

05 (К.УН.)
Вісн



ВІСНИК

**Київського
університету**

**Серія: фізико-математичні
науки**

Випуск № 4

Київ 2006

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК № 4 2006

**Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**



12910JB

45 - чит.зал періодики та дисерт. Ц: 10.00

Редакційна колегія:

- **Головний редактор** – **Булавін Леонід Анатолійович**, академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор
- **Відповідальний секретар** – **Анісімова Тетяна Харитонівна**, старший науковий співробітник

Члени редколегії:

- **Адаменко Ірина Іванівна**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Акименко Віталій Володимирович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Анатолій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Анісімов Ігор Олексійович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Гарашенко Федір Григорович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Єжов Станіслав Миколайович**, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Кириченко Володимир Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Котаченко Юрій Васильович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Левитський Сергій Михайлович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет);
- **Макара Володимир Арсенійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (фізичний факультет);
- **Мелешко В'ячеслав Володимирович**, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Перестюк Микола Олексійович**, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор (механіко-математичний факультет);
- **Понов Юрій Дмитрович**, доктор технічних наук, професор (факультет кібернетики);
- **Скришевський Валерій Антонович**, доктор фізико-математичних наук, професор (радіофізичний факультет).

Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету кібернетики.

Адреса редакційної колегії:

03022, вул. Глушкова, 2, корп. 6,
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
факультет кібернетики,
тел. (044) 259-01-49

ISBN 966-76-52-00-9

З М І С Т

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Єна О.Г. Про власні простори внутрішніх диференціювань в $P_2(k)$	11
Журавльов В.М., Журавльов Д.В. Про матриці показників горенштейнових порядків	18
Жучок А.В. Вільні добутки напівгруп	23
Зельдич М.В. Про нормальний базис алгебр ендоморфізмів розширень Галуа	26
Кириченко В.В., Зеленський О.В., Хибина М.А. Індекси горенштейнових матриць	28
Коломієць П.С. Деякі факти про бішубертівські багатовиди	38
Масол В.І., Слободян С.Я. Асимптотична нормальність числа розв'язків системи рівнянь з обмеженнями на розподіл нелінійних коефіцієнтів	48
Тадеев І.О., Кравчук О.А. До геометрії векторного поля n - вимірного афінного простору	61

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Безим'яна Е.М., Жмуріна А.А., Черниш М.Д. Стаціонарні мікротечії рідини у прямокутній порожнині	73
Бернінг Р., Мелешко В. Локальні області течії Стокса в клині та півплощині	83
Карнаухов В.Г., Карнаухова Т.В., П'ятецька О.В. Уточнена термомеханічна модель композитних оболонок типу Тимошенка з розподіленими ортотропними актуаторами при моногармонічному навантаженні	88
Лісняк В.С. Диференціальна геометрія неголономних аналогів класичних многовидів	98
Перекуда О.В., Ковтун О.І. Якісний аналіз поведінки системи двох згасаючих стохастичних осциляторів	106
Петрова Т.О. Один контрприклад для опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну	113
Плахотник М.В., Федоренко В.В., Федоренко Ю.В. Одновимірні динамічні системи з обмеженими у сукупності потужностями орбіт	119
Шарай Н.В. Про дослідження деякої напів'явної системи диференціальних рівнянь	129

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Анікушин А.В. Властивості узагальнених розв'язків лінійних операторних рівнянь в банахових просторах	137
Антосяк П.П. Алгоритм побудови колективного ранжування на основі методу вектора спаду	145
Галковський Т.О., Мілейко Ю.Ю., Рубльов Б.В. Статистичні дані випадкових діаграм Вороного вищих порядків на площині	148
Замковий О.В. Шевченко О.В. Розробка програмного прототипу інформаційного інтелектуального пошукового агента	153
Іксанов О.М. Моментні результати, пов'язані з процесами Гальтона-Ватсона	159
Капустян В.О., Капустян О.А., Фартушний І.Д. Асимптотики мінімаксних оцінок функціоналів від розв'язків критичної параболічної крайової задачі в класі обмежених функцій	166
Клименко В.Г. Вибір двох пунктів доставки однорідного товару з мінімальними транспортними витратами	172
Клюшин Д.А. Міра близькості між вибірками із дискретних генеральних сукупностей	177
Лисюк В.М., Семенов В.В., Семенов В.В., Сорока Ю.Б. Метод послідовної квадратичної оптимізації розв'язання задач на передопуклих множинах	186
Малишева Т.М. Про точність інтерполювання та збіжність послідовності інтерполянтів, асимптотично точних на поліномах в гільбертовому просторі	191
Маляр М.М., Баранник В.Ф., Маляр М.М. Побудова інтегрованої цільової функції в аналітичному вигляді	200
Подласов Є.С. Про задачу націлювання променів у неоднорідному хвилеводі	206
Саженок В.С., Гаркуша В.І., Риженко А.І. Застосування методу штрафу та фіктивних областей для параболічних варіаційних нерівностей другого порядку з обмеженням усередині області	211
Саженок В.С., Риженко А.І. Оцінка швидкості збіжності методу сіток для варіаційних еліптичних нерівностей четвертого порядку з обмеженням усередині області	216
Слабоспицький О.С. Розщеплена процедура оцінювання нестационарних параметрів нелінійних неперервних систем методом найменших квадратів зі змінним фактором забування	222
Тимофієва Н.К. Розв'язний випадок задачі розміщення	227
Утебаев Д. Исследование разностных схем метода конечных элементов для уравнения колебания с диссипацией	232

Холод Д.В. Побудова сервісно-орієнтованої системи електронного навчання	238
Хусаїнов Д.Я., Іванов А.Ф., Коварж І.В. Розв'язок рівняння коливання із післядією	243

РАДІОФІЗИКА

Анісімов І.О., Літошенко Т.С. Нелінійна взаємодія модульованого електронного пучка з областю локального плазмового резонансу: двовимірне моделювання	251
Афанас'єва Т.В., Коваль І.П., Находкін М.Г., Сторчак М.М. Адсорбція та обертання димерів Ві на поверхні Si(001)2x1	257
Бабіч І.І., Веклич А.М., Осідач В.Є. Дослідження плазми електродугового розряду між композиційними електродами на основі міді	265
Бенілов А.І., Скришевський В.А. Удосконалення методу вимірювання часу життя люмінесценції	269
Гайдай Ю.О., Сидоренко В.С., Сінькевич О.В. Методи розрахунку задач ближньопольової НВЧ мікроскопії	279
Григорук В.І., Огенько В.М., Волковинська Л.С., Голдун О.В., Коломієць О.М. Синтез вуглецевих нано-структур з використанням властивостей ближнього оптичного поля	285
Іванюта О.М., Курочка М.І., Прокопенко О.В., Толкачов В.І., Юдіна О.С. Вплив зовнішнього магнітного поля на ВАХ високотемпературного джозефсонівського контакту	291
Кременецький О.Ю., Іванісік А.І. Енергетично-частотні характеристики випромінювання, зумовленого перехідним ефектом у самофокусуючих середовищах	297
Левитський С.М. Спрощений метод одержання "закону 3/2» для струму у вакуумному діоді	305
Лисоченко С.В., Безякін В.О., Жарких Ю.С., Третяк О.В. Автоматизована установка безконтактного контролю якості технологічних обробок напівпровідникових пластин	308
Малюта В.В., Обуховський В.В. Розповсюдження поляризаційного імпульса в сегнетоелектриках	318
Находкін М.Г., Федорченко М.І. Формування інтерфейсу Sb/Ge(111)	323
Обуховський В.В., Попова В.В. Вплив молекулярної взаємодії на процеси нелінійної дифузії	333
Ткаченко А.В., Ананьїна О.Ю., Яновський О.С. Теоретичне дослідження корозійної дії атомарного водню на моногідридній поверхні Ge(100)-(2x1)	339

Юхименко В.В., Черняк В.Я., Наумов В.В., Присяжневич І.В., Скалій Ян Д., Матейчик С., Сабо М. Оптичні дослідження повітряної плазми електричного розряду з водяною стінкою	346
--	-----

СУЧАСНА ФІЗИКА

Альохін О.Д. Розрахунки критичних температур малих обмежених систем	357
Безшийко О.А., Голінка-Безшийко Л.О., Каденко І.М. Розрахунок множинності нейтронів для уламків поділу з використанням коду Empire II	360
Булавін Л.А., Якунов А.В., Білий М.М. Повільні нестационарні явища в люмінесценції водних розчинів органічних барвників.	367
Бурлій П.В., Городниченко О.С., Гнатюк В.А. Лазерна ударна хвиля як механізм трансформації дефектної структури напівпровідника	378
Вакуленко О.В., Северин В.С. Вплив електронної поляризації на оптичні властивості металу	387
Гіржон В.В., Смоляков О.В., Танцюра І.В. Формування квазікристалічної фази в поверхневих шарах технічного алюмінію при лазерному легуванні	398
Гоженко В.В., Гончарук Ю.С., Гречко Л.Г., Куницька Л.Ю. Поверхневі моди малих частинок межі розділу фаз	406
Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Білокриницька Л.М., Шостак С.В. Поверхневі моди в багатошарових малих частинках еліпсоїдальної форми	416
Слізаров О.І., Слізаров М.О., Журав В.В., Руденко О.П. Особливості електропровідності дисперсної системи вологого грунту	426
Захаренко М. І., Семенько М. П. Вплив легування перехідними металами на електроопір аморфних сплавів на основі Fe	439
Макара В.А., Стебленко Л.П., Курилюк А.М., Кольченко Ю.Л., Науменко С.М., Матвеева О.В., Кріт О.М. Зміна мікротвердості кристалів кремнію в магнітних полях з різною індукцією	444
Охріменко Б.А., Яблочкова К.С. Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію зв'язків Н-Х молекул типу H_2X	449
Погорелов В., Лізенгевич О., Євглевський О. Структура смуг С-Н коливань в вуглеводнях: ізооктан	459
Поперенко Л.В., Розуван К.П.І, Розуван С.Г. Перетворення Лоренца для тонкої плівки	466

Семко Л.С., Горбик П.П., Рево С.Л., Сторожук Л.П., Оранська О.І., Скрипка О.І. Структура та магнітні властивості нанокристалічного магнетиту і нанокомпозитів на його основі	472
Слободянюк О.В., Гарасевич С.Г., Коренюк П.І., Мягченко Ю.О. Особливості комбінаційного розсіяння світла в одновісних гіроτροпних кристалах	481
Щерба А.А., Подольцев О.Д., Удалов Є.П., Хомич Ю.А. Електроімпульсний спосіб дес-трукції відпрацьованих автомо-більних шин з металокордом і кінцево-елементне модельовання виникаючих у них механічних напружень	498
Макара В.А., Дуб С.М., Весна Г.В., Горячова В.Ю. Поведінка механічних характеристик нанооб'ємів іонних кристалів	507

РАДІОФІЗИКА

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ЙМОВІРНОСТЕЙ

УДК 512.554

Олександр Г. Єна*

Про власні простори внутрішніх диференціювань в $P_2(k)$

В роботі доведено, що ненульові власні підпростори $V_a(f)$ внутрішнього диференціювання $\text{ad}(f)$ алгебри Лі $P_2(k)$, що відповідають узагальненому власному значенню a мають форму $g_{a,f}k[\bar{f}]$, де $\bar{f}$ є породжуючий поліном для f і $g_{a,f}$ не ділиться на вільний від констант елементи з $k[f]$.

*E-mail: yena@univ.kiev.ua

Oleksandr G. Iena*

On eigenspaces of inner derivations in $P_2(k)$

We prove that non-zero eigenspaces $V_a(f)$ of inner derivation $\text{ad}(f)$ which correspond to the generalized eigenvalue a have a form $g_{a,f}k[\bar{f}]$, where $\bar{f}$ is a generative polynomial for f and $g_{a,f}$ is not divisible by non-constant elements from $k[f]$.

1. Вступ

Як відомо, в кільці многочленів $k[x, y]$ від двох змінних над полем k заміна операції множення fg многочленів f і g операцією взяття якобіана $[f, g] = \det(J(f, g))$ (тут $J(f, g)$ – матриця Якобі многочленів f і g) перетворює асоціативну алгебру $k[x, y]$ на алгебру Лі, яку ми будемо надалі позначати через $P_2(k)$. Будова цієї алгебри Лі тісно пов'язана з будовою групи автоморфізмів $\text{Aut}(k[x, y])$ алгебри многочленів $k[x, y]$, вивченню якої присвячено велику кількість робіт (див, наприклад, [1]). В роботі [2] були описані централізатори і максимальні абелеві підалгебри алгебри Лі $P_2(k)$ у випадку алгебраїчно замкненого поля k характеристики 0. Дужка Лі $[f, g]$ єдиним чином продовжується з алгебри многочленів $k[x, y]$ на поле раціональних функцій $k(x, y)$ від двох змінних над полем k , отриману таким чином алгебру Лі будемо позначати через $\tilde{P}_2(k)$.

В першій частині роботи вказано основні властивості замкнених раціональних функцій, які аналогічні властивостям замкнених многочленів. Потім з використанням отриманих результатів дано опис централізаторів і максимальних абелевих підалгебр в алгебрі Лі $\tilde{P}_2(k)$ в термінах замкнених раціональних функцій. В другій частині роботи вивчаються узагальнені власні числа і власні функції деяких диференціювань алгебри Лі $P_2(k)$.

Основне поле k вважається надалі алгебраїчно замкненим характеристики 0. Нехай $f \in k[x, y] \setminus k$ – довільний многочлен. Тоді многочлен $h \in k[x, y]$ називається породжуючим многочленом для f , якщо виконується одна з наступних еквівалентних умов:

1) $f \in k[h]$, і h є замкненим многочленом (це означає, що підалгебра $k[f]$ цілозамкнена в алгебрі многочленів $k[x, y]$);

2) $f \in k[h]$, і $k[h]$ є максимальним елементом частково впорядкованої (відносно включення) множини $M = \{k[h] \mid h \in k[x, y] \setminus k\}$.

Нехай h_1 і h_2 два породжуючих многочлени для f . Тоді існують $a, b \in k$, $a \neq 0$, такі що $h_1 = ah_2 + b$. Еквівалентно: $k[h_1] = k[h_2]$. Породжуючий многочлен для f ми позначаємо через $\bar{f}$. В [2] було доведено, що централізатор $C_{P_2(k)}(f)$ довільного многочлена f відмінного від константи співпадає з $k[\bar{f}]$.

2. Централізатори елементів і максимальні абелеві підалгебри в алгебрі Лі $\tilde{P}_2(k)$

Аналогічно до $P_2(k)$ (див. [2]) дамо опис централізаторів елементів та максимальних абелевих підалгебр в алгебрі $\tilde{P}_2(k)$. Цей опис дається у термінах замкнених раціональних функцій, що визначаються аналогічно до замкнених многочленів. Нагадаємо, що підполе k поля L називається алгебраїчно замкненим в L , якщо кожен алгебраїчний над полем k елемент із L , лежить в полі k .

Означення 1. Раціональна функція $f \in k(x, y) \setminus k$ називається замкненою, якщо $k(f)$ є алгебраїчно замкненим підполем поля раціональних функцій $k(x, y)$.

Лема 1. Нехай $f \in k(x, y) \setminus k$. Раціональна функція f замкнена тоді і лише тоді, коли поле $k(f)$ є максимальним елементом в частково упорядкованій (відносно включення) множині

$$M = \{k(h) \mid h \in k(x, y) \setminus k\},$$

тобто є максимальним однопородженням полем.

Доведення. Нехай f - замкнена раціональна функція. Припустимо, що $k(f) \subseteq k(g)$ для деякого елемента $g \in k(x, y)$. Позначимо

$$f = \frac{a_n g^n + \dots + a_0}{b_n g^n + \dots + b_0}, \quad a_i, b_i \in k,$$

отже $(b_n g^n + \dots + b_0)f = a_n g^n + \dots + a_0$. Останнє означає, що g алгебраїчний над $k(f)$. Тому, оскільки $k(f)$ є алгебраїчно замкненим у $k(x, y)$, ми отримуємо $g \in k(f)$ і $k(f) = k(g)$. Це доводить, що $k(f)$ максимальний елемент в M .

Нехай тепер $k(f)$ максимальний елемент множини M . Позначимо через E алгебраїчне замикання підполя $k(f)$ в полі $k(x, y)$. Тоді степінь трансцендентності $\text{tr.deg}_k E = \text{tr.deg}_k k(f) = 1$. За Теоремою Гордана (див., наприклад, [3], р.15) маємо $E = k(e)$ для деякого елемента $e \in k(x, y)$. Тому

1) $f \in k[h]$, і h є замкненим многочленом (це означає, що підалгебра $k[f]$ цілозамкнена в алгебрі многочленів $k[x, y]$);

2) $f \in k[h]$, і $k[h]$ є максимальним елементом частково впорядкованої (відносно включення) множини $M = \{k[h] \mid h \in k[x, y] \setminus k\}$.

Нехай h_1 і h_2 два породжуючих многочлени для f . Тоді існують $a, b \in k$, $a \neq 0$, такі що $h_1 = ah_2 + b$. Еквівалентно: $k[h_1] = k[h_2]$. Породжуючий многочлен для f ми позначаємо через $\bar{f}$. В [2] було доведено, що централізатор $C_{C_k(k)}(f)$ довільного многочлена f відмінного від константи співпадає з $k[\bar{f}]$.

2. Централізатори елементів і максимальні абелеві підалгебри в алгебрі $L_1 \tilde{P}_2(k)$

Аналогічно до $P_2(k)$ (див. [2]) дамо опис централізаторів елементів та максимальних абелевих підалгебр в алгебрі $\tilde{P}_2(k)$. Цей опис дається у термінах замкнених раціональних функцій, що визначаються аналогічно до замкнених многочленів. Нагадаємо, що підполе k поля L називається алгебраїчно замкненим в L , якщо кожен алгебраїчний над полем k елемент із L , лежить в полі k .

Означення 1. Раціональна функція $f \in k(x, y) \setminus k$ називається замкненою, якщо $k(f)$ є алгебраїчно замкненим підполем поля раціональних функцій $k(x, y)$.

Лема 1. Нехай $f \in k(x, y) \setminus k$. Раціональна функція f замкнена тоді і лише тоді, коли поле $k(f)$ є максимальним елементом в частково упорядкованій (відносно включення) множині

$$M = \{k(h) \mid h \in k(x, y) \setminus k\},$$

тобто є максимальним однопородженням полем.

Доведення. Нехай f - замкнена раціональна функція. Припустимо, що $k(f) \subsetneq k(g)$ для деякого елемента $g \in k(x, y)$. Позначимо

$$f = \frac{a_n g^n + \dots + a_0}{b_n g^n + \dots + b_0}, \quad a_i, b_i \in k,$$

отже $(b_n g^n + \dots + b_0)f = a_n g^n + \dots + a_0$. Останнє означає, що g алгебраїчний над $k(f)$. Тому, оскільки $k(f)$ є алгебраїчно замкненим у $k(x, y)$, ми отримуємо $g \in k(f)$ і $k(f) = k(g)$. Це доводить, що $k(f)$ максимальний елемент в M .

Нехай тепер $k(f)$ максимальний елемент множини M . Позначимо через E алгебраїчне замикання підполя $k(f)$ в полі $k(x, y)$. Тоді степінь трансцендентності $\text{tr.deg}_k E = \text{tr.deg}_k k(f) = 1$. За Теоремою Гордана (див., наприклад, [3], р.15) маємо $E = k(e)$ для деякого елемента $e \in k(x, y)$. Тому

$k(f) \subseteq E = k(e)$, і з максимальності $k(f)$ отримуємо $k(f) = k(e) = E$. Звідси випливає, що підполе $k(f)$ алгебраїчно замкнене в полі $k(x, y)$.

Лема 2. Якщо $f \in k[x, y]$ – замкнений многочлен, то f замкнений як раціональна функція.

Доведення. Нехай f – замкнений многочлен. Покажемо, що $k(f)$ – алгебраїчно замкнене підполе в полі раціональних функцій $k(x, y)$. Припустимо, що це не так і позначимо через L алгебраїчне замикання підполя $k(f)$ в полі $k(x, y)$. Оскільки степінь трансцендентності поля L над k дорівнює одиниці, то за теоремою Гордана (див. [3], р.15) $L = k(g)$, де g – деяка раціональна функція. Оскільки L містить несталий многочлен f , то за теоремою Е.Нетер (див., наприклад, [3], р.16) твірний елемент підполя L можна вибрати многочленом, тобто вважати надалі, що g – многочлен. Але тоді підалгебра $k[f]$ строго міститься в підалгебрі $k[g]$, що неможливо з огляду на характеристику замкнених многочленів із роботи [4]. Отримане протиріччя показує, що $k(f)$ – алгебраїчно замкнене підполе $k(x, y)$, тобто многочлен f – замкнений як раціональна функція. Лему доведено.

Означення 2. Для даної раціональної функції $f \in k(x, y)$ раціональна функція h називається породжуючою для f , якщо h – замкнена і $f \in k(h)$.

Зауважимо, що це еквівалентно тому, що $k(h)$ – максимальний елемент в множині всіх підполів степеня трансцендентності 1 із $k(x, y)$ (частково впорядкованої відносно включення) і $f \in k(h)$.

Лема 3. Нехай D – ненульове диференціювання поля $k(x, y)$. Тоді $\ker D = k(f)$ для деякої замкненої раціональної функції f .

Доведення. З огляду на результати роботи [5] (Corollary 2.6) $\ker D = k(f)$ для деякого елемента $f \in k(x, y)$. Так само як і в Лемі 2.1 з [4] можна довести, що $\ker D$ алгебраїчно замкнене підполе поля $k(x, y)$. Тому f є замкненою раціональною функцією.

Лема 4. Нехай f і g дві алгебраїчно залежні раціональні функції з $k(x, y)$. Тоді $[f, g] = 0$.

Доведення. Оскільки f і g алгебраїчно залежні, існує многочлен $\Phi \in k[t_1, t_2] \setminus k$, такий, що $\Phi(f, g) = 0$. Тоді $\frac{\partial}{\partial x} \Phi(f, g) = \frac{\partial}{\partial y} \Phi(f, g) = 0$, звідки випливає

$$\begin{cases} \Phi_1(f, g) \frac{\partial f}{\partial x} + \Phi_2(f, g) \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \\ \Phi_1(f, g) \frac{\partial f}{\partial y} + \Phi_2(f, g) \frac{\partial g}{\partial y} = 0. \end{cases}$$

Оскільки або $\Phi_1(f, g)$ або $\Phi_2(f, g)$ не дорівнює нулю, маємо

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{pmatrix} = [f, g] = 0.$$

Лему доведено.

Лема 5. 1) Нехай $f, g \in k(x, y)$ дві алгебраїчно залежні раціональні функції. Тоді існує замкнена раціональна функція $h \in k(x, y)$ така, що $f \in k(h)$ і $g \in k(h)$.

2) Для довільного $g \in k(x, y) \setminus k$ існує породжуючий елемент f . Для довільних породжуючих елементів f_1 і f_2 раціональної функції g маємо $k(f_1) = k(f_2)$.

Доведення. 1) За Лемою 4 маємо $[f, g] = 0$. За Лемою 3 $\ker \operatorname{ad}(f) = k(h)$ для деякого замкненого елемента $h \in k(x, y)$. Оскільки $f \in \ker \operatorname{ad}(f)$ і $g \in \ker \operatorname{ad}(f)$, маємо $f \in k(h)$ і $g \in k(h)$.

2) Маємо $g \in C_{\tilde{P}_2(k)}(g) = \ker \operatorname{ad}(g)$. За Лемою 3 $\ker \operatorname{ad}(g) = k(f)$ для деякого замкненого елемента $f \in k(x, y)$.

Нехай f_1 і f_2 два породжуючих елементи для g . Тоді $g = \Phi_1(f_1)$ і $g = \Phi_2(f_2)$ для деяких раціональних функцій $\Phi_1, \Phi_2 \in k(t)$. Отже

$$0 = g - g = \Phi_1(f_1) - \Phi_2(f_2),$$

звідки отримуємо, що f_1 і f_2 алгебраїчно залежні. З 1) отримуємо, що $f_1 \in k(f)$ і $f_2 \in k(f)$ для деякого замкненого елемента f . Оскільки обидва f_1 і f_2 замкнені, звідси отримуємо співвідношення $k(f_1) = k(f) = k(f_2)$.

Теорема 1. 1) Для довільного елемента $g \in \tilde{P}_2(k) \setminus k$ його централізатор $C_{\tilde{P}_2(k)}(g)$ співпадає з $k(f)$ для будь-якої породжуючої раціональної функції f елемента g .

2) Нехай A максимальна абелева підалгебра в алгебрі Лі $\tilde{P}_2(k)$. Тоді $A = k(f)$ для деякої замкненої раціональної функції $f \in \tilde{P}_2(k) \setminus k$. Навпаки, для будь-якої замкненої раціональної функції $f \in \tilde{P}_2(k) \setminus k$ підалгебра $k(f)$ є максимальною абелевою підалгеброю в $\tilde{P}_2(k)$.

Доведення. 1) Випливає з Лемми 3, оскільки $C_{\tilde{P}_2(k)}(g) = \ker \operatorname{ad}(g)$.

2) Нехай A максимальна абелева підалгебра алгебри Лі $\tilde{P}_2(k)$. Неважко переконатися, що підалгебра A містить многочлени, які не є константами (оскільки центр алгебри Лі $\tilde{P}_2(k)$ збігається з k). Візьмемо довільний відмінний від константи елемент g з A . Очевидно, $A \subseteq C_{\tilde{P}_2(k)}(g) = k(f)$ для деякого замкненого елемента f . Оскільки $k(f)$ є абелевою підалгеброю, то $A = k(f)$. Нехай тепер f замкнена раціональна функція. Тоді $k(f)$ очевидно абелева підалгебра. Залишається показати, що $k(f)$ є максимальною абелевою підалгеброю в $\tilde{P}_2(k)$. Візьмемо довільний елемент g такий, що $[f, g] \neq 0$. Тоді $g \in C_{\tilde{P}_2(k)}(f) = k(f)$. Отже, елементи, що

комутують з f , належать $k(f)$. Таким чином, $k(f)$ максимальна абелева підалгебра в $\tilde{P}_2(k)$. Теорему доведено.

3. Узагальнені власні значення і власні функції диференціювань алгебри Лі $P_2(k)$

Рациональна функція (ненульова) $g \in k(x, y)$ називається власною функцією внутрішнього диференціювання $\text{ad}(f)$, $f \in k(x, y)$, якщо $[f, g] = ag$ для деякої раціональної функції a , яка називається узагальненим власним значенням лінійного оператора $\text{ad}(f)$. Через $V_a(f) = \{g \mid \text{ad}(f)(g) = ag\}$ позначатимемо простір власних функцій внутрішнього диференціювання $\text{ad}(f)$, що відповідають узагальненому власному значенню a .

Лема 6. Нехай $f, g, h \in k[x, y]$, $h \neq 0$, $\text{НСД}(g, h) = 1$. Рациональна функція g/h належить $C_{\tilde{P}_2(k)}(f)$ тоді і лише тоді, коли g і h є власними функціями лінійного оператора $\text{ad}(f)$, що відповідають одному і тому ж узагальненому власному значенню (можливо нульовому).

Доведення. Оскільки $[f, g/h] = ([f, g]h - [f, h]g)/h^2$, ми отримуємо, що $[f, g/h] = 0$ тоді і лише тоді, коли $[f, g]h = [f, h]g$. Оскільки g і h взаємно прості многочлени, останнє виконується лише за умов $[f, g] = ag$ і $[f, h] = ah$ для деякого $a \in k[x, y]$.

Лема 7. Нехай a і f многочлени з $k[x, y]$, $a \neq 0$. Тоді

1) Довільні два ненульових многочлени з множини

$$V_a(f) = \{g \in k[x, y] \mid \text{ad}(f)(g) = ag\}$$

мають спільний дільник із $k[x, y] \setminus k$.

2) Нехай $g, h \in k[x, y] \setminus k$ і нехай $gh \in V_a(f)$. Тоді $g \in V_a(f)$ тоді і лише тоді, коли $h \in C_{\tilde{P}_2(k)}(f)$.

3) Нехай $g, h \in V_a(f) \setminus \{0\}$ і нехай $d = \text{НСД}(g, h)$. Тоді $d \in V_a(f)$.

Доведення. 1) Припустимо, що існують $g, h \in V_a(f)$ з $\text{НСД}(g, h) = 1$. За Лемою 6 отримуємо $g/h \in C_{\tilde{P}_2(k)}(f)$. Нехай $\bar{f}$ породжуючий многочлен для f . За Лемою 2 $\bar{f}$ є також породжуючим елементом для f в $k(x, y)$. Отже, за Теоремою 1 $C_{\tilde{P}_2(k)}(f) = k(\bar{f})$ і ми отримуємо $g/h \in k(\bar{f})$. Таким чином $g/h = G(\bar{f})/H(\bar{f})$ для деяких поліномів $H, G \in k[t]$, $\text{НСД}(G, H) = 1$. Зауважимо, що з рівності $\text{НСД}(G(t), H(t)) = 1$ випливає, що $\text{НСД}(G(\bar{f}), H(\bar{f})) = 1$. Тому, з точністю до множення на відмінну від нуля константу, $g = G(\bar{f})$ і $h = H(\bar{f})$. Звідси отримуємо співвідношення $g, h \in k[\bar{f}] = C_{\tilde{P}_2(k)}(f)$, що суперечить умові $a \neq 0$.

2) Випливає з рівності $[f, g]h + [f, h]g = [f, gh] = agh$.

3) Нехай $g = dg_1$, $h = dh_1$. Тоді $[f, g_1/h_1] = [f, (dg_1)/(dh_1)] = [f, g/h] = ([f, g]h - [f, h]g)/h^2 = (ag_1h - ahg_1)/h^2 = 0$.

Таким чином $g_i/h_i \in C_{P_1(k)}(f) = k[\bar{f}]$, звідки, використовуючи умову $\text{НСД}(g_i, h_i) = 1$, отримуємо $g_i, h_i \in k[f] = C_{P_1(k)}(f)$. Тоді пункту 2) випливає, що $d \in V_d(f)$.

Теорема 2. Нехай $a, f \in k[x, y]$, $a \neq 0$, $V_a(f) \neq 0$. Тоді існує многочлен $g_{af} \in k[x, y]$, такий що $V_a(f) = g_{af} k[\bar{f}]$ і g_{af} не ділиться на многочлени, відмінні від констант з $C_{P_1(k)}(f) = k[\bar{f}]$. Зокрема, простір $V_a(f)$ нескінченновимірний.

Доведення. В якості g_{af} візьмемо довільний ненульовий многочлен з $V_a(f)$ мінімального степеня. Тоді для довільного $g \in V_a(f)$ за Лемою 7 $\text{НСД}(g_{af}, g) \in V_a(f)$. Оскільки g_{af} має мінімальний степінь, з точністю до множення на відмінну від нуля константу, маємо $\text{НСД}(g_{af}, g) = g_{af}$. Тому g_{af} ділить усі $g \in V_a(f)$. За Лемою 7 маємо $g_{af} k[\bar{f}] \subseteq V_a(f) \subseteq g_{af} k[\bar{f}]$, і тому $V_a(f) = g_{af} k[\bar{f}]$.

Зауваження. З огляду на теорему 2 достатньо знайти лише один многочлен з $V_a(f)$. Дійсно, якщо відомий ненульовий елемент $g \in V_a(f)$, то ми можемо поділити g на його дільник найбільшого степеня із $C_{P_1(k)}(f) = k[\bar{f}]$. Таким чином отримаємо многочлен g_{af} .

Література

1. A. van den Essen, Polynomial Automorphisms and the Jacobian Conjecture // Birkhaeuser Verlag, Boston, 2000.
2. A.P.Petravchuk, O.G.Iena, On centralizers of elements in the Lie algebra of the special Cremona group $SA_2(k)$, // Journal of Lie Theory, 16(2006), 561-567.
3. A.Schinzel, Polynomials with Special Regard to Reducibility, Cambridge Univ. Press, 2000.
2. A.Nowicki, M.Nagata, Rings of constants for k -derivations in $k[x_1, \dots, x_n]$, // J. Math. Kyoto Univ. 28(1988), 111-118.
5. V.Bavula, Lüroth field extensions, // Journal of Pure and Applied algebra, 199(2005), 1-10.

Надійшла до редакції

УДК 512.552

Віктор М. Журавльов, Дмитро В. Журавльов.

Про матриці показників горенштейнових порядків.

В статті для довільного зведеного горенштейнового черепичного порядку, підстановка Кириченка якого є добутком циклів, довжини яких є взаємно прості у сукупності, встановлено вигляд матриці показників.

Ключові слова: горенштейновий черепичний порядок, матриця показників, підстановка Кириченка.

*E-mail: vshur@univ.kiev.ua

Viktor N. Zhuravlev, Dmytro V. Zhuravlyov.

On exponent matrices of Gorenstein orders.

In the paper, for an arbitrary reduced Gorenstein tiled order with Kirichenko's permutation being a product of cycles such that their lengths are coprime, a exponent matrices of these orders are described.

Key Words: Gorenstein tiled order, exponent matrix, Kirichenko's permutation.

Черепичні порядки (первинні напівмаксимальні кільця в термінології [1]) виникли в 70-их роках минулого століття. Матриці показників зведених циклічних горенштейнових черепичних порядків розглянуто в роботі [3]. В роботі [4] встановлені умови, за яких матриця показників циклічного горенштейнового черепичного порядку подається у вигляді лінійної комбінації степенів переставної матриці. В цій же роботі для довільного зведеного горенштейнового черепичного порядку, підстановка Кириченка якого є добутком циклів, довжини яких є попарно взаємно простими, описано вигляд матриці показників.

Мета цієї роботи — встановити вигляд матриці показників зведеного горенштейнового черепичного порядку у випадку, коли підстановка σ порядку Λ є добутком циклів, довжини яких є взаємно прості в сукупності.

Ми дотримуємося термінології та позначень, прийнятих в [3]. Необхідні для нас відомості про горенштейнові напівмаксимальні кільця можна знайти в [1], [2], [3].

Нехай $\Lambda = \{\theta, E(\Lambda) = (\alpha_{ij})\}$ — зведений горенштейновий черепичний порядок з підстановкою Кириченка σ , $\sigma = \sigma_1 \cdots \sigma_s$ — розклад підстановки σ в добуток циклів, що не перетинаються, m_k — довжина циклу σ_k . Можна вважати, що $\sigma_k = (g_k + 1 \ g_k + 2 \ \cdots \ g_k + m_k)$ (цього можна досягти перетвореннями другого типу), де $g_k = \sum_{j=1}^{k-1} m_j$. Нехай

$f_k = e_{g_k+1, g_k+1} + e_{g_k+2, g_k+2} + \cdots + e_{g_k+m_k, g_k+m_k}$, $1 = f_1 + \cdots + f_s$ — розклад одиниці кільця Λ в суму взаємно ортогональних ідемпотентів. Двосторонній пірсонський розклад кільця Λ має вигляд

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} & \cdots & \Lambda_{1s} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} & \cdots & \Lambda_{2s} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \Lambda_{s1} & \Lambda_{s2} & \cdots & \Lambda_{ss} \end{pmatrix},$$

де Λ_{kk} — зведений циклічний горенштейновий черепичний порядок з підстановкою Кириченка $\sigma'_k = (1 \ 2 \ \cdots \ m_k)$. Відповідно до цього матриця показників порядку Λ має блочний вигляд $\mathcal{E} = (\mathcal{E}_{ij})$, де $\mathcal{E}_{kk}$ — матриця показників циклічного горенштейнового зведеного черепичного порядку Λ_{kk} . Запишемо умову горенштейновості порядку Λ в матричному вигляді

$$\mathcal{E} + P_{\sigma} \mathcal{E}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma(k)}\}U$$

або

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}_{11} & \mathcal{E}_{12} & \cdots & \mathcal{E}_{1s} \\ \mathcal{E}_{21} & \mathcal{E}_{22} & \cdots & \mathcal{E}_{2s} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathcal{E}_{s1} & \mathcal{E}_{s2} & \cdots & \mathcal{E}_{ss} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} P_{\sigma'_1} & O & \cdots & O \\ O & P_{\sigma'_2} & \cdots & O \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ O & O & \cdots & P_{\sigma'_s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{11}^T & \mathcal{E}_{21}^T & \cdots & \mathcal{E}_{s1}^T \\ \mathcal{E}_{12}^T & \mathcal{E}_{22}^T & \cdots & \mathcal{E}_{s2}^T \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathcal{E}_{1s}^T & \mathcal{E}_{2s}^T & \cdots & \mathcal{E}_{ss}^T \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_1(k)}\} & O & \cdots & O \\ O & \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_2(k)}\} & \cdots & O \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ O & O & \cdots & \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_s(k)}\} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \cdots & U_{1s} \\ U_{21} & U_{22} & \cdots & U_{2s} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ U_{s1} & U_{s2} & \cdots & U_{ss} \end{pmatrix}$$

Звідси отримуємо систему матричних рівнянь

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{ij} + P_{\sigma'_i} \mathcal{E}_{ij}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_i(k)}\}U_{ij} \\ \mathcal{E}_{ij} + P_{\sigma'_i} \mathcal{E}_{ji}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_i(k)}\}U_{ij} \\ \mathcal{E}_{ji} + P_{\sigma'_j} \mathcal{E}_{ij}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_j(k)}\}U_{ji} \end{cases}$$

Крім цього, елементи блочних матриць $\mathcal{E}_{11}$, $\mathcal{E}_{22}$, ..., $\mathcal{E}_{ss}$ за [4] задовольняють

систему $\frac{\sum_{k=1}^{m_1} \alpha_{k\sigma'_1(k)}}{m_1} = \frac{\sum_{k=1}^{m_2} \alpha_{k\sigma'_2(k)}}{m_2} = \cdots = \frac{\sum_{k=1}^{m_s} \alpha_{k\sigma'_s(k)}}{m_s}$. Для знаходження $\mathcal{E}_{ij}$ маємо

систему

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{ij} + P_{\sigma'_i} \mathcal{E}_{ji}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_i(k)}\}U_{ij} \\ \mathcal{E}_{ji} + P_{\sigma'_j} \mathcal{E}_{ij}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_j(k)}\}U_{ji} \end{cases}$$

Звідси

$$\mathcal{E}_{ij} + P_{\sigma'_j} (\text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_j(k)}\}U_{ji} - P_{\sigma'_j} \mathcal{E}_{ij}^T)^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma'_i(k)}\}U_{ij}$$

або

$$\mathcal{E}_{ij} - P_{\sigma_1} \mathcal{E}_{ij} P_{\sigma_1}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma_1^k(i)}\} U_{ij} - P_{\sigma_1} U_{ij} \text{diag}\{\alpha_{k\sigma_1^k(j)}\}.$$

Враховуючи, що переставна матриця при множенні лише переставляє рядки або стовпчики матриці-співмножника, маємо

$$\mathcal{E}_{ij} - P_{\sigma_1} \mathcal{E}_{ij} P_{\sigma_1}^T = \text{diag}\{\alpha_{k\sigma_1^k(i)}\} U_{ij} - U_{ij} \text{diag}\{\alpha_{k\sigma_1^k(j)}\}. \quad (1)$$

Лема. Нехай $\sigma_1 = (1 \ 2 \ \dots \ n)$, $\sigma_2 = (1 \ 2 \ \dots \ m)$, $(n, m) = d$, $n = du$, $m = dv$. Розв'язок рівняння $X - P_{\sigma_1} X P_{\sigma_2}^T = 0$ є наступною блочною $u \times v$ матрицею

$$X = \begin{pmatrix} F & \dots & F \\ \dots & \dots & \dots \\ F & \dots & F \end{pmatrix}, \text{ де } F \in M_d(Z) \text{ і } F \text{ є лінійною комбінацією з довільними кое-}$$

фіцієнтами степенів переставної матриці $P_\tau = \sum_{k=1}^d e_{k\tau(k)}$, де $\tau = (1 \ 2 \ \dots \ d)$.

Доведення. Рівняння $X = P_{\sigma_1} X P_{\sigma_2}^T$ можна подати у вигляді $x_{ij} = x_{\sigma_1(i)\sigma_2(j)}$. Звідси $x_{ij} = x_{\sigma_1^k(i)\sigma_2^k(j)}$ для довільного цілого k . Покажемо, що для довільних цілих чисел p, q таких, що $0 < i + pd \leq n$, $0 < j + qd \leq m$ виконується рівність $x_{ij} = x_{i+pd, j+qd}$.

Для довільного цілого k мають місце співвідношення $\sigma_1^k(i) \equiv i + k \pmod{n}$, $\sigma_2^k(j) \equiv j + k \pmod{m}$. Оскільки числа u та v взаємно прості, то існують натуральні числа a та b такі, що $p - q = bv - au$. Покладемо $k = pd + au + cnm = qd + bv + cnm$. Тоді $\sigma_1^k(i) \equiv i + k \equiv i + pd \pmod{n}$, $\sigma_2^k(j) \equiv j + k \equiv j + qd \pmod{m}$. Звідси випливає, що $x_{ij} = x_{i+pd, j+qd}$. Це означає, що матриця X розбивається на uv однакових квадратних блоків F порядку d (по u блоків у блочному стовпчику та по v блоків у блочному рядку матриці X). Отже,

$$X = \begin{pmatrix} F & \dots & F \\ \dots & \dots & \dots \\ F & \dots & F \end{pmatrix} \in M_{uv}(F). \text{ Покажемо тепер, що } x_{ij} = x_{\pi(i)\pi(j)} \text{ при } i, j \leq d, \text{ де } \pi = (1 \ 2 \ \dots \ d).$$

Якщо $i, j < d$, то при $k = 1$ маємо $x_{ij} = x_{\sigma_1^k(i)\sigma_2^k(j)} = x_{i+1, j+1} = x_{\pi(i)\pi(j)}$.

Нехай $i < d$, $j = d$. Позаяк числа u та v взаємно прості, то $1 = \delta v - \gamma u$ для деяких цілих чисел δ та γ . Покладемо $k = 1 + \gamma n + cnm = 1 - d + \delta m + cnm$. Тоді $\sigma_1^k(i) \equiv i + k \equiv i + 1 + \gamma n + cnm \equiv i + 1 \pmod{n}$, $\sigma_2^k(d) \equiv d + k \equiv d + 1 - d + \delta m + cnm \equiv 1 \pmod{m}$. Отже, $x_{\pi(i)\pi(d)} = x_{i+1, 1} = x_{\sigma_1^k(i)\sigma_2^k(d)} = x_{id}$.

Аналогічно при $i = d$, $j < d$ покладемо $k = 1 - d - \gamma n + cnm = 1 - \delta m + cnm$. Тоді $\sigma_1^k(d) \equiv d + k \equiv 1 - \gamma n + cnm \equiv 1 \pmod{n}$, $\sigma_2^k(j) \equiv j + k \equiv j + 1 - \delta m + cnm \equiv j + 1 \pmod{m}$. Отже, $x_{\pi(d)\pi(j)} = x_{1, j+1} = x_{\sigma_1^k(d)\sigma_2^k(j)} = x_{dj}$.

При $i = d$, $j = d$ покладемо $k = 1 - d + cnm$. Тоді $\sigma_1^k(d) \equiv d + k \equiv d + 1 - d + cnm \equiv 1 \pmod{n}$, $\sigma_2^k(d) \equiv d + k \equiv d + 1 - d + cnm \equiv 1 \pmod{m}$. Отже,

$$x_{\pi(d)\pi(d)} = x_{1,1} = x_{\alpha_1^k(d)\alpha_2^k(d)} = x_{dd}.$$

Таким чином, $x_{ij} = x_{\pi(i)\pi(j)}$ при $i, j \leq d$. Тому $F = x_{11}E + x_{12}P_1 + x_{13}P_1^2 + \dots + x_{1d}P_1^{d-1}$.

Твердження. Нехай $\Lambda = \{\theta, \mathcal{E}(\Lambda) = (\alpha_{ij})\}$ — зведений горенштейновий черепичний порядок з підстановкою Кириченка σ , $\sigma = \sigma_1 \dots \sigma_s$ — розклад підстановки в добуток циклів, що не перетинаються, причому довжини циклів σ_k взаємно прості в сукупності, тобто $(|\langle \sigma_1 \rangle|, \dots, |\langle \sigma_s \rangle|) = 1$. Тоді $\frac{1}{|\langle \sigma_1 \rangle|} \sum_i \alpha_{i\sigma_1(i)} = \dots = \frac{1}{|\langle \sigma_s \rangle|} \sum_j \alpha_{j\sigma_s(j)} = t$, де t — натуральне число.

Доведення. Нехай m_k — довжина циклу σ_k , $Y_k = \sum_i \alpha_{i\sigma_k(i)}$. Оскільки $(m_1, \dots, m_s) = 1$, то існують цілі числа $a_1, \dots, a_s$ такі що $a_1 m_1 + \dots + a_s m_s = 1$. За лемою 5 [4] $\frac{Y_p}{m_p} = \frac{Y_q}{m_q}$ або $m_q Y_p = m_p Y_q$. Помножимо цю рівність на a_q . Отримаємо $a_q m_q Y_p = a_q m_p Y_q$. Звідси $\sum_{q \neq p} a_q m_q Y_p = \sum_{q \neq p} a_q m_p Y_q$ або $Y_p \cdot \sum_{q \neq p} a_q m_q = m_p \cdot \sum_{q \neq p} a_q Y_q$. З урахуванням рівності $(m_1, \dots, m_s) = 1$ маємо $Y_p \cdot (1 - a_p m_p) = m_p \cdot \sum_{q \neq p} a_q Y_q$. Числа $1 - a_p m_p$ та m_p взаємно прості, тому Y_p ділиться на m_p для всіх p .

Теорема. Нехай $\Lambda = \{O, \mathcal{E}(\Lambda) = (\alpha_{ij})\}$ — зведений горенштейновий черепичний порядок з підстановкою Кириченка σ , $\sigma = \sigma_1 \dots \sigma_s$ — розклад підстановки σ в добуток циклів, що не перетинаються. Нехай m_k — довжина циклу $\sigma_k = (g_k + 1 g_k + 2 \dots g_k + m_k)$, де $g_k = \sum_{j=1}^{k-1} m_j$ для $k > 1$, $g_1 = 0$, нехай $d_{ij} = (m_i, m_j)$ — найбільший спільний дільник чисел m_i, m_j та $(m_1, \dots, m_s) = 1$. Тоді порядок Λ ізоморфний порядку Λ' з підстановкою

Кириченка $\sigma' = \sigma'_1 \dots \sigma'_s$ і матрицею показників $\mathcal{E} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{11} & \mathcal{E}_{12} & \dots & \mathcal{E}_{1s} \\ \mathcal{E}_{21} & \mathcal{E}_{22} & \dots & \mathcal{E}_{2s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathcal{E}_{s1} & \mathcal{E}_{s2} & \dots & \mathcal{E}_{ss} \end{pmatrix}$, де

$\frac{1}{m_i} \sum_{k=1}^{m_i} \alpha'_{k\sigma'_i(k)} = t \in N$ для всіх $i = 1, \dots, s$. Матриця $\mathcal{E}_{kk}$ є матрицею показників циклічного горенштейнового порядку з підстановкою Кириченка $\sigma'_k = (1 2 \dots m_k)$ і є лінійною комбінацією степенів переставної матриці $P_{\sigma'_k}$.

($k = 1, \dots, s$). Матриця $\mathcal{E}_k = \begin{pmatrix} F_k & \cdots & F_k \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ F_k & \cdots & F_k \end{pmatrix}$, $k \neq l$, $\in \frac{m_k}{d_k} \times \frac{m_l}{d_l}$ блочною матрицею, де F_k є квадратною $d_k \times d_k$ матрицею, яка є лінійною комбінацією степенів переставної матриці P_{τ_k} з $\tau_k = (12 \dots d_k)$.

Доведення. За твердженням $\frac{1}{|\langle \sigma_1 \rangle|} \sum_i \alpha_{\sigma_1(i)} = \dots = \frac{1}{|\langle \sigma_s \rangle|} \sum_j \alpha_{\sigma_s(j)} = t$,

де t — натуральне число. Тоді кожна діагональна матриця $\mathcal{E}_k$ ізоморфними перетвореннями зводиться до матриці $\mathcal{E}_{kk}$, яка є лінійною комбінацією переставної матриці P_{σ_k} , причому $\alpha_{\sigma_k(i)} = t$ для всіх i та k . Тому матричне рівняння (1) для $\mathcal{E}_j$ $\mathcal{E}_j - P_{\sigma_j} \mathcal{E}_j P_{\sigma_j}^T = \text{diag}\{\alpha_{\sigma_j(k)}\} U_j - U_j \text{diag}\{\alpha_{\sigma_j(k)}\}$ набуває вигляду $\mathcal{E}_j - P_{\sigma_j} \mathcal{E}_j P_{\sigma_j}^T = 0$. Використовуючи лему, отримуємо твердження теореми.

Висновок. Результати роботи узагальнюють результати з [4] і можуть бути використані при подальшому вивченні матриць показників горенштейнових черепичних порядків.

Література

1. Завадский А.Г., Кириченко В.В. Модули без кручения над первичными кольцами // Зап. Науч. семинаров Ленингр. Отд. Мат. ин-та АН СССР.— 1976.— т.57.— с. 100-116.
2. Кириченко В.В. О квазифробениусовых кольцах и горенштейновых порядках // Тр. Мат. ин-та АН СССР.— 1978.— т.148.— с. 168-174.
3. Кириченко В.В., Журавлёв В.М., Черноусова Ж.Т., Мирошниченко С.Г. Циклические горенштейновы порядки // Доповіді НАН України. Серія: Математика, природознавство, технічні науки. - 2003.- № 4. - С.7-11.
4. Журавлёв В. Н., Зеленский А. В.. Об одном классе горенштейновых черепичных порядков. Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. 2006 -№3 (36). стр. 147-154.

Надійшла до редакції 16.02.2006.

УДК 512.53

Анатолій В. Жучок

Вільні добутки напівгруп.

Anatoly V. Zhuchok

The free products of semigroups.

Доведено, що вільний добуток довільних напівгруп є ізоморфним деякій піднапівгрупі прямого добутку напівгруп.

Ключові слова: вільний добуток напівгруп, гомоморфізми.

The free products of arbitrary semigroups are described in the terms of subdirect products of semigroups.

Key words: the free products of semigroups, homomorphisms.

E-mail: zhuchok_a@mail.ru

Одним із визнаних напрямків дослідження проблеми класифікації структурних властивостей напівгруп є пошук і описання зв'язків між різними теоретико-напівгруповими конструкціями такими, як наприклад, вільні добутки, сполуки, підпрямі добутки. У [1,2] описано декомпозиції вільних добутків напівгруп у сполуки своїх піднапівгруп.

В цій роботі доведено, що вільний добуток довільних напівгруп є ізоморфним деякій піднапівгрупі прямого добутку напівгруп.

1. Нагадаємо визначення напівгрупових конструкцій, що розглядаються в даній роботі.

Розглянемо сімейство напівгруп S_i ($i \in Y, Y$ – множина індексів) таких, що $S_i \cap S_j = \emptyset$ при $i \neq j$. Визначимо на множині Fr^* , що складається із усіх таких кінцевих непорожніх послідовностей $a_1 a_2 \dots a_k$, що, якщо $a_j \in S_{i_j}, 1 \leq j \leq k$, то $i_j \neq i_{j+1}, 1 \leq j \leq k-1$, операцію у такий спосіб:

$$a_1 a_2 \dots a_k * b_1 b_2 \dots b_m = \begin{cases} a_1 a_2 \dots a_k b_1 b_2 \dots b_m, & \text{якщо } a_k \in S_i, b_1 \in S_j, i \neq j, \\ a_1 a_2 \dots a_{k-1} (a_k \cdot b_1) b_2 \dots b_m, & \text{якщо } a_k, b_1 \in S_i, \cdot - \text{операція в } S_i, i \in Y. \end{cases}$$

Коротка безпосередня перевірка показує, що операція $*$ асоціативна, тобто $(Fr^*, *)$ – напівгрупа. Отриману напівгрупу називають вільним добутком напівгруп S_i ($i \in Y$). Будемо її позначати через $Fr[S_i]_{i \in Y}$.

Принципова важливість вільних добутків напівгруп полягає у тому, що будь-які гомоморфізми вільних множників у деяку фіксовану напівгрупу однозначно продовжуються до гомоморфізму вільного добутку в цю напівгрупу. А саме:

якщо $\alpha_i : S_i \rightarrow T$ ($i \in Y$) – гомоморфізми напівгруп S_i у напівгрупу T , $w = s_1 s_2 \dots s_m \in Fr[S_i]_{i \in Y}$, причому $s_j \in S_{i_j}, j = 1, 2, \dots, m$, то відображення $\gamma : Fr[S_i]_{i \in Y} \rightarrow T$, яке визначається за правилом:

$$w\gamma = (s_1 s_2 \dots s_m)\gamma = s_1 \alpha_{i_1} s_2 \alpha_{i_2} \dots s_m \alpha_{i_m},$$

є гомоморфізмом. Дійсно, якщо $w_1, w_2 \in Fr[S_i]_{i \in Y}$, то у будь-якому випадку маємо:

$$(w_1 * w_2)\gamma = w_1\gamma * w_2\gamma.$$

2. Через $\prod_{i \in Y} S_i$ в роботі будемо позначати прямий добуток напівгруп S_i ($i \in Y$, Y – множина індексів), через $\{s\}_i$ – i -компоненту елементу $s \in \prod_{i \in Y} S_i$, через $P(Y)$ – множину непорожніх підмножин множини Y .

Нехай $S = \{S_i\}_{i \in Y}$, $P = \{P_i\}_{i \in Y}$ – сімейства напівгруп, K – довільна напівгрупа. Якщо $\varphi = \{\varphi_i\}_{i \in Y}$, $\sigma = \{\sigma_i\}_{i \in Y}$ – системи гомоморфізмів $\varphi_i : S_i \rightarrow P_i$ та, відповідно, $\sigma_i : K \rightarrow P_i$ такі, що $S_i\varphi_i \cap K\sigma_i \neq \emptyset$ для всіх $i \in Y$, то покладемо

$$Mul_\sigma^{\varphi}(S, K; P) = \left\{ (s; k) \in \left(\prod_{i \in Y} S_i \right) \times K \mid \{s\}_i\varphi_i = k\sigma_i, i \in Y \right\}.$$

Неважко перевірити безпосередньо, що множина $Mul_\sigma^{\varphi}(S, K; P)$ з операцією покомпонентного множення є напівгрупою. Отриману напівгрупу назвемо мультимероморфним добутком напівгруп $S_i, i \in Y$ та напівгрупи K з системами гомоморфізмів φ, σ .

Конструкція мультимероморфного добутку узагальнює відому конструкцію спеціальної суми груп, введену Лонстрою (див., наприклад, [3], с.58). Нагадаємо її визначення.

Підпрямую суму G груп A_i ($i \in Y$) називають спеціальною, якщо існує така група R і такі епіморфізми $\alpha_i : A_i \rightarrow R$ ($i \in Y$), що G складається з векторів $(..., a_i, ..., a_j, ...)$ $\in \prod_{i \in Y} A_i$, де $... = a_i\alpha_i = ... = a_j\alpha_j = ...$.

Якщо тепер у напівгрупі $Mul_\sigma^{\varphi}(S, K; P)$ вважати, що S, P – сімейства груп, K – група, φ, σ – системи епіморфізмів та покласти $P_i = P_j$, $\sigma_i = \sigma_j$ для всіх $i, j \in Y$, то отримаємо спеціальну підпрямую суму груп S_i ($i \in Y$) та K .

3. Нехай N – множина натуральних чисел. Для кожного $Z \in P(N)$ покладемо Z^* – вільний добуток одноеlementних напівгруп $\{i\}$, $i \in Z$, $\{S_i\}_{i \in Z}$ – сімейство довільних напівгруп.

Нехай далі e – зовнішній ідемпотент, $F_i = Fr[i, e]$ – вільний добуток одноеlementних напівгруп $\{i\}, \{e\}$ ($i \in Z$), $F'_i = Fr[S_i, e]$ – вільний добуток напівгруп $S_i, \{e\}$ ($i \in Z$). Для кожного $Z \in P(N)$ через $\psi_Z = \{\psi_i\}_{i \in Z}$ позначимо систему гомоморфізмів

$$\psi_i : F'_i \rightarrow F_i : d \mapsto d\varphi_i,$$

де $d\varphi_i$ – елемент, отриманий із d заміною елементів із S_i ідемпотентом i , а через $\tau_Z = \{\tau_i\}_{i \in Z}$ – систему гомоморфізмів

$$\tau_i : Z^* \rightarrow F_i : c \mapsto c\tau_i,$$

де $c\tau_i$ – елемент, отриманий із c заміною елементів, не рівних i , ідемпотентом e .

Відзначимо, що $F_i\psi_i \cap Z^*\tau_i \neq \emptyset$ для всіх $i \in Z$ та позначимо через Λ_Z сімейство напівгруп $F_i, i \in Z$, а через Λ'_Z – сімейство напівгруп $F'_i, i \in Z$.

Для кожного $Z \in P(N), |Z| > 1$ визначимо далі відображення $\beta_Z : Fr[S_i]_{i \in Z} \rightarrow Z^*$ та $\mu_p : Fr[S_i]_{i \in Z} \rightarrow F'_p$ за правилами:

$$(s_1 \dots s_m)\beta_Z = i_1 \dots i_m, \text{ де } s_j \in S_{i_j}, j = 1, 2, \dots, m,$$

и μ_p – елемент, отриманий з u заміною всіх елементів, які не належать до S_p , ідемпотентом e ($p \in Z$).

Безпосередня нескладна перевірка показує, що $\beta_Z, Z \in P(N), |Z| > 1$ і μ_p ($p \in Z$) – сюр'єктивні гомоморфізми.

В умовах та позначеннях пунктів 1, 2 має місце

Теорема. $Fr[S_i]_{i \in Z} \cong Mul_{\tau_Z}^{\psi_Z}(\Lambda'_Z, Z^*; \Lambda_Z), Z \in P(N), |Z| > 1$.

Доведення. Відзначимо, що для довільного $g \in Fr[S_i]_{i \in Z}$ виконується умова: $(g\mu_p)\psi_p = (g\beta_Z)\tau_p$ для всіх $p \in Z$, де $\psi_p \in \psi_Z, \tau_p \in \tau_Z$.

Визначимо відображення

$$\alpha : Fr[S_i]_{i \in Z} \rightarrow Mul_{\tau_Z}^{\psi_Z}(\Lambda'_Z, Z^*; \Lambda_Z) : g \mapsto g\alpha = (g^*; g\beta_Z), \text{ де} \\ \{g^*\}_p = g\mu_p \text{ для всіх } p \in Z.$$

За побудовою α є взаємнооднозначним відображенням напівгрупи $Fr[S_i]_{i \in Z}$ на напівгрупу $Mul_{\tau_Z}^{\psi_Z}(\Lambda'_Z, Z^*; \Lambda_Z)$.

Крім цього, якщо $g_1, g_2 \in Fr[S_i]_{i \in Z}$, то

$$(g_1 g_2)\alpha = ((g_1 g_2)^*; (g_1 g_2)\beta_Z) = ((g_1)^* (g_2)^*; g_1 \beta_Z g_2 \beta_Z) = \\ = ((g_1)^*; g_1 \beta_Z) ((g_2)^*; g_2 \beta_Z) = g_1 \alpha g_2 \alpha,$$

оскільки $\{(g_1 g_2)^*\}_p = \{(g_1)^*\}_p \{(g_2)^*\}_p$ для всіх $p \in Z$. Звідси, разом з попереднім, α – ізоморфізм.

Теорему доведено.

Література

1. Жучок А.В. Декомпозиції вільних добутків // Вісник Київ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. наук.-2002.-вип.2 -с.41-49.
2. Кізіменко О.М. Про вільні добутки одноелементних напівгруп // Вісник Київ. Ун-ту. Сер. фіз.-мат. наук.- 2000.- вип. 1.- с. 37-41.
3. Л.Фукс. Бесконечные абелевы группы // Т.1, Москва, 1974.

Надійшла до редакції 7.02.2006

УДК 519.19

Марк. В. Зельдич

**Про нормальный базис алгебр
эндоморфизмов расширений Галуа.**

Доказано существование нормального базиса "общего положения" в пространстве линейных операторов расширения Галуа относительно двустороннего действия группы Галуа, состоящего из операторов максимального ранга и дана явная каноническая конструкция их построения.

Mark. V. Zeldich

On the normal basis of endomorphisms algebras of the Galois extensions.

The existence of the normal base of "general position" in the space of linear operators of Galois extension according to twoside action of the Galois group, consisting of the maximal rang operators is given and the explicit construction of their constructing is presented.

Пусть V – конечномерное линейное пространство над полем K и G – конечная группа, действующая эндоморфизмами на V справа $V \ni v \rightarrow g(v) = v^g$. Тогда это действие естественным образом индуцирует действие группы G на пространстве $End_K V$ линейных операторов на V как справа ($End_K V \ni A \rightarrow A^g$), так и слева ($End_K V \ni A \rightarrow {}^g A$), где $A^g = Ag$ и ${}^g A = gA$ обозначают, соответственно, операторы, определенные как соответствующие суперпозиции на элементе $v \in V$ формулами $(v)Ag = (vA)^g$ и $(v)gA = (v^g)A$, и суперпозиция или умножение операторов понимается как результат применения сначала оператора A , потом B ; при этом вектор следовало бы рисовать слева от оператора, хотя иногда мы для удобства будем последнее правило нарушать и писать вектор, как это обычно делается, справа от оператора и в скобках, т.е. вместо $(v)A$ писать $A(v)$.

На ином языке, это означает, что группа $G^0 \times G$ (где G^0 – инверсная к G группа) естественно действует справа на $End_K V$. Естественность этого действия объясняется тем, что правое действие G на V индуцирует левое действие G на дуальном к V пространстве V^* , а следовательно, и левое действие на последнем (т.е. на V^*) инверсной к G группе G^0 . В результате, мы естественно получаем правое действие прямого произведения $G^0 \times G$ на тензорном произведении $V^* \otimes V$, и если последнее отождествить с $End_K V$ при помощи канонического изоморфизма $End_K V \cong V^* \otimes V$, то в итоге, как легко проверить, и получим вышеуказанное правое действие $G^0 \times G$ на $End_K V$.

Предположим теперь, что в пространстве V существует

нормальный (относительно действия группы G) базис в классическом смысле [1, 2], т.е. базис, состоящий в точности из орбиты одного (а значит и любого) своего элемента v . Зададимся естественным вопросом: существует ли в данной ситуации нормальный базис пространства $\text{End}_K V$ относительно (правого) действия на нем группы $G^0 \times G$, т.е. иными словами, базис, нормальный относительно правого и левого действия в совокупности группы G на пространстве линейных операторов $\text{End}_K V$? Ответ на этот вопрос утвердительный. Действительно, если $\{e_1, \dots, e_n\}$ – нормальный базис V относительно правого действия G , то, очевидно, что дуальный к нему базис $\{e_1^*, \dots, e_n^*\}$, будет нормальным относительно (правого) действия группы G^0 на V^* , а следовательно, базис $\{e_i^* \otimes e_j \mid i, j = 1, \dots, n\}$ пространства $\text{End}_K V \cong V^* \otimes V$ также будет нормальным относительно правого действия $G^0 \times G$ на $V^* \otimes V$. Поскольку при каноническом изоморфизме $V^* \otimes V \cong \text{End}_K V$ образ $e_i^* \otimes e_j$ есть линейный оператор $E_{ij} \in \text{End}_K V$, соответствующий в базисе $\{e_1, \dots, e_n\}$ матричной единице $[E_{ij}]$, то в итоге получаем, что нормальный базис $\{e_1, \dots, e_n\}$ пространства V относительно (правого) действия группы G индуцирует нормальный базис $\{E_{ij} \mid i, j = 1, \dots, n\}$ (соответствующий матричным единицам в исходном базисе) в пространстве линейных операторов $\text{End}_K V$ относительно (правого) действия прямого произведения $G^0 \times G$, т.е. относительно левого и правого действия в совокупности группы G на $\text{End}_K V$ (см. выше).

Главный недостаток построенного таким образом “индуцированного” нормального базиса пространства $\text{End}_K V$ линейных операторов состоит в том, что он весьма специфичен и не является базисом “общего положения”, поскольку состоит из сильно вырожденных линейных операторов минимального ранга 1.

Возникает естественный вопрос о существовании о построении нормального базиса в пространстве $\text{End}_K V$ линейных операторов (относительно действия) $G^0 \times G$ “общего положения” в том смысле, чтобы все его элементы были бы операторами максимального ранга, то есть невырожденными.

В настоящей статье мы показываем, что если пространство V имеет дополнительную структуру поля, являясь расширением Галуа поля K , а G – группу Галуа данного расширения, действующего автоморфизмами поля L над K , то сформулированный выше вопрос имеет утвердительный ответ, а нормальный базис в пространстве $\text{End}_K L$ конструируется естественным образом.

Теорема. Пусть $P \subset L$ – расширение Галуа размерности n над P , а $G = \{g_1, \dots, g_n\}$ – его группа Галуа, действующая (справа) на L P –автоморфизмами поля L (т.е. автоморфизмами, сохраняющими неподвижными элементы подполя P): $L \ni \alpha \rightarrow g(\alpha) = \alpha^g \in L$. Тогда для любого нормального базиса $\theta^G = \{\theta^g, | g \in G\}$ расширения L над P (существование которого гарантируется согласно классической теореме о нормальном базисе [1,2]) система линейных операторов $\{g, \bar{\theta}g, | i, j = 1, \dots, n\}$ (где $\bar{\theta}g$ – скалярный оператор умножения на θ в L) образует нормальный базис пространства $\text{End}_P L$ относительно правого и левого действия в совокупности группы Галуа G на L , т.е. относительно (правого) действия группы $G^0 \times G$ на пространстве эндоморфизмов $\text{End}_P L$.

Даим краткий набросок доказательства. Нам понадобится следующее утверждение.

Утверждение. Если $U \subset V \subset A$ – вложения трех (ассоциативных) колец, причем A – свободный левый модуль над V ранга m (который мы обозначим ${}_V A$), а V – свободный модуль над U ранга n , (который обозначим ${}_U V$) то A является свободным левым модулем над U ранга $m \cdot n$; при этом, если $\{v_1, \dots, v_n\}$ – базис ${}_U V$ над U , то $\{v_i \cdot a_j, | i = \overline{1, n}, j = \overline{1, m}\}$ – базис ${}_U A$ над U .

Доказательство совершенно аналогично доказательству классической теоремы о размерности цепочки расширений полей [1, 2] (т.е. случая, когда U и V являются полями), обобщением которой оно является.

Вернемся теперь в сформулированной выше теореме. Обозначим через $\bar{\lambda}$ скалярный оператор умножения на $\lambda \in L$ в пространстве L , и для любого подмножества $M \subset L$ обозначим $\bar{M} = \{\bar{\lambda} | \lambda \in M\}$. Тогда мы имеем очевидное вложение трех колец $\bar{P} \subset \bar{L} \subset \text{End}_P L$, первые два из которых являются полями: $\bar{P} = P$ и $\bar{L} = L$, а третье $\text{End}_P L$ – алгеброй над P , L , $\bar{P}$, $\bar{L}$ с центром P , причем данные вложения очевидно согласовываются с вложением $P \subset L$ и каноническими изоморфизмами $\bar{P} = P$ и $\bar{L} = L$ в смысле коммутативности диаграммы

$$\begin{array}{ccc} \bar{P} & \rightarrow & \bar{L} \subset \text{End}_P L \\ \parallel & & \parallel \\ P & \rightarrow & L \end{array}, \text{ где символ } \rightarrow \text{ означает изоморфизм.}$$

Положим в приведенном выше утверждении $U = \bar{P}$; $V = \bar{L}$, $A = \text{End}_P L$ и заметим, что $\dim[V : U] = \dim[L : P] = n$, $\dim[A : U] = \dim[\text{End}_P L : P] = n^2$.

Обозначим $\dim[A : V] = m$ (очевидно, m – конечно, поскольку

$\dim[A:V] \leq \dim[A:U] = n^2 < \infty$). Тогда, согласно Утверждению, $\dim[A:U] = \dim[V:U] \cdot \dim[A:V]$, т.е. $n^2 = n \cdot m$, откуда $m = n$, т.е. $\dim[End_P L : \bar{L}] = \dim[A:V] = n$.

Но, согласно теореме о линейной независимости автоморфизмов (группа Галуа) над L из $\lambda_1 g_1 + \dots + \lambda_n g_n = 0$ в $End_P L$ (где $(\sum_{i=1}^n \lambda_i g_i)(\alpha) = \sum_{i=1}^n \lambda_i g_i(\alpha)$, $\alpha \in L$), следует, что все $\alpha_i = 0$, $i = 1, \dots, n$ (см. Теорему 12 в [1]). Но это означает, что из $\bar{\lambda}_1 g_1 + \dots + \bar{\lambda}_n g_n = 0$ в $End_P L$ (где $\bar{\lambda}_i \in V$, $g_i \in A$) следует, что все $\bar{\lambda}_i = 0$, $i = 1, \dots, n$, т.е. $\{g_1, \dots, g_n\}$ – линейно независимая над $V = \bar{L}$ система элементов $A = End_P L$. Поскольку $V = \bar{L} \cong L$ является полем (будучи подкольцом в $A = End_P L$) и, мы ранее установили, $\dim[A:V] = n$, то из вышесказанного вытекает, что автоморфизм группы Галуа $\{g_1, \dots, g_n\} = G = Gal(L/P)$ образует базис $A = End_P L$ над $V = \bar{L} \cong L$ (является, очевидно, каноническим).

Более того, данный базис, очевидно, является нормальным относительно левого и правого действия в совокупности группы $G = Gal(L/P)$ на линейном P -пространстве $End_P L$, поскольку оба эти действия в применении к базису $\{g_1, \dots, g_n\} = G$ сводятся к правому или, соответственно, левому умножению (в кольце A линейных операторов $End_P L$) базисных элементов на фиксированный элемент g группы G , что приводит всего лишь к перестановке элементов данного базиса.

Но, с другой стороны, существующий согласно теореме о нормальном базисе (см. [1,2]) и фигурирующий в условии теоремы нормальный базис $\theta^G = \{\theta_1 = \theta^{g_1}, \dots, \theta_n = \theta^{g_n}\}$ расширения Галуа L поля P индуцирует базис $\{\bar{\theta}_1, \dots, \bar{\theta}_n\}$ поля $\bar{L}$ над подполем $\bar{P}$ (что вытекает из согласованности вложений $P \rightarrow L$ и $\bar{P} \rightarrow \bar{L}$ с каноническими изоморфизмами $P \cong \bar{P}$ и $L \cong \bar{L}$, т.е. из коммутативности диаграммы
$$\begin{array}{ccc} \bar{P} & \rightarrow & \bar{L} \\ \parallel & & \parallel \\ P & \rightarrow & L \end{array}$$
 см. выше).

Данный базис будет нормальным относительно (правого) действия группы G на $\bar{L}$ внутренними автоморфизмами, т.е. автоморфизмами вида $\bar{g}$, $g \in G$, $\bar{g}: \bar{L} \rightarrow \bar{L}$, где для любого $\alpha \in \bar{L}$ ($\alpha \in L$): $\bar{g}(\alpha) = \bar{g}^{-1} \alpha g$ есть суперпозиция правого и левого действий соответственно g и $\bar{g}$ на $\alpha \in End_P L$ (эти действия, как мы отмечали выше, коммутируют друг с другом). Действительно, для любого $i = 1, \dots, n$ $\bar{\theta}_i = \theta^{g_i}$, поэтому $\bar{g}(\bar{\theta}_i) = g^{-1} \theta^{g_i} g$, и значит, для произвольного $x \in L$ по определению левого и правого действия группы G на пространстве линейных операторов $End_P L$,

данном в начале статьи, мы имеем:
 $\bar{g}(\bar{\theta}_i)(x) = g^{-1}(\bar{\theta}_i(g(x))) = [\theta^{g_i} \cdot x^{g_i^{-1}}]^g = \theta^{g_i g} \cdot x = \theta^{g_i'} \cdot x = \theta_{j'} \cdot x$ (где через j' обозначен номер элемента $g_i g \in G$), откуда в силу произвольности $x \in L$ мы получаем: $\bar{g}(\bar{\theta}_i) = \bar{\theta}_{j'}$, где $j' = j(i)$, очевидно, является биекцией множества номеров $\{1, \dots, n\}$ на себя, что и доказывает нормальность базиса $\{\bar{\theta}_1, \dots, \bar{\theta}_n\}$ относительно (правого) действия группы G внутренними автоморфизмами $\bar{g}$, $g \in G$ пространства $End_P L$.

Заметим, что попутно мы в ходе доказательства получили, что $\bar{g}(\bar{\theta}_i)(x) = \theta^{g_i g} \cdot x$ (для любого $x \in L$), – см. выше. Но $\theta^{g_i g} \cdot x = \bar{\theta}^{g_i g} \cdot x$, откуда $\bar{g}(\bar{\theta}_i) = \bar{\theta}^{g_i g}$, ($i = 1, \dots, n$). Выберем теперь номер i такой, для которого $g_i = 1 \in G$. Тогда $\bar{\theta}_i = \bar{\theta}^{g_i} = \bar{\theta}$ и из последней формулы мы заключаем, что $\bar{g}(\bar{\theta}) = \bar{\theta}^g$, т.е. $\bar{\theta}^g = g^{-1} \bar{\theta} g$ и, в силу произвольности выбора $g \in G$ мы, в частности, получаем, что для любого $i = 1, \dots, n$: $\bar{\theta}_i = \bar{\theta}^{g_i} = g^{-1} \bar{\theta} g_i$, т.е. в результате мы приходим к тому, что $\bar{\theta}_i = g_i^{-1} \bar{\theta} g_i$ для всех $i = 1, \dots, n$ (*).

Вернемся теперь к доказательству собственно теоремы. Согласно утверждению, если в нем положим $U = \bar{P}$, $V = \bar{L}$ и $A = End_P L$, то система $\{\bar{\theta}_i g_j = g_i^{-1} \bar{\theta} g_j \cdot g_j \mid i, j = 1, \dots, n\}$ образует базис ${}_U A$, т.е. базис векторного пространства линейных операторов $End_P L$ над исходным полем P .

Нам остается только показать, что построенный базис также является нормальным относительно правого и левого действия в совокупности группы G на $End_P L$, т.е. нормальным относительно правого действия $G^0 \times G$ на $End_P L$.

Поскольку число n^2 элементов построенного базиса векторного пространства $End_P L$ над полем P равно порядку группы $G^0 \times G$, то для доказательства нормальности данного базиса относительно действия указанной группы достаточно проверить, что $G^0 \times G$ орбита $w^{G^0 \times G}$ некоторого элемента w этого базиса (например элемента $w = \bar{\theta}_1 g_1 = (1_G^{-1} \bar{\theta} 1_G) \cdot 1_G = \bar{\theta}$) совпадает с множеством всех базисных элементов.

Действительно, для любого базисного элемента $\bar{\theta}_i g_j$, ($i, j = 1, \dots, n$) мы, согласно, формуле (*) выше, очевидно, имеем:
 $\bar{\theta}_i g_j = (g_i^{-1} \bar{\theta} g_i) \cdot g_j = g_i^{-1} \cdot \bar{\theta} \cdot (g_i \cdot g_j) = g_i^{-1} \bar{\theta}^{(g_i \cdot g_j)} = \bar{\theta}^{(g_i^{-1} \cdot g \cdot g_j)} \in \bar{\theta}^{G^0 \times G} = w^{G^0 \times G}$, т.е. любой базисный элемент $\bar{\theta}_i g_j$ принадлежит $G^0 \times G$ – орбите $w^{G^0 \times G}$ базисного элемента $w = \bar{\theta}_1 g_1 = \bar{\theta}$, что и требовалось. Следовательно, построенный

базис $\{\bar{\theta}_i \cdot g_j \mid i, j = 1, \dots, n\}$ является нормальным относительно правого действия группы $G^0 \times G$.

Напоследок заметим, что, согласно (*), при $i, j = 1, \dots, n$ $\bar{\theta}_i \cdot g_j = (g_i^{-1} \bar{\theta} g_i) \cdot g_j = g_i^{-1} \bar{\theta} g_k$ (где через k обозначим номер элемента $g_i g_j$ в группе G), причем для каждого фиксированного номера i соответствие между j и k , очевидно, взаимно однозначно на множестве номеров $\{1, \dots, n\}$. Поэтому, с точностью до перестановки, построенный нормальный базис можно записать в более простом виде $\{g_i^{-1} \cdot \bar{\theta} \cdot g_j \mid i, j = 1, \dots, n\}$ что завершает доказательство сформулированной теоремы.

Литература

1. Артин Е. Теория Галуа. — Київ: Радянська Школа, 1963.
2. М. М. Постников "Основания теории Галуа", Москва, Физматгиз, 1960.

Надійшла до редакції 11.01.2007

УДК 519.9

Володимир В. Кириченко*,
Олексій В. Зеленський,
Марина А. Хибина

Volodymyr V. Kyrychenko*,
Olexiy V. Zelensky*,
Maryna A. Khybyna

Индексы горенштейновых матриц

Indexes of Gorenstein matrices

Доведено, що для будь-якого натурального $n \geq 2$ існує горенштейнова матриця порядку n та цілого індексу k , де $1 \leq k \leq n-1$.

We proved that for any integer $n \geq 2$ there exists a gorenstein $n \times n$ -matrix $G_n^{(k)}$ with $\text{inx } G_n^{(k)} = k$ and $1 \leq k \leq n-1$.

Ключові слова: горенштейнова матриця, індекс, колчан.

Key Words: gorenstein matrix, index, quiver.

*E-mail: vkir@univ.kiev.ua

1. Предварительные сведения.

Пусть $M_n(\mathbb{Z})$ является кольцом всех квадратных матриц порядка n с целыми элементами. Матрица $\mathcal{E} = (\alpha_{ij}) \in M_n(\mathbb{Z})$ называется матрицей показателей, если

- $\alpha_{ij} + \alpha_{jk} \geq \alpha_{ik}$ для всех $i, j, k \in \{1, \dots, n\}$;
- $\alpha_{ii} = 0$ для всех $i \in \{1, \dots, n\}$.

Первое условие в дальнейшем будем называть неравенством треугольника. Матрица показателей $\mathcal{E} = (\alpha_{ij})$ называется приведенной матрицей показателей, если

- $\alpha_{ij} + \alpha_{ji} > 0$ для всех $i \neq j$.

В дальнейшем мы будем рассматривать, в основном, приведенные матрицы показателей.

Следуя [1], мы называем матрицу показателей $\mathcal{E} = (\alpha_{ij})$ эквивалентной матрице показателей $\Theta = (\theta_{ij})$, если $\mathcal{E}, \Theta \in M_n(\mathbb{Z})$ и матрица $\mathcal{E}$ получается из матрицы Θ преобразованиями следующих двух типов:

(1) вычитание целого числа z из i -ой строки с одновременным прибавлением z к i -ому столбцу ($i \in \{1, \dots, n\}$);

(2) одновременная перестановка строк с номерами i и j и столбцов с номерами i и j . В этом случае мы пишем, что $\mathcal{E} \sim \Theta$. Очевидно, что если $\mathcal{E} \sim \Theta$, то

$\Theta \sim \mathcal{E}$; $\Theta \sim \Theta$ и, если $\Theta \sim \mathcal{E}$ и $\mathcal{E} \sim \Theta_1$, то $\Theta \sim \Theta_1$, т.е. так введенное понятие эквивалентности, задает отношение эквивалентности (в абстрактном

смысле) на множестве матриц показателей (в частности, на множестве приведенных матриц показателей).

Дадим теперь определение колчана $Q(\mathcal{E})$ приведенной матрицы показателей $\mathcal{E}$.

Пусть $\mathcal{E} = (\alpha_{ij}) \in M_n(\mathbb{Z})$ - приведенная матрица показателей. Обозначим через $E_n \in M_n(\mathbb{Z})$ единичную матрицу порядка n . Положим $\mathcal{E}^{(1)} = (\beta_{ij}) = \mathcal{E} + E_n$ и $\mathcal{E}^{(2)} = (\gamma_{ij})$, где $\gamma_{ij} = \min_{1 \leq k \leq n} (\beta_{ik} + \beta_{kj})$. Очевидно, $[Q(\mathcal{E})] = \mathcal{E}^{(2)} - \mathcal{E}^{(1)}$ является $(0,1)$ -матрицей. Матрицу $[Q(\mathcal{E})]$ будем рассматривать как матрицу смежности колчана $Q(\mathcal{E})$, причем для эквивалентных матриц $\mathcal{E}$ и Θ колчаны $Q(\mathcal{E})$ и $Q(\Theta)$, очевидно, изоморфны.

Напомним, что колчан Q называется простым, если его матрица смежности $[Q]$ является $(0,1)$ -матрицей. Другими словами, колчан является простым тогда и только тогда, когда он не содержит кратных стрелок и кратных петель.

По теореме 4.11 и следствию 5.3 (см. [2]) мы имеем следующее утверждение.

Теорема 1.1. Матрица $[Q(\mathcal{E})] = \mathcal{E}^{(2)} - \mathcal{E}^{(1)}$ является матрицей смежности сильно связного простого колчана $Q(\mathcal{E})$.

Эта теорема и предложение 7.7.2 [3], которое утверждает, что действительная матрица B перестановочно неприводима тогда и только тогда, когда ее колчан сильно связан позволяет применить теорию неотрицательных матриц, в частности, теоремы Перрона и Фробениуса к изучению колчанов таких матриц показателей. Это приводит к такому определению (см. теорему Фробениуса в книге [4], гл. Неотрицательные матрицы).

Основное определение. Индексом ($\text{inx } \mathcal{E}$) приведенной матрицы показателей $\mathcal{E}$ называется максимальное действительное положительное собственное значение матрицы смежности $[Q(\mathcal{E})]$ колчана $Q(\mathcal{E})$.

По теореме Фробениуса такое число всегда существует.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 1.2. [5]. Пусть $n \geq 2$ для любого целого k , где $1 \leq k \leq n$ существует приведенная матрица показателей M_k такая, что $\text{inx } M_k = k$.

Определение горенштейновой матрицы.

Приведенная матрица $\mathcal{E} = (\alpha_{ij}) \in M_n(\mathbb{Z})$ называется горенштейновой, если существует подстановка $i \rightarrow \sigma(i)$ множества $\{1, \dots, n\}$ такая, что $\alpha_{ik} + \alpha_{k\sigma(i)} = \alpha_{\sigma(i)}$ для любых $i, k = 1, \dots, n$.

Горенштейнова матрица $\mathcal{E}$ называется циклической, если ее подстановка $\sigma = \sigma(\mathcal{E})$ является простым циклом.

Обозначим через $M_n(\mathbb{R})$ кольцо всех матриц порядка n с действительными элементами. Пусть τ - подстановка чисел $1, 2, \dots, n$ и $P_\tau = \sum e_{i, \tau(i)}$ - подстановочная матрица, где e_{ij} - матричные единицы. Очевидно, $P_\tau^T P_\tau = P_\tau P_\tau^T = E_n$, где E_n - единичная матрица кольца $M_n(\mathbb{R})$, T означает транспонирование. Мы будем использовать равенство $P_\tau = P_\tau^k$, которое справедливо для любой подстановки τ и любого натурального числа k [1].

Теорема 1.3. [6]. Матрица смежности колчана циклической горенштейновой матрицы $\mathcal{E}$ с циклической подстановкой $\sigma = \sigma(\mathcal{E})$ является суммой некоторых степеней подстановочной матрицы P_σ .

Следствие 1.4. Колчан $Q(\mathcal{E})$ циклической горенштейновой матрицы $\mathcal{E}$ либо не имеет петель ни в одной вершине, либо имеет петли во всех вершинах.

2. Петли в горенштейновых колчанах.

Мы говорим, что колчан Q называется *горенштейновым* колчаном, если Q является колчаном горенштейновой матрицы.

Пусть $\mathcal{E}$ - горенштейнова матрица такая, что ее подстановка $\sigma(\mathcal{E})$ раскладывается в произведение $k \geq 2$ независимых циклов.

Теорема 2.1. Для каждого $k \geq 2$ существует подстановка σ_k , которая является произведением k независимых циклов такая, что существует горенштейнова матрица $\mathcal{E}_k$ с подстановкой $\sigma(\mathcal{E}_k) = \sigma_k$ и у колчана $Q(\mathcal{E}_k)$ есть петли не во всех вершинах.

Доказательство. Рассмотрим случай $k = 2$:

$$\mathcal{E}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 3 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 3 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 3 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 2 & 0 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q(\mathcal{E}_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где $\sigma(\mathcal{E}_2) = (1\ 2\ 3\ 4)(5\ 6\ 7\ 8)$

У колчана $Q(\mathcal{E}_3)$ 4 петли.

Рассмотрим случай $k \geq 3$.

$$\sigma(\mathcal{E}_3) = (1\ 4)(2\ 3)(5\ 6),$$

$$\mathcal{E}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q(\mathcal{E}_3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

У колчана $Q(\mathcal{E}_3)$ 2 петли.

Рассмотрим следующие горенштейновы матрицы $\mathcal{E}_k$, где $\mathcal{E}_k \in M_{2k}(\mathbb{Z})$.

$$\mathcal{E}_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 2 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 2 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Q(\mathcal{E}_k) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, $\sigma(\mathcal{E}_k) = (1\ 4)(2\ 3)(5\ 6)(7\ 8)\dots(2k-1\ 2k)$. У колчана $Q(\mathcal{E}_k)$ $n-4$ петли.

3. Индексы горенштейновых матриц.

Теорема 1.2 утверждает, что для любого натурального $n \geq 2$ и любого целого k , такого, что $1 \leq k \leq n$ существует приведенная матрица показателей $M_k \in M_n(\mathbb{Z})$ такая, что $\text{inx } M_k = k$.

Пусть $G^{(n)} \in M_n(\mathbb{Z})$ - горенштейнова матрица, индекс которой является натуральным числом λ . Нетрудно видеть, что в этом случае $1 \leq \lambda \leq n-1$.

Имеет место следующая основная теорема.

Теорема 3.1. Для каждого $n \geq 2$ и каждого натурального λ не превосходящего $n-1$, существует горенштейнова матрица $G_\lambda^{(n)} \in M_n(\mathbb{Z})$ такая что $\text{inx } G_\lambda^{(n)} = \lambda$.

Приведем примеры горенштейновых матриц, индексы которых равны 1, 2, 3 и $n-1$.

Пусть

$$T_{n,\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha & \alpha & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha & \alpha & \alpha & \dots & 0 & 0 \\ \alpha & \alpha & \alpha & \dots & \alpha & 0 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, $T_{n,\alpha}$ является циклической горенштейновой матрицей с подстановкой $\sigma = \sigma(T_{n,\alpha}) = (1 \ n \ n-1 \dots 2)$. При $\alpha = 1$ $\text{inx } T_{n,1} = 1$ и при $\alpha \geq 2$ $\text{inx } T_{n,\alpha} = 2$.

Для каждого $n \geq 2$ рассмотрим матрицу $\mathcal{E}_n$ следующего вида:

$$\mathcal{E}_n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 1 & 1 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, $\mathcal{E}_n$ - горенштейнова матрица с подстановкой $\sigma(\mathcal{E}_n) = \sigma = (1 \ n \ n-1 \dots 2)$. Нетрудно видеть, что $[Q(\mathcal{E}_n)] = P_{\sigma^2} + P_\sigma$, и колчан $Q(\mathcal{E}_n)$ не имеет петель. Легко видеть, что $\text{inx } \mathcal{E}_n = 2$.

Справедлива следующая лемма.

Лемма 3.2. Пусть $G^{(n)} = (g_{ij})$ - произвольная горенштейнова матрица ($n \geq 2$). Для любого натурального числа $m \geq 2$ матрица $mG^{(n)}$ горенштейнова и в колчане $Q(mG^{(n)})$ есть петли во всех вершинах. Кроме того, в $Q(G^{(n)})$ есть стрелка из вершины i в вершину j ($i \neq j$) тогда и только тогда, когда есть стрелка из вершины i в вершину j в колчане $Q(mG^{(n)})$.

Из этой леммы сразу следует, что $\text{inx } m\mathcal{E}_n = 3$ при $m \geq 2$.

Доказательство теоремы в остальных случаях базируется на

рассмотрении горенштейновых матриц $\Gamma = \sum_{i=0}^{n-1} t(i)P_{\sigma^i}$, где $\sigma = (1\ 2\ \dots\ n)$ является простым циклом и $t(i)$ это отображение множества $\{0, 1, \dots, n-1\}$ в $\mathbb{N} \cup \{0\}$, где $\mathbb{N}$ - множество натуральных чисел. Основной является следующая лемма.

Лемма 3.3. Если для отображения $t: \{0, 1, \dots, n-1\} \rightarrow \mathbb{N} \cup \{0\}$ выполняются следующие условия:

1. $t(0)=0$;
2. $t(i)>0$ для $i \in \{1 \dots n-1\}$;
3. $t(i)+t(j) \geq t((i+j) \bmod n)$;
4. $t(1)=t(i) + t(n+1-i)$, для $i \in \{2 \dots n-1\}$,

то $\Gamma = \sum_{i=0}^{n-1} t(i)P_{\sigma^i}$ - горенштейнова матрица с подстановкой $\sigma = (1\ 2\ \dots\ n)$.

Используя эту лемму, для каждого натурального λ с условием $4 \leq \lambda \leq n-2$, кроме случая $\lambda = n-2$, $n = 3k$, строится циклическая горенштейнова матрица с указанным индексом λ . Случай $\lambda = n-2$, $n = 3k$ рассматривается отдельно.

Литература

1. Zh.T.Chernousova, M.A.Dokuchaev, M.A.Khibina, V.V.Kirichenko, S.G.Miroshnichenko, and V.N.Zhuravlev, Tiled orders over discrete valuation rings, finite Markov chains and partially ordered sets. II, Algebra and Discrete Math. **2** (no 2) (2003) pp. 47-86.
2. Zh.T.Chernousova, M.A.Dokuchaev, M.A.Khibina, V.V.Kirichenko, S.G.Miroshnichenko, and V.N.Zhuravlev, Tiled orders over discrete valuation rings, finite Markov chains and partially ordered sets. I, Algebra and Discrete Math. **1** (2002) pp. 32-63.
3. N.M.Gubareni, V.V.Kirichenko, Rings and Modules, Czestochowa 2001, 306 p.
4. Ф.Р.Гантмахер, Теория матриц, изд-во «Наука», М., 1967.
5. M.A. Dokuchaev, V.V.Kirichenko, A.V.Zelensky, V.N.Zhuravlev, Gorenstein matrices, Algebra and Discrete Math. **1** (2005) pp. 8-29.
6. V.V.Kirichenko V.V., A.V.Zelensky A.V. and Zhuravlev V.N., Exponent matrices and tiled orders over a discrete valuation rings, Intern. Journal of Algebra and Computation, v. **15**, N5&6 (2005), pp. 997-1012.

Надійшла до редакції 15.12.2006

УДК 519.9

Павло С. Коломієць¹

Pavlo S. Kolomiets¹

Деякі факти про бішубертівські багатовиди

Some facts about bischubert varieties

В статті доводиться раціональність незвідних компонент бішубертівських багатовидів, вписані їх рівняння, і визначені їх розклади в шубертівському базисі для найпростішого випадку $m=n=1$.

Here we prove rationality of irreducible components of bischubert varieties, write down their equations and, finally, decompose them into Schubert basis in the simplest case of $m=n=1$.

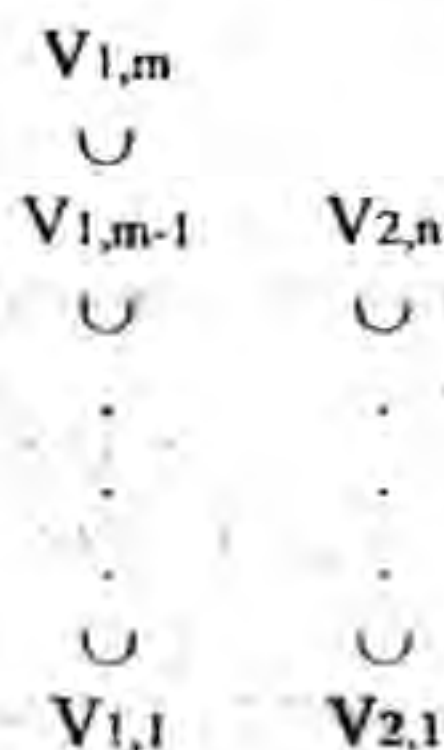
Ключові слова: багатовид, бішубертівський, раціональність, шубертівський базис.

Key Words: variety, bischubert, rationality, Schubert basis.

¹ E-mail: kolom_sk@nbi.com.ua

1. Означення та основні властивості.

Нагадаємо означення та основні властивості бішубертівських багатовидів, викладені в [1]. Бішубертівські багатовиди є одним з логічних узагальнень шубертівських багатовидів. Замість одного прапора підпросторів тут використовується 2 прапори, які не перетинаються, тобто жоден з підпросторів першого прапора не лежить ні в одному з підпросторів другого прапора, і навпаки.



Малюнок 1: Прапори.

Тут і надалі $m \geq n$, $d = m + n$ для зручності. A^n - весь простір. На прапори накладаються наступні умови:

- (1) $D_{r,s} = \dim(\text{деяке доповнення } \langle (V_{1,r-1} \cap V_{2,s}), (V_{1,r} \cap V_{2,s-1}) \rangle \text{ до } (V_{1,r} \cap V_{2,s})) \geq 1$,
 $r = \overline{1, m+1}$, $s = \overline{1, n+1}$, де $V_{1,m+1} = V_{2,n+1} = A^d$,

(2) весь простір достатньо великий, а саме $D_{m+1,n+1} \geq n$.

Тоді в грасманіані всіх d -вимірних підпросторів розглядається підбагатовид усіх підпросторів V , що задовольняють наступним умовам

$$\dim(V \cap V_{1,r}) \geq r, \quad r = \overline{1, m},$$

$$\dim(V \cap V_{2,s}) \geq s, \quad s = \overline{1, n}.$$

Він є звідним, його незвідні компоненти описуються таблицями з $(m+1)$ стовпчика і $(n+1)$ рядка з натуральними числами від 1 до d в клітинах, кожне з яких зустрічається один і тільки один раз. Таблиці мають задовольняти наступним умовам:

(1) Кожна клітина може мати максимум 1 число, за винятком самої верхньої-правої, яка може мати максимум n чисел,

$$|(i, j)| \leq 1, \quad i = \overline{1, m+1}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad |(m+1, n+1)| \leq n,$$

(2) Кожен стовпчик має точно одне число, за винятком самого правого, який має точно n чисел,

$$|i\text{-ий стовпчик}| = 1, \quad i = \overline{1, m}, \quad |(m+1)\text{-ий стовпчик}| = n,$$

(3) Кожен рядок має точно одне число, за винятком самого верхнього, який має точно m чисел,

$$|j\text{-ий рядок}| = 1, \quad j = \overline{1, n}, \quad |(n+1)\text{-ий рядок}| = m.$$

При цьому порядок слідування чисел не важливий, тобто довільна перестановка чисел в таблиці дає таблицю, яка відповідає тій самій незвідній компоненті.

Тоді кількість незвідних компонент рівна кількості таких таблиць, а саме

$$N_{m,n} = \sum_{k=0}^n C_n^k \cdot A_m^k.$$

Якщо ми маємо одну з таких таблиць з числами в клітинах (x_l, y_l) , $l = \overline{1, d}$, тоді розмірність відповідної незвідної компоненти O розраховується за наступною формулою

$$\dim(O) = \sum_{l=1}^d r(l) + \sum_{l=1}^d |\Sigma_{x_l, y_l}| - d^2,$$

де $r(l), r(i, j), \Sigma_{i,j}$ визначаються наступним чином

$$r(l) := \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n D_{i,j}, \quad r(i, j) := \sum_{r=1}^{m+1} \sum_{s=1}^{n+1} |(r, s)|, \quad \Sigma_{i,j} := \bigcup_{(r,s) \in (i,j)} (r, s).$$

2. Раціональність

Теорема 1: Всі незвідні компоненти довільного бішубертівського багатовиду є раціональними.

Доведення

◀ Розглянемо довільну компоненту O із множини всіх незвідних компонент $O_{m,n}$ бішубертівського багатовиду (m,n) в просторі A^n .

Як відомо, багатовид називається раціональним, якщо він біраціонально еквівалентний деякому афінному простору. Це означає, що для того, щоб довести раціональність незвідного багатовиду, достатньо знайти деяку відкриту підмножину, ізоморфну деякому афінному простору.

Отже, елементи нашого бішубертівського багатовиду представляються деякими матрицями M з n рядків і $m+n$ стовпчиків. А наша орбіта має відповідну таблицю $\tilde{M} ((n+1) \times (m+1))$ з числами $l = \overline{1, m+n}$ в клітинках $\tilde{K}_{i,j}$, де $1 \leq i \leq m+1$, $1 \leq j \leq n+1$.

Тепер давайте в кожній матриці M , в кожному наборі рядків $K_{i,j}$ виберемо стільки рядків (стоячих, наприклад, найвище), скільки чисел стоїть у відповідній клітині $\tilde{K}_{i,j}$ (позначимо його $|\tilde{K}_{i,j}|$). Вибрані рядки утворюватимуть квадратні матриці $Mnr ((m+n) \times (m+n))$ і їхні визначники, мінори $|Mnr|$.

Тепер визначимо відкриту множину $U_O \subset O$ тих елементів, які мають ненульовий міноर $|Mnr|$.

Перетвореннями над стовпчиками можна привести матрицю Mnr довільного елемента із U_O до одиничної матриці. Очевидно, що всі інші рядки в матриці M визначають елемент із U_O однозначно. Доведемо, що вони ізоморфні деякому афінному простору.

Дійсно, поставивши в них кругом нулі, отримаємо один із характеристичних елементів e_O нашої орбіти. Всі інші елементи O можуть бути отримані з нього за допомогою єдиного дозволеного перетворення над рядками. Щоб не змінювати саму матрицю Mnr , викинемо ті перетворення, які змінюють її. Матриці (елементи), утворені таким чином, утворюватимуть всю U_O .

Таким чином, якщо деякий елемент $a_{i,j}$ матриці M з U_O , може бути зроблений ненульовим, то він може бути зроблений довільним, тому що кожен коефіцієнт наших дозволених перетворень над рядками є або нульовим, або довільним. А це і означає, що U_O ізоморфна деякому афінному простору. Його розмірність може бути порахована за наступною формулою.

$$\dim(U_O) = \sum_{l=1}^d r(l) - \sum_{l=1}^d k(l), \quad (1)$$

де

$$r(l) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n D_{i,j}, \quad (2)$$

як було визначено в [1], а

$$k(l) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |\tilde{K}_{i,j}|, \quad (3)$$

Доведення закінчено. ►

3. Рівняння бішубертівських багатовидів

Вивід рівнянь, описаний тут, дуже подібний до виводу рівнянь для звичайних шубертівських багатовидів, описаного, наприклад, в [2].

Як і в [1], позначимо $d_{i,j} := \dim(V_{i,j})$ для всіх дозволених (i, j) , $d = m + n$. Припустимо ми маємо незвідну орбіту $O \in O_{m,n}$ з числами $l = \overline{1, m+n}$ в клітинах $\tilde{K}_{i,j}$, де $1 \leq i \leq m+1$, $1 \leq j \leq n+1$. Визначимо $s_{i,j} := |\tilde{K}_{i,j}|$. Побудуємо базис A^h як в ([1], п.1). Тоді клітині $\tilde{K}_{i,j}$ ($i = \overline{1, m+1}$, $j = \overline{1, n+1}$) відповідають $D_{i,j}$ базисних векторів $(e_{i,j,k}, k = \overline{1, D_{i,j}})$. Для кожної пари i, j позначимо координати, що відповідають $e_{i,j,k}$, $k = \overline{1, s_{i,j}}$ як $x_{i,j,k}$, а координати, що відповідають $e_{i,j,k}$, $k = \overline{s_{i,j} + 1, D_{i,j}}$ як $y_{i,j,k}$.

Існує характерний елемент e_O в нашій орбіті, для якого матриця, створена із рядків $x_{i,j,k}$, $l = \overline{1, d}$ (мається на увазі з рядків, відповідних цим координатам, звичайно) є одиничною. Тобто, її Грассманова координата $X_{(i_1, j_1, k_1), \dots, (i_d, j_d, k_d)} \neq 0$. Це означає, що не всі елементи орбіти O , представлені точками в грассманіані, лежать на гіперплощині $X_{(i_1, j_1, k_1), \dots, (i_d, j_d, k_d)} = 0$. Ті d -вимірні підпростори, представлені точками в грассманіані, які не лежать на ній, визначаються наступною системою рівнянь ([3], гл. VII, §2, (2))

$$y_{i,j,k} = \sum_{l=1}^d u_{i,j,k,l} \cdot x_{i,l,k_l}, \quad i = \overline{1, m+1}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad k = \overline{s_{i,j} + 1, D_{i,j}}. \quad (4)$$

В цій системі $h - d$ рівнянь.

Тепер знайдемо умови, яким повинен задовольняти d -вимірний підпростір V , визначений системою рівнянь (4), щоб належати до бішубертівського багатовиду $Sch(V_{1,1}, \dots, V_{1,m}; V_{2,1}, \dots, V_{2,n})$ (ми побачимо, що вони автоматично означають, що цей підпростір належить до орбіти O).

Цими умови є

$$\dim(V \cap V_{1,r}) \geq r, \quad r = \overline{1, m}, \quad (5)$$

$$\dim(V \cap V_{2,s}) \geq s, \quad s = \overline{1, n}. \quad (6)$$

Розглянемо умову для $V_{1,r}$. Позначимо $B(1, r) := \{l : i_l \leq r\}$. Тоді з рівнянь (4) ми додаємо

$$x_{i,l,j,k} = 0, \quad \forall l \in B(1, r), \quad (7)$$

$$y_{i,j,k} = 0, \quad i = \overline{r+1, m+1}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad k = \overline{s_{1,j}+1, D_{1,j}}. \quad (8)$$

Тоді ми отримуємо $d_{1,r} - r = \dim(V_{1,r}) - |B(1, r)|$ рівнянь

$$y_{i,j,k} = \sum_{l \in B(1,r)} u_{i,j,k,l} \cdot x_{i,l,j,k}, \quad i = \overline{1, r}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad k = \overline{s_{1,j}+1, D_{1,j}}, \quad (9)$$

і $h - d - (d_{1,r} - r)$ рівнянь

$$0 = \sum_{l \in B(1,r)} u_{i,j,k,l} \cdot x_{i,l,j,k}, \quad i = \overline{r+1, m+1}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad k = \overline{s_{1,j}+1, D_{1,j}}. \quad (10)$$

Ми можемо розглядати їх як рівняння $h - d$ гіперплощини в $d_{1,r}$ -вимірному просторі $V_{1,r}$. Зі всіма можливими значеннями $u_{i,j,k,l}$, рівняння (9) лінійно незалежні, тому вони визначають підпростір розмірності $d_{1,r} - (d_{1,r} - r) = r$. Якщо рівняння (10) не тривіальні, то вони незалежні від рівнянь (9). Отже, рівняння (9), (10) визначають підпростір розмірності r тоді і тільки тоді, коли

$$u_{i,j,k,l} = 0, \quad i = \overline{r+1, m+1}, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad k = \overline{s_{1,j}+1, D_{1,j}}, \quad l \in B(1, r). \quad (11)$$

Аналогічно додаючи умови для обох прапорів, ми отримаємо

$$u_{i,j,k,l} = 0, \quad \text{якщо } i > i_l \text{ або } j > j_l, \quad k = \overline{s_{1,j}+1, D_{1,j}}. \quad (12)$$

Але ці умови автоматично описують тільки ті простори, які належать до орбіти O . Дійсно, вони означають, що кожен $x_{i,l,j,k}$, $l \in \{1, \dots, d\}$ щось привносить тільки в ті $y_{i,j,k}$, для яких $i \leq i_l$, $j \leq j_l$, тобто вони описують перетворення рядків з нашої алгебраїчної групи.

Висновок

Всі незвідні компоненти всіх бішубертівських багатовидів є повними перетинами. Тобто їхні корозмірності дорівнюють кількості відповідних визначальних рівнянь.

Доведення

◀ Маючи деяку незвідну орбіту O з таблицею з числами в клітинах (x_l, y_l) , $l = \overline{1, d}$, з (12) отримуємо, що кількість рівнянь дорівнює

$\sum_{l=1}^d (h - r(l)) - \sum_{l=1}^d |\Sigma_{x_l, y_l}|$ в позначеннях параграфу 1. Тоді сума кількості рівнянь і розмірності орбіти рівна $d \cdot h - d^2 = \dim(Gr(d, h))$, що і треба було довести. ►

4. Розклад в шубертовому базисі, випадок $m=n=1$

Як відомо [2], мультиплікативні багатовиди, отримані із шубертівських багатовидів розмірності ρ наданням їм кратності 1 утворюють базис для всіх ρ -вимірних багатовидів (в мультиплікативному сенсі) на $Gr(d, n)$. Надалі, працюючи з багатовидами, коли потрібно, ми будемо вважати їх мультиплікативними багатовидами, отриманими зі звичайних наданням їм кратності 1, і позначатимемо тими ж символами.

В нашому випадку існує дві незвідні орбіти, і виявляється, що одна з них рівна єдиному шубертовому багатовиду з кратністю 1, а друга рівна лінійній комбінації декількох також з кратностями 1.

Ці дві орбіти мають наступні таблиці

$$O_1 \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline & 1 \\ \hline 1 & \\ \hline \end{array} \quad O_2 \leftrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & \\ \hline & 1 \\ \hline \end{array}$$

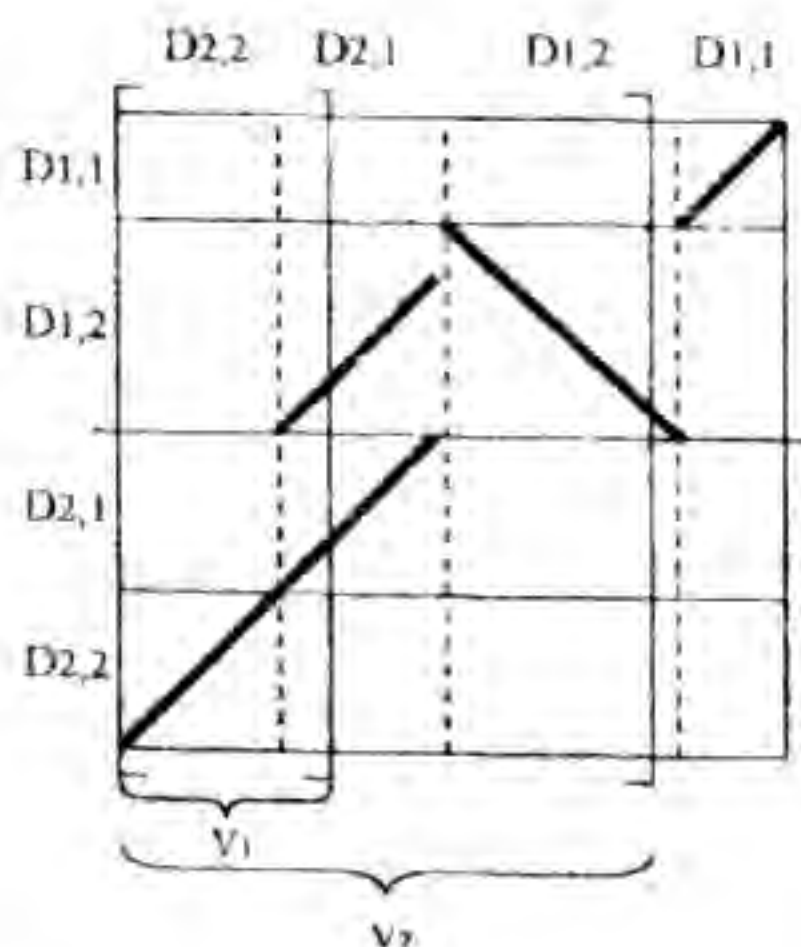
Розмірність всього простору $h = D_{1,1} + D_{1,2} + D_{2,1} + D_{2,2}$,
 $\dim(V_{1,1}) = D_{1,1} + D_{1,2}$, $\dim(V_{2,1}) = D_{1,1} + D_{2,1}$.

Так як $d=2$ в нашому випадку, тому відповідні шубертівські багатовиди мають прапор із двох підпросторів. Згадаємо, що $\dim(Sch(a_1, a_2)) = a_1 + a_2 - 3$.

4.1. Загальний базис для прапора $V_1 \subset V_2$

Щоб знайти спільний базис для деякого прапора $V_1 \subset V_2$, ми використовуємо всі лінійні перетворення рядків, які не змінюють $V_{1,1}$, $V_{2,1}$, тобто ту саму групу дозволених перетворень рядків, яку ми використовували для знаходження незвідних орбіт в [1]. І ми використовуємо тільки ті лінійні перетворення стовпчиків, які не додають базисний вектор із $V_2 \setminus V_1$ до базисного вектору із V_1 !!! Таким чином ми можемо будувати загальний базис тільки для V_2 , оскільки ми не діємо на V_1 базисними векторами, які не лежать в V_1 .

Отже, загальний базис виглядає як на Малюнку 1, що досить легко довести.



Малюнок 1: Загальний базис для V_1, V_2 .

де товсті діагональні лінії означають одинички, а все інше є нульовим. Щоб задати загальний базис, треба на цьому малюнку задати дві вертикальні границі, і всі вектори, що знаходяться зліва від кожної границі утворюватимуть базис відповідного простору.

Тепер, щоб перетнути орбіту з шубертовим багатovidом, заданим прапором $V_1 \subset V_2$, треба знайти всі ті d -вимірні підпростори V з орбіти, які перетинаються з V_1 по простору розмірності не менше 1, з V_2 по простору розмірності не менше 2. Тобто

$$\begin{aligned} \dim(V \cap V_1) \geq 1 &\Leftrightarrow \dim V + \dim(V_1) - \dim(V \cup V_1) \geq 1 \Leftrightarrow \\ \dim(V \cup V_1) &\leq \dim(V_1) + 1, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \dim(V \cap V_2) \geq 2 &\Leftrightarrow \dim V + \dim(V_2) - \dim(V \cup V_2) \geq 2 \Leftrightarrow \\ \dim(V \cup V_2) &\leq \dim(V_2). \end{aligned} \quad (14)$$

4.2. Перша орбіта

$$\dim O_1 = 2D_{1,1} + D_{1,2} + D_{2,1} + (D_{2,2} - 1 + 2) - 4 = D_{1,1} + h - 3. \quad (15)$$

З рівності $\dim O_1 = \dim(\text{Sch}(a_1, a_2))$ отримуємо

$$a_1 + a_2 = (D_{1,1} - 1) + (h + 1). \quad (16)$$

Як відомо, коефіцієнт при $\text{Sch}(a_1, \dots, a_d)$ в лінійному розкладі деякого багатovidу Ω обчислюється за

$$\alpha_{a_1, \dots, a_d} = \Omega \cdot \text{Sch}(h + 1 - a_d, \dots, h + 1 - a_1). \quad (17)$$

Позначимо цей доповнюючий до $\text{Sch}(a_1, \dots, a_d)$ шубертів багатovid

як $Sch(\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_d)$. Тоді із (16) отримаємо

$$\tilde{\alpha}_1 + \tilde{\alpha}_2 = h + 2 - D_{1,1}. \quad (18)$$

Отже, всі можливі пубертіві багатовиди в нашому базисі і відповідні багатовиди, з якими треба буде перетинати, є такими

$$\begin{aligned} Sch(D_{1,1}, h) &\leftrightarrow Sch(1, h+1-D_{1,1}), \\ Sch(D_{1,1}+1, h-1) &\leftrightarrow Sch(2, h-D_{1,1}), \\ \dots &\dots \end{aligned} \quad (19)$$

Тепер ми покажемо, що $O_1 = 1 \cdot Sch(D_{1,1}, h)$.

Всі елементи орбіти O_1 виглядають як на Малюнку 2.



Малюнок 2: Елемент орбіти O_1 .

Матриця $K_{1,1}$ ненульова.

4.2.1. $O_1 \cap Sch(1, h+1-D_{1,1})$

Із умови (13) отримуємо, що $\forall V \in O_1 \quad \alpha_{i,j} = 0$ для всіх можливих i, j окрім $\alpha_{4,1,2}$. А із (14) маємо $c_i = d_i = 0$, $i = 2, \overline{D_{1,1}}$. Таким чином в перетині є тільки один елемент, що і визначає кратність 1.

4.2.2. $O_1 \cap Sch(k, h+2-D_{1,1}-k)$, $k \geq 2$

Ненульові коефіцієнти базисних векторів V_i розміщені в нижніх $D_{1,2} + D_{2,1} + D_{2,2}$ рядках. Це разом з умовою (14) означає, що $\forall V \in O_1$

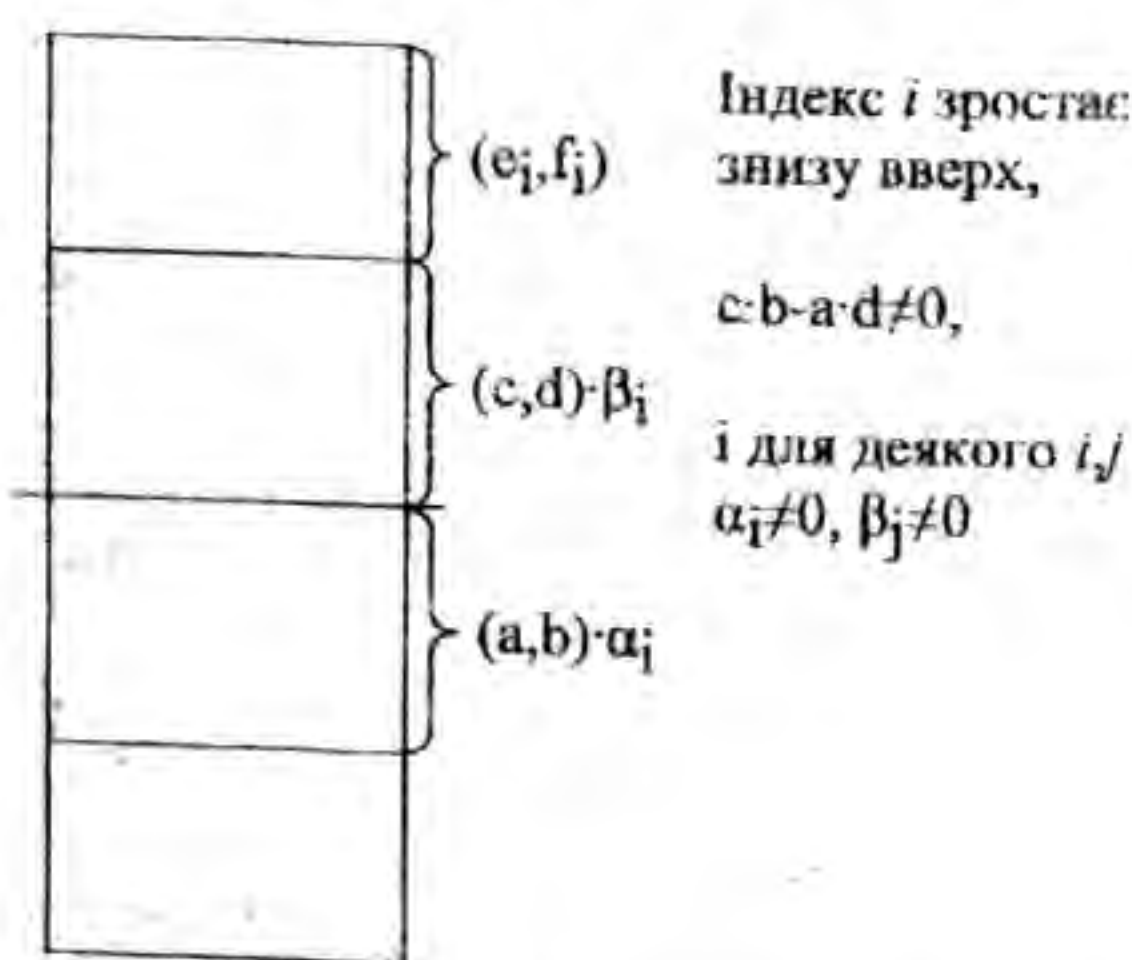
4.3. Друга орбіта

$$\dim O_2 = 2D_{1,1} + (D_{1,2} - 1 + 2) + (D_{2,1} - 1 + 2) - 4 = (D_{1,1} - D_{2,2}) + h - 2, \quad (20)$$

$$a_1 + a_2 = (D_{1,1} - D_{2,2}) + (h + 1), \quad (21)$$

$$\tilde{a}_1 + \tilde{a}_2 = (h + 1) - D_{1,1} + D_{2,2}. \quad (22)$$

Всі елементи орбіти O_2 виглядають як на Малюнку 3.



Малюнок 3: Елемент орбіти O_2 .

$$4.3.1. O_2 \cap Sch(k, (h + 1) - D_{1,1} + D_{2,2} - k), \quad k \leq D_{2,2}$$

В цьому випадку легко бачити з Малюнків (1), (3), що $\forall V \in O_2$ $\dim(V + V_1) = \dim V_1 + 2$ - протиріччя з умовою (13).

$$4.3.2. O_2 \cap Sch(k, (h + 1) - D_{1,1} + D_{2,2} - k), \quad k \geq D_{2,2} + 1$$

Із (22) отримуємо, що $\dim V_2 \leq h - D_{1,1}$. Із умови (14) маємо, що $\forall V \in O_2$ $e_i = f_i = 0$ для $i = \overline{1, D_{1,1}}$.

Для

$$k = \dim V_1 = D_{2,2} + 1, D_{2,2} + \min(D_{1,2}, D_{2,1}), \quad (23)$$

умова (13) означає, що

$$\begin{aligned} \alpha_i &= 0, \quad i > k - D_{2,2}, \\ \beta_j &= 0, \quad j > k - D_{2,2}, \\ \alpha_i \beta_j - \alpha_j \beta_i &= 0, \quad \forall i, j \in \{1, \dots, k - D_{2,2}\}, \quad i \neq j. \end{aligned} \quad (24)$$

В цьому випадку $\dim(V + V_1) = \dim V_1 + 1$.

Щоб визначити рівності, які накладаються умовою (14), потрібно розглянути два випадки:

А) $D_{1,2} \geq D_{2,1}$

Б) $D_{1,2} < D_{2,1}$

Ці випадки складніші чим попередні, але після досить простих калькуляцій і розбиттів на під випадки знаходимо, що

А) $k = \dim V_1$ може приймати довільне значення із $\{D_{2,2} + 1, \dots, D_{2,2} + D_{2,1}\}$ і для кожного з цих значень відповідний коефіцієнт в лінійному розкладі орбіти O_1 дорівнює 1.

Б) $k = \dim V_1$ може приймати довільне значення із $\{D_{2,2} + 1, \dots, D_{2,2} + D_{1,2}\}$ і для кожного з цих значень відповідний коефіцієнт в лінійному розкладі орбіти O_1 також дорівнює 1.

4.4. Висновок

$$O_1 = 1 \cdot \text{Sch}(D_{1,1}, h), \quad (25)$$

$$O_2 = \sum_{l=D_{2,2}+1}^{D_{2,2}+\min\{D_{1,1}, D_{1,2}\}} 1 \cdot \text{Sch}((D_{1,1} - D_{2,2}) + k, (h+1) - k). \quad (26)$$

Література

1. Y.A. Drozd, P.S. Kolomiets On some generalization of Schubert's varieties// Computational Commutative and Non-Commutative Algebraic Geometry. NATO Science Series III: Computer and Systems Sciences—Vol.196 – 2005. – с. 79-89.
2. Ходж В., Пидо Д. Методы алгебраической геометрии, том 2. – Москва: Издательство иностранной литературы, 1954.
3. Ходж В., Пидо Д. Методы алгебраической геометрии, том 1. – Москва: Издательство иностранной литературы, 1954.
4. Дрозд Ю.А. Вступ до алгебраїчної геометрії. – Київ: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2001.

Надійшла до редакції 10.02.2006

УДК 519.21

Володимир І. Масол*, Світлана
Я. Слободян*

**Асимптотична нормальність
числа розв'язків системи
рівнянь з обмеженнями на
розподіл нелінійних
коефіцієнтів.**

Доведена теорема про нормальний граничний ($n \rightarrow \infty$) розподіл числа хибних розв'язків наперед сумісної системи нелінійних випадкових булевих рівнянь, з незалежними коефіцієнтами. Припускається, зокрема, що в кожному рівнянні існують коефіцієнти, які набувають значення 0 та 1 з однаковою ймовірністю; система має розв'язок з числом одиниць $[\rho n]$, $\rho = \text{const}$, $0 < \rho < 1$.

Ключові слова: нелінійні випадкові булеві рівняння, граничний нормальний розподіл, число хибних розв'язків.

Volodymyr I. Masol*, Svitlana
Y. Slobodyan*

**The asymptotic normalize of a
number of solutions of system of
equations with restriction on the
distribution of the nonlinear
coefficients.**

The theorem on a normal limit ($n \rightarrow \infty$) distribution of the number of false solutions of a beforehand consistent system of nonlinear random Boolean equations with independent coefficients is proved. In particular, we assume that each equation has coefficients that take values 0 and 1 with equal probability; the system has a solution where the number of ones equals $[\rho n]$, $\rho = \text{const}$, $0 < \rho < 1$.

Key Words: the nonlinear random Boolean equations, normal limit distribution, number of false solutions.

*E-mail: vymasol@ukr.net, sv_yaros@rambler.ru

1. Постановка задачі. Формулювання теореми.

Розглянемо над полем $GF(2)$, що складається з двох елементів, систему рівнянь

$$\sum_{k=1}^{g_i(n)} \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_k \leq n} a_{j_1 \dots j_k}^{(i)} x_{j_1} \dots x_{j_k} = b_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1.1)$$

яка задовольняє умову (А).

Умова (А): 1) Коефіцієнти $a_{j_1 \dots j_k}^{(i)}$, $1 \leq j_1 < \dots < j_k \leq n$, $k = 1, \dots, g_i(n)$, $i = 1, \dots, N$, є незалежними випадковими величинами, які приймають

значення 1 з ймовірністю $P\{a_{h-h}^{(i)} = 1\} = p_h$ і значення 0 з ймовірністю $P\{a_{h-h}^{(i)} = 0\} = 1 - p_h$.

2) Елементи $b_i, i = 1, \dots, N$, являють собою результат підстановки в ліву частину системи (1.1) фіксованого n -вимірного вектора $\bar{x}^0$, в якому $[\rho n] / n - [\rho n] /$ компонент, що дорівнюють одиниці /нулю/, $\rho = \text{const}, 0 < \rho < 1$.

3) Функція $g_i(n), i = 1, \dots, N$ – не випадкова, $g_i(n) \in \{2, \dots, n\}, i = 1, \dots, N$.

Через v_n позначимо число хибних розв'язків системи (1.1), тобто число розв'язків системи (1.1), відмінних від вектора $\bar{x}^0$.

Покладемо $m = n - N$. Нас цікавлять умови, при яких випадкова величина v_n має граничний ($n \rightarrow \infty$) нормальний розподіл.

Теорема. Нехай для довільного $i, i = 1, \dots, N$, існує непорожня множина T_i ,

$$T_i \subseteq \{2, 3, \dots, \varphi(n)\}, T_i \neq \emptyset, \quad (1.2)$$

така, що

$$p_n = \frac{1}{2} \text{ для } t \in T_i, \quad (1.3)$$

де функція $\varphi(n)$ набуває цілих значень,

$$2 \leq \varphi(n) \leq \varepsilon \frac{n^{1-p}}{\ln n}, \quad (1.4)$$

$$p = \text{const}, 0 < p < 1, \quad (1.5)$$

$$\varepsilon - \text{додатне число}, 0 < \varepsilon < \frac{\rho}{2}, \quad (1.6)$$

і, крім того,

$$m = \left\lceil \log_2 \left(\frac{\rho}{14} \log_2 n \right) \right\rceil. \quad (1.7)$$

Тоді

$$\lambda \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty, \quad (1.8)$$

де $\lambda = Mv_n$, і випадкова величина $\frac{v_n - \lambda}{\sqrt{\lambda}}$ має асимптотично ($n \rightarrow \infty$) стандартний нормальний розподіл.

2. Допоміжні твердження.

Твердження 2.1. ([1]) Нехай X та Y – випадкові величини, які набувають цілих невід'ємних значень. Якщо

$$\max_{1 \leq r \leq T} |M(X)_r (M(Y)_r)^{-1} - 1| = \varepsilon_r < 1, M(Y)_r \leq C\lambda^r, 1 \leq r \leq T,$$

де $(x)_r = x(x-1)\dots(x-r+1)$, то для довільного $t, 0 \leq t \leq T - 5\lambda$,

$$|P\{X \geq t\} - P\{Y \geq t\}| \leq \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\varepsilon_r e^{2\lambda}}{\sqrt{\max(1, \lambda - 1)}} + \frac{e^{(1+\lambda-1)/2}}{\max(1, \lambda - 1)} \right).$$

Безпосереднім наслідком твердження 2.1 є

Наслідок 2.1. Нехай X та Y – випадкові величини, які набувають цілих невід'ємних значень і $\lambda = MX$. Якщо розподіли цих випадкових величин змінюються так, що

$$\sup_{1 \leq r \leq 7\lambda} |M(X)_r (M(Y)_r)^{-1} - 1| \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow 0 \quad (2.1)$$

і при всіх $r \leq 7\lambda$

$$M(Y)_r \leq C\lambda \quad (2.2)$$

для деякої сталої C , то

$$\max_{1 \leq r \leq 2\lambda} |P\{X \geq t\} - P\{Y \geq t\}| \rightarrow 0. \quad (2.3)$$

Твердження 2.2. ([2]) Якщо виконується умова (A), то математичне сподівання випадкової величини v_n дорівнює

$$Mv_n = \sum_{i=0}^{n-[pn]} C'_{n-[pn]-i} \sum_{j=0}^{[pn]} C''_{[pn]-j} \prod_{r=1}^N \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \prod_{r=1}^{g_r(n)} (1 - 2p_r)^{\Gamma_r} \right), \quad (2.4)$$

де $\Gamma_r = C'_{i+[pn]-j} + C''_{[pn]-j} - 2C'_{[pn]-j}$, $r = 1, \dots, g_r(n)$, $i + j \geq 1$.

Твердження 2.3. ([3]) Якщо виконується умова (A), то для $r \geq 1$

$$M(v_n)_r = 2^{-rN} S(n, r; Q), \quad (2.5)$$

де

$$S(n, r; Q) = \sum_{s=0}^{n-[pn]} \sum (n - [pn])! \left((n - [pn] - s)! \prod_{i \in I} i! \right)^{-1} \times \quad (2.6)$$

$$\sum_{\substack{s'=0 \\ s'+s \leq [pn]}} \sum' ([pn])! \left(([pn] - s')! \prod_{j \in J} j! \right)^{-1} Q,$$

$$Q = \prod_{i=1}^N \left(1 + \sum_{r=1}^r \sum_{1 \leq u_1 < \dots < u_r \leq r} \prod_{i=1}^{g_i(n)} (1 - 2p_{u_i})^{i_{u_1, \dots, u_r}} \right); \quad (2.7)$$

сумування $\sum \left(\sum' \right)$ здійснюється по всім $i \in I$ ($j \in J$), $I = \{i_{u_1, \dots, u_v} : 1 \leq u_1 < \dots < u_v \leq r, v = 1, \dots, r\}$, $J = \{j_{u_1, \dots, u_v} : 1 \leq u_1 < \dots < u_v \leq r, v = 1, \dots, r\}$,

таким, що

$$\sum_{i \in I} i = s \quad \left(\sum_{j \in J} j = s' \right); \quad (2.8)$$

в рівності (2.6) числа i ($i \in I$), j ($j \in J$) задовольняють співвідношення

$$\sum_{i \in I, j \in J, i+j=1} (i+j) \geq 1, \quad u = 1, \dots, r, \quad (2.9)$$

$$\sum_{i=0}^{r-2} \sum_{1 \leq u_1 < \dots < u_i \leq r} (i_{u_1, u_2, \dots, u_i} + j_{u_1, u_2, \dots, u_i} + i_{u_2, u_3, \dots, u_i} + j_{u_2, u_3, \dots, u_i}) \geq 1, \quad 1 \leq u_1 < u_2 \leq r; \quad (2.10)$$

для $1 \leq u_1 < \dots < u_v \leq r$, $v \in \{1, \dots, r\}$ і $t \in \{1, \dots, n\}$ виконується нерівність

$$\Gamma_{i,r}^{(u_1, \dots, u_v)} \geq \sum_{(i,j) \in T} (C_i' + C_j'), \quad (2.11)$$

де $T = I_{\{u_1, \dots, u_v\}} \times J_{\{u_1, \dots, u_v\}}$; і якщо

$$[\rho n] - s' \geq t, \quad (2.12)$$

то

$$\Gamma_{i,r}^{(u_1, \dots, u_v)} \geq C_{[\rho n] - s'}^{l-1} \sum_{(i,j) \in T} (i + j). \quad (2.13)$$

Тут

$$I_{\{u_1, \dots, u_v\}} = \{i_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_\psi, \mu_1, \dots, \mu_l\}} : A(\psi, l, r)\},$$

$$J_{\{u_1, \dots, u_v\}} = \{j_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_\psi, \mu_1, \dots, \mu_l\}} : A(\psi, l, r)\},$$

де $A(\psi, l, r)$ – скорочений запис наступного набору обмежень:

$1 \leq \sigma_1 < \dots < \sigma_\psi \leq r$, $\sigma_z \in \{u_1, \dots, u_v\}$, $z = 1, \dots, \psi$, $\psi = 1, \dots, v$, $\psi \equiv 1 \pmod{2}$,

$1 \leq \mu_1 < \dots < \mu_l \leq r$, $\mu_1, \dots, \mu_l \notin \{u_1, \dots, u_v\}$, $l = 0, \dots, r - v$.

Зауваження 2.1. Явний вигляд виразу $\Gamma_{i,r}^{(u_1, \dots, u_v)}$ для $1 \leq u_1 < \dots < u_v \leq r$, $v \in \{1, \dots, r\}$, $t = 1, 2, \dots, g_i(n)$, $i = 1, \dots, N$ наведено в [3].

Нехай W – сукупність всіх непорожніх підмножин множини Ω , потужність якої дорівнює $|\Omega| = k$, $1 \leq k < \infty$. Визначимо дві підмножини W_Δ та I_s множини W :

$$W_\Delta \subseteq W, \quad W_\Delta = \{\omega_1, \dots, \omega_\Delta\}, \quad |W_\Delta| = \Delta, \quad \Delta \geq 1, \quad \omega_i \neq \omega_j$$

для $i \neq j$, $i, j \in \{1, \dots, \Delta\}$;

$$I_s \subseteq W, \quad I_s = \{m_1, \dots, m_s\}, \quad |I_s| = s, \quad s \geq 0, \quad m_i \neq m_j$$

для $i \neq j$, $i, j \in \{1, \dots, s\}$.

Твердження 2.4. ([3]) Нехай

$$|m_i \cap \omega_j| \equiv (\text{mod } 2), \quad i = 1, \dots, s, \quad j = 1, \dots, \Delta; \quad (2.14)$$

$$\Delta \in [2^{r-1}, 2^r - 1], \quad 1 \leq r \leq k. \quad (2.15)$$

Тоді

$$s \leq 2^{k-r} - 1. \quad (2.16)$$

Твердження 2.5. ([3]) Нехай $\Omega = \{1, \dots, k\}$, $3 \leq k < \infty$. Якщо для множини W_Δ та I_s виконуються умови (2.14),

$$\Delta = 2^r - 1, \quad s = 2^{k-r} - 1, \quad 1 \leq r \leq k - 2; \quad (2.17)$$

$$|\omega_j| \geq 3, \quad j = 1, \dots, \Delta, \quad (2.18)$$

то існує таке число α , $\alpha \in \{1, \dots, \Delta\}$, що для деяких m_ν , $m_\nu \in I_s$, $\nu = 1, 2, 3$

$$|\omega_\alpha \cap m_\nu| = 2, \quad \nu = 1, 2, 3, \quad |\omega_\alpha \cap (a \cup b)| = 3, \quad (2.19)$$

де $a \neq b$, $a, b \in \{m_\nu : \nu = 1, 2, 3\}$.

Зауваження 2.2. При $r = k - 1$ та $s = 1$ умова (2.18) не виконується. Цей факт впливає з доведення твердження 2.5 (див. також [3, с.45]).

3. Доведення теореми.

Покажемо, що за умов теореми можна скористатися наслідком 2.1. Нехай у зазначеному наслідку випадкова величина Y має розподіл Пуассона з параметром 2^n , а розподіл випадкової величини X співпадає з розподілом випадкової величини V_n .

При виконанні умови (1.3) з урахуванням твердження 2.2 отримуємо

$$M V_n = 2^n - \frac{1}{2^n}. \quad (3.1)$$

Далі, використовуючи співвідношення (3.1), умови (1.5) та (1.7), неважко показати, що має місце (1.8), а нерівність (2.2) виконується при $C \geq 2$ для всіх n , починаючи з деякого n_0 , $n \geq n_0$.

Перейдемо до перевірки умови (2.1). З цією метою скористаємось рівністю (2.5), подавши її наступним чином:

$$M(V_n)_r = \frac{1}{2^{rN}} \sum_{\Delta=0}^{r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q), \quad (3.2)$$

де $S^{(\Delta)}(n, r; Q)$ відрізняється від $S(n, r; Q)$ тим, що усі i та j , $i \in I$, $j \in J$, які приймають участь у записі $S(n, r; Q)$ згідно з (2.6), набувають лише таких значень, що існує точно Δ різних наборів

$$\omega_\alpha = \{u_1^{(\alpha)}, \dots, u_{\xi_\alpha}^{(\alpha)}\}, \quad 1 \leq u_1^{(\alpha)} < \dots < u_{\xi_\alpha}^{(\alpha)} \leq r, \quad \xi_\alpha \in \{1, 2, \dots, r\}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \Delta, \quad (3.3)$$

для кожного з яких знайдеться число $t^{(\alpha)} \in \{2, \dots, \varphi(n)\}$ таке, що

$$\Gamma_{t^{(\alpha)}, r}^{\omega_\alpha} = 0, \quad (3.4)$$

і для наборів $\{g_1, \dots, g_r\}$, $1 \leq g_1 < \dots < g_r \leq r$, $r = 1, \dots, r$, що задовольняють співвідношенню

$$\{g_1, \dots, g_r\} \neq \omega_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \Delta, \quad (3.5)$$

має місце оцінка

$$\Gamma_{t, r}^{\{g_1, \dots, g_r\}} \geq 1 \quad (3.6)$$

для усіх $t \in \{2, \dots, \varphi(n)\}$.

Переконаємось у тому, що при $n \rightarrow \infty$

$$\sup_{1 \leq r \leq 74} \left| \frac{S^{(0)}(n, r; Q)}{2^{rN} M(Y)_r} - 1 \right| \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow 0. \quad (3.7)$$

Спочатку зазначимо, що рівність $\Delta = 0$ дійсно може виконуватись.

Справді, якщо для всіх i , $i \in I$ та (або) j , $j \in J$ виконується нерівність $i \geq \varphi(n)$, $j \geq \varphi(n)$, то в силу (2.11) оцінка (3.6) має місце для всіх наборів $\{g_1, \dots, g_r\}$, $1 \leq g_1 < \dots < g_r \leq r$, $r = 1, \dots, r$, та $t \in \{2, \dots, \varphi(n)\}$.

Залишається помітити, що $\max(|I|\varphi(n), |J|\varphi(n)) \leq \min(n - [\rho n], [\rho n])$ для $r \leq 7\lambda$. Але це дійсно так, бо

$$\begin{aligned} |J|\varphi(n) &= (2^r - 1)\varphi(n) \leq \\ &\leq 2^{14} \varepsilon \frac{n^{1-p}}{\ln n} \leq 2^{72^m} \varepsilon \frac{n^{1-p}}{\ln n} \leq 2^{\frac{p}{2} \log_2 n} \varepsilon \frac{n^{1-p}}{\ln n} = \varepsilon \frac{n^{1-\frac{p}{2}}}{\ln n} \leq \min(n - [\rho n], [\rho n]). \end{aligned}$$

Отже, рівність $\Delta = 0$ може досягатись.

При $\Delta = 0$ з урахуванням (3.6) та умови (1.3) знаходимо

$$Q = 1. \quad (3.8)$$

Звідси отримуємо за допомогою поліноміальної теореми

$$S^{(0)}(n, r; Q) = S^{(0)}(n, r; 1) = 2^{r^n} - \sigma_0, \quad (3.9)$$

де

$$\sigma_0 = 1 + \sum_{q=1}^{2^r-1} S_q^{(0)}(n, r; 1), \quad (3.10)$$

$S_q^{(0)}(n, r; 1)$ відрізняється від $S(n, r; 1)$ тим, що числа $i \in I$ та $j \in J$ в правій частині рівності (2.6) змінюються таким чином, що існує точно q виразів виду $\Gamma_{i,r}^{[u_1, \dots, u_v]}$, для кожного з яких

$$\Gamma_{i,r}^{[u_1, \dots, u_v]} = 0, \quad (3.11)$$

де $q = 1, 2, 3, \dots, 2^r - 1$.

Нехай усі вирази виду $\Gamma_{i,r}^{[u_1, \dots, u_v]}$, $1 \leq u_1 < \dots < u_v \leq r$, $v \in \{1, \dots, r\}$ занумеровані числами $1, 2, 3, \dots, 2^r - 1$. Тоді суму $S_q^{(0)}(n, r; 1)$ можна представити наступним чином

$$S_q^{(0)}(n, r; 1) = \sum_{1 \leq \gamma_1 < \dots < \gamma_q \leq 2^r - 1} S_{\{\gamma_1, \dots, \gamma_q\}}^{(0)}(n, r; 1), \quad (3.12)$$

$q = 1, 2, 3, \dots, 2^r - 1$, де $S_{\{\gamma_1, \dots, \gamma_q\}}^{(0)}(n, r; 1)$ відрізняється від $S_q^{(0)}(n, r; 1)$ тим, що співвідношення (3.11) виконується тільки для виразів $\Gamma_{i,r}^{[u_1, \dots, u_v]}$, яким відповідають номери $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q$. Позначимо через $A(\gamma_1, \dots, \gamma_q) / B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ множину усіх тих $i \in I / j \in J$, які використовуються при записі оцінки (2.11) для усіх $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_q$. В силу (3.11) число елементів множини $A(\gamma_1, \dots, \gamma_q) / B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ не менша, ніж 2^{r-1} :

$$|A(\gamma_1, \dots, \gamma_q)| \geq 2^{r-1}, \quad (3.13)$$

$$|B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)| \geq 2^{r-1}. \quad (3.14)$$

Тепер суму $S_q^{(0)}(n, r; 1)$ можна подати так

$$S_q^{(0)}(n, r; 1) = \sum_{1 \leq \gamma_1 < \dots < \gamma_q \leq 2^r - 1} S_{\{\gamma_1, \dots, \gamma_q\}}^{(0)}(n, r; 1) = \sum_{1 \leq \gamma_1 < \dots < \gamma_q \leq 2^r - 1} \sum_{s=0}^{r-[\rho n]} C_{n-[\rho n]}^s \times$$

$$\begin{aligned} & \times \sum_{s_1+s_2=1} C_{s_1}^{s_1} \left\{ \sum_{i \in A(\gamma_1, \dots, \gamma_q)} \frac{s_1!}{i!} \right\} \left\{ \sum_{i \in I \setminus A(\gamma_1, \dots, \gamma_q)} \frac{s_2!}{i!} \right\} \times \\ & \times \sum_{s'=0}^{[\rho n]} \sum_{s'_1+s'_2=s'} C_{s'_1}^{s'_1} \left\{ \sum_{j \in B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)} \frac{s'_1!}{j!} \right\} \left\{ \sum_{j \in I \setminus B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)} \frac{s'_2!}{j!} \right\}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

де $\sum_1$ – це сума за всіма $i \in A(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ такими, що $\sum i = s_1$, $\sum_2$ – це сума за всіма $i \in I \setminus A(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ такими, що $\sum i = s_2$, $\sum_3$ – це сума за всіма $j \in B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ такими, що $\sum j = s'_1$, $\sum_4$ – це сума за всіма $j \in I \setminus B(\gamma_1, \dots, \gamma_q)$ такими, що $\sum j = s'_2$.

Співвідношення (3.10), (3.12)-(3.15) та поліноміальна формула дозволяють отримати для σ_0 наступну оцінку:

$$\begin{aligned} \sigma_0 & \leq 1 + \sum_{q=1}^{2^r-1} C_{2^r-1}^q \sum_{s=0}^{n-[\rho n]} C_{n-[\rho n]}^s \sum_{s_1+s_2=s} C_{s_1}^{s_1} (2^r)^{s_1} (2^{r-1}-1)^{s_2} \times \\ & \times \sum_{s'=0}^{[\rho n]} C_{[\rho n]}^{s'} \sum_{s'_1+s'_2=s'} C_{s'_1}^{s'_1} (2^r)^{s'_1} (2^{r-1}-1)^{s'_2} \leq \\ & \leq 2^{2^r-1} 2^{(r-1)n} \left(\sum_{s_1 \geq 0} C_{n-[\rho n]}^{s_1} (2^{r-1})^{s_1} \right) \left(\sum_{s'_1 \geq 0} C_{[\rho n]}^{s'_1} (2^{r-1})^{s'_1} \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Враховуючи нерівності $s_1 \leq 2^r \varphi(n)$ та $s'_1 \leq 2^r \varphi(n)$, співвідношення (3.16) можна переписати у вигляді

$$\sigma_0 \leq 2^{2^r-1} 2^{(r-1)n} 2^{r 2^{r-1} \varphi(n)} \left(\sum_{s_1=0}^{2^r \varphi(n)} C_{n-[\rho n]}^{s_1} \right) \left(\sum_{s'_1=0}^{2^r \varphi(n)} C_{[\rho n]}^{s'_1} \right). \quad (3.17)$$

Далі скористаємось тим, що в умовах теореми для $1 \leq r \leq 7\lambda$

$$2^{r-1} \varphi(n) \leq \min(n-[\rho n], [\rho n]). \quad (3.18)$$

Це дає можливість перейти від (3.17) до оцінки

$$\sigma_0 \leq 2^{2^r-1} 2^{(r-1)n} 2^{r 2^{r-1} \varphi(n)} (2^r \varphi(n))^2 C_{n-[\rho n]}^{2^r \varphi(n)} C_{[\rho n]}^{2^r \varphi(n)},$$

звідки за допомогою формули Стірлінга отримуємо

$$\begin{aligned} \sigma_0 & \leq 2^{2^r-1} 2^{(r-1)n} 2^{r 2^{r-1} \varphi(n)} (2^r \varphi(n))^2 \left(\frac{(n-[\rho n])! [\rho n]! e^2}{(2^r \varphi(n))^2} \right)^{2^r \varphi(n)} \frac{1}{2\pi 2^r \varphi(n)} = \\ & = 2^{2^r-1} 2^{(r-1)n} \frac{2^r \varphi(n)}{2\pi} \left(\frac{(n-[\rho n])! [\rho n]! e^2}{\varphi^2(n)} \right)^{2^r \varphi(n)}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Тепер неважко переконатися, що при $n \rightarrow \infty$

$$\sup_{1 \leq r \leq 7\lambda} \frac{\sigma_0}{2^{rn}} \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow 0. \quad (3.20)$$

Дійсно, в силу (3.19) знаходимо

$$\begin{aligned} \sup_{1 \leq r \leq 7\lambda} \frac{\sigma_0}{2'^n} \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} &\leq \frac{1}{2^n} 2^{2\lambda} 2^{7\lambda} \frac{\varphi(n)}{4\pi} \left(\frac{(n - [\rho n])[\rho n]e^2}{\varphi^2(n)} \right)^{2^{7\lambda}\varphi(n)} \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \exp \left\{ 2^{7\lambda} \ln 2 + 7\lambda \ln 2 + 2^{7\lambda} \varphi(n) \ln \left(\frac{(n - [\rho n])[\rho n]e^2}{\varphi^2(n)} \right) + \right. \\ &\quad \left. \ln \varphi(n) + 2\lambda - \frac{1}{2} \ln \lambda - n \ln 2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Умови (1.4), (1.7) і співвідношення (3.1) дозволяють зробити висновок, що

$$0 \leq 2^{7\lambda} \varphi(n) \leq \varepsilon \frac{n^{\frac{1-p}{2}}}{\ln n}. \quad (3.22)$$

З урахуванням (3.21) та (3.22) отримуємо, очевидно, (3.20).

Із співвідношень (3.9), (3.20) та рівності $M(Y)_r = 2'^n$ безпосередньо випливає (3.7).

В силу (3.2) та (3.7) для завершення перевірки умови (2.1) потрібно встановити, що для $1 \leq r \leq 7\lambda$

$$\frac{1}{2^{rN+em}} \left(\sum_{\Delta=1}^{r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) \right) \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty. \quad (3.23)$$

Покажемо, що (3.23) має місце, якщо виконується обмеження (Ч₀):

$$[\rho n] - \varphi(n) + 1 \leq s' \leq [\rho n], \quad (3.24)$$

де s' – параметр підсумування, який введений в рівності (2.6).

Нехай $S_{\{(q_0, k, r_1, \dots, r_\Delta)\}}^{(\Delta)}(n, r; 1)$ визначається аналогічно $S_{\{r_1, \dots, r_\Delta\}}^{(0)}(n, r; 1)$ з додатковою умовою (Ч₀). Тоді при виконанні (3.24) маємо

$$\sum_{\Delta=1}^{r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) = \sum_{z=1}^r \sum_{\Delta=2^{z-1}}^{2^z-1} \sum_{1 \leq r_1 < \dots < r_\Delta \leq 2^{z-1}} S_{\{(q_0, k, r_1, \dots, r_\Delta)\}}^{(\Delta)}(n, r; Q). \quad (3.25)$$

Кожен доданок у правій частині (3.25) допускає оцінку

$$S_{\{(q_0, k, r_1, \dots, r_\Delta)\}}^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq (\Delta + 1)^n S_{\{(q_0, k, r_1, \dots, r_\Delta)\}}^{(\Delta)}(n, r; 1). \quad (3.26)$$

Позначимо через $M_1 / \tilde{M}_1$ сукупність усіх $i, i \in I / j, j \in J$, що не належать $I_{\alpha_\alpha} / J_{\alpha_\alpha}$, $\alpha = 1, \dots, \Delta$ і покладемо $M_2 = I \setminus M_1$, $\tilde{M}_2 = J \setminus \tilde{M}_1$.

Нехай z – найменше ціле число, для якого

$$\Delta \leq 2^z - 1, \quad 1 \leq z \leq r. \quad (3.27)$$

Тоді число елементів множини $M_1 / \tilde{M}_1$ не перевищує в силу твердження 2.4

$$|M_1| \leq 2^{r-z} - 1, \quad |\tilde{M}_1| \leq 2^{r-z} - 1. \quad (3.28)$$

За допомогою (3.28) знаходимо оцінку

$$\begin{aligned}
 S_{((q_0), r_1, \dots, r_k)}^{(\Delta)}(n, r; 1) &= \sum_{s=0}^{n-[pn]} C_{n-[pn]}^s \sum_{s_1+s_2=s} C_s^{s_1} \left(\sum_{i \in M_1}' \frac{s_1!}{i!} \right) \left(\sum_{i \in M_2}' \frac{s_2!}{i!} \right) \times \\
 &\times \sum_{s'=[pn]-\varphi(n)+1}^{[pn]} C_{[pn]}^{s'} \sum_{s'_1+s'_2=s'} C_{s'}^{s'_1} \left(\sum_{j \in \tilde{M}_1}' \frac{s'_1!}{j!} \right) \left(\sum_{j \in \tilde{M}_2}' \frac{s'_2!}{j!} \right) \leq \\
 &\leq \sum_{s=0}^{n-[pn]} C_{n-[pn]}^s (2^{r-2}-1)^s \sum_{s_1 \leq \binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{s_1}^{s_1} (2^r-1)^{s_1} \times \\
 &\times (2^{r-2}-1)^{[pn]} \sum_{s'=[pn]-\varphi(n)+1}^{[pn]} C_{[pn]}^{s'} \sum_{s'_1 \leq \binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{s'}^{s'_1} (2^r-1)^{s'_1},
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

де $\sum_1'$ – це сума за всіма $i \in M_1$ такими, що $\sum i = s_1$, $\sum_2'$ – це сума за всіма $i \in M_2$ такими, що $\sum i = s_2$, $\sum_3'$ – це сума за всіма $j \in \tilde{M}_1$ такими, що $\sum j = s'_1$, $\sum_4'$ – це сума за всіма $j \in \tilde{M}_2$ такими, що $\sum j = s'_2$.

Співвідношення (3.25)-(3.27) та (3.29) дають нерівність

$$\begin{aligned}
 \sum_{\Delta=1}^{2^r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) &\leq 2^{2^r+r n-m} \left(1 - \frac{1}{2^{r-1}} \right)^{[pn]} (2^r-1)^{2 \binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} \times \\
 &\times \left(\sum_{s_1=0}^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{n-[pn]}^{s_1} \right) \left(\sum_{s'_1=0}^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{[pn]}^{s'_1} \right) \sum_{s'=0}^{\varphi(n)} C_{[pn]}^{s'}.
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

Помічаючи далі, що

$$\sum_{s_1=0}^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{n-[pn]}^{s_1} \leq \left(\frac{(n-[pn])e}{(2^r-1)\varphi(n)} \right)^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} \sqrt{(2^r-1)\varphi(n)}, \tag{3.31}$$

$$\sum_{s'_1=0}^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} C_{[pn]}^{s'_1} \leq \left(\frac{[pn]e}{(2^r-1)\varphi(n)} \right)^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} \sqrt{(2^r-1)\varphi(n)}, \tag{3.32}$$

$$\sum_{s'=0}^{\varphi(n)} C_{[pn]}^{s'} \leq \left(\frac{[pn]e}{\varphi(n)} \right)^{\varphi(n)} \sqrt{\varphi(n)}, \tag{3.33}$$

оцінку (3.30) можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned}
 \sum_{\Delta=1}^{2^r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) &\leq 2^{2^r+r n-m} \left(1 - \frac{1}{2^{r-1}} \right)^{[pn]} \left(\frac{(n-[pn])[pn]e^2}{\varphi^2(n)} \right)^{\binom{2^r-1}{2} \varphi(n)} \times \\
 &\times \left(\frac{[pn]e}{\varphi(n)} \right)^{\varphi(n)} (2^r-1)(\varphi(n))^{\frac{1}{2}},
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Використовуючи (3.34), (1.7) та (3.2), знаходимо, що при виконанні обмеження $(\mathcal{U}_0)$ для $1 \leq r \leq 7\lambda$ і всіх n , починаючи з деякого n_1 , $n \geq n_1$,

$$\frac{1}{2^{rN+rm}} \left(\sum_{\Delta=1}^{2^r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) \right) \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \leq 2^{2^{r\lambda}-m} \left(1 - \frac{1}{2^{7\lambda-1}} \right)^{[\rho n]} \times$$

$$\times \left(\frac{(n - [\rho n]) [\rho n] e^2}{\varphi^2(n)} \right)^{(2^{7\lambda}-1)\varphi(n)} \left(\frac{[\rho n] e}{\varphi(n)} \right)^{\varphi(n)} \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} (2^{7\lambda} - 1) (\varphi(n))^{\frac{3}{2}}. \quad (3.35)$$

За допомогою співвідношення (3.35) та умов (1.4) і (1.7) неважко переконатися, що (3.23) має місце при виконанні (3.24).

Нехай тепер

$$0 \leq s' \leq [\rho n] - \varphi(n). \quad (3.36)$$

Далі скористаємось наступною лемою.

Лема. Якщо виконується умова (3.36) і мають місце обмеження (Ч'), (Ч''): існує $i \in M_2$ та (або) існує $j \in \tilde{M}_2$ таке, що

$$0 \leq i \leq \varphi(n) \text{ та (або) } 0 \leq j \leq \varphi(r_i),$$

то для довільного Δ , $1 \leq \Delta \leq 2^r - 1$,

$$0 \leq S^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq C_{2^r-1}^{\Delta} 2^{rN+rm} \left(1 - \frac{1}{2^r} \right)^{[\rho n]} \left(\frac{ne}{\varphi(n)} \right)^{2(2^r-1)\varphi(n)} \varphi(n). \quad (3.37)$$

За допомогою леми знаходимо, що при виконанні (3.36) та (Ч') має місце нерівність

$$\frac{1}{2^{rN+rm}} \left(\sum_{\Delta=1}^{2^r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) \right) \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \leq \frac{1}{2^{rN+rm}} 2^{2^{r\lambda}-m} \left(1 - \frac{1}{2^r} \right)^{[\rho n]} \times$$

$$\times \left(\frac{ne}{\varphi(n)} \right)^{2(2^r-1)\varphi(n)} \sqrt{\varphi(n)} \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}}.$$

Звідси для $1 \leq r \leq 7\lambda$ отримуємо

$$\frac{1}{2^{rN+rm}} \left(\sum_{\Delta=1}^{2^r-1} S^{(\Delta)}(n, r; Q) \right) \frac{e^{2\lambda}}{\sqrt{\lambda}} \leq \exp \left\{ 2^{7\lambda} \ln 2 - m \ln 2 - \right.$$

$$\left. - \frac{[\rho n]}{2^{7\lambda}} + 2(2^{7\lambda} - 1) \varphi(n) \ln \frac{ne}{\varphi(n)} + \frac{1}{2} \ln \varphi(n) + 2\lambda - \frac{1}{2} \ln \lambda \right\}. \quad (3.38)$$

В силу умов (1.4), (1.7) та оцінки $\lambda \leq 2^m$ знаходимо, що

$$\frac{2^{14\lambda+1} \varphi(n)}{[\rho n]} \ln \frac{ne}{\varphi(n)} \leq 2 \frac{\varepsilon}{\rho} \left(1 + \frac{1}{\ln n} \ln \frac{e}{2} \right) < 1 \quad (3.39)$$

при $0 < \varepsilon < \rho/2$ та $n \rightarrow \infty$.

Співвідношення (3.38) і (3.39) дозволяють, очевидно, зробити висновок, що в умовах леми має місце (3.23).

Із співвідношень (3.2), (3.7) та (3.23) випливає справедливості умови (2.1) і, отже, умови наслідку 2.1 виконуються. Користуючись далі наслідком 2.1, отримуємо

$$\max_{1 \leq r \leq 7\lambda} |P\{\nu_n \geq t\} - P\{Y \geq t\}| \rightarrow 0.$$

Звідси слідує необмежене зближення функцій розподілу випадкових величин $(Y_n - 2^m)(2^{m/2})^{-1}$ і $(Y - 2^m)(2^{m/2})^{-1}$ для значень аргументу, які належать діапазону $[-2^{m/2}; 2^{m/2}]$, що розширюється при $2^m \rightarrow \infty$. Враховуючи останнє співвідношення та той факт, що випадкова величина $(Y - 2^m)(2^{m/2})^{-1}$ при $m \rightarrow \infty$ має стандартний нормальний розподіл, приходимо до твердження теореми.

Доведення леми. Дійсно, для $S^{(\Delta)}(n, r; Q)$ маємо очевидну оцінку

$$S^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq \sum_{1 \leq \gamma_1 < \dots < \gamma_\Delta \leq 2^r - 1} S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q), \quad (3.40)$$

де $S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q)$ визначається аналогічно $S^{(\Delta)}(n, r; Q)$ з додатковою умовою, а саме: співвідношення (3.11) виконується тільки для виразів $\Gamma_{r,r}^{(u_1, \dots, u_\nu)}$, $1 \leq u_1 < \dots < u_\nu \leq r$, $\nu \in \{1, \dots, r\}$, яким відповідають номери $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_\Delta \in \{1, 2, 3, \dots, 2^r - 1\}$.

Нехай z – мінімальне ціле число, для якого має місце нерівність $\Delta \leq 2^z - 1$. Тоді при виконанні умов (3.36), (1.3) та обмежень $(\mathcal{C}_1)$,

$(\mathcal{C}_1)$: існує $i \in M_2$ та (або) існує $j \in \tilde{M}_2$ таке, що

$$1 \leq i \leq \varphi(n) \text{ та (або) } 1 \leq j \leq \varphi(n),$$

з урахуванням співвідношення (2.13) неважко перевірити, що

$$Q \leq (2^z - 1)^N. \quad (3.41)$$

За допомогою (3.40) та (3.41) знаходимо, що при виконанні (3.37) та $(\mathcal{C}_1)$ справджується нерівність

$$S^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq (2^z - 1)^N \sum_{1 \leq \gamma_1 < \dots < \gamma_\Delta \leq 2^r - 1} S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1), \quad (3.42)$$

де $S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1)$ відрізняється від $S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1)$ додатковою умовою $(\mathcal{C}_1)$.

У свою чергу аналогічно (3.29) отримуємо

$$S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1) \leq \sum_{s=0}^{n-[pn]} C_{n-[pn]}^s (2^{r-z} - 1)^s \sum_{\substack{s_1=0 \\ s_1 \leq (2^z-1)\varphi(n)}}^1 C_{s_1}^{s_1} (2^r - 1)^{s_1} \times \\ \times \sum_{\substack{s'_1=0 \\ s'_1 \leq (2^z-1)\varphi(n)}}^{[pn]-\varphi(n)} C_{[pn]}^{s'_1} (2^{r-z} - 1)^{s'_1} \sum_{\substack{s'_2=0 \\ s'_2 \leq (2^z-1)\varphi(n)}}^{s'_1} C_{s'_2}^{s'_2} (2^r - 1)^{s'_2}.$$

Звідси

$$(2^z - 1)^N S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1) \leq 2^{rn-n} \left(1 - \frac{1}{2^r}\right)^N (2^r - 1)^{2(2^z-1)\varphi(n)} \sum_{s_1=0}^{(2^z-1)\varphi(n)} C_{n-[pn]}^{s_1} \sum_{s'_2=0}^{(2^z-1)\varphi(n)} C_{[pn]}^{s'_2},$$

або з урахуванням (3.31) та (3.32)

$$(2^z - 1)^N S_{(\gamma_1, \dots, \gamma_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; 1) \leq 2^{rn-n} \left(1 - \frac{1}{2^r}\right)^N \left(\frac{ne}{\varphi(n)}\right)^{2(2^z-1)\varphi(n)} (2^r - 1)\varphi(n). \quad (3.43)$$

Із (3.42) і (3.43) випливає (3.37), оскільки $[\rho n] < N = n - m$ при достатньо великих значеннях n і $\varphi(n) \geq 2$ в силу (1.4).

Далі позначимо через $(\mathcal{C}_2)$ наступні обмеження

$(\mathcal{C}_2)$: (3.36); $i = j = 0$ для усіх $i \in M_2$ та $j \in \tilde{M}_2$.

Покажемо, що (3.37) має місце при обмеженнях $(\mathcal{C}_2)$.

Дійсно, якщо для параметра Δ виконується

$$\Delta < 2^z - 1 \text{ або } \Delta = 2^z - 1 \text{ і } |\tilde{M}_1| < 2^{r-z} - 1, \quad (3.44)$$

то в силу (3.40)

$$S^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq \sum_{1 \leq r_1 < \dots < r_\Delta \leq 2^r - 1} S_{((i_1), (3.44), r_1, \dots, r_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q), \quad (3.45)$$

де $S_{((i_1), (3.44), r_1, \dots, r_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q)$ відрізняється від $S_{(r_1, \dots, r_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q)$ додатковими умовами $(\mathcal{C}_2)$ та (3.44).

Кожен доданок з правої частини (3.45) можна оцінити наступним чином:

1) при $\Delta < 2^z - 1$ маємо

$$S_{((i_1), (3.44), r_1, \dots, r_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq 2^{r(n-i(n-N))} \left(1 - \frac{1}{2^z}\right)^N, \quad (3.46)$$

2) при $\Delta = 2^z - 1$ і $|\tilde{M}_1| < 2^{r-z} - 1$ маємо

$$S_{((i_1), (3.44), r_1, \dots, r_\Delta)}^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq 2^{r(n-m)} \left(1 - \frac{1}{2^r}\right)^{|\rho n|}, \quad (3.47)$$

Поеднуючи (3.45)-(3.47), приходимо до висновку, що (3.37) виконується при обмеженнях $(\mathcal{C}_2)$ та (3.44).

Позначимо через s_* та $\tilde{s}_*$ суми $s_* = \sum_{i \in M_1} i$ та $\tilde{s}_* = \sum_{j \in \tilde{M}_2} j$ відповідно.

Очевидно, що із умови $(\mathcal{C}_2)$ маємо

$$s_* + \tilde{s}_* = 0. \quad (3.48)$$

Переконаємось далі у тому, що із рівності (3.48) випливає $\xi_\alpha \geq 3$ для усіх $\alpha \in \{1, 2, \dots, \Delta\}$, де ξ_α – параметр із означення (3.3). Дійсно, нерівності (2.9) та (2.10) дозволяють зробити висновок, що коли для деякого $\alpha \in \{1, 2, \dots, \Delta\}$ $\xi_\alpha \leq 2$, то $s_* + \tilde{s}_* \geq 1$, а це суперечить рівності (3.48).

Тепер перевіримо, що коли $\Delta = 2^z - 1$, $1 \leq z \leq r$, і $z \in \{r, r-1\}$ або $r \in \{1, 2\}$, то існує таке α , $\alpha \in \{1, 2, \dots, \Delta\}$, для якого $\xi_\alpha \leq 2$. Справді, при $z = r$ або $r \in \{1, 2\}$ наявність зазначеного α не викликає сумнівів. При $z = r - 1$ існування зазначеного параметра α , для якого $\xi_\alpha \leq 2$ випливає із зауваження 2.2.

Отже, співвідношення (3.37) залишиться перевірити при обмеженнях $(\mathcal{C}_3)$:

$$\xi_\alpha \geq 3, \quad \alpha \in \{1, 2, 3, \dots, \Delta\}, \quad (3.49)$$

$$\Delta = 2^z - 1, \quad (3.50)$$

$$|\tilde{M}_1| = 2^{r-z} - 1 \text{ для } 1 \leq z \leq r-2, 3 \leq r < \infty. \quad (3.51)$$

За допомогою твердження 2.5 та умов (3.49)-(3.51) аналогічно тому, як зроблено в роботі [3], переконуємося у тому, що існує елемент $j_*, j_* \in \tilde{M}_1$, який задовольняє нерівності $j_* \leq \varphi(n)$. Це дає можливість отримати оцінку

$$\begin{aligned} S_{((j_1), j_2, \dots, j_k)}^{(\Delta)}(n, r; Q) &\leq 2^{zN} S_{((j_1), j_2, \dots, j_k)}^{(\Delta)}(n, r; 1) \leq 2^{zN} 2^{(r-z)(n - \lfloor \rho n \rfloor)} \sum_{\substack{s'=0 \\ s+s' \geq 1}}^{\lfloor \rho n \rfloor - \varphi(n)} C_{\lfloor \rho n \rfloor}^{s'} \sum_{j \in M_1} \frac{s'!}{\prod j!} = \\ &= 2^{zN + (r-z)n} \sum_{\substack{s'=0 \\ s+s' \geq 1}}^{\lfloor \rho n \rfloor - \varphi(n)} C_{\lfloor \rho n \rfloor}^{s'} \sum_{\substack{s'+j=s' \\ j_* \leq \varphi(n)}} C_{s'}^{s'} \left(\sum_{j \in M_1 \setminus j_*} \frac{s'!}{\prod j!} \right) \leq \\ &\leq 2^{zN + (r-z)n} \left(1 - \frac{1}{2^{r-z}} \right)^{\lfloor \rho n \rfloor - \varphi(n)} \sum_{j_*=0}^{\varphi(n)} C_{\lfloor \rho n \rfloor}^{j_*} \leq \\ &\leq 2^{zN + (r-z)n} \left(1 - \frac{1}{2^r} \right)^{\lfloor \rho n \rfloor} \left\{ (\varphi(n) + 1) \left(\frac{\lfloor \rho n \rfloor e}{\varphi(n)} \right)^{\varphi(n)} \frac{1}{\sqrt{2\pi\varphi(n)}} \right\} \leq \\ &\leq 2^{zN + (r-z)n} \left(1 - \frac{1}{2^r} \right)^{\lfloor \rho n \rfloor} \left(\frac{\lfloor \rho n \rfloor e}{\varphi(n)} \right)^{\varphi(n)} \sqrt{\varphi(n)}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Співвідношення (3.52) та нерівність

$$S^{(\Delta)}(n, r; Q) \leq \sum_{1 \leq j_1 < \dots < j_k \leq 2^r - 1} S_{((j_1), j_2, \dots, j_k)}^{(\Delta)}(n, r; Q)$$

доводять (3.37) при виконанні обмежень (Ч₃).

Аналізуючи обмеження (Ч_i), $i=1, 2, 3$, неважко переконатися у тому, що (3.37) має місце при всіх можливих значеннях параметра z , та значень параметрів s' , i та j , що задовольняють (3.36) та (Ч*), для яких $\Delta \geq 1$. Лема доведена.

Література

- [1]. Зубков А.М. Неравенства для вероятностей переходов с запрещениями // Матем. сб. – 1979. – т. 109 (151), № 4 (11). – С. 491-532
- [2]. Masol V.I. Moments of the number of solutions of system of random Boolean equations // Random Oper. and Stoch. Equations. – 1993. – 1, № 2. – Р. 171-179
- [3]. Масол В.И. Теорема о предельном распределении числа ложных решений системы нелинейных случайных булевых уравнений // Теория вероятностей и ее применения. – 1998. – 43, вып. 1. – С. 41-56

Надійшла до редакції 18.10.2005

Помістимо вершину A рухомого репера в початок векторного елемента V , а вектор $\bar{e}_n$ сумістимо з вектором $\bar{v}$.

Означення. Репером кульового порядку векторного елемента називається репер у якого здійснена фіксація точки A і вектора $\bar{e}_n$ вказаним вище чином.

Оскільки в репері кульового порядку

$$\delta A = 0 \text{ і } \delta \bar{e}_n = 0 \text{ то}$$

$$\pi^1 = \pi^2 = \dots \pi^n = 0 \text{ і } \pi_n^1 = \pi_n^2 = \dots \pi_n^n = 0$$

Це означає, що головними формами векторного елемента є форми ω^a і ω_n^b для яких

$$\begin{aligned} D\omega^a &= [\omega^r \omega_r^a] \\ D\omega_n^b &= [\omega_n^r \omega_r^b] \end{aligned} \quad (4)$$

Означення. Векторним полем в просторі A_n називається відповідність при якій кожній точці простору співставляється певним чином визначений вектор з початком в цій точці.

Векторне поле можна розглядати також лише в деякій області G n -вимірного афінного простору A_n .

Введенням векторного поля у многовиді всіх векторних елементів виділяється деякий підмноговид.

Надалі будемо розглядати лише той випадок, коли лінійні форми ω^a незалежні. Очевидно, що це буде тоді, коли векторне поле розглядається в області G , яка є n -вимірною або в усьому просторі A_n .

Тоді система диференціальних рівнянь векторного поля в репері кульового порядку буде мати вигляд:

$$\omega_n^a = \Lambda_{nb}^a \omega^b \quad (5)$$

Надалі систему (5) зручно буде подавати у вигляді

$$\begin{aligned} \omega_n^i &= \Lambda_{nj}^i \omega^j + \Lambda_{nn}^i \omega^n, \\ \omega_n^a &= \Lambda_{nk}^a \omega^k + \Lambda_{nn}^a \omega^n, \\ i, j, k, \dots 1, 2, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (6)$$

Продовжуючи систему диференціальних рівнянь векторного поля (6) одержимо систему диференціальних рівнянь фундаментального об'єкта першого порядку векторного поля:

$$\begin{aligned} \nabla \Lambda_{nj}^i &= \Lambda_{nk}^i \omega_k^j + \Lambda_{na}^i \omega^k + \Lambda_{nn}^i \omega^n, \\ \nabla \Lambda_{nk}^i &= -\Lambda_{kn}^i \omega_k^j + \Lambda_{nn}^i \omega^k + \Lambda_{nn}^i \omega^n, \\ \nabla \Lambda_{nn}^i &= \Lambda_{nk}^i \omega_k^j + \Lambda_{nn}^i \omega_j^n + \Lambda_{nn}^i \omega^j + \Lambda_{nn}^i \omega^n, \\ \nabla \Lambda_{nn}^a &= -\Lambda_{nn}^a \omega_k^j + \Lambda_{nn}^a \omega^k + \Lambda_{nn}^a \omega^n \end{aligned} \quad (7)$$

При фіксації головних параметрів система диференціальних рівнянь (7) буде мати такий вигляд:

$$\begin{aligned}\delta\Lambda_{ij}^i &= \Lambda_{nk}^i \pi_j^k - \Lambda_{nj}^k \pi_k^i + \Lambda_{ni}^i \pi_j^n \\ \delta\Lambda_{ni}^i &= -\Lambda_{ni}^k \pi_k^i \\ \delta\Lambda_{ij}^n &= \Lambda_{nk}^n \pi_j^k - \Lambda_{ni}^k \pi_k^n - \Lambda_{nn}^n \pi_j^n \\ \delta\Lambda_{nn}^n &= -\Lambda_{nn}^k \pi_k^n\end{aligned}\quad (8)$$

Фундаментальний об'єкт першого порядку $\{\Lambda_{ij}^i, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{ni}^n, \Lambda_{nn}^n\}$ має ряд підоб'єктів. Серед яких $\{\Lambda_{ij}^i, \Lambda_{nn}^i\}$, $\{\Lambda_{ij}^n, \Lambda_{ni}^n, \Lambda_{nn}^n\}$ та $\{\Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nn}^n\}$. Компоненти Λ_{nn}^i також утворюють підоб'єкт фундаментального об'єкта першого порядку, який є тензором.

Диференціюючи зовнішнім чином диференціальні рівняння (7) та використовуючи лему Картана, одержимо:

$$\begin{aligned}\nabla\Lambda_{ijk}^i &= \Lambda_{nik}^i \omega_j^n + \Lambda_{ijn}^i \omega_k^n + \Lambda_{ij}^e \Lambda_{nk}^i \omega_e^n - \Lambda_{ne}^i \Lambda_{nk}^i \omega_j^n - \Lambda_{ni}^e \Lambda_{nk}^i \omega_j^n + \Lambda_{njke}^i \omega^e + \Lambda_{njkn}^i \omega^n \\ \nabla\Lambda_{ijn}^i &= \Lambda_{nnn}^i \omega_j^n + \Lambda_{ij}^k \Lambda_{nn}^i \omega_k^n - \Lambda_{nk}^i \Lambda_{ni}^k \omega_j^n - \Lambda_{nn}^i \Lambda_{nn}^i \omega_j^n + \Lambda_{njke}^i \omega^e + \Lambda_{njkn}^i \omega^n \\ \nabla\Lambda_{nik}^i &= \Lambda_{nn}^e \Lambda_{nk}^i \omega_e^n + \Lambda_{nikn}^i \omega^e + \Lambda_{nikn}^i \omega^n \\ (9)\end{aligned}$$

$$\nabla\Lambda_{nnn}^i = \Lambda_{nn}^e \Lambda_{nn}^i \omega_e^n + \Lambda_{nnne}^i \omega^e + \Lambda_{nnnn}^i \omega^n$$

$$\begin{aligned}\nabla\Lambda_{ijk}^n &= -\Lambda_{ijk}^e \omega_e^n + \Lambda_{ijn}^n \omega_k^n - \Lambda_{nik}^n \omega_j^n - \Lambda_{ne}^n \Lambda_{nk}^i \omega_j^n + \Lambda_{ij}^e \Lambda_{nk}^n \omega_e^n - \Lambda_{nn}^e \Lambda_{nk}^i \omega_j^n + \Lambda_{njke}^n \omega^e + \Lambda_{njkn}^n \omega^n \\ \nabla\Lambda_{ijn}^n &= -\Lambda_{ijn}^k \omega_k^n - \Lambda_{nnn}^n \omega_j^n - \Lambda_{nk}^n \Lambda_{ni}^k \omega_j^n + \Lambda_{ij}^k \Lambda_{nn}^n \omega_k^n - (\Lambda_{nn}^n)^2 \omega_j^n + \Lambda_{njke}^n \omega^e + \Lambda_{njkn}^n \omega^n \\ \nabla\Lambda_{nik}^n &= \Lambda_{nnn}^n \omega_k^n - \Lambda_{nik}^e \omega_e^n + \Lambda_{nn}^e \Lambda_{nk}^i + \Lambda_{nnke}^n \omega^e + \Lambda_{nnkn}^n \omega^n \\ \nabla\Lambda_{nnn}^n &= -\Lambda_{nnn}^k \omega_k^n + \Lambda_{nn}^k \Lambda_{nn}^n \omega_k^n + \Lambda_{nnnn}^n \omega^k + \Lambda_{nnnn}^n \omega^n\end{aligned}$$

Із диференціальних рівнянь (7) і (9) видно, що система величин

$$\{\Lambda_{ij}^i, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{ij}^n, \Lambda_{nn}^n, \Lambda_{ijk}^i, \Lambda_{ijn}^i, \Lambda_{nik}^i, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ijk}^n, \Lambda_{ijn}^n, \Lambda_{nik}^n, \Lambda_{nnn}^n\} \quad (10)$$

утворює фундаментальний об'єкт другого порядку векторного поля в афінному просторі A_n . З цього об'єкта можна віділити такі підоб'єкти

$$\begin{aligned}1 &\{\Lambda_{ijk}^i, \Lambda_{nik}^i, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nk}^i, \Lambda_{nn}^n\} \\ 2 &\{\Lambda_{ijn}^i, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nn}^n\} \\ 3 &\{\Lambda_{nik}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i\} \\ 4 &\{\Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{nn}^i\} \\ 5 &\{\Lambda_{ijk}^n, \Lambda_{ijn}^n, \Lambda_{nik}^n, \Lambda_{nnn}^n, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nk}^i, \Lambda_{nn}^n\} \\ 6 &\{\Lambda_{nnn}^n, \Lambda_{ijn}^n, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{nnn}^n, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nk}^i, \Lambda_{nn}^n\} \\ 7 &\{\Lambda_{nik}^n, \Lambda_{ijn}^n, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{ij}^k, \Lambda_{nn}^i, \Lambda_{nn}^n\} \\ 8 &\{\Lambda_{nnn}^n, \Lambda_{nnn}^i, \Lambda_{nn}^k, \Lambda_{nn}^n\}\end{aligned}\quad (11)$$

Послідовність фундаментальних об'єктів $\{\Lambda_{\alpha\beta}^\alpha, \Lambda_{\alpha\beta\gamma}^\alpha, \Lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}^\alpha, \dots\}$ лежить в основі диференціальної геометрії векторного поля n -вимірного афінного простору A_n .

2. Деякі поля інваріантних геометричних об'єктів присдані до векторного поля

В класичній афінній диференціальній геометрії основними інваріантними геометричними об'єктами присданими до досліджуваного образу (крива, поверхня, розподіл) є точка, пряма та площина []. Знайдемо диференціальні рівняння інваріантних геометричних об'єктів присданих до векторного поля в просторі A_n .

2.1. Поле точок. Розглянемо точку $P(x^a)$ в афінному репері $(\bar{A}, \bar{e}_i)$. Якщо позначити через $\bar{P}$ – радіус-вектор цієї точки, то відносно афінного репера $(\bar{A}, \bar{e}_i)$ її можна задати співвідношенням

$$\bar{P} = \bar{A} + x^a \bar{e}_a \quad (2.1)$$

Продиференціювавши співвідношення (2.1) та враховуючи (1.1) і (1.2) при фіксації головних параметрів одержимо:

$$\begin{aligned} \delta x^i + x^i \pi_j^i &= 0 \\ \delta x^n + x^n \pi_j^n &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Отже, інваріантне поле точок пов'язаних з векторним полем в A_n задовільняє рівнянням

$$dx^i + x^i \omega_j^i = x_j^i \omega^j + x_n^i \omega^n \quad (2.3)$$

$$dx^n + x^n \omega_i^n = x_i^n \omega^i + x_n^n \omega^n$$

або

$$\begin{aligned} \nabla x^i &= x_j^i \omega^j + x_n^i \omega^n \\ dx^n + x^n \omega_i^n &= x_i^n \omega^i + x_n^n \omega^n \end{aligned} \quad (2.4)$$

2.2 Поле прямих. Нехай через точку A проходить пряма l з напрямним вектором

$$\bar{R} = v^i \bar{e}_i + v^n \bar{e}_n \quad (2.5)$$

Будемо позначати таку пряму через $l = [A, \bar{R}]$. Із умови інваріантності прямої

$$d\bar{R} = \theta \bar{R}, \quad d\theta = 0$$

одержимо

$$\begin{aligned} dv^i + v^i \pi_j^i &= \theta v^i \\ dv^n + v^n \pi_j^n &= \theta v^n \end{aligned} \quad (2.6)$$

Лінійну форму θ можна вибрати таким чином, щоб $v^n = 1$. Тоді $\theta = v^j \pi_j^n$.

Таким чином, диференціальні рівняння поля інваріантних прямих присданих до векторного поля приймуть вигляд:

$$\delta v^i + v^i \pi_j^i - v^i v^j \pi_j^n = 0 \quad (2.7)$$

$$\text{або } dv' + v' \omega'_j - v' v' \omega'_j = v'_j \omega' + v'_n \omega'' \quad (2.8)$$

Векторно параметричне рівняння прямої l в репері $(A, \bar{e}_i)$ при цьому можна записати так:

$$\bar{P} = \bar{A} + t \bar{e}_i$$

Звідки канонічне рівняння прямої $l = [A, P]$ запишеться у вигляді:

$$x^i - v^i x^n = 0 \quad (2.9)$$

2.3 Поле гіперплощини. Нехай гіперплощина відносно рухомого реперу $(A, \bar{e}_i)$ має вигляд:

$$v_a x^a + v = 0 \quad (2.10)$$

Умова інваріантності гіперплощини

$$(v_a + \delta v_a)(x^a - \delta x^a) + v + \delta v = (\rho_0 + \theta)(v_a x^a + v)$$

або

$$\begin{cases} \rho_0 = 1 \\ \delta v^a x^a - v_a x^a \pi^a_\beta + \delta v = \theta(v_a x^a + v) \end{cases} \quad (2.12)$$

Звідки

$$\begin{aligned} \delta v_i - v_j \pi^j_i - v_n \pi^n_i &= \theta v_i \\ \delta v_n &= \theta v_n \\ \delta v &= \theta v \end{aligned} \quad (2.13)$$

Можливі два випадки.

2.3.1. Поле гіперплощини, яке не проходить через т.А

Пронормувавши коефіцієнти гіперплощини можна домогтись того, щоб $v = 1$. Тоді $\theta = 0$.

Із рівняння (2.8) одержимо диференціальні рівняння геометричного об'єкту $\{v_i, v_n\}$, який визначає поле гіперплощини, що не проходить через т.А:

$$\delta v_i - v_j \pi^j_i - v_n \pi^n_i = 0 \quad (2.14)$$

$$\delta v_n = 0$$

$$\text{або } \nabla v_i - v_n \omega^n_i = v_j \omega^j_i + v_m \omega^m_i + \omega^n_i \quad (2.15)$$

$$dv_n = v_m \omega^m_n + v_n \omega^n_n$$

В цьому випадку рівняння гіперплощини має вигляд

$$v_i x^i + v_n x^n + 1 = 0 \quad (2.16)$$

$$v_i x^i + x^n + 1 = 0$$

2.3.2. Поле гіперплощини, що проходить через т.А Враховуючи (2.8), умови інваріантності гіперплощини запишуться у вигляді

$$\begin{aligned}\delta v_i - v_j \pi_i^j - v_n \pi_i^n &= \theta v_i \\ \delta v_n &= \theta v_n\end{aligned}\quad (2.17)$$

Нормуючи коефіцієнт гіперплощини можна домогтися того, щоб $v_n = 1$. Звідки $\theta = 0$.

Отже, умови інваріантності поля гіперплощини, яке проходить через т.А приймуть вигляд

$$dv_i - v_j \omega_i^j - \omega_i^n = v_j \omega^j + v_n \omega^n \quad (2.18)$$

При цьому рівняння поля гіперплощини має вигляд

$$v_i x^i + x^n = 0 \quad (2.19)$$

3. Деякі геометричні об'єкти (тензори, квазітензори та інваріанти) побудовані за допомогою фундаментальних об'єктів векторного поля

Розглянемо систему величин Λ_{ij}^i . В загальному випадку

$$L = \det \|\Lambda_{ij}^i\| \neq 0 \quad (3.1)$$

Це дозволяє ввести в розгляд величин V_{ij}^i , компоненти яких визначаються із співвідношень

$$\Lambda_{ik}^i V_{nj}^k = \delta_j^i \quad (3.2)$$

Диференціальні рівняння введених величин мають вигляд:

$$\nabla V_{ij}^i = V_{np}^i \Lambda_{im}^p V_{nj}^k \omega_k^n + V_{ij}^i \omega^a \quad (3.3)$$

Диференціюючи співвідношення (3.1) одержимо

$$d \ln L = V_{ij}^i \Lambda_{im}^j \omega_i^n + L_k \omega^k + L_n \omega^n \quad (3.4)$$

Введемо в розгляд величини

$$V^i = -V_{ij}^i \Lambda_{im}^j \quad (3.5)$$

$$\nabla V^i = V^i V^k \omega_k^n + V_a^i \omega^a \quad (3.6)$$

а також величини

$$\Lambda^i = \frac{\Lambda_{im}^i}{\Lambda_{im}^n} \quad (3.7)$$

$$\nabla \Lambda^i = \Lambda^i \Lambda^k \omega_k^n + \Lambda_a^i \omega^a \quad (3.8)$$

За допомогою фундаментального об'єкта першого порядку $\{\Lambda_{ij}^i, \Lambda_{im}^i, \Lambda_{im}^n, \Lambda_{im}^n\}$ розглянемо серію тензорів

$$h^{ij} = \Lambda_{im}^i \Lambda_{jn}^j \quad (3.9)$$

$$dh^0 = -h^{ik} \omega_k^j - h^{ij} \omega_k^i + (\dots)_a \omega^a$$

$$\varphi_j^a = \Lambda_{ij}^i \Lambda_{im}^j - \Lambda_{im}^i \Lambda_{nj}^j$$

$$\nabla_s \varphi_j^a = 0 \quad (3.10)$$

Тензор (3.9) симетричний, а тензор (3.10) – антисиметричний. Побудуємо обернений тензор до тензора h^{ν} за допомогою співвідношень

$$\begin{aligned} h^{ik} h_{kj} &= \delta_j^i \\ \nabla_\delta h_{ij} &= 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Система величин

$$\begin{aligned} \psi_j^{ik} &= \frac{1}{2} (\Lambda_{nj}^i \Lambda_{mn}^k + \Lambda_{mn}^i \Lambda_{nj}^k) \\ \nabla \psi_j^{ik} &= h^{ik} \omega_j^n + (\dots)_\alpha \omega^\alpha \end{aligned} \quad (3.12)$$

дозволяє побудувати квазітензор

$$\begin{aligned} \psi_i &= \frac{1}{n-1} h_{jk} \psi_i^{jk} \\ \nabla \psi_i &= \psi_j \omega_i^j + \omega_i^n + (\dots)_\alpha \omega^\alpha \end{aligned} \quad (3.13)$$

Введемо систему величин

$$\begin{aligned} l^i &= \Lambda_{mn}^i \Lambda_{mn}^n \\ \nabla l^i &= -l^k \omega_k^i - h^{ik} \omega_k^n + (\dots)_\alpha \omega^\alpha \end{aligned} \quad (3.14)$$

За допомогою їх побудуємо квазітензор

$$\begin{aligned} L_i &= -l^k h_{ik} \\ \nabla_\delta L_i &= L_k \pi_i^k + \pi_i^n \end{aligned} \quad (3.15)$$

Розглянемо систему величин

$$\begin{aligned} P &= \Lambda_{ni}^i \\ dP &= \Lambda_{mn}^k \omega_k^n + P_\alpha \omega^\alpha \end{aligned} \quad (3.16)$$

за допомогою яких побудуємо інваріант

$$\begin{aligned} T &= \Lambda_{mn}^n + P \\ dT &= T_i \omega^i + T_n \omega^n \end{aligned} \quad (3.17)$$

Очевидно, що

$$T_k = \Lambda_{mnk}^n + \Lambda_{mnk}^i \quad (3.18)$$

$$T_n = \Lambda_{mn}^n + \Lambda_{mn}^i \quad (3.19)$$

Диференціюючи (3.18) та (3.19) одержимо

$$dT_k = T_\alpha \omega_k^\alpha + T_n \omega_k^n + T_{ka} \omega^a \quad (3.20)$$

$$dT_n = T_{na} \omega^a \quad (3.21)$$

4. Інваріантні нормалізації векторного поля

Означення. Нормалізацією векторного поля будемо називати пару, яка складається з інваріантно пов'язаної з векторним полем прямої, що проходить через точку А (нормалі першого роду) та гіперплощини, яка не проходить через точку А (нормалі другого роду).

Згідно з означенням, нормалізація векторного поля рівносильна заданню на векторному полі двох полів квазітензорів (ν', ν_α) , які задовільняють рівнянням (2.8) і (2.15).

Оскільки, диференціальні рівняння величин (3.6) і (3.7) мають структуру аналогічну структурі диференційного рівняння (2.8), то величини

$$\begin{aligned}\nu'_1 &= V' \\ \nu'_2 &= \Lambda'\end{aligned}$$

визначають за допомогою компонента фундаментального геометричного об'єкта першого порядку дві інваріантні нормалі першого роду приєднані до векторного поля.

Їх рівняння в локальному репері (A, e_i) мають відповідно вигляд:

$$\begin{aligned}X' - \Lambda' X^\alpha &= 0 \\ X' - V' X^\alpha &= 0\end{aligned}\tag{4.1}$$

Диференціальні рівняння величин $\{T_i, T_\alpha\}$ мають структуру аналогічну структурі диференціальних рівнянь (2.15). Отже, величини

$$\begin{aligned}\nu_i &= T_i \\ \nu_\alpha &= T_\alpha\end{aligned}$$

визначають за допомогою компонент фундаментального геометричного об'єкта другого порядку інваріантну нормаль другого роду приєднану до векторного поля, рівняння якої в репері нульового порядку приймає вигляд

$$T_i x^i + T_\alpha x^\alpha + 1 = 0\tag{4.2}$$

Одержані результати можна сформулювати у вигляді

Теорема Існує дві інваріантні нормалізації векторного поля в n -вимірному афінному просторі побудовані за допомогою компонент фундаментального геометричного об'єкта другого порядку, причому інваріантні нормалі першого роду будуються за допомогою лише компонент фундаментального об'єкта першого порядку.

Побудовані інваріантні нормалізації векторного поля мають вигляд

$$(\nu', T_i, T_\alpha)\tag{4.3}$$

$$(\Lambda', T_i, T_\alpha)\tag{4.4}$$

Означення Гіперрозподілом векторного поля називається відповідність при якій кожній точці простору співставляється інваріантно пов'язана з векторним полем гіперплощина, яка проходить через цю точку.

Оскільки диференціальні рівняння величини (3.13) і (3.15) мають структуру рівнянь (2.18), то величини ψ_i і L_i визначають інваріантно пов'язані з векторним полем гіперплощини, рівняння яких в локальному репері мають вигляд

$$\psi_i x^i + x^\alpha = 0\tag{4.5}$$

$$L, x^i + x^n = 0 \quad (4.6)$$

Отже, справедлива така теорема

Теорема Існує принаймі два інваріантні гіперрозподіли векторного поля, які побудовані за допомогою компонент фундаментального об'єкта першого порядку.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ .

1. Алшибая Э.Д. К геометрии распределений гиперплоскостных элементов в аффинном пространстве // Тр. Геометр. Семинара/ ВИНТИ. М., 1974. - Т.5, - С.159-193
2. Аминов Ю.А. Геометрия векторного поля // М.: Наука, 1990. - 208 с.
3. Бюшгес С.С. Геометрия векторного поля // Изв. АН СССР / Серия математика., 1948. Т.10, №1.
4. Норден А.П. Пространство аффинной связности. - М.: Наука, 1976. - 432 с.
5. Синцов Д.М. Работы по неголономной геометрии. - Київ: Вища школа, 1972. - 293 с.
6. Слухаев В.В. Геометрия векторных полей. - Томск: Изд-во Томского университета, 1982. - 97 с.
7. Слухаев В.В. Эквивариантно-инвариантные неголономные поверхности потока жидкости // Труды Томского университета. Томск, 1967. - Т.191, - С.74-80

Надійшла до редакції 12.12.2005

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА

УДК 532.5

Еліна М. Безим'янна,
Анастасія А. Жмуріна¹,
Михайло Д. Черниш²

Elina M. Bezumyanna,
Anastasiia A. Zhmurina¹,
Mykhailo D. Chernysh²

Стационарні мікротечії рідини у прямокутній порожнині

Stationary microfluidic flows in a rectangular cavity

Розглядається виникнення вихорів у
рідині в залежності від швидкостей руху
стінок та розмірів порожнини.

Occurence of vortices in fluids
depending on speeds of moving walls and
aspect ratio of the cavity is considered.

Ключові слова: мікрорідина, течія
Стокса, точка стагнації.

Keywords: microfluidics, Stokes flow,
stagnation point.

E-mails: ¹zhmurina@univ.kiev.ua,
²mic@higmir.net

Вступ

Протягом останніх років спостерігається бурхливий розвиток інтересу до керування течіями в каналах з розмірами порядку кількох десятків мікрометрів [1-4]. Це, по суті, призвело до виникнення нової області науки, яка отримала назву "механіка мікрорідини" (*microfluidics*). Ця назва, а також терміни "мікрорідина" (*microfluid*) та "мікротечія рідини" (*microfluidic flow*), стали вже традиційними в зарубіжних статтях, присвячених даній темі.

Механіка мікрорідини використовується в різних областях сучасної нанотехнології – від хімічного синтезу та біологічного аналізу до нанооптики та інформаційних технологій, і все ж, ця область знаходиться на первинній стадії розвитку. Одним із важливих напрямків даної галузі є вивчення перемішування рідини [5-7].

Ключовим аспектом при вивченні мікрорідини є малі характерні розміри каналів. Це призводить, з одного боку, до малих значень типових чисел Рейнольдса ($Re < 0.1$), а з іншого – заважає безпосередньо застосовувати звичайні методи збудження руху рідини шляхом прикладання на поверхні дотичних швидкостей із заданим (відомим) законом розподілу. Запропонована нещодавно [8, 9] ідея використання електро-осмотичного ефекту для збудження течій у двовимірних порожнинах дозволяє звести задачу до вивчення течії Стокса в'язкої

рідини при заданій дотичній швидкості на границі. Для обчислень автори цих статей використовують точний аналітичний розв'язок, наведений у роботі [10]. Однак, на наш погляд, у роботах [8-9] не вдалося з'ясувати важливі особливості течії, які виникають при розгляді прямокутної порожнини. Адже при різних співвідношеннях сторін прямокутника вигляд ліній течії має принципово різний характер.

Мета даної роботи полягає у використанні аналітичного розв'язку [10, 11] для вивчення тонкої структури картини стаціонарних ліній течії для прямокутної (у частковому випадку – квадратної) порожнини.

Постановка граничної задачі та побудова розв'язку

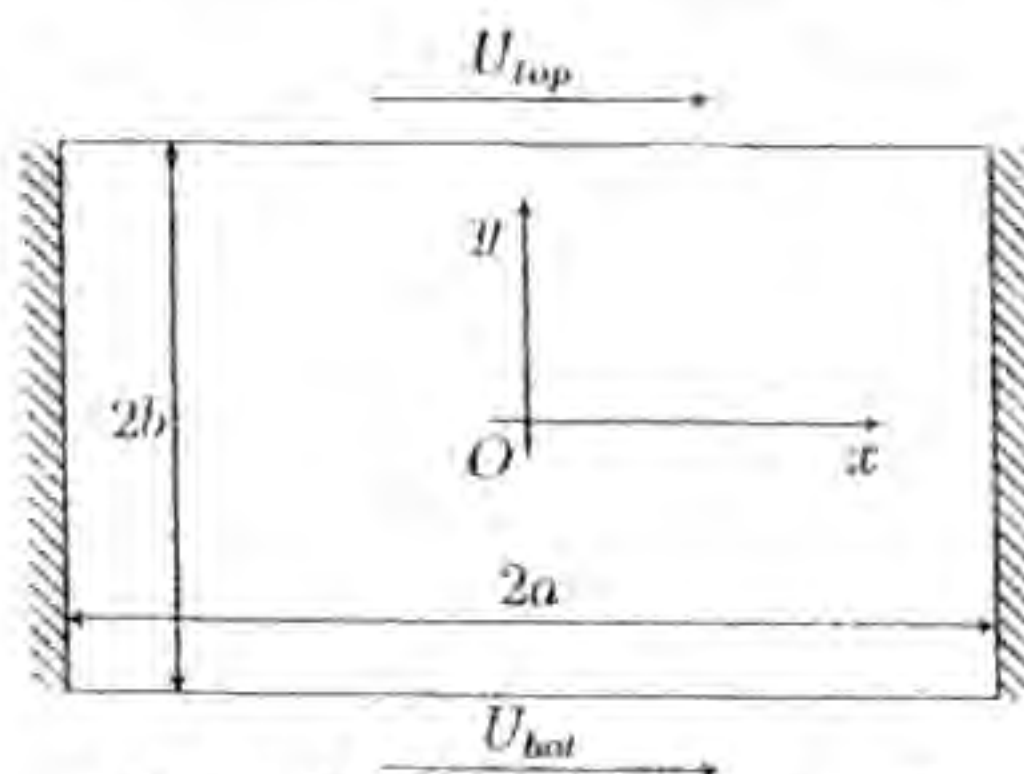


Рис. 1. Геометрія області течії

Розглянемо двовимірну стаціонарну стоксову течію в'язкої нестисливої рідини всередині прямокутної порожнини $-a \leq x \leq a$, $-b \leq y \leq b$ (рис. 1). Рідина приводиться в рух верхньою ($y=b$), та нижньою ($y=-b$) стінками, які мають постійні швидкості U_{top} та U_{bot} , відповідно. Бічні стінки ($x = \pm a$) залишаються нерухомими.

В наближенні Стокса, коли силами інерції нехтують порівняно з силами тиску та в'язкості, двовимірна задача в термінах функції течії $\psi(x, y)$ зводиться до бігармонічного рівняння

$$\frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} = 0 \quad (1.1)$$

з граничними умовами

$$\begin{aligned} \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a, \\ \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = U_{top}, \quad y = b, \\ \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = U_{bot}, \quad y = -b. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Компоненти $u(x, y)$ та $v(x, y)$ вектора швидкості визначаються як

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (1.3)$$

Користуючись властивістю лінійності граничної задачі (1.1), (1.2), представимо функцію течії у вигляді

$$\psi(x, y) = U_1 \psi_1(x, y) + U_2 \psi_2(x, y), \quad (1.4)$$

де

$$U_1 = \frac{U_{\text{top}} - U_{\text{bot}}}{2}, \quad U_2 = \frac{U_{\text{top}} + U_{\text{bot}}}{2}. \quad (1.5)$$

Граничні умови для бігармонічних функцій $\psi_1(x, y)$ та $\psi_2(x, y)$ мають вигляд

$$\psi_1 = 0, \quad \frac{\partial \psi_1}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a; \quad \psi_1 = 0, \quad \frac{\partial \psi_1}{\partial y} = \pm 1, \quad y = \pm b, \quad (1.6)$$

$$\psi_2 = 0, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a; \quad \psi_2 = 0, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial y} = 1, \quad y = \pm b. \quad (1.7)$$

Функція $\psi_1(x, y)$, яка відповідає антисиметричному полю швидкостей, може бути представлена у вигляді розкладу

$$\begin{aligned} \psi_1(x, y) = & b \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} x_m^{(1)} \left(b \tanh \alpha_m b \frac{\cosh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b} - y \frac{\sinh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b} \right) \cos \alpha_m x - \\ & - a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\beta_l} y_l^{(1)} \left(a \tanh \beta_l a \frac{\cosh \beta_l x}{\cosh \beta_l a} - x \frac{\sinh \beta_l x}{\cosh \beta_l a} \right) \cos \beta_l y + \\ & + b X S_a^{(1)}(x, y) - a Y S_b^{(1)}(x, y), \end{aligned} \quad (1.8)$$

де

$$\alpha_m = \frac{2m-1}{2a} \pi, \quad \beta_l = \frac{2l-1}{2b} \pi, \quad X = \frac{2\pi^2}{ab(\pi^2 - 4)}, \quad Y = \frac{4\pi}{ab(\pi^2 - 4)} \quad (1.9)$$

та

$$S_a^{(1)}(x, y) = \frac{4a^2}{\pi^2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \left[S_1 \left(\frac{\pi x}{2a}, \frac{(2rb + b - y)\pi}{2a} \right) + S_1 \left(\frac{\pi x}{2a}, \frac{(2rb + b + y)\pi}{2a} \right) \right]; \quad (1.10)$$

$$S_b^{(1)}(x, y) = \frac{4b^2}{\pi^2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \left[S_1 \left(\frac{\pi y}{2b}, \frac{(2ra + a - x)\pi}{2b} \right) + S_1 \left(\frac{\pi y}{2b}, \frac{(2ra + a + x)\pi}{2b} \right) \right];$$

$$S_1(\xi, \eta) = -\frac{\eta}{2} \arctan \frac{\cos \xi}{\sinh \eta}. \quad (1.11)$$

Коефіцієнти рядів Фур'є (1.8) отримаємо, розв'язуючи методом простої редукції нескінченну систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} x_m^{(1)} b \Delta_1(\alpha_m b) - \sum_{l=1}^{\infty} y_l^{(1)} \frac{4\alpha_m^2 \beta_l}{(\beta_l^2 + \alpha_m^2)^2} = F_m^{(1)}, & m = 1, 2, \dots, \\ y_l^{(1)} a \Delta_1(\beta_l a) - \sum_{m=1}^{\infty} x_m^{(1)} \frac{4\beta_l^2 \alpha_m}{(\alpha_m^2 + \beta_l^2)^2} = G_l^{(1)}, & l = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (1.12)$$

де

$$F_m^{(1)} = 4Y\alpha_m^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\beta_l}{(\beta_l^2 + \alpha_m^2)^2} - Xb\Delta_1(\alpha_m b) + \frac{2}{a}, \quad F_m^{(1)} = O\left(\frac{1}{m^2}\right), \quad m \rightarrow \infty, \quad (1.13)$$

$$G_l^{(1)} = 4X\beta_l^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha_m}{(\beta_l^2 + \alpha_m^2)^2} - Ya\Delta_1(\beta_l a), \quad G_l^{(1)} = O\left(\frac{1}{l^2}\right), \quad l \rightarrow \infty,$$

$$\Delta_1(\xi) = \tanh \xi + \frac{\xi}{\cosh^2 \xi}, \quad (1.14)$$

Для функції $\psi_2(x, y)$, яка відповідає симетричному полю швидкостей, використовуємо наступний розклад:

$$\begin{aligned} \psi_2(x, y) = & b \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} x_m^{(2)} \left(b \coth \alpha_m b \frac{\sinh \alpha_m y}{\sinh \alpha_m b} - y \frac{\cosh \alpha_m y}{\sinh \alpha_m b} \right) \cos \alpha_m x - \\ & - a \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\delta_k} y_k^{(2)} \left(a \tanh \delta_k a \frac{\cosh \delta_k x}{\cosh \delta_k a} - x \frac{\sinh \delta_k x}{\cosh \delta_k a} \right) \sin \delta_k y + \\ & + b X S_a^{(2)}(x, y) - a Y S_\delta^{(2)}(x, y), \quad (1.15) \end{aligned}$$

де значення α_m , X та Y наведені в (1.9), $\delta_k = \frac{k}{b}\pi$ та

$$S_a^{(2)}(x, y) = \frac{4a^2}{\pi^2} \sum_{r=0}^{\infty} \left[S_1\left(\frac{\pi x}{2a}, \frac{(2rb + b - y)\pi}{2a}\right) - S_1\left(\frac{\pi x}{2a}, \frac{(2rb + b + y)\pi}{2a}\right) \right], \quad (1.16)$$

$$S_\delta^{(2)}(x, y) = \frac{4b^2}{\pi^2} \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \left[S_2\left(\frac{\pi y}{b}, \frac{(2ra + a - x)\pi}{2b}\right) + S_2\left(\frac{\pi y}{b}, \frac{(2ra + a + x)\pi}{2b}\right) \right],$$

$$S_2(\xi, \eta) = -\frac{\eta}{2} \arctan \frac{\sin \xi}{e^{2\eta} + \cos \xi}, \quad (1.17)$$

а вираз для $S_1(\xi, \eta)$ вже наводився вище (1.11).

Коефіцієнти розкладу в цьому випадку визначаються з нескінченної системи

$$\begin{cases} x_m^{(2)} b \Delta_2(\alpha_m b) - \sum_{k=1}^{\infty} y_k^{(2)} \frac{4\alpha_m^2 \delta_k}{(\delta_k^2 + \alpha_m^2)^2} = F_m^{(2)}, & m = 1, 2, \dots, \\ y_k^{(2)} a \Delta_2(\delta_k a) - \sum_{m=1}^{\infty} x_m^{(2)} \frac{4\delta_k^2 \alpha_m}{(\alpha_m^2 + \delta_k^2)^2} = H_k^{(2)}, & k = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (1.18)$$

де

$$F_m^{(2)} = 4Y\alpha_m^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\delta_k}{(\delta_k^2 + \alpha_m^2)^2} - Xb\Delta_2(\alpha_m b) + \frac{2}{a}, \quad F_m^{(2)} = O\left(\frac{1}{m^2}\right), \quad m \rightarrow \infty, \quad (1.19)$$

$$H_k^{(2)} = 4X\delta_k^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha_m}{(\delta_k^2 + \alpha_m^2)^2} - Ya\Delta_2(\delta_k a), \quad H_k^{(2)} = O\left(\frac{1}{k^2}\right), \quad k \rightarrow \infty,$$

$$\Delta_2(\xi) = \coth \xi - \frac{\xi}{\sinh^2 \xi}, \quad (1.20)$$

а $\Delta_1(\xi)$ визначається за формулою (1.14).

Результати розрахунків

Для проведення чисельних обчислень згідно представлених вище аналітичних розв'язків вибиралось $a=5$ та $U_{top}=1$. Величини b та U_{bot} для різних випадків були різними. При цьому кількість коефіцієнтів Фур'є розкладів (1.8), (1.15) бралася в 2-5 разів більшою за відповідні лінійні розміри порожнини (наприклад, визначалося від 10 до 25 коефіцієнтів $x_m^{(1)}$). При обчисленні нескінченних сум у виразах (1.13), (1.19) було взято 25000 перших доданків, а в тих випадках, коли це не призводило до помітного зниження точності, відповідні суми обчислювалися через асимптотичні розклади в комплексній площині, що дозволяло проводити розрахунки швидше. У виразах (1.10), (1.16) залишалось 20 перших доданків. Всі обчислення проводилися на мові C++, зі збереженням від 48 до 96 значущих цифр. Для контролю точності обчислень перевірялися значення функції течії вздовж границі порожнини.

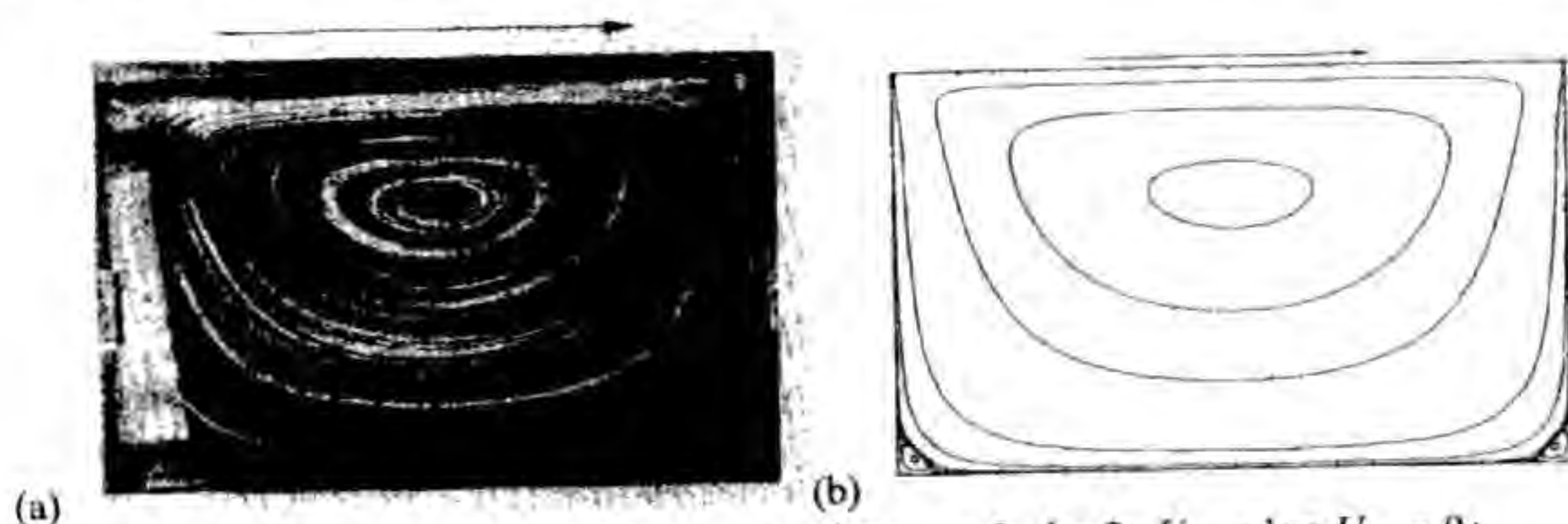


Рис. 2. Картина ліній течії у порожнині при $a=5$, $b=3$, $U_{top}=1$ та $U_{bot}=0$;

(a) Фотознімок експерименту [12]; (b) Результати розрахунку

Оскільки траєкторії руху частинок не можуть перетинатися з сепаратрисами поля швидкостей, то при змішуванні важливу роль відіграють точки з нульовою швидкістю руху (точки стагнації), розміщені всередині вихорів (точки еліптичного типу) або на перетині сепаратрис (гіперболічного типу).

На рис. 2 та 3 зображено фотознімок експерименту [12] та чисельні розрахунки ліній течії для випадку нерухомої нижньої стінки. В нижніх кутах порожнини видно вихори, вперше відкриті Мофатом [13]. В кожному з нижніх кутів існує нескінченна послідовність таких вихорів.

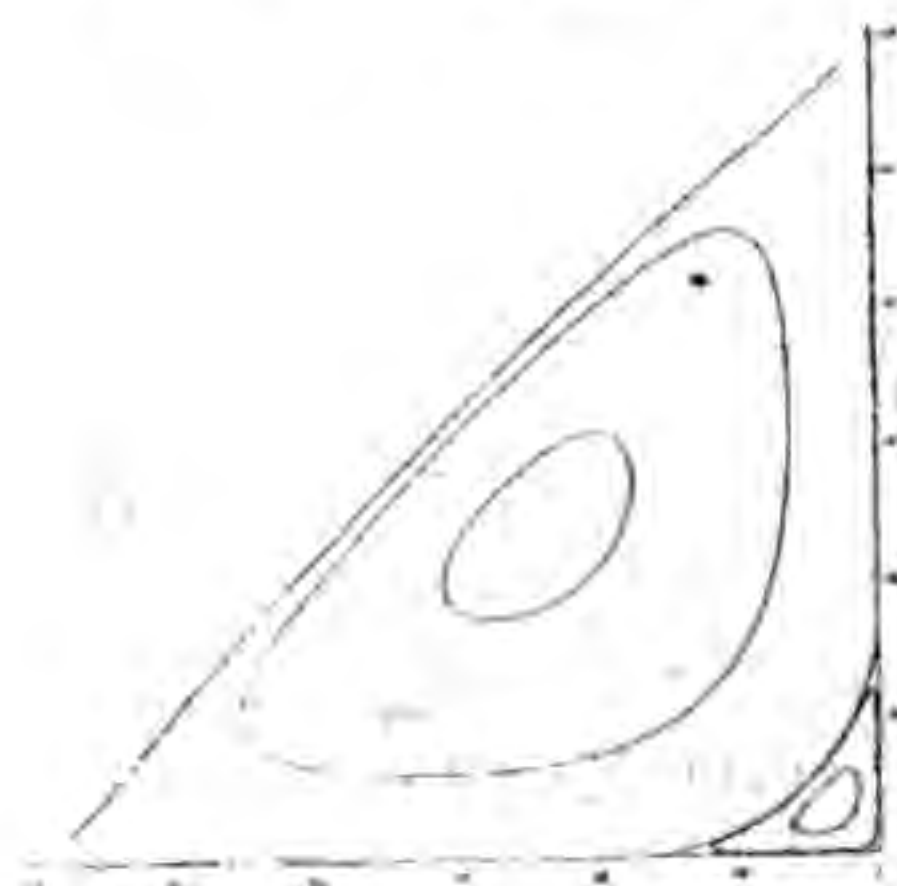


Рис. 3. Збільшений вигляд правого нижнього кута для рис. 2 б

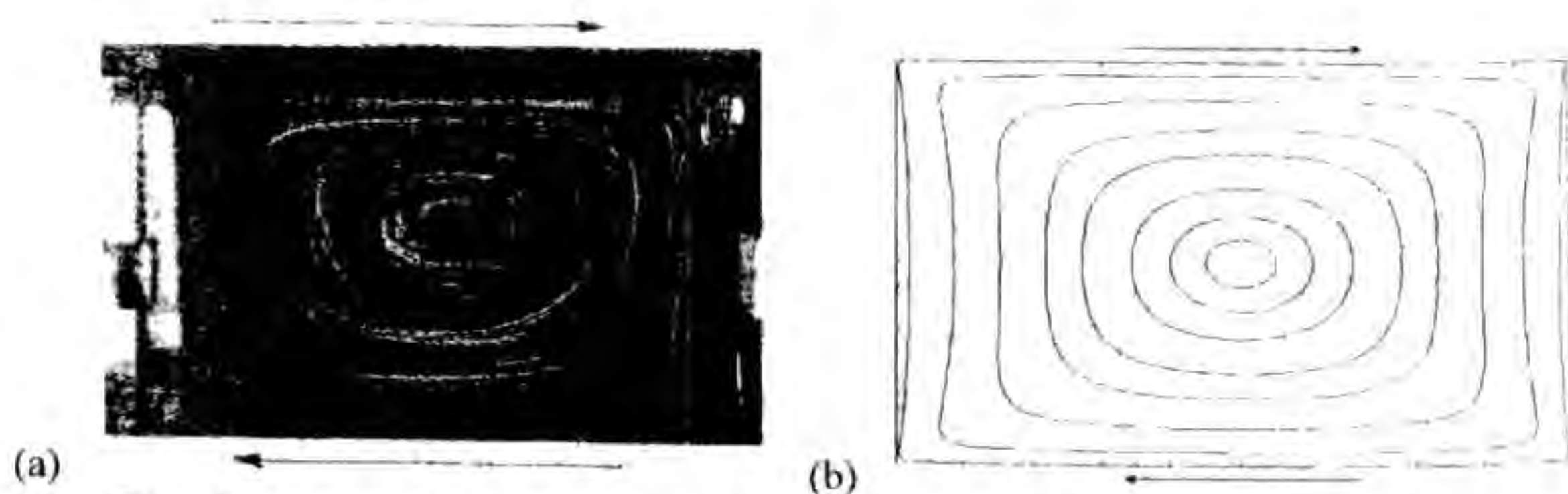


Рис. 4. Картина ліній течії у порожнині при $a = 5$, $b = 3$, $U_{top} = 1$ та $U_{bot} = -1$;

(a) Фотознімок експерименту [12]; (b) Результати розрахунку

На рис. 4 зображені результати експерименту [12] і чисельного розрахунку ліній течії в прямокутній порожнині при $U_{bot} = -1$. Рідина всередині порожнини обертається навколо однієї точки стагнації. У даному випадку, точка стагнації є центром вихору і має еліптичний тип.

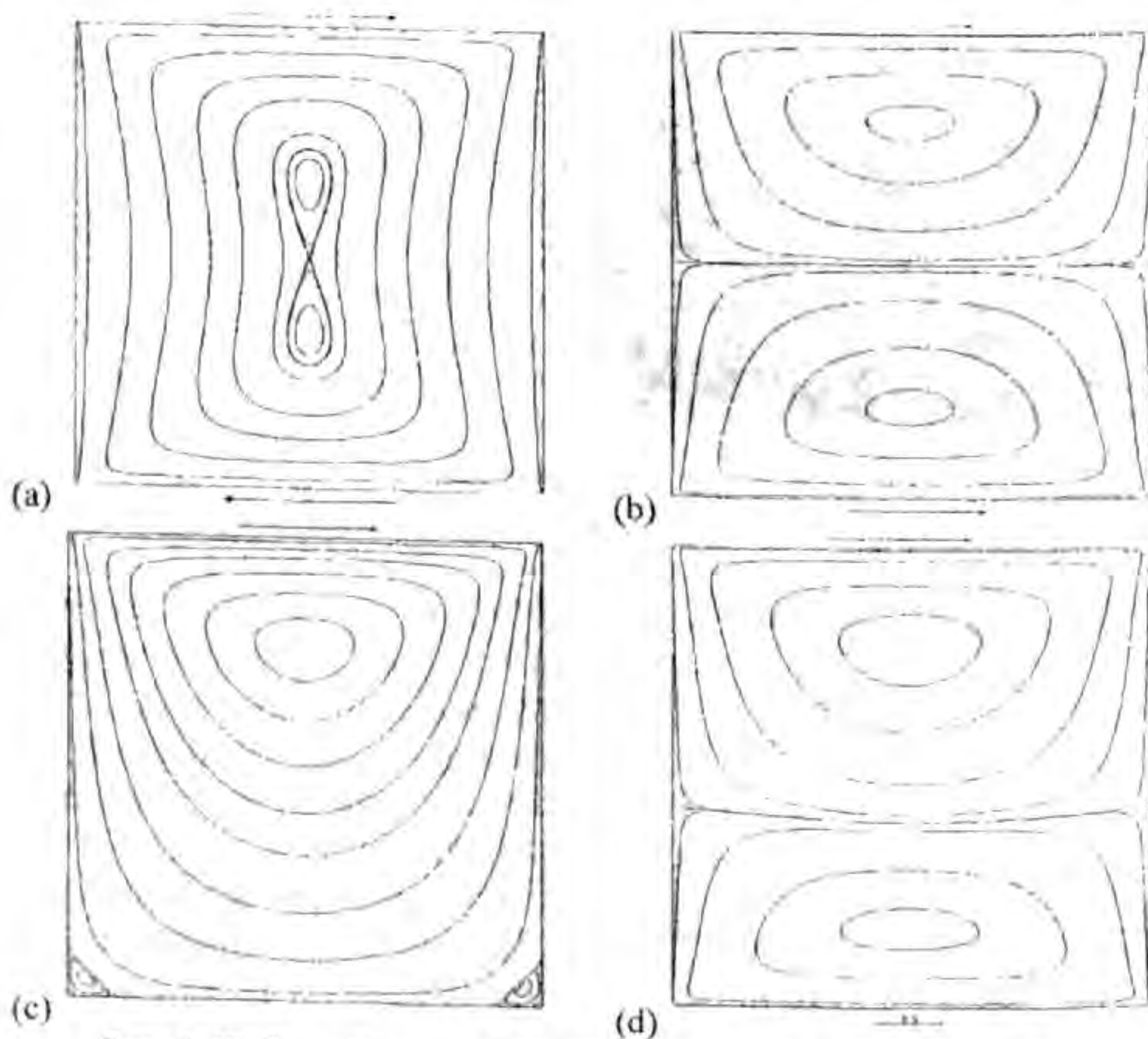


Рис. 5. Лінії течії всередині квадрата ($a = 5$, $b = 5$ та $U_{top} = 1$):

(a) $U_{bot} = -1$; (b) $U_{bot} = 1$; (c) $U_{bot} = 0$; (d) $U_{bot} = 0.5$

Порівняння картини ліній течії на рис. 5 d з аналогічною картиною Fig. 7 d роботи [9] показує розбіжність у поведінці сепаратиси. Горизонтальна форма сепаратиси на Fig. 7 d є помилковою.

У випадках, розглянутих на рис. 4 та 5 a, лінії течії всередині квадрата і прямокутника поведуться по-різному (при однакових граничних швидкостях $U_{top} = 1$, $U_{bot} = -1$). На відміну від прямокутника, всередині квадрата вони утворюють два вихори навколо еліптичних точок стагнації. На перетині сепаратис знаходиться точка стагнації гіперболічного типу.

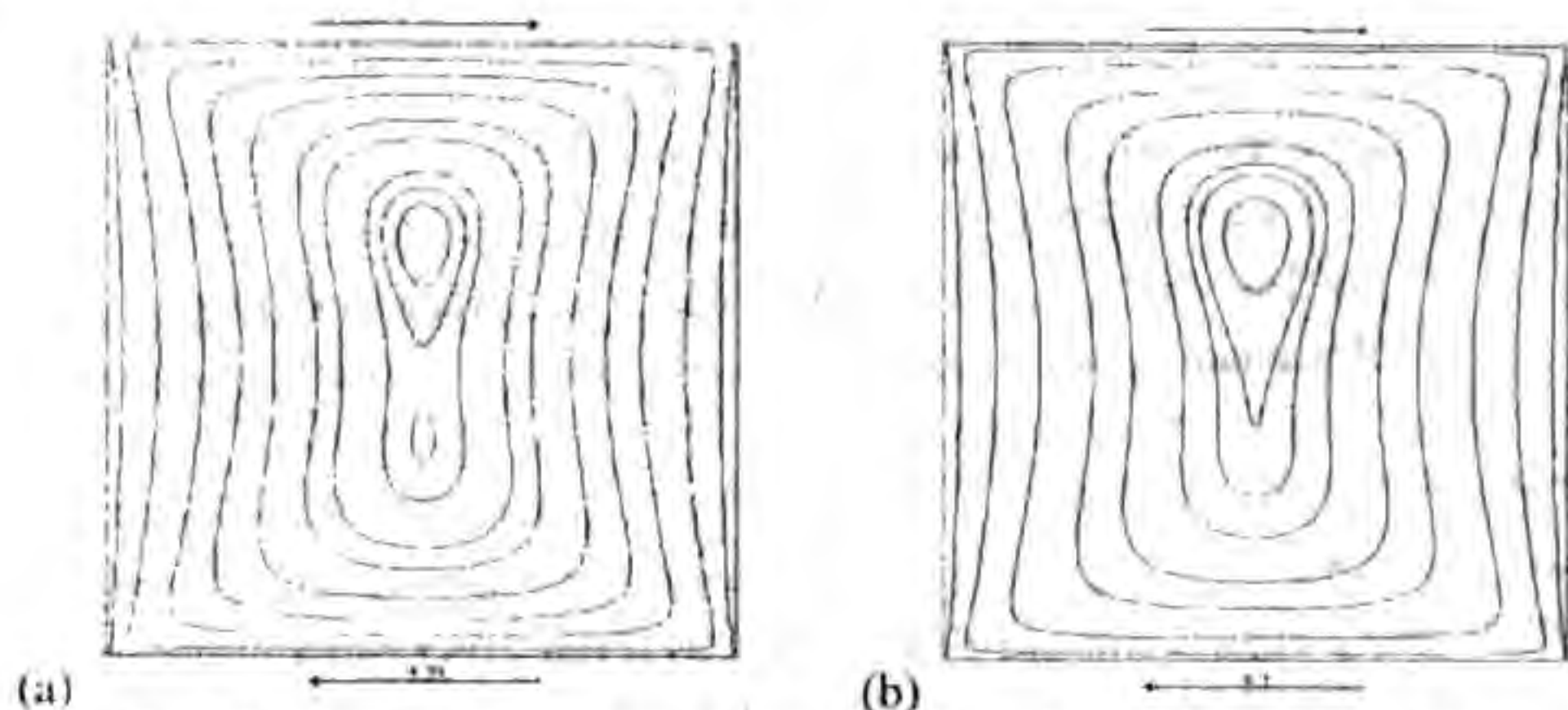


Рис. 6. Лінії течії всередині квадрата ($a = 5$, $b = 5$ та $U_{top} = 1$):

(a) Випадок $U_{bot} = -0.95$; (b) Випадок $U_{bot} = -0.9$

При зменшенні по абсолютній величині швидкості руху нижньої стінки нижній вихор поступово зменшується за розмірами (рис. 6 a), а потім зникає (рис. 6 b). Однак, з вигляду ліній течії не завжди легко однозначно визначити, чи другий вихор зникає, чи залишається, але має дуже малі розміри. Щоб відповісти на це питання, потрібно підрахувати кількість нулів горизонтальної компоненти швидкості частинок рідини уздовж перерізу $x = 0$, яка відповідає кількості точок стагнації.

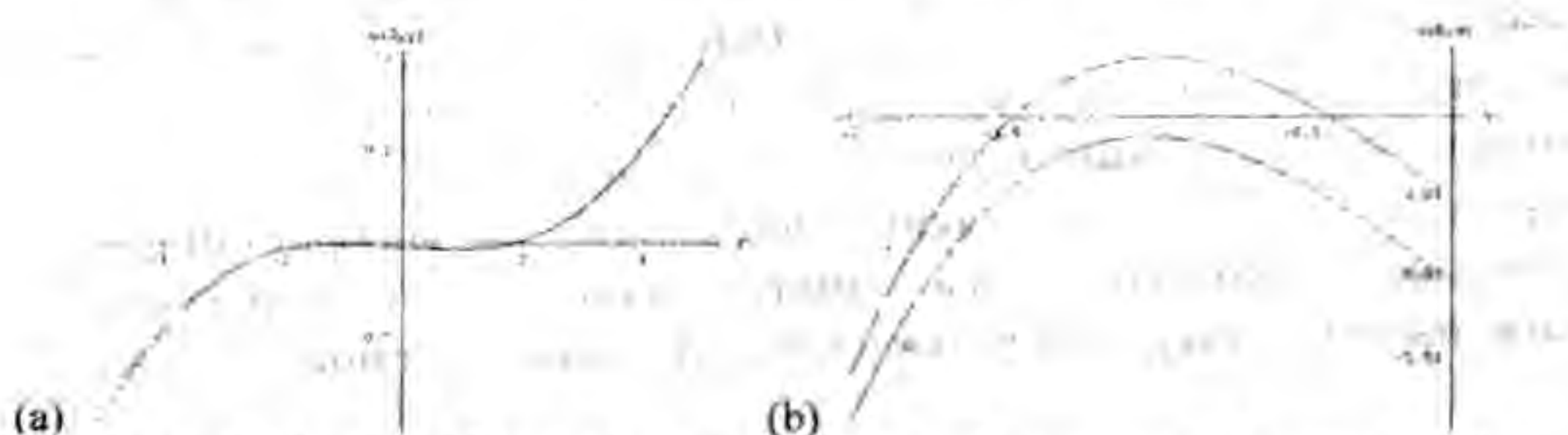


Рис. 7. $a = 5$, $b = 5$: (a) Залежність горизонтальної компоненти швидкості від координати y ($x = 0$) для випадків $U_{bot} = -0.95$ (графік I) та $U_{bot} = -0.9$ (графік II); (b) Ті ж самі випадки у збільшеному вигляді ($-2 \leq y \leq 0$)

Аналізуючи рис. 7, приходимо до висновку, що графік I має три точки перетину з віссю ординат, а графік II – одну. Отже, у випадку $U_{\text{top}} = -0.95$ еліптичних точок стагнації буде дві, а у випадку $U_{\text{bot}} = -0.9$ – одна.



Рис. 8. Залежність горизонтальної компоненти швидкості від координати y ($x=0$) при $U_{\text{top}} = 1$, $U_{\text{bot}} = -1$ у випадках $b/a = 0.931318$ (графік I) та $b/a = 0.931316$ (графік II):

- (а) При $-5 \leq y \leq 5$ обидва графіки зливаються між собою;
- (б) Локальна поведінка поблизу нуля ($-0.01 \leq y \leq 0.01$) є різною

Оскільки при $a=5$, $b=5$ для $U_{\text{top}}=1$, $U_{\text{bot}}=-1$ існує дві еліптичні точки стагнації, а при $a=5$, $b=3$ така точка одна, то можна припустити, що при певному співвідношенні сторін одна еліптична точка стагнації розділяється на дві, між якими виникає гіперболічна точка. Аналізуючи розподіл швидкості руху рідини в горизонтальному напрямку вздовж осей ординат для прямокутників різних розмірів, можна визначити це співвідношення з високою точністю. Розглядаючи рис. 8, бачимо, що при $b/a = 0.931318$ існує три точки стагнації (одна гіперболічна та дві еліптичні), а при $b/a = 0.931316$ – одна.

Якщо продовжити збільшувати висоту прямокутника, залишаючи незмінною його ширину, кількість вихорів зростатиме. На рис. 9 наведено приклади ліній течії при висоті порожнини, більшій за ширину в 5 разів.

Відзначимо, що у випадку $U_{\text{bot}}=0$ (рис. 9 б) для забезпечення достатньої точності обчислень потрібно було залишати велику кількість коефіцієнтів Фур'є (по 100 $x_m^{(1)}$, $x_m^{(2)}$ та по 250 $y_l^{(1)}$, $y_l^{(2)}$), а також брати по 70 доданків у виразах (1.10), (1.16). Це пов'язано з втратою значущих розрядів при додаванні в області, де функція течії $\psi(x, y)$ приймає малі значення. Підхід [14], який пов'язаний з використанням методу однорідних розв'язків, дає змогу провести ці обрахунки легше. Можливості зв'язку двох підходів будуть темою окремої публікації.

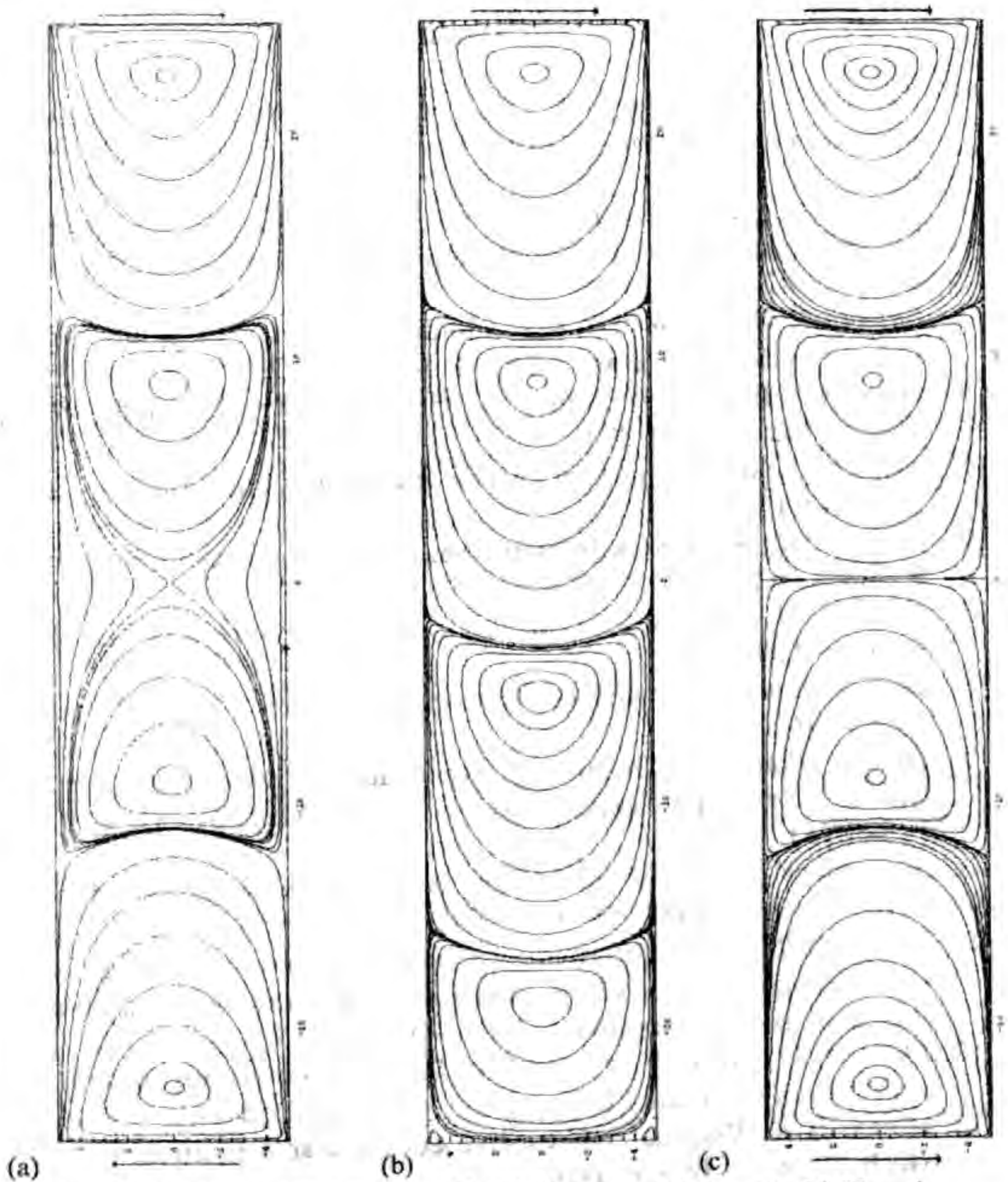


Рис. 9. Лінії течії для $a = 5$, $b = 25$: (a) $U_{bot} = -1$; (b) $U_{bot} = 0$; (c) $U_{bot} = 1$

Висновок

Аналітичний метод дозволяє дослідити тонку структуру поля течії рідини у прямокутній мікропорожнині. Це є важливим для подальшого вивчення перемішування у таких типах течій.

Література

1. *Beebe D. J., Mensing G. A., Walker G. M.* Physics and applications of microfluidics in biology // *Annu. Rev. Biomed. Eng.* – 2002. – **4**. – P. 261-286.
2. *Stone H. A., Stroock A. D., Ajdari A.* Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a-chip // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2004. – **36**. – P. 381-411.
3. *Squires T. M., Quake S. R.* Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale // *Rev. Mod. Phys.* – 2005. – **77**. – P. 977-1026.
4. *Whitesides G. M.* The origins and the future of microfluidics // *Nature*. 2006. – **442**. – P. 368-373.
5. *Aref H.* The development of chaotic advection // *Phys. Fluids*. – 2002. – **14**. – P. 1315-1325.
6. *Ottino J. M., Wiggins S.* Introduction: mixing in microfluidics // *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* – 2004. – **A362**. – P. 923-935.
7. *Ottino J. M., Wiggins S.* Designing optimal micromixers // *Science*. 2004. – **305**. – P. 485-486.
8. *Qian S., Bau H. H.* A chaotic electroosmotic stirrer // *Anal. Chem.* 2002. – **74**. – P. 3616-3625.
9. *Qian S., Bau H. H.* Theoretical investigation of electro-osmotic flows and chaotic stirring in rectangular cavities // *Appl. Math. Model.* – 2005. – **29**. – P. 726-753.
10. *Meleshko V. V.* Steady Stokes flow in a rectangular cavity // *Proc. R. Soc. Lond.* – 1996. – **A452**. – P. 1999-2022.
11. *Мелешко В. В.* Бігармонічна задача для прямокутника: від згину пружних пластин до змішування в'язкої рідини // *Наукові записки Київ. нац. унів. ім. Т. Шевченка*. – 2004. – **VIII**. – С. 45-62.
12. *Chien W. L., Rising H., Ottino J. M.* Laminar and chaotic mixing in several cavity flows // *J. Fluid Mech.* – 1986. – **170**. – P. 355-377.
13. *Moffatt H. K.* Viscous and resistive eddies near a sharp corner // *J. Fluid Mech.* – 1964. – **18**. – P. 1-18.
14. *Shankar P. N.* The eddy structure in Stokes flow in a cavity // *J. Fluid Mech.* – 1993. – **250**. – P. 371-383.

Надійшла до редколегії 13.11.2006 р.

УДК 532.5

Раймунд Бернінг,
В'ячеслав Мелешко

Локальні особливості течій Стокса в клині та півплощині

Побудовані аналітичні локальні розв'язки двовимірних задач про течію Стокса у клині та півплощині. Виявлено суттєву різницю між двома розв'язками.

Ключові слова: течії Стокса, двовимірна бігармонічна задача, локальні особливості.

E-mail berning@univ.kiev.ua
meleshko@univ.kiev.ua

Raimund Berning,
Vyacheslav Meleshko

Local behaviour of Stokes flows in a wedge and a halfplane

Analytical local solutions of two-dimensional Stokes flow problems in a wedge and a halfplane are constructed. The essential differences between two cases are found.

Keywords: Stokes flows, two-dimensional biharmonic problem, local singularities.

Двовимірні стаціонарні повільні течії Стокса в'язкої нестисливої рідини у клиновидній області $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \alpha$ (при $\alpha \leq \pi$) у полярних координатах (r, θ) при заданих дотичних швидкостях $u_0(r)$ та $u_\alpha(r)$ на граничних поверхнях $\theta = 0$ та $\theta = \alpha$, вивчаються вже давно, починаючи із робіт Релея [1, 2]. В термінах функції течії $\psi(r, \theta)$ радіальна $u_r(r, \theta)$ та окружна $u_\theta(r, \theta)$ компоненти вектора швидкості визначаються як

$$u_r = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad u_\theta = -\frac{\partial \psi}{\partial r}. \quad (1)$$

Для течії Стокса при нехтуванні силами інерції порівняно із силами тиску та в'язкості функція течії визначається з бігармонічного рівняння

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi = 0, \quad (2)$$

де $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$ є двовимірний оператор Лапласа у полярних координатах. Граничні умови на гранях для функції $\psi(r, \theta)$ в термінах швидкості мають вигляд

$$\begin{aligned} u_r &= u_0(r), \quad u_\theta = 0, \quad \theta = 0, \\ u_r &= u_\alpha(r), \quad u_\theta = 0, \quad \theta = \alpha. \end{aligned} \quad (3)$$

В загальному випадку гранична задача (2), (3) при спадаючих до нуля при $r \rightarrow \infty$ функціях $u_0(r)$ та $u_\alpha(r)$ розв'язується [3] за допомогою інтегрального перетворення Меліна, що призводить до обчислення методом лишків деяких інтегралів у комплексній площині.

У зв'язку з сучасним інтересом до течій в'язкої рідини у мікроканалах [4,5] принципове значення набуває вивчення локальних особливостей поля швидкості поблизу при розриві заданих дотичних швидкостей біля вершини клину. Типовий випадок такого розриву наведений на рис. 1а, коли функції $u_0(r)$ та $u_\alpha(r)$ задаються найпростішим чином

$$u_0(r) = U_0 + U'_0 r, \quad u_\alpha(r) = U_\alpha + U'_\alpha r. \quad (4)$$

При цьому сталі $U_0, U'_0, U_\alpha, U'_\alpha$ задовольняють одній (чи двом) нерівностям $-U_0 \neq U_\alpha, U'_0 \neq U'_\alpha$. Для такого задання функцій розв'язок граничної задачі (2), (3) у вигляді інтегралів Меліна не придатний. Представлення для функції $\psi(r, \theta)$ згідно (1) треба шукати у степеневому вигляді $r^n f_n(\theta)$ ($n=1, 2$). Для типового випадку $U_0 \neq 0, U'_0 = 0, U_\alpha = 0, U'_\alpha = 0$ (рис. 2а) це було зроблено у роботах Гудьєра [6] та Тейлора [7] з представленням

$$\psi_{\sigma\tau}(r, \theta) = \frac{U_0 r}{\alpha^2 - \sin^2 \alpha} \left(\alpha^2 \sin \theta - \theta \sin^2 \alpha \cos \theta - \frac{\alpha \sin^3 \alpha + \alpha^2 \cos \alpha - \cos \alpha \sin^2 \alpha}{\sin \alpha + \alpha \cos \alpha} \theta \sin \theta \right) \quad (5)$$

Лінії течії при $\alpha = \frac{\pi}{2}$ наведені на рис. 2б.

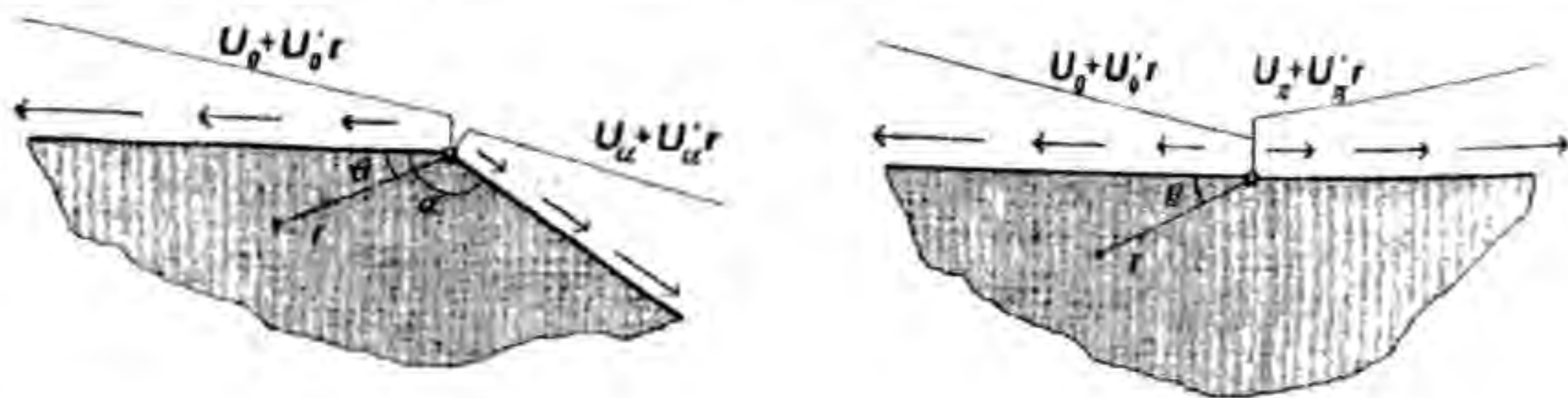


Рис. 1. Геометрія задачі.

Мета цієї роботи полягає у побудові розв'язку граничної задачі (2), (3) з умовами (4) і виявленні принципової різниці для півплощини $\alpha = \pi$ (рис. 1).

На закінчення слід відмітити, що розглянутий випадок має певну аналогію з задачею 17 до глави 4 в [10] для пружної півплощини при певних значеннях сталих дотичних напружень на її границі.

Література

1. Rayleigh, Lord. On the flow of viscous liquids, especially in two dimensions // Phil. Mag. (ser. 5). – 1893. – **36**. – P. 354-372.
2. Rayleigh, Lord. Hydrodynamical notes // Phil. Mag. (ser. 6). – 1911. – **21**. – P. 177-195.
3. Moffatt H.K. Viscous eddies near a sharp corner // Arch. Mech. Stosow. – 1964. – **2**. – P. 365-372.
4. Stroock A.D., Dertinger S.K., Ajdari A., Mezić I., Stone H.A., Whitesides G.M. Chaotic mixer for microchannels // Science. – 2002. – **295**. – P. 647-651.
5. Whitesides G.M. The origins and the future of microfluidics // Nature. – 2006. – **442**. – P. 368-373.
6. Goodier J.N. An analogy between the slow motion of a viscous fluid in two dimensions, and systems of plane stress // Phil. Mag. (ser. 7). – 1934. – **17**. – P. 554-576.
7. Taylor G.I. On scraping viscous fluid from a plane surface // Miszellen der Angewandten Mechanik (Festschrift Walter Tollmien), M Schäfer (ed.). – Berlin: Akademie-Verlag, 1962. – P. 313-315.
8. Папкович П.Ф. Теория упругости. – Л.-М.: Оборонгиз, 1939. – 640 с.
9. Филоненко-Бородич М.М. Теория упругости. 4-ое изд. – М.: Физматгиз, 1959. – 364 с.
10. Тимошенко С.П., Гудьер Д. Теория упругости. – М.: Наука, 1975. – 576 с.

Надійшла до редколегії 10.10.2006 р.

УДК 529.3

Василь Г. Карнаухов,
Тетяна В. Карнаухова,
Олена В. П'ятецька

УТОЧНЕНА ТЕРМОМЕХАНІЧНА МОДЕЛЬ КОМПОЗИТНИХ ОБО- ЛОНОК ТИПУ ТИМОШЕНКА З РОЗПОДІЛЕНИМИ ОРТОТРОП- НИМИ АКТУАТОРАМИ ПРИ МОНОГАРМОНІЧНОМУ НА- ВАНТАЖЕННІ

На основі уточнених гіпотез типу Тимошенка та адекватних їм гіпотез відносно електричних польових величин побудовано термомеханічну модель в'язкопружних тонкостінних композитних оболонок з розподіленими ортотропними актуаторами з врахуванням впливу температури дисипативного розігріву, яка виникає в тілі із-за гістерезисних втрат в матеріалах. Електромеханічна поведінка матеріалів при моногармонічному механічному та електричному навантаженні описується з використанням концепції комплексних характеристик, які можуть залежати від частоти і температури.

Ключові слова: композитні оболонки, дисипативний розігрів, актуатор, демпфірування.

Vasyl G. Karnaukhov,
Tetyana V. Karnaukhova,
Olena V. Pyatetska

REFINED THERMOMECHANICAL TIMOSHENKO' MODEL OF COMPOSITE SHELLS WITH DISTRIBUTED ORTHOTROPIC ACTUATORS UNDER MONOHAR- MONIC LOADING

On base refined Timoshenko's hypothesis and adequate to them the hypothesis about electric field quantities the thermomechanical model of thinwalled viscoelastic composite shells with distributed orthotropic actuators is presented with taking account of dissipative heating as result of hysteresis in the materials. Electromechanical behavior of the materials under monoharmonic mechanical and electrical loading is described by the conception of complex characteristic, which depend on the temperature and frequency.

Key words: composite shells, dissipative heating, actuator, damping

Тонкостінні композитні оболонки знаходять широке застосування в багатьох галузях сучасної науки і техніки. Часто на них діють стаціонарні та нестаціонарні механічні й теплові навантаження, які можуть викликати високий рівень напружень. Для зменшення рівня власних коливань оболонок, суттєвого зниження амплітуд при вимушених коливаннях і зменшення напружень в зонах концентрації в останні роки почали інтенсивно розвиватися активні методи керування термомеханічним станом тонкостінних елементів, в тому числі і демпфірування з використанням п'єзоактивних матеріалів – п'єзоелектричних, п'єзوماгнітних та матеріалів пам'яті форми. Найчастіше для вказаної мети використовуються п'єзоелектричні матеріали, які мають ряд переваг порівняно з іншими матеріалами. Останні досягнення в з цих питань представлено в роботах [10-12]. При використанні для активного демпфірування п'єзоелектричних актуаторів головними питаннями являються розрахунок характеристик актуаторів, їх оптимального розміщення в структурі оболонки, розрахунок різниці потенціалів, які необхідно підвести до актуаторів для компенсації механічного навантаження з метою зменшення амплітуди коливань.

@В.Г.Карнаухов, Т.В.Карнаухова, О.В.П'ятецька

Ефективність активного демпфірування за допомогою актуаторів залежить від багатьох факторів: їх геометричних розмірів, розміщення в структурі оболонки, електромеханічних властивостей тощо. Із-за суттєвої залежності властивостей багатьох пасивних (без п'єзоефекту) і активних матеріалів від температури великий вплив на ефективність демпфірування за допомогою актуаторів мають теплові ефекти. Джерелом підвищення температури може бути як теплообмін з зовнішнім середовищем, так і дисипативний розігрів, викликаний гістерезисними втратами в матеріалах. Проте в літературі відсутні роботи з дослідження впливу дисипативного розігріву на ефективність роботи актуаторів та на ефективність активного демпфірування за їх допомогою. В них для моделювання електромеханічної поведінки тонкостінних елементів застосовувались гіпотези Кірхгофа-Лява та адекватні їм гіпотези відносно електричних польових величин. Як відомо, для дослідження механічного стану композитних елементів необхідно використовувати уточнені моделі, зокрема, моделі типу Тимошенка. Останні досягнення з цих питань представлено в монографіях [3,7].

Дана стаття присвячена розробці уточненої термомеханічної моделі типу Тимошенка для в'язкопружних тонкостінних композитних оболонок з розподіленими актуаторами.

Нехай оболонка складена з середнього шару, який виготовлено з пасивного металічного, полімерного чи композитного матеріалу і двох зовнішніх шарів, виготовлених з полімерного чи керамічного ортотропного п'єзоматеріалу з товщиною попередньою поляризацією. На оболонку діє гармонічне за часом механічне або електричне навантаження. Вважається, що пасивні і п'єзоактивні матеріали шарів виготовлено з в'язкопружних матеріалів, механічні й електричні властивості яких залежать від температури. Із-за дисипації енергії при моногармонічному навантаженні в оболонці має місце дисипативний розігрів. При досягненні температурою точки Кюрі п'єзоактивні шари втрачають п'єзоефект і вони не виконують свого функціонального призначення. Це явище можна назвати тепловим руйнуванням п'єзоактуатора.

Для моделювання механічної поведінки пасивного і п'єзоактивного шарів використовується модель Тимошенка, коли тангенціальні складові вектора переміщень змінюються по товщині оболонки по лінійному закону, а для деформацій зсуву задається деякий закон. Пасивний шар може бути як металічним, так і діелектричним. Вважається, що п'єзоактивні шари поляризовані по товщині. Для них приймається гіпотеза, що тангенціальні складові вектора індукції набагато менші від нормальної складової. В результаті з рівняння електростатики матимемо, що нормальна складова індукції постійна по товщині п'єзошару. Для рівняння енергії приймається припущення, що нормальна складова вектора теплового потоку змінюється по товщині за степеневим законом. Використовуючи закон Фур'є, знаходимо розподіл температури по товщині кожного шару.

Відповідно до вказаного, зміщення змінюються по товщині пасивного шару оболонки по лінійному закону

$$u_1^z = u_1 + \varphi_1 z; v_1^z = v_1 + \varphi_{21} z; u_3^z = u_3. \quad (1)$$

Тоді компоненти тензора деформацій визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^z &= \varepsilon_1 + \kappa_1 z; \varepsilon_{11}^z = \varepsilon_2 + \kappa_2 z; \varepsilon_{12}^z = \varepsilon_{12} + \kappa_{12} z; \varepsilon_{12} = \omega_1 + \omega_2; \\ \kappa_{12} &= \tau_1 + \tau_2 + k_1 \omega_2 + k_2 \omega_1; \varepsilon_{13}^z = \phi_1 + \theta_1; \varepsilon_{23}^z = \phi_2 + \theta_2. \end{aligned} \quad (2)$$

Вирази для всіх кінематичних характеристик через компоненти вектора переміщень u_i ($i=1,2,3$) і зсуви ϕ_i представлено в монографіях [3,7]. Відповідно до вищевказаного співвідношення (1)-(2) доповнюються співвідношеннями

$$\sigma_{13} = f_1(z) \sigma_{13}^0; \quad \sigma_{23} = f_1(z) \sigma_{23}^0. \quad (3)$$

Вирази для $\sigma_{13}^0; \sigma_{23}^0$ знаходяться з варіаційного принципу Рейснера або методом Бубнова-Гальоркіна з таких співвідношень:

$$\int_{(h_0)} (\varepsilon_{i3}^z - \frac{f_1(z)}{G_{i3}(z)} \sigma_{i3}^0) f_1(z) dz = 0 \quad (i=1,2). \quad (4)$$

Після інтегрування (4) по товщині кожного з пасивних пакетів знаходимо

$$\sigma_{i3}^0 = \frac{I_1}{I_{2i}} \varepsilon_{i3}^z, \quad (5)$$

де

$$I_1 = \int_{(h_0)} f_1(z) dz, \quad I_{2i} = \int_{(h_0)} \frac{f_1^2(z)}{G_{i3}(z)} dz. \quad (6)$$

В результаті складові рівнянь стану (зусилля, моменти, перерізуючі сили), які вносяться пакетами із пасивних ортотропних матеріалів у загальні рівняння стану, визначаються традиційними співвідношеннями [3,7]:

$$\begin{aligned}\tilde{T}_1 &= \tilde{C}_{11}\varepsilon_1 + \tilde{C}_{12}\varepsilon_2 + \tilde{K}_{11}\kappa_1 + \tilde{K}_{12}\kappa_2, \\ \tilde{T}_2 &= \tilde{C}_{12}\varepsilon_1 + \tilde{C}_{22}\varepsilon_2 + \tilde{K}_{12}\kappa_1 + \tilde{K}_{22}\kappa_2, \tilde{S} = \tilde{C}_{66}\varepsilon_{12} + \tilde{K}_{66}\kappa_{12}, \\ \tilde{M}_1 &= \tilde{K}_{11}\varepsilon_1 + \tilde{K}_{12}\varepsilon_2 + \tilde{D}_{11}\kappa_1 + \tilde{D}_{12}\kappa_2, \\ \tilde{M}_2 &= \tilde{K}_{12}\varepsilon_1 + \tilde{K}_{22}\varepsilon_2 + \tilde{D}_{12}\kappa_1 + \tilde{D}_{22}\kappa_2, \tilde{H} = \tilde{K}_{66}\varepsilon_{12} + \tilde{D}_{66}\kappa_{12}, \\ \tilde{Q}_1 &= \tilde{G}_{13}\varepsilon_{13}, \quad \tilde{Q}_2 = \tilde{G}_{23}\varepsilon_{23}, \quad \tilde{G}_{13} = \frac{I_1^2}{I_{21}}.\end{aligned}\tag{7}$$

Для п'єзоактивного ортотропного шару після нехтування у визначальних рівняннях нормальною складовою тензора напружень σ_{33} та тангенціальними складовими вектора індукції спрощені визначальні рівняння приймають вигляд:

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^k &= B_{11}(z)\varepsilon_{11}^k + B_{12}(z)\varepsilon_{22}^k - \gamma_{31}(z)E_3^k, \\ \sigma_{22}^k &= B_{12}(z)\varepsilon_{11}^k + B_{22}(z)\varepsilon_{22}^k - \gamma_{32}(z)E_3^k,\end{aligned}\tag{8}$$

$$\begin{aligned}\sigma_{12}^k &= B_{66}(z)\varepsilon_{12}^k, \sigma_{13}^k = B_{13}(z)\varepsilon_{13}^k, \sigma_{23}^k = B_{23}(z)\varepsilon_{23}^k, \\ D_3^k &= \gamma_{33}(z)E_3^k + \gamma_{31}(z)\varepsilon_{11}^k + \gamma_{32}(z)\varepsilon_{22}^k,\end{aligned}$$

Тут прийнято позначення [2,4]:

$$\begin{aligned}B_{11}(z) &= S_{22}(z)/\Delta, \quad B_{22}(z) = S_{11}(z)/\Delta, \quad B_{12}(z) = -S_{12}(z)/\Delta, \\ B_{66}(z) &= 1/S_{66}, \quad B_{13}(z) = (S_{55} - \frac{d_{15}^2}{\varepsilon_{11}})^{-1}, \quad B_{23}(z) = (S_{44} - \frac{d_{24}^2}{\varepsilon_{22}})^{-1}, \\ \gamma_{33}^k &= \varepsilon_{33}^k - d_{31}^k \gamma_{31}^k - d_{32}^k \gamma_{32}^k, \quad \gamma_{31}^k = (S_{22} d_{31}^k - S_{12} d_{32}^k)/\Delta, \\ \gamma_{32}^k &= (S_{12} d_{31}^k - S_{11} d_{32}^k)/\Delta, \quad \Delta = (S_{11} S_{22} - S_{12}^2).\end{aligned}\tag{9}$$

Як видно з (8), рівняння стану для перерізуючих сил матимуть такий же вигляд, як і для пасивних шарів з модифікованими жорсткісними характеристиками. Тому їх наводити не будемо, а звернемо увагу лише на зусилля і моменти.

Потрібно мати на увазі, що відповідно до концепції комплексних характеристик при моногармонічному навантаженні коефіцієнти наведених вище визначальних рівнянь комплексні і в загальному випадку залежать від частоти і температури [4,5].

Нехай товщина пасивного шару дорівнює h_0 , а верхній та нижній п'єзоактивні шари мають відповідно товщини h_1 та h_2 . Загальна товщина пластини $h = h_0 + h_1 + h_2$. Використовуючи останнє з рівнянь (8), матимемо

$$\frac{D_3}{\gamma_{33}} = -\frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{\gamma_{31}}{\gamma_{33}}(\varepsilon_1 + z\kappa_1) + \frac{\gamma_{32}}{\gamma_{33}}(\varepsilon_2 + z\kappa_2) \quad (10)$$

Для пасивного шару $\gamma_{31} = \gamma_{32} = 0$, $D_3 = C_0 = 0$.

Для верхнього та нижнього п'єзоактивних шарів $D_3 = C_1(\alpha, \beta)$ та $D_3 = C_2(\alpha, \beta)$ відповідно. Нехай $\psi(\frac{h_0}{2} + h_1) = V_1$, $\psi[-(\frac{h_0}{2} + h_1)] = V_2$. Після інтегрування по товщині верхнього та нижнього п'єзоактивних шарів матимемо

$$\begin{aligned} C_1(\alpha, \beta) &= -\frac{V_1}{v_{10}} + \frac{v_{11}}{v_{10}}\varepsilon_1 + \frac{v_{12}}{v_{10}}\varepsilon_2 + \frac{w_{11}}{v_{10}}\kappa_1 + \frac{w_{12}}{v_{10}}\kappa_2, \\ C_2(\alpha, \beta) &= \frac{V_2}{v_{20}} + \frac{v_{21}}{v_{20}}\varepsilon_1 + \frac{v_{22}}{v_{20}}\varepsilon_2 + \frac{w_{21}}{v_{20}}\kappa_1 + \frac{w_{22}}{v_{20}}\kappa_2. \end{aligned} \quad (11)$$

В подальшому будемо вважати, що шари досить тонкі, а тому можна вважати температуру постійною по товщині кожного з пасивних та п'єзоактивних шарів. Тому при врахуванні залежності властивостей матеріалів від температури характеристики будуть незалежними від товщинної координати. При цьому введені в (11) величини розраховуються за такими формулами:

$$\begin{aligned} v_{(10,20)} &= \int_{(h_1, h_2)} \frac{dz}{(1,2)\gamma_{33}} = \frac{(h_1, h_2)}{\gamma_{33}}, & v_{(11,12)} &= \int_{(h_1)} \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} dz = \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} h_1, \\ w_{(11,12)} &= \int_{(h_1)} \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} z dz = \frac{\gamma_{(31,32)}}{2\gamma_{(33,33)}} h_1(h_1 + h_0), \\ v_{(21,22)} &= \int_{(h_2)} \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} dz = \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} h_2, \\ w_{(21,22)} &= \int_{(h_2)} \frac{\gamma_{(31,32)}}{\gamma_{(33,33)}} z dz = -\frac{\gamma_{(31,32)}}{2\gamma_{(33,33)}} h_2(h_2 + h_0). \end{aligned} \quad (12)$$

Враховуючи (11), з останнього з рівнянь (8) E_3 , одержаний результат підставимо в перші три рівняння (8) і використаємо формули для інтегральних характеристик оболонки:

$$T_{(1,2,12)} = \int_{(h)} (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_{12}) dy, \quad M_{(1,2,12)} = \int_{(h)} (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_{12}) y dy. \quad (13)$$

В результаті одержимо складові визначальних рівнянь для зусиль і моментів, які породжуються п'єзоактивними шарами:

$$\begin{aligned} \bar{T}_{(1,2)} &= \bar{C}_{11,21} \varepsilon_1 + \bar{C}_{12,22} \varepsilon_2 + \bar{K}_{11,21} \kappa_1 + \bar{K}_{12,22} \kappa_2 - \bar{T}_{(1,2)}^0, \\ \bar{M}_{(1,2)} &= \bar{K}_{11,21} \varepsilon_1 + \bar{K}_{12,22} \varepsilon_2 + \bar{D}_{11,21} \kappa_1 + \bar{D}_{12,22} \kappa_2 - \bar{M}_{(1,2)}^0, \\ \bar{T}_{12} = \bar{S} &= \bar{C}_{66} \varepsilon_{12} + \bar{K}_{66} \kappa_{12}, \quad \bar{M}_{12} = \bar{H} = \bar{K}_{66} \varepsilon_{12} + \bar{D}_{66} \kappa_{12}. \end{aligned} \quad (14)$$

Тут введено позначення роботи [4] і, крім того,

$$\bar{T}_{(1,2)}^0 = -\frac{v_{(11,12)}}{v_{10}} V_1 + \frac{v_{(21,22)}}{v_{20}} V_2, \quad \bar{M}_{(1,2)}^0 = -\frac{w_{(11,12)}}{v_{10}} V_1 + \frac{w_{(21,22)}}{v_{20}} V_2. \quad (15)$$

Враховуючи той факт, що при демпфірування коливань тонких оболонок п'єзоелектричні включення досить тонкі, в більшості випадків можна знехтувати їх впливом на жорсткі характеристики оболонок і враховувати лише викликані ними зусилля та моменти, які розраховуються за формулами (15). При цьому величини C_{ij}, K_{ij}, D_{ij} розраховуються за класичними формулами теорії оболонок, наведеними, наприклад, в [7]. Таке припущення робиться в більшості робіт по активному демпфіруванню коливань тонких оболонок, зокрема в роботах [11,12]. До наведених вище рівнянь потрібно додати рівняння руху, наведені в [7].

Розглянемо тепер другий випадок, коли середній пасивний шар діелектричний, а внутрішні електроди відсутні. При цьому індукція постійна по товщині оболонки, розміщеної між електродами:

$$D_3 = C(\alpha, \beta) \quad (16)$$

Використовуючи рівняння (10), по аналогії з вищевикладеним матимемо

$$C(\alpha, \beta) = -\frac{V_0}{v_{10}} + \frac{v_{11}}{v_{10}} \varepsilon_1 + \frac{v_{12}}{v_{10}} \varepsilon_2 + \frac{w_{11}}{v_{10}} \kappa_1 + \frac{w_{12}}{v_{10}} \kappa_2 \quad (17)$$

Тут V_0 - прикладена до зовнішніх електродів різниця потенціалів, а величини v_y, w_y розраховуються за формулами (12), де інтегрування виконується по всій товщині оболонки і для пасивного шару покладається $\gamma_{31} = \gamma_{32} = 0$.

При цьому

$$E_3 = \frac{C(\alpha, \beta)}{\gamma_{33}(z)} - \frac{\gamma_{31}(z)}{\gamma_{33}(z)} (\varepsilon_1 + z \kappa_1) - \frac{\gamma_{32}(z)}{\gamma_{33}(z)} (\varepsilon_2 + z \kappa_2). \quad (18)$$

Підставляючи (18) в (8), одержимо спрощені рівняння для напружень. Після їх інтегрування по товщині одержимо рівняння стану виду (14), коефіцієнти яких розраховуються за формулами:

$$\begin{aligned}
 \bar{C}_{11} &= \int_{(h)} (B_{11} + \frac{\gamma_{31}^2}{\gamma_{33}}) dz - \frac{v_{11}^2}{v_{10}} - \frac{v_{21}^2}{v_{20}}, \\
 \bar{C}_{12} &= \bar{C}_{21} = \int_{(h)} (B_{12} + \frac{\gamma_{31}\gamma_{32}}{\gamma_{33}}) dz - \frac{v_{11}v_{12}}{v_{10}} - \frac{v_{21}v_{22}}{v_{20}}, \\
 \bar{K}_{11} &= \int_{(h)} (B_{11} + \frac{\gamma_{31}^2}{\gamma_{33}}) z dz - \frac{v_{11}w_{11}}{v_{10}} - \frac{v_{21}w_{21}}{v_{20}}, \\
 \bar{K}_{12} &= \int_{(h)} (B_{12} + \frac{\gamma_{31}\gamma_{32}}{\gamma_{33}}) z dz - \frac{v_{11}w_{12}}{v_{10}} - \frac{v_{21}w_{22}}{v_{20}}, \\
 \bar{K}_{21} &= \int_{(h)} (B_{12} + \frac{\gamma_{31}\gamma_{32}}{\gamma_{33}}) z dz - \frac{v_{12}w_{11}}{v_{10}} - \frac{v_{22}w_{21}}{v_{20}}, \\
 \bar{K}_{22} &= \int_{(h)} (B_{22} + \frac{\gamma_{32}^2}{\gamma_{33}}) z dz - \frac{v_{12}w_{12}}{v_{10}} - \frac{v_{22}w_{22}}{v_{20}}, \\
 \bar{D}_{11} &= \int_{(h)} (B_{11} + \gamma_{31}^2 / \gamma_{33}) z^2 dz - w_{11}^2 / v_{10} - w_{21}^2 / v_{20}, \\
 \bar{D}_{12} &= \bar{D}_{21} = \int_{(h)} (B_{12} + \gamma_{31}\gamma_{32} / \gamma_{33} + \gamma_{32}^2 / \gamma_{33}) z^2 dz - w_{11}w_{12} / v_{10} - w_{21}w_{22} / v_{20}, \\
 \bar{D}_{22} &= \int_{(h)} (B_{22} + \gamma_{32}^2 / \gamma_{33}) z^2 dz - w_{12}^2 / v_{10} - w_{22}^2 / v_{20}, \\
 {}^0T_{1,2} &= -(v_{11,12} + v_{21,22})V_0 / v_{10}, \quad {}^0M_{1,2} = -(w_{11,12} + w_{21,22})V_0 / v_{10}.
 \end{aligned} \tag{19}$$

Покладаючи товщини п'єзоактивних шарів рівними нулеві, матимемо визначальні рівняння для пасивного діелектричного шару, до якого підведена задана різниця потенціалів.

Для того щоб одержати двовимірні рівняння енергії для шаруваті оболонки, приймаємо, що нормальна складова теплового потоку змінюється по товщині за заданим законом, наприклад, за степеневим

$$q_3 = \sum_{v=1}^N a_v(x, y, t) z^{v-1}. \tag{20}$$

При такому виборі автоматично задовольняються умови неперервності теплового потоку між шарами оболонки. Будемо вважати, що граничні й початкові умови мають вигляд

$$\lambda_{33}(z) \frac{\partial \theta}{\partial z} + \alpha_3 (\theta - \theta^-) = 0 (z = h_1), \quad \lambda_{33} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \alpha_4 (\theta - \theta^+) = 0 (z = h_{m+1}), \quad (21)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial n} + \frac{\alpha_L}{\lambda_n} (\theta - \theta_L) = 0 (на L), \quad \theta = \theta_0 \quad (t=0).$$

Інтегруючи по z вираз $q_3 = -\lambda_{33}(z) \frac{\partial \theta}{\partial z}$, матимемо

$$\theta = \sum_{v=0}^N P_v(z) \theta_v, \quad (22)$$

де $\theta_v(x, y, t)$ - невідомі функції, а $P_v(z)$ - функції розподілу температури по товщині кожного з шарів:

$$\theta_0 = \theta_0(x, y, t), \theta_v(x, y, t) = -a_v H^{v+1} / \bar{\lambda}_{33}, P_0(z) = 1, P_v(z) = \left(\bar{\lambda}_{33} / H^{v+1} \right) \int_{h_1}^{\gamma} \lambda_{33}^{-1}(z) z^{v-1} dz.$$

Тут і далі риска $(\bar{})$ означає інтегральну характеристику виду $(\bar{}) = \int_{h_1}^{\gamma} \bar{\lambda}_{33}(z) z^{v-1} dz$.

Вираз (22) автоматично задовольняє умові неперервності температури по пакету шарів.

Двовимірні рівняння енергії одержимо множенням рівняння теплопровідності на $P_v(z) dz (v=0, 1, 2, \dots, N)$ та інтегруванням знайденого виразу по z по товщині оболонки. В результаті матимемо систему диференціальних рівнянь порядку $2(N+1)$ відносно $\theta = (\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_N)^T$: $K\theta = R\theta^* - W^*$. Матриці K, R диференціальних операторів наведені, наприклад, в роботі [3];

$$\theta^* = (\theta^-, \theta^+)^T; \quad W^* = (W_0, W_1, \dots, W_N)^T,$$

при цьому $W_v = \int_{h_1}^{h_{m+1}} W P_{v+1}(z) dz$. Граничні умови для $\theta_v(x, y, t)$ одержані в [3] і

мають вигляд

$$\sum_{j=1}^N \left(\lambda_n P_v P_j \frac{\partial}{\partial n} + a_n P_v P_j \right) \theta_j - a_n P_v \theta_L = 0.$$

Їх кількість дорівнює $N+1$, що відповідає порядку системи диференціальних рівнянь. Початкові умови для $(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_N)$ знаходяться шляхом множення останнього з співвідношень (21) на $P_v dz$ та інтегрування по товщині пакету. Такі ж двовимірні рівняння можна одержати і з варіаційного принципу для рівняння теплопровідності.

Двовимірні рівняння енергії для різних варіантів розподілу температури по товщині оболонки представлено в [4]. Найпростіший варіант маємо, припускаючи, що $q_3 = 0$. При цьому температура буде постійною по товщині оболонки і для стаціонарного випадку визначається рівнянням [4,8]:

$$\frac{1}{AB} \left[\lambda_{11} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(B \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \lambda_{22} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(B \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \right] \theta - (2\delta/h) \theta + W/h = 0, \quad (23)$$

де $\theta = T - T^0$, $\delta = (\alpha_3 + \alpha_4)/(2)$, $T^0 = (\alpha_3\theta_3 + \alpha_4\theta_4)/(\alpha_3 + \alpha_4)$; α_3, α_4 - коефіцієнти теплообміну на поверхнях $z = \pm h/2$ з зовнішнім середовищем з температурами θ_3, θ_4 ; λ_{ij} - коефіцієнти теплопровідності ортотропного матеріалу [6]. Якщо знехтувати розігрівом в активних шарах, то в (23) дисипативна функція W розраховується за формулою

$$W = \frac{\omega}{2} [(T_1''\varepsilon_1' - T_1'\varepsilon_1'') + (T_2''\varepsilon_2' - T_2'\varepsilon_2'') + 2(S''\varepsilon_{12}' - S'\varepsilon_{12}'') + \\ + (M_1''\chi_1' - M_1'\chi_1'') + (M_2''\chi_2' - M_2'\chi_2'') + 2(H_1''\chi_{12}' - H_1'\chi_{12}'') + \\ + (Q_1''\varepsilon_{13}' - Q_1'\varepsilon_{13}'') + (Q_2''\varepsilon_{23}' - Q_2'\varepsilon_{23}'')]. \quad (24)$$

При врахуванні розігрівом в активних шарах в (24) потрібно додати члени, представлені в [6]. При врахуванні залежності властивостей матеріалів від температури матимемо складну нелінійну систему диференціальних рівнянь в частинних похідних.

Якщо ж властивості матеріалів можна вважати незалежними від температури, то задача розпадається на три окремі задачі: 1) задачу механіки для в'язкопружного матеріалу; 2) задачу теплопровідності з відомими джерелами тепла; 3) розрахунок різниці потенціалів, яку необхідно підвести до актуатора для компенсації механічного навантаження.

При досягненні температурою дисипативного розігріву точки Кюрі, актуатор перестає виконувати своє функціональне призначення, тобто має місце специфічний тип теплового руйнування п'єзоелемента.

Представлена вище модель є теоретичною основою для дослідження впливу температури дисипативного розігріву на ефективність роботи п'єзоелектричних актуаторів та на ефективність активного демпфірування коливань композитних оболонок за їх допомогою.

1. Бондарь А.Г., Рассказов А.О., Козлов В.И., Бондарский А.Г. Термоупругое равновесие многослойных составных оболочек//Проблемы прочности. - 1989. - №6. - С. 68-72.

2. Гринченко В.Т., Улитко А.Ф., Шульга Н.А. Механика связанных полей в элементах конструкций. Электроупругость. - Т.5. - Киев: Наук. думка, 1989. - 290 с.

3. Гузь А.Н., Шперенко К.И. Линейные задачи для оболочек с учетом деформаций поперечного сдвига//Механика композитов: В 12 т. Т.7:Концентрация напряжений/А.Н.Гузь, А.С.Космодамианский, В.П.Шевченко и др. К.: А.С.К., 1998. – С.288-328.
4. Карнаухов В.Г., Киричок И.Ф. Механика связанных полей в элементах конструкций. Электротермовязкоупругость. - Т.4. - Киев: Наук. думка, 1988. - 320 с.
5. Карнаухов В.Г., Михайленко В.В. Нелинейная термомеханика пьезоэлектрических неупругих тел при моногармоническом нагружении. – Житомир: ЖГТУ, 2005. – 428с.
6. Коваленко А.Д. Основы термоупругости. - Киев: Наук. думка, 1970. - 307с.
7. Луговой П.З., Мейш В.Ф., Штанцель Э.А. Нестационарная динамика неоднородных оболочесных конструкций. – Кю: Издательско-полиграфический центр << Киевский университет >>, 2005. – 536с.
8. Gabbert U. and Tzou H.S. Smart Structures and Structronic Systems.- Kluwer Academic Pub.: Dordrecht/Boston/ London. – 2001. – 384p.
9. Rao S.S. and Sunar M. Piezoelectricity and its use in disturbance sensing and control of structure: A survey// Applied mechanics reviews.-1994. - V.47, N 44. - P. 113 -123.
10. Tani J., Takagi T., Qiu J. Intelligent material systems: Applications of functional materials// Applied mechanic reviews. - 1998. - V. 51, N 8. - P. 505 - 521.
11. Tzou H.S., Bergman L.A. Dynamics and control of distributed systems. - Cambridge: Cambridge University Press. - 1998. - 400p.
12. Tzou H.S. Piezoelectric shells (Distributed Sensing and Control of Continua).- Kluwer Academic Pub.: Dordrecht/Boston/ London. – 1993. – 400p.

Надійшла до редколегії 31.08.2006

УДК 514.77

Віктор С. Лісняк

Диференціальна геометрія неголономних аналогів класичних многовидів

Розглядаються неголономні аналоги класичних точкових і лінійчатих многовидів тривимірного евклідового простору. Побудову всіх аналогів виконано геометричним методом.

Складено системи вихідних диференціальних рівнянь цих неголономних многовидів.

Ключові слова: комплекс, конгруенція, неголономний многовид.

Viktor S. Lisnyak

Differential geometry of aholonomic analogues for classic manifolds

Aholonomic analogues for classic point and lineal manifolds in three-dimensional Euclidean space are considered. All analogues constructions are accomplished by geometrical method.

Systems of determining differential equations of these aholonomic manifolds are composed.

Key Words: aholonomic manifold, complex, congruence.

Неголономні аналоги класичних многовидів є алгоритмічно зручним засобом унаочнення новітніх математичних моделей конкретних еволюційуючих (зокрема рухомих) суцільних середовищ [1, 2, 15]. Тут здійснюється паралельне дослідження найприродніших неголономних многовидів.

§ 1. Рухомий орторепер евклідового простору

Нехай в E_3 маємо деякий орторепер $Q = (A; e_1, e_2, e_3)$ з радіус-вектором A його вершини A та з базисними ортами e_1, e_2, e_3 . Запишемо загальні дериваційні рівняння (диференціальні рівняння руху) Q як

$$dA = \omega^r e_r, \quad de_s = \omega_s^r e_r, \quad a, \dots = 1, 2, 3. \quad (1)$$

Тут відносні компоненти ω^a та ω_m^c реперу Q підпорядковані рівнянням структури простору E_3 : $D\omega^a = [\omega^s \omega_s^a]$, $D\omega_s^a = [\omega_s^r \omega_r^a]$. (2)

Тотожні алгебраїчні залежності відносних компонент $\omega_m^s + \omega_s^m = 0$ (3) є наслідком евклідовості простору E_3 . Вони викликають косу симетрію

$$\Omega^T = -\Omega \quad \text{для їх матриці} \quad \Omega = \begin{pmatrix} \omega_1^1 & \omega_1^2 & \omega_1^3 \\ \omega_2^1 & \omega_2^2 & \omega_2^3 \\ \omega_3^1 & \omega_3^2 & \omega_3^3 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Запровадимо наступні векторно-матричні позначення:

$$\omega = (\omega^1 \ \omega^2 \ \omega^3)^T \quad (5), \quad R = (e_1 \ e_2 \ e_3). \quad (6)$$

Зі врахуванням (4)-(6) перша рівність з (1) постає як $dA = R\omega$, (7)

а система решти трьох рівнянь з (1) набуває вигляду $dR = R\Omega$. (8)

Рівності (7) та (8) є матричним поданням дериваційних рівнянь (1) рухомого ортореперу $Q = (A; e_1, e_2, e_3)$ класичного евклідового простору E_3 .

§ 2. Неголономна поверхня як поле напрямків

Ітимемо від рівнянь поверхні до рівнянь її неголономного аналогу.

1. Класична поверхня. Єдиним інваріантом, який визначається першим диференціальним оком поверхні S , є її локальна дотична площина π . Їй (за перпендикулярністю) двоїстий локальний орт нормалі n , визначаючий локально перпендикулярний до S напрям l . Це ж дозволяє взяти для S за супровідний частково канонізований орторепер $Q = (A; e_1, e_2, e_3)$ з вершиною A у біжучій точці S та з ортами e_1, e_2 у π . У такому Q поверхня S визначається рівнянням $\omega^3 = 0$. (1)

Його зовнішнє продовження має вигляд

$$\omega_1^3 = a\omega^1 + b\omega^2, \quad \omega_2^3 = b\omega^1 + c\omega^2. \quad (2)$$

Тоді фундаментальний геометричний об'єкт другого порядку (скорочено – ф.г.о.-2) (a, b, c) чи (за іншою термінологією) другий диференціальний окіл поверхні S визначає два незалежні функціональні інваріанти. Це середня H та повна K кривини поверхні. Їхні формули –

$$H = (a + c)/2, \quad K = ac - b^2. \quad (3)$$

Істотним для подальшого ж є те, що перший диференціальний окіл поверхні однозначно визначає у кожній її точці локальну дотичну до неї площину π , а тому й локальний перпендикулярний до неї напрям.

Ще інакше: класична поверхня S визначає своїм першим диференціальним оком двовимірне поле напрямків у просторі E_3 .

Неголономною поверхнею назовемо тривимірне поле напрямків у просторі E_3 .

2. Основні диференціальні рівняння поля напрямків. Нехай простір E_3 віднесений до рухомого ортореперу $Q = (A; R)$ з вершиною (визначуваною радіус-вектором) A та з о.н.б. $R = (e_1, e_2, e_3)$.

Кожний напрямок у просторі E_3 зручно задати йому колінеарним ортом e . Тому поля напрямків зручно задавати полями відповідних ортів.

Вважатимемо заданим у деякій області D з E_3 поле E одиничного вектору (орту) e . У його супровідному 0-репері Q векторне поле E має зображення

$$e = e_3. \quad (4)$$

Основні диференціальні рівняння поля E у Q запишуться так:

$$\Theta \equiv -\omega_\alpha^3 + a_{\alpha i} \omega^i = 0, \quad D\Theta_\gamma \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta}; \quad (5)$$

Зовнішні продовження цієї системи приводять до рівнянь

$$\Theta_{\alpha i} \equiv da_{\alpha i} - a_{\beta i} \omega_\alpha^\beta - a_{\alpha k} \omega_i^k - a_{\alpha j} \omega^j = 0, \quad (6)$$

$$\Delta a_{\alpha j} \wedge \omega^j \equiv 0 \pmod{\Theta_\beta, \Theta_{\gamma p}}. \quad (7)$$

Тут усі компоненти $a_{\alpha j}$ фундаментальних геометричних об'єктів поля E симетричні за всіма їхніми латинськими індексами.

2. Інтерпретація інваріантних функцій. Для довільного векторного поля E безпосередньою перевіркою можна пере-

конатися в абсолютній інваріантності полів наступних функцій [6] –

$$i_1 = a_{12} - a_{21}, \quad i_2 = a_{11} + a_{22}, \quad i_3 = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}, \\ i_4 = (a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22})^2 + (a_{13}a_{21} - a_{11}a_{23})^2, \quad i_5 = a_{13}^2 + a_{23}^2. \quad (8)$$

Тут $i_1, \dots, i_5$ утворюють повну систему алгебраїчно незалежних (функцій компонент ф.г.о.-1) інваріантів першого диференціального околу E .

3. Інваріантні оператори й афінна нормаль. Позначимо символом ${}^{\pi}d$ локальний оператор диференціювання, задовільняючий умову $e_3 \cdot {}^{\pi}dA = 0$. Таким чином, ${}^{\pi}d(\cdot)$ є ортогональною проекцією вектору $d(\cdot)$ на локальну (прохожу через A перпендикулярно відповідному e_3) площину π . Умовимося ще символом $\bar{e}$ позначати складову локального вектору e у $R \equiv (e_1, e_2, e_3)$, ортогональну до e_3 .

Задання поля E в області D простору E_3 вводить у кожній точці A цієї області лінійний оператор T , який ставить у відповідність векторові ${}^{\pi}dA$ вектор ${}^{\pi}de_3$. Обидва ці вектори лежать у π , а в її локальному ор-

торепері $Q \equiv (A; e_1, e_2)$ матриця

$$T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Афінна нормаль поля E визначається точками A та $A + dA|_{de_3=0}$.

Позначимо

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{21} \end{vmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}. \quad (10)$$

Тоді вектор

$$a = \delta^j \Delta_j e_j \quad (11)$$

є тим з колінеарних афінній нормалі векторів, модуль та орієнтація якого визначені умовою

$$ae_3 = i_3. \quad (12)$$

Надалі вектор a традиційно іменуватимемо вектором афінної нормалі [6].

Застосовуючи подання операторів векторного аналізу в орторепері до інваріантного векторного поля $V = V^i e_i$ та до скалярного поля φ з диференціальним рівнянням $d\varphi = \varphi_i e^i$, одержимо $\text{grad } \varphi = \delta^j \varphi_j e_j$, (13)

$$\text{div } V = V_s^s \quad (14), \quad \text{rot } V = (V_2^3 - V_3^2) e_1 + (V_3^1 - V_1^3) e_2 + (V_1^2 - V_2^1) e_3. \quad (15)$$

Використовуючи попередні формули і позначення, зрештою дістаємо:

$$i_1 = e_3 \text{rote } e_3, \quad i_2 = \text{Sp } T = - \text{dive } e_3, \quad i_3 = \det T, \\ i_4 = (\bar{a})^2, \quad i_5 = (de_3|_{dA \perp \pi})^2 / (dA|_{dA \perp \pi})^2. \quad (16)$$

Це – лише одна з можливих інтерпретацій абсолютних інваріантів (8).

Зафіксовані тут рівностями (5) – (16) поняття та факти в однаковій мірі стосовні неголономних поверхонь, полів напрямків та полів ортів. Диференціальні геометрії усіх трьох тотожні з точністю до термінології.

§ 3. Неголономні конгруенції

Спочатку звернемося до класичної конгруенