zeitler U., Frahm H., Jansen A. G. M., Haug R. J., Pierz K. *Phys. Rev. B*. 2000, vol. 62, no. 19, pp. 12621. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/0003400>
111. Burkard G., Seelig G., Loss D. *Phys. Rev. B*. 2000, vol. 62, p. 2581. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9910105>
112. Rodrigues E. S., Anda E. V., Orellana P. *Non Linear Effects in Resonant Tunneling Through a Quantum Dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9903384>
113. Partoens B., Matulis A., Peeters F. M. *Interplay between tunneling and exchange effects in the two electron double quantum dot molecule*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9902240>
114. Kaminski A., Glazman L. I. *Mesoscopic fluctuations of tunneling through double quantum dots*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9810237>
115. Jouault B., Boero M., Faini G., Inkson J. C. *The theory of magneto-transport in quantum dots: 3D-0D and 2D-0D tunnelling and selection rules for the angular momentum*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9809071>
116. Kicheon K., Min B. I. *Effect of Quantum Confinement on Electron Tunneling through a Quantum Dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9703128>
117. Aleiner I. L., Ned S. Wingreen, Meir Yigal *Dephasing and the Orthogonality Catastrophe in Tunneling through a Quantum Dot: the «Which Path?» Interferometer*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9702001>
118. Matveev K. A., Glazman L. I., Baranger H. U. *Coulomb Blockade of Tunneling Through a Double Quantum Dot*. Available at: <http://www.arxiv.org/cond-mat/9512082>
119. Morozova E. N., Makarovskiy O. N., Volkov V. A., Dubrovskiy Yu. V., Turyanska L., Vdovin E. E., Patané A., Eaves L., Henini M. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology]. 2005, vol. 39, no. 5, pp. 573–576. [In Russian]
120. Galkin N. G., Margulis V. A., Shorokhov A. V. *Fizika tverdogo tela* [Solid-state physics]. 2001, vol. 43, no. 3, pp. 511–519. [In Russian]
121. Geyler V. A., Margulis V. A., Filina L. I. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 1998, vol. 113, no. 4, pp. 1377–1396. [In Russian]
122. Ullien D., Cohen H., Porath D. *Nanotechnology*. 2007, vol. 18, no. 42, p. 424015(1-4).
123. Yanagi H., Ohno T. *Langmuir*. 1999, vol. 15, no. 14, pp. 4773–4776.
124. Bychkov A. M., Stace T. M. *Nanotechnology*. 2007, vol. 18, pp. 185403-1–185403-5.
125. Mantsevich V. N. «*Neravnovesnye efekty i nestatsionarnyy elektronnyy transport v poluprovodnikovyykh nanostrukturakh s mezhchastichnym vzaimodeystviem: dis. d-ra fiz.-mat. nauk: 01.04.10* [Non-equilibrium effects and non-stationary electron transport in semiconductor nanostructures with interparticle interaction: dissertation to apply for the degree of the doctor of physical and mathematical sciences: 01.04.10]. Moscow: Fizicheskii fakul'tet MGU im. M. V. Lomonosova, 2014, 337 p. [In Russian]
126. Zhukovskiy V. Ch., Krevchik V. D., Grunin A. B., Semenov M. B., Zaytsev R. V. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3: Fizika. Astronomiya* [Bulletin of Moscow University. Series 3: Physics. Astronomy]. 2013, no. 1, pp. 52–59. [In Russian]
127. Zhukovskiy V. Ch., Krevchik V. D., Grunin A. B., Semenov M. B., Zaytsev R. V. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3: Fizika. Astronomiya* [Bulletin of Moscow University. Series 3: Physics. Astronomy]. 2013, no. 5, pp. 58–64. [In Russian]

128. Galitskiy V. M., Karnakov B. M., Kogan V. I. *Zadachi po kvantovoy mekhanike* [Quantum mechanics issues]. 2nd ed. Moscow, 1992, 880 p. [In Russian]
129. Beymen G., Erdeyi A. *Vysshie transtsendentnye funktsii* [Higher transcendental functions]. Moscow, 1973, vol. 1, 2. [In Russian]

Кревчик Владимир Дмитриевич

доктор физико-математических наук,
профессор, декан факультета
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 information technology and electronics,
Penza State University (40 Krasnaya
street, Penza, Russia)

Семенов Михаил Борисович

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

E-mail: physics@pnzgu.ru

Semenov Mikhail Borisovich

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

Кревчик Павел Владимирович

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

E-mail: physics@pnzgu.ru

Krevchik Pavel Vladimirovich

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

Образец цитирования:

Кревчик, В. Д. Квантовое туннелирование с диссипацией: приложение к туннельному транспорту для полупроводниковых квантовых точек в системе совмещенного АСМ/СТМ в условиях внешнего электрического поля (обзор). Часть II / В. Д. Кревчик, М. Б. Семенов, П. В. Кревчик // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 132–185. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-9.

К. Н. Нищев, М. И. Новопольцев, М. Ю. Малыгин,
Ю. В. Чернобровкин, В. И. Беглов, А. Ф. Сигачев,
В. П. Мишкин, Н. В. Моисеев, Е. Н. Лютова

ВЛИЯНИЕ ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА НАПОЛНИТЕЛЯ И ТЕРМООБРАБОТКИ НА АДГЕЗИОННУЮ ПРОЧНОСТЬ МНОГОСЛОЙНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА $AlSiC$ ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Современные силовые полупроводниковые приборы содержат в своей конструкции термокомпенсаторы, изготавливаемые из металломатричного композиционного материала на основе алюминиевого матричного сплава и микропорошка карбида кремния (ММК $AlSiC$). На поверхность термокомпенсатора наносится многослойное металлическое покрытие, которое обеспечивает возможность прочного соединения термокомпенсатора с активным полупроводниковым кристаллом. Надежность силового полупроводникового прибора в значительной степени определяется адгезионной прочностью данного покрытия с поверхностью композита. Целью работы является исследование влияния гранулометрического состава наполнителя и термообработки на адгезионную прочность многослойного ($Al-Ti-Ni-Ag$) металлического покрытия, наносимого на поверхность ММК $AlSiC$ методом магнетронного распыления.

Материалы и методы. Исследуемые образцы ММК $AlSiC$ на основе алюминиевого матричного сплава АК9 изготавливались методом вакуумно-компрессионной пропитки. В качестве наполнителя использовались микропорошки карбида кремния гранулометрического состава F120, F150, F180 и смеси F120+M10П (10 %), F150+M10П (10 %), F180+M10П (10 %). Четырехслойное металлическое покрытие ($Al-Ti-Ni-Ag$) наносилось на поверхность исследуемых образцов ММК $AlSiC$ методом магнетронного распыления. Адгезионная прочность соединения покрытия с поверхностью композита определялась методом отслаивания (L-методом).

Результаты. Измерена адгезионная прочность многослойного металлического покрытия на поверхности образцов ММК $AlSiC$ с различным гранулометрическим составом наполнителя SiC в зависимости от продолжительности и температуры отжига в атмосфере водорода и аргона.

Выводы. Отжиг исследуемых образцов в атмосфере водорода или аргона продолжительностью более 30 мин при температуре 450 °С (или более 60 мин при температуре 350 °С) приводит к значительному (почти к троекратному) возрастанию адгезионной прочности металлического покрытия.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта №18-43-130010\18 p_a.

© Нищев К. Н., Новопольцев М. И., Малыгин М. Ю., Чернобровкин Ю. В., Беглов В. И., Сигачев А. Ф., Мишкин В. П., Моисеев Н. В., Лютова Е. Н., 2020. Данная статья доступна по условиям всемирной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая дает разрешение на неограниченное использование, копирование на любые носители при условии указания авторства, источника и ссылки на лицензию Creative Commons, а также изменений, если таковые имеют место.

Ключевые слова: силовые полупроводниковые приборы, металлматричный композиционный материал AlSiC, многослойные металлические покрытия, термокомпенсатор, адгезия.

*K. N. Nishchev, M. I. Novopol'tsev, M. Yu. Malygin,
Yu. V. Chernobrovkin, V. I. Beglov, A. F. Sigachev,
V. P. Mishkin, N. V. Moiseev, E. N. Lyutova*

THE EFFECT OF THE GRANULOMETRIC COMPOSITION OF THE FILLER AND HEAT TREATMENT ON THE ADHESION STRENGTH OF MULTILAYER METAL COATING ON AlSiC MMC'S SURFACE

Abstract.

Background. Modern semiconductor power devices (SPD) contain temperature compensators (TC) in their design, which can be made of a metal matrix composite material based on an aluminum matrix alloy and silicon carbide micropowder (MMC AlSiC). A multilayer metal coating is applied to the TC surface, which makes it possible to firmly connect the TC with an active semiconductor crystal in the SPP. The adhesion strength of this coating to the surface of MMCM AlSiC largely determines the reliability of the SPP. The aim of this work is to study the effect of the granulometric composition of the filler and heat treatment on the adhesion strength of multilayer Al-Ti-Ni-Ag metal coatings on the surface of AlSiC MMCM.

Materials and methods. The studied samples of MMC AlSiC based on the AK9 aluminum matrix alloy were prepared by the method of vacuum-compression impregnation. As a filler, silicon carbide micropowders of grain size distribution F120, F150, F180 and mixtures F120 + M10P (10 %), F150 + M10P (10 %), F180 + M10P (10 %) were used. A four-layer metal coating (Al-Ti-Ni-Ag) was applied to the surface of the studied samples of MMCM AlSiC by magnetron sputtering. The adhesion strength of the bond between the coating and the composite surface was determined by the peeling method.

Results. The adhesive strength of a multilayer metal coating on the surface of MMC AlSiC samples with different grain-size composition of SiC filler was measured depending on the duration and temperature of annealing in an atmosphere of hydrogen and argon.

Conclusions. Annealing the samples under study in a hydrogen or argon atmosphere for more than 30 min at a temperature of 450 °C (or more than 60 min at a temperature of 350 °C) leads to a significant (almost threefold) increase in the adhesion strength of the metal coating.

Keywords: semiconductor power devices, AlSiC metal-matrix composite material, multilayer metal coatings, thermal compensator, adhesion.

Введение

Одним из основных элементов конструкции силовых полупроводниковых приборов (СПП) являются термокомпенсаторы (ТК), которые выступают основой для тонкого полупроводникового кристалла (ПК) большого диаметра (до 150 мм) и предохраняют его от термомеханических воздействий. Основные параметры СПП и их надежность в процессе эксплуатации в значительной степени определяются качеством соединения термокомпенсатора с полу-

проводниковым кристаллом. Материал для изготовления термокомпенсаторов должен обладать определенным набором физических свойств. Во-первых, его коэффициент линейного термического расширения (КЛТР) должен быть близким к КЛТР кремния. Кроме того, он должен обладать высокой теплопроводностью, низким удельным электрическим сопротивлением и большой механической прочностью, а также иметь высокую температуру плавления. Этим требованиям удовлетворяет молибден, широко используемый в настоящее время в конструкциях СПП. Однако молибден – достаточно редкий и дорогостоящий металл. Поэтому перспективным материалом для изготовления ТК является металломатричный композиционный материал (ММК) AlSiC, состоящий из наполнителя – микрочастиц карбида кремния определенного гранулометрического состава и матричного алюминиевого сплава [1–3]. ММК AlSiC в настоящее время широко используется для изготовления теплопроводящих оснований мощных IGBT-модулей [4, 5].

Перспективным способом соединения полупроводниковых кристаллов СПП с термокомпенсаторами (в том числе изготовленными из ММК AlSiC) является низкотемпературное спекание (синтеринг) с использованием в качестве соединительного слоя специальных серебрясодержащих паст [6–10]. Для повышения прочности соединения на поверхность композитного ТК методом магнетронного распыления наносится многослойное (Al-Ti-Ni-Ag) металлическое покрытие [11]. Требуемая высокая механическая прочность и надежность соединения ТК с ПК в значительной степени определяются адгезионной способностью поверхности композитного ТК по отношению к наносимому металлическому покрытию.

Анализ литературных данных показывает, что адгезионные свойства поверхности металломатричных композиционных материалов практически не исследовались. В большинстве публикаций, посвященных исследованию адгезионных свойств поверхностей материалов, изучается адгезионная способность подложек с гомогенной (по составу и морфологии) поверхностью. Поверхность же ММК AlSiC является гетерогенной, она включает области «материал – матрица» и «материал – наполнитель», адгезионные свойства которых существенно различаются. Данное обстоятельство значительно усложняет задачу нанесения на поверхность металломатричного композита металлического покрытия с заданной адгезионной прочностью соединения.

Поскольку известно, что адгезионная прочность соединения адгезива с подложкой может возрастать в результате диффузии при термической обработке соединения [12], в данной работе нами исследовалось влияние отжига на адгезионную прочность многослойного металлического покрытия, нанесенного на поверхность исследуемых композитов.

1. Образцы и методика эксперимента

Исследуемые образцы ММК AlSiC получались методом вакуумно-компрессионной пропитки пористых заготовок [13]. Для изготовления пористых заготовок готовилась прессовочная смесь, состоящая из мелкодисперсного порошка SiC заданного гранулометрического состава и связующего, в качестве которого использовалось жидкое стекло. Для получения соответствующих металломатричных композитов были изготовлены пористые заго-

товки со следующими гранулометрическими составами порошка-наполнителя: F120 (100 %), F150 (100 %), F180 (100 %), F120(90 %) + M10П(10 %), F150(90 %) + M10П(10 %), F180(90 %) + M10П(10 %).

Гранулометрический состав порошков SiC, применяемых при изготовлении исследуемых образцов MMK AlSiC, определяли с использованием лазерного гранулометра Shimadzu SALD-3101. Результаты измерений приведены на рис. 1 и в табл. 1.

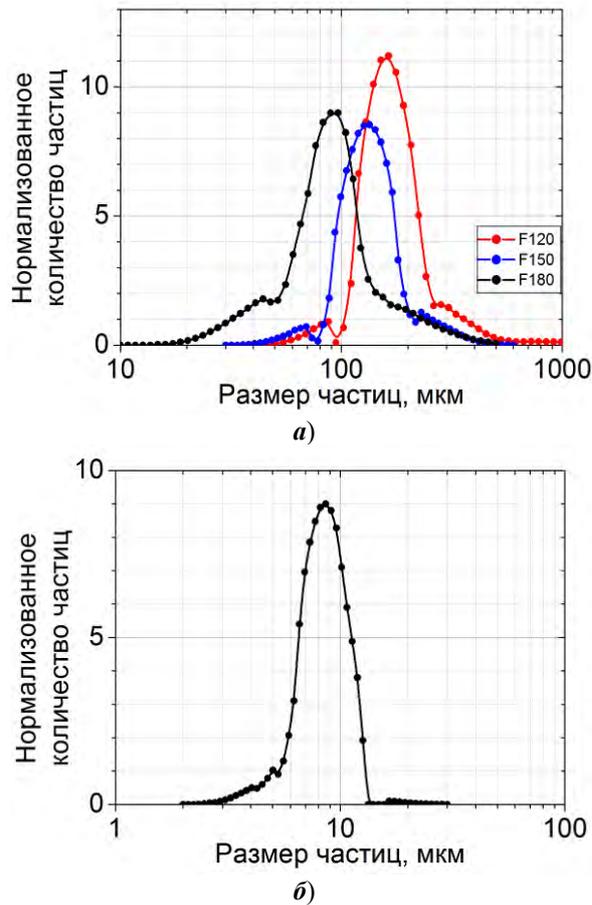


Рис. 1. Гранулометрический состав порошков SiC, используемых в качестве наполнителей исследуемых композитов: *a* – F180, F150 и F120; *б* – M10П

Таблица 1

Средний размер частиц SiC в исследуемых композитных образцах

Гранулометрический состав наполнителя	Средний размер частиц, мкм
F120	$158,8 \pm 0,2$
F150	$128,3 \pm 0,2$
F180	$85,2 \pm 0,2$
M10П	$8,2 \pm 0,1$

Предварительно подготовленная прессовочная смесь укладывалась в пресс-форму и прессовалась при давлении 300 МПа. Полученная пористая

заготовка извлекалась из пресс-формы и высушивалась при температуре 110 °С на воздухе. Просушенные пористые заготовки устанавливались в оснастку для пропитки, нагревались до температуры 700–750 °С и помещались в камеру установки вакуумно-компрессионной пропитки над поверхностью расплавленного матричного алюминиевого сплава АК9 в тигле. Затем камера откачивалась до давления 10 Па, пористые заготовки погружались в расплав и выдерживались при избыточном давлении 4–6 МПа в течение нескольких минут. После снятия внешнего давления пропитанные пластины ММК AlSiC извлекались из расплава, охлаждались, подвергались механической обработке на плоскошлифовальном станке с алмазным кругом до шероховатости R_a не менее 1,0 мкм и разрезались на установке гидроабразивной резки на образцы размером 43×35×3 мм.

Для повышения механической прочности соединения композитного термокомпенсатора с активным полупроводниковым кристаллом на поверхность ТК наносилось многослойное металлическое покрытие. Покрытие состояло из четырех слоев Al-Ti-Ni-Ag (с толщинами 1; 0,3; 0,5; 2 мкм соответственно), которые последовательно наносились на поверхность образцов ММК AlSiC методом магнетронного распыления в атмосфере аргона.

Для исследования влияния режимов термообработки исследуемых образцов ММК AlSiC с нанесенным на их поверхность многослойным металлическим покрытием на адгезионную прочность покрытия образцы отжигались в атмосфере водорода или аргона при температуре 350 и 450 °С в течение 30 и 60 мин. Часть образцов термообработке не подвергалась.

Адгезионная прочность соединения металлического покрытия с поверхностью ММК AlSiC исследовалась методом неравномерного отрыва (отслаивания) [14–16] на испытательной машине SHIMADZU AG100KNX. Адгезионная прочность определялась из соотношения

$$f = F/l,$$

где l – ширина отслаиваемой пленки. Значение усилия отслаивания F определялось из диаграммы отслаивания, представляющей собой зависимость F от координаты границы области отрыва покрытия от подложки, перемещающейся в процессе измерения вдоль исследуемого образца. Для измерения адгезионной прочности применялись тестовые полосы шириной 10 мм и толщиной 0,1 мм, которые изготавливались из посеребренной медной фольги и отжигались в атмосфере водорода при температуре 450 °С в течение 30 мин. Тестовая полоса соединялась с поверхностью металлического покрытия путем пайки при температуре 210 °С с использованием паяльной пасты Оникс 7020 (ТУ 005-00387275–2012).

Измеренное нами значение прочности адгезионного отрыва тестовой полосы от поверхности данного припоя составляло $5,2 \pm 0,1$ Н/мм.

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Определение объемной доли наполнителя методом растровой электронной микроскопии

Физические свойства металломатричного композитного материала AlSiC в значительной степени определяются содержанием в нем матричного

алюминиевого сплава и частиц порошка карбида кремния (наполнителя). Для контроля содержания наполнителя в образцах ММК AlSiC можно использовать метод химического растворения матричного алюминиевого сплава с последующим определением доли нерастворенного осадка карбида кремния. Однако практика показывает, что не удается достичь полного растворения алюминия внутри пропитанной пористой заготовки из карбида кремния, что приводит к некорректным результатам.

Для определения объемных долей матричного сплава и наполнителя в композитных материалах может быть использован метод рентгеновской микротомографии [17]. Однако определение доли наполнителя в образцах ММК AlSiC этим методом затруднительно, поскольку коэффициенты поглощения рентгеновского излучения алюминием и карбидом кремния имеют достаточно близкие значения. Поэтому не удается получить контрастное изображение, позволяющее при последующей обработке результатов разделить области матричного сплава и наполнителя. Наши исследования показали, что данная задача может быть более успешно решена с использованием РЭМ-изображений поверхности композита, полученных с применением детектора обратно рассеянных электронов (BSED).

Для определения соотношения объемных долей матричного сплава и наполнителя в исследуемых образцах ММК AlSiC нами использовались изображения поверхности шлифов композитных образцов, которые были получены на РЭМ Quanta 200i 3D FEI, оснащенный BSED (рис. 2). Как видно из рис. 2, применение BSED обеспечивает высокий контраст изображения гетерогенной поверхности композита. Полученные изображения содержат хорошо различимые темные области SiC-наполнителя и более светлые области матричного алюминиевого сплава.

Процедура определения относительной объемной доли наполнителя в ММК AlSiC может быть проиллюстрирована на примере композита, содержащего порошок карбида кремния F120. На рис. 2,а приведено РЭМ-изображение поверхности данного образца. Гистограмма этого изображения (зависимость количества пикселей изображения от уровня серого) показана на рис. 3 (кривая 1). На рис. 3 приведены также результаты обработки гистограммы изображения методом наименьших квадратов тремя кривыми Гаусса. Кривая 2 соответствует темным пикселям в областях SiC-наполнителя на РЭМ-изображении, кривая 3 – светлым пикселям в области матричного сплава и кривая 4 – областям на границе зерен карбида кремния. По соотношению площадей под кривыми 2 и 3 определялась относительная объемная доля наполнителя в образце ММК AlSiC, которая составила 71 %.

Дополнительно для исследуемого образца методом эталонной порометрии с использованием поромера Standard Porosimeter 3.2 была определена открытая пористость заготовки перед ее пропиткой матричным сплавом. Объемная пористость, измеренная для пор с размерами в диапазоне от 80 до 20 мкм, составила 32 %. Этот результат соответствовал объемной доле SiC-наполнителя 68 % и был близок к результатам, полученным обработкой РЭМ-изображений.

По РЭМ-изображениям, приведенным на рис. 2, была определена объемная доля наполнителя в образцах ММК AlSiC с исследуемыми грануломет-

рическими составами наполнителя, которая составила 69 % для гранулометрического состава F150; 68 % – для F180; 70 % – для F120 + M10П (10 %); 72 % – для F150 + M10П (10 %); 74 % – для F180 + M10П (10 %).

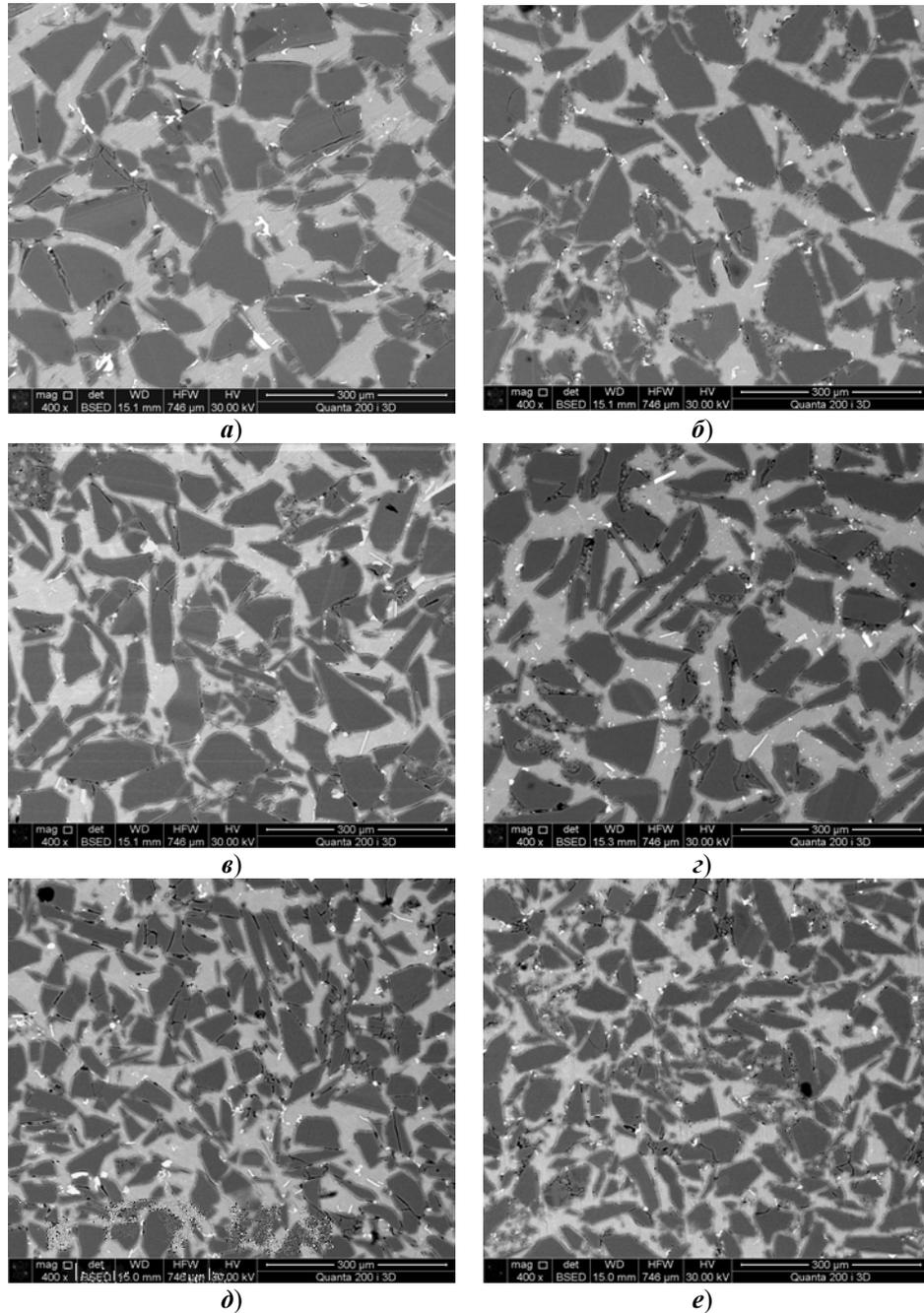


Рис. 2. РЭМ-изображения поверхности образцов ММК AlSiC до нанесения металлического покрытия, полученные с применением детектора обратно рассеянных электронов (BSED). Гранулометрический состав наполнителя (SiC):
а – F120 (100 %); б – F120 (90 %) + M10П (10 %); в – F150 (100 %);
г – F150 (90 %) + M10П (10 %); д – F180 (100 %); е – F180 (90 %) + M10П (10 %)

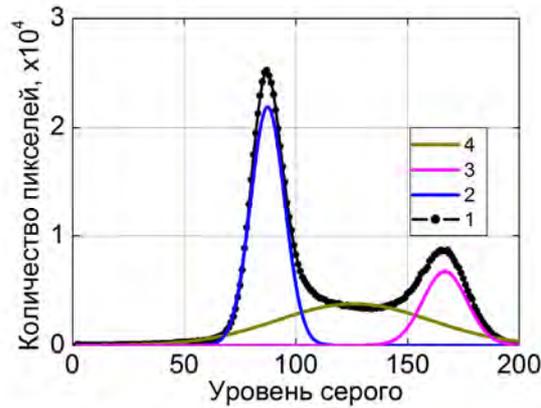


Рис. 3. Обработка гистограммы РЭМ-изображения, приведенного на рис. 2,а.
 1 – гистограмма изображения; 2 – кривая Гаусса для областей наполнителя;
 3 – кривая Гаусса для областей матричного сплава; 4 – кривая Гаусса
 для областей на границе зерен наполнителя

2.2. Адгезионная прочность металлического покрытия на поверхности ММК AlSiC

На рис. 4–6 представлены графики зависимости адгезионной прочности многослойного (Al-Ti-Ni-Ag) металлического покрытия, определенной методом неравномерного отрыва (отслаивания), от длительности изотермического отжига исследуемых композитных образцов в атмосфере водорода и аргона.

Как следует из приведенных данных, для выбранных составов наполнителя адгезионная прочность металлических покрытий, нанесенных на поверхность композитных образцов ММК AlSiC, не подвергнутых дополнительной термообработке, отличается незначительно. Максимальные значения адгезионной прочности покрытия были получены для образцов, наполнитель которых содержал добавку мелкозернистой фракции SiC (порошок М10П).

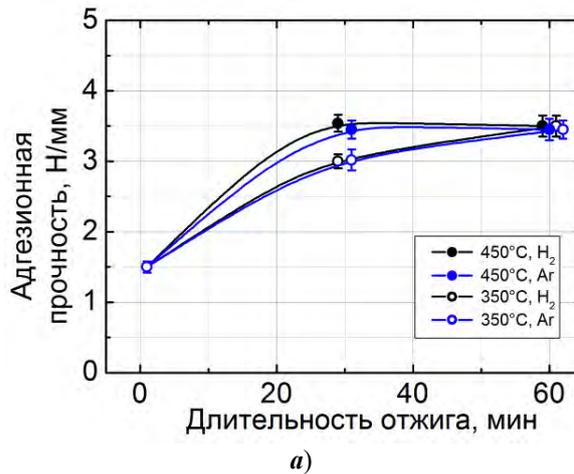
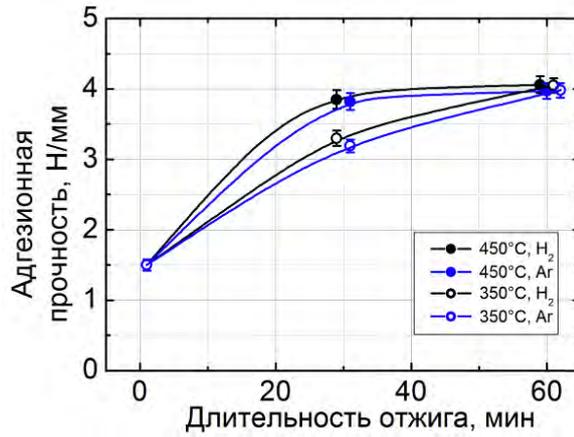
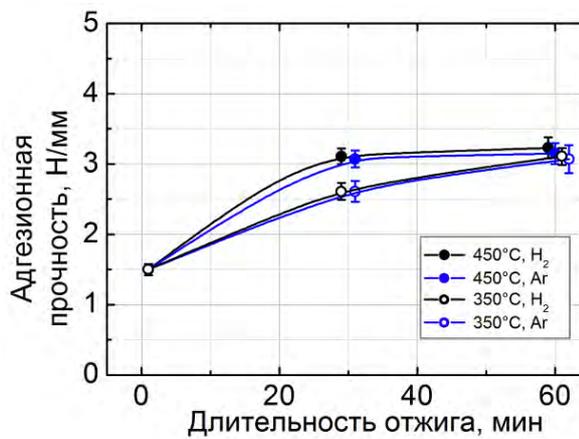


Рис. 4. Зависимость адгезионной прочности металлического покрытия от продолжительности изотермического отжига в атмосфере водорода и аргона при температуре 450 и 350 °С. Гранулометрический состав SiC наполнителя:
 а – F120 (100 %); б – F120 (90 %) + М10П (10 %)

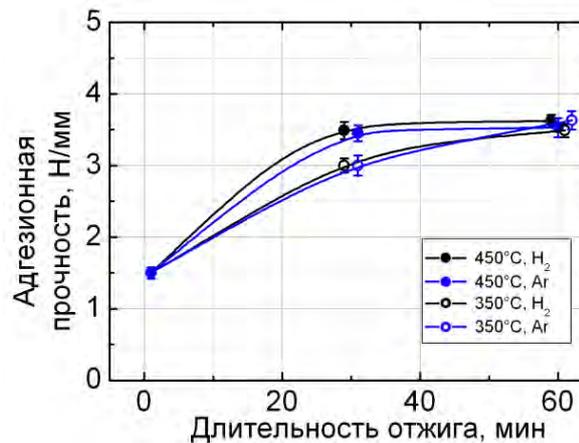


б)

Рис. 4. Окончание



а)



б)

Рис. 5. Зависимость адгезионной прочности металлического покрытия от продолжительности изотермического отжига в атмосфере водорода и аргона при температуре 450 и 350 °С. Гранулометрический состав SiC наполнителя: а – F150 (100 %); б – F150 (90 %) + M10П (10 %)

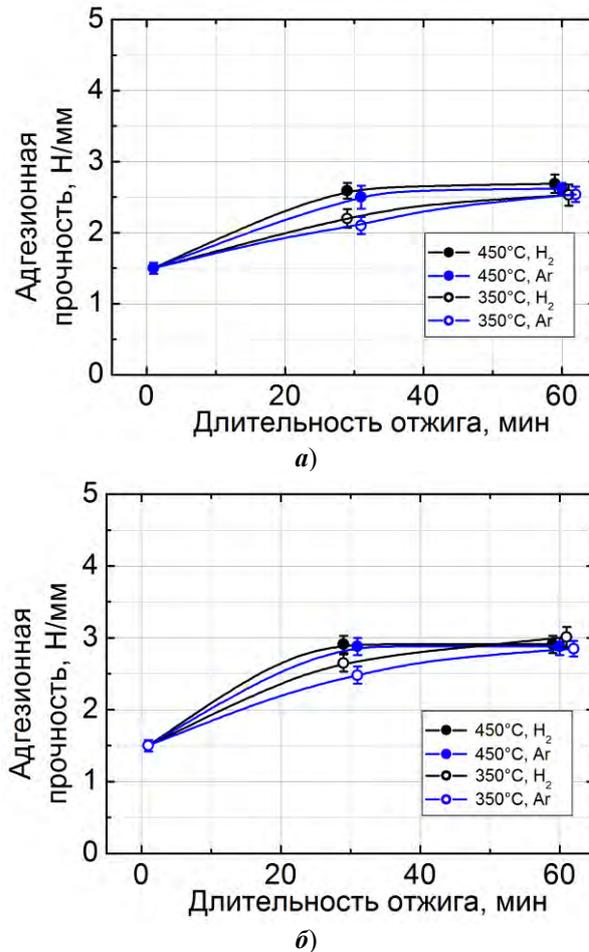


Рис. 6. Зависимость адгезионной прочности металлического покрытия от продолжительности изотермического отжига в атмосфере водорода и аргона при температуре 450 и 350 °С. Гранулометрический состав SiC наполнителя:
 а – F180 (100 %); б – F180 (90 %) + M10П (10 %)

При этом значения адгезионной прочности покрытия на 10–15 % превышали адгезионную прочность образцов, наполнитель которых состоял только из крупнозернистой фракции.

Результаты наших исследований показывают, что значительно более сильное влияние на адгезионную прочность покрытий оказывает дополнительная термическая обработка металлизированных композитных образцов отжигом. Из результатов, приведенных на рис. 4–6, следует, что отжиг образцов ММК AlSiC приводит к существенному возрастанию адгезионной прочности металлического покрытия на их поверхности. Наиболее высокие значения адгезионной прочности достигались при отжиге исследуемых образцов при температуре 350 °С (в течение 60 мин и более) или при температуре 450 °С (в течение 30 мин и более). В зависимости от гранулометрического состава наполнителя композита увеличение адгезионной прочности покрытия после отжига в указанных режимах может составлять от $1,8 \pm 0,1$ раза (для образцов ММК AlSiC с наполнителем F180) до $2,6 \pm 0,1$ раза для образцов

с наполнителем F120 + 10 % M10П. Из этих данных также следует, что возрастание адгезионной прочности покрытия практически не зависело от состава атмосферы (водород, аргон), в которой проводилась термообработка исследуемых образцов.

С целью определения физического механизма (адгезионный или когезионный) отслаивания исследуемого металлического покрытия от композитной подложки в экспериментах по измерению адгезионной прочности нами изучена микроструктура и элементный состав сопряженных областей разрушения, формирующихся на поверхности ММК AlSiC и на поверхности отрываемой тестовой полосы. Исследования были проведены с использованием РЭМ Quanta 200i 3D FEI, оснащенного BSED. Установлено, что отрыв металлического покрытия от поверхности образцов ММК AlSiC в процессе измерения адгезионной прочности соединения «покрытие – композит» всегда происходит по адгезионному механизму, независимо от гранулометрического состава наполнителя и режимов термической обработки.

Заключение

В результате проведенных исследований установлено, что для выбранных составов наполнителя ММК AlSiC наиболее высокие значения адгезионной прочности многослойного покрытия Al-Ti-Ni-Ag (с толщинами 1; 0,3; 0,5; 2 мкм) достигаются для образцов, наполнитель которых содержал добавку мелкозернистой фракции SiC со средним размером частиц около 8 мкм (порошок M10П). При этом значения адгезионной прочности покрытия на 10–15 % превышают адгезионную прочность образцов, наполнитель которых состоит только из крупнозернистой фракции. Более сильное влияние на адгезионную прочность покрытия оказывает термическая обработка образцов отжигом. Показано, что в зависимости от гранулометрического состава наполнителя композита изотермический отжиг образцов в атмосфере водорода или аргона при температуре 450 °С (длительностью 30 мин) или при температуре 350 °С (длительностью 60 мин) увеличивает адгезионную прочность покрытия от $1,8 \pm 0,1$ раза (для образцов ММК AlSiC с наполнителем F180) до $2,6 \pm 0,1$ раза для образцов ММК AlSiC с наполнителем F120 + 10 % M10П.

Библиографический список

1. MMC AlSiC as alternative for molybdenum in power press-pack semiconductor design. Investigations of electric conductivity properties of AlSiC / A. Grishanin, K. Nishchev, V. Martynenko, V. Eliseev, M. Novopoltsev, A. Samoylov // PCIM Europe 2017 (16–18 May 2017). – Nuremberg, Germany, 2017. – P. 1416–1419.
2. **Occhionero, M. A.** Cost-effective manufacturing of aluminium silicon carbide (AlSiC) electronic packages / M. A. Occhionero, R. A. Hay, R. W. Adams, K. P. Fennessy // Proceedings – International Symposium on Advanced Packaging Materials: Processes, Properties and Interfaces. – 1999. – P. 118–124.
3. The use of metal-matrix Al-SiC composites in heat-spreading bases of power electronic devices / K. N. Nishchev, V. V. Eliseev, L. A. Emikh, V. L. Novopoltsev, N. F. Fomin, V. A. Yudin, A. N. Afanas'ev-Khodykin // Polymer Science. Series D. – 2012. – Vol. 5, iss. 3. – P. 195–198
4. **Occhionero, M. A.** AlSiC Baseplates for Power IGBT Modules: Design, Performance and Reliability / M. A. Occhionero, K. P. Fennessy, R. W. Adams, G. J. Sundberg // Ceramics Process Systems. – 2003. – 6 p.

5. Повышение надежности IGBT модулей с применением металлического композиционного материала AlSiC / Е. Н. Каблов, Б. В. Щетанов, А. А. Шавнев, А. Н. Няфкин, В. В. Чибиркин, В. В. Елисеев, В. А. Мартыненко, В. Г. Мускатиньев, Л. А. Эмих, С. М. Вдовин, К. Н. Нищев // *Авиационные материалы и технологии*. – 2010. – № 4 (17). – С. 3–6.
6. Patentschrift DE 3414065 C2, Deutsches Patentamt / Fellenger J., Baumgartner W., 1989.
7. Europäische Patentschrift EP 0 242 626 B1, Europäisches Patentamt / Schwarzbauer H., 1991.
8. **Schwarzbauer, H.** Novel Large Area Joining Technique for Improved Power Device Performance / H. Schwarzbauer, R. Kuhnert // *IEEE Trans. Ind. Appl.* – 1991. – Vol. 27, № 1. – P. 93.
9. **Scheuermann, U.** Low Temperature Joining Technology – a High Reliability Alternative to Solder Contacts / U. Scheuermann, P. Wiedl // *Workshop on Metal Ceramic Composites for Functional Applications*. – Wien, 1997. – P. 181–192.
10. Исследование процесса низкотемпературного спекания серебряносодержащих паст методом растровой электронной микроскопии / К. Н. Нищев, М. И. Новопольцев, К. В. Саврасов, В. П. Мишкин, В. В. Елисеев, В. А. Мартыненко, А. В. Гришанин // *Прикладная физика*. – 2015. – № 3. – С. 10–14.
11. Optimization of properties thermal compensators from MMC AlSiC for thyristors and IGBT modules / K. Nishchev, M. Novopoltsev, M. Malygin, E. Osipova, D. Pyshkov // *PCIM Europe Conference Proceedings*. – 2020. – Vol. 1. – С. 1267–1271. – URL: <https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85089662253&origin=resultlist>
12. Тонкие пленки: Взаимная диффузия и реакции / Дж. Поут, К. Ту, Дж. Мейер и др. – Москва : Мир, 1982. – 576 с.
13. Патент 110310 Российская Фежерация. Устройство для получения изделия из металломатричного композиционного материала / Kablov E. N., Chibirkin V. V., Vdovin S. M., Grashchenkov D. V., Shchetanov B. V., Prokofev S. A., Muskatinev V. G., Nishchev K. N. – 31.05.2011.
14. ГОСТ 28574–90 (СТ СЭВ 6319-88). Защита от коррозии в строительстве. Конструкции бетонные и железобетонные. Методы испытаний адгезии защитных покрытий. – Москва, 1990.
15. ГОСТ 15140–78. Материалы лакокрасочные. Метод определения адгезии. – Москва, 1978.
16. ГОСТ 32299–2013. Материалы лакокрасочные. Определение адгезии методом отрыва. – Москва, 2013.
17. Лабораторные рентгеновские микротомографы на монохроматическом излучении / В. Е. Асадчиков, А. В. Бузмаков, Д. А. Золотов, Р. А. Сенин, А. С. Геранин // *Кристаллография*. – 2010. – Т. 55, № 1. – С. 7–9.

References

1. Grishanin A., Nishchev K., Martynenko V., Eliseev V., Novopoltsev M., Samoylov A. *PCIM Europe 2017 (16–18 May 2017)*. Nuremberg, Germany, 2017, pp. 1416–1419.
2. Occhionero M. A., Hay R. A., Adams R. W., Fennessy K. P. *Proceedings – International Symposium on Advanced Packaging Materials: Processes, Properties and Interfaces*. 1999, pp. 118–124.
3. Nishchev K. N., Eliseev V. V., Emikh L. A., Novopoltsev V. L., Fomin N. F., Yudin V. A., Afanas'ev-Khodykin A. N. *Polymer Science. Series D*. 2012, vol. 5, iss. 3, pp. 195–198
4. Occhionero M. A., Fennessy K. P., Adams R. W., Sundberg G. J. *Ceramics Process Systems*. 2003, 6 p.

5. Kablov E. N., Shchetanov B. V., Shavnev A. A., Nyafkin A. N., Chibirkin V. V., Eliseev V. V., Martynenko V. A., Muskatinev V. G., Emikh L. A., Vdovin S. M., Nishchev K. N. *Aviatsionnye materialy i tekhnologii* [Aviation materials and technologies]. 2010, no. 4 (17), pp. 3–6. [In Russian]
6. *Patentschrift DE 3414065 C2, Deutsches Patentamt* [Patent DE 3414065 C2, German Patent Office]. Fellenger J., Baumgartner W., 1989.
7. *Europäische Patentschrift EP 0 242 626 B1, Europäisches Patentamt* [European patent specification EP 0 242 626 B1, European Patent Office]. Schwarzbauer H., 1991.
8. Schwarzbauer H., Kuhnert R. *IEEE Trans. Ind. Appl.* 1991, vol. 27, no. 1, p. 93.
9. Scheuermann U., Wiedl P. *Workshop on Metal Ceramic Composites for Functional Applications*. Wien, 1997, pp. 181–192.
10. Nishchev K. N., Novopol'tsev M. I., Savrasov K. V., Mishkin V. P., Eliseev V. V., Martynenko V. A., Grishanin A. V. *Prikladnaya fizika* [Applied physics]. 2015, no. 3, pp. 10–14. [In Russian]
11. Nishchev K., Novopol'tsev M., Malygin M., Osipova E., Pyshkov D. *PCIM Europe Conference Proceedings*. 2020, vol. 1, pp. 1267–1271. Available at: <https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85089662253&origin=resultslist>
12. Pout Dzh., Tu K., Meyer Dzh. et al. *Tonkie plenki: Vzaimnaya diffuziya i reaktsii* [Thin Films: Interdiffusion and reactions]. Moscow: Mir, 1982, 576 p. [In Russian]
13. Patent 110310 Russian Federation. *Ustroystvo dlya polucheniya izdeliya iz metallomatrichnogo kompozitsionnogo materiala* [A device for producing a product from a metal matrix composite material]. Kablov E. N., Chibirkin V. V., Vdovin S. M., Grashchenkov D. V., Shchetanov B. V., Prokofev S. A., Muskatinev V. G., Nishchev K. N. 31.05.2011. [In Russian]
14. GOST 28574–90 (ST SEV 6319-88). *Zashchita ot korrozii v stroitel'stve. Konstruktsii betonnye i zhelezobetonnye. Metody ispytaniy adgezii zashchitnykh pokrytiy* [State Standart 28574-90 (ST SEV 6319-88). Corrosion protection in construction. Concrete and reinforced concrete structures. Test methods for adhesion of protective coatings]. Moscow, 1990. [In Russian]
15. GOST 15140–78. *Materialy lakokrasochnye. Metod opredeleniya adgezii* [State Standart 15140-78. Paints and varnishes. Method for determining adhesion]. Moscow, 1978. [In Russian]
16. GOST 32299–2013. *Materialy lakokrasochnye. Opredelenie adgezii metodom otryva* [State Standart 32299-2013. Paints and varnishes. Determination of adhesion by pull-off method]. Moscow, 2013. [In Russian]
17. Asadchikov V. E., Buzmakov A. V., Zolotov D. A., Senin R. A., Geranin A. S. *Kristallografiya* [Crystallography]. 2010, vol. 55, no. 1, pp. 7–9. [In Russian]

Нищев Константин Николаевич

кандидат физико-математических наук,
доцент, директор Института физики
и химии, Национальный
исследовательский Мордовский
государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевикская, 68)

E-mail: nishchev@inbox.ru

Nishchev Konstantin Nikolaevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, director
of the Institute of Physics and Chemistry,
Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Новопольцев Михаил Ильич

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей физики,
Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевистская, 68)

E-mail: novopol@inbox.ru

Малыгин Михаил Юрьевич

инженер-конструктор,
ПАО «Электровыпрямитель» (Россия,
г. Саранск, ул. Пролетарская, 126)

E-mail: maligin-m.y@yandex.ru

Чернобровкин Юрий Васильевич

инженер, кафедра общей физики,
Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевистская, 68)

E-mail: novopol@inbox.ru

Беглов Владимир Иванович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра радиотехники,
Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевистская, 68)

E-mail: beglowlad@yandex.ru

Сигачев Александр Федорович

ведущий инженер, кафедра физики
твердого тела, Национальный
исследовательский Мордовский
государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевистская, 68)

E-mail: siaf@mail.ru

Мишкин Владимир Петрович

инженер, кафедра общей физики,
Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет
имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск,
ул. Большевистская, 68)

E-mail: Vladimirm1978@mail.ru

Novopol'tsev Mikhail Il'ich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, sub-
department of general physics,
Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Malygin Mikhail Yur'evich

Design engineer, PJSC
"Elektrovypryamitel" (126 Proletarskaya
street, Saransk, Russia)

Chernobrovkin Yuriy Vasil'evich

Engineer, sub-department of general
physics, Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Beglov Vladimir Ivanovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of radio engineering,
Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Sigachev Aleksandr Fedorovich

Leading engineer, sub-department of solid
state physics, Ogarev Mordovia State
University (68 Bolshevistskaya
street, Saransk, Russia)

Mishkin Vladimir Petrovich

Engineer, sub-department of general
physics, Ogarev Mordovia State University
(68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Моисеев Николай Владимирович

кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра полупроводниковых материалов и приборов, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, 68)

E-mail: moiseev-nv@mail.ru

Moiseev Nikolay Vladimirovich

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, sub-department of semiconductor materials and devices, Ogarev Mordovia State University (68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Лютова Екатерина Николаевна

инженер, кафедра общей физики, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет имени Н. П. Огарева (Россия, г. Саранск, ул. Большевикская, 68)

E-mail: ekat.lyutova@yandex.ru

Lyutova Ekaterina Nikolaevna

Engineer, sub-department of general physics, Ogarev Mordovia State University (68 Bolshevistskaya street, Saransk, Russia)

Образец цитирования:

Влияние гранулометрического состава наполнителя и термообработки на адгезионную прочность многослойного металлического покрытия на поверхности металломатричного композиционного материала AlSiC / К. Н. Нищев, М. И. Новопольцев, М. Ю. Малыгин, Ю. В. Чернобровкин, В. И. Беглов, А. Ф. Сигачев, В. П. Мишкин, Н. В. Моисеев, Е. Н. Лютова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4 (56). – С. 186–200. – DOI 10.21685/2072-3040-2020-4-10.

Внимание 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).

Обращаем внимание авторов на то, что в соответствии с этическим кодексом журнала для обеспечения единообразия перевод фамилии, имени, отчества каждого автора на английский язык (в сведениях об авторах и списке литературы) осуществляется автоматически с использованием программы транслитерации в кодировке BGN (сайт translit.ru).

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).

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. Научные специальности журнала:

01.01.02 Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление

01.01.07 Вычислительная математика

01.01.09 Дискретная математика и математическая кибернетика

01.04.02 Теоретическая физика

01.04.05 Оптика

01.04.10 Физика полупроводников

01.04.15 Физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика

01.04.16 Физика атомного ядра и элементарных частиц

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) 64-32-89. 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.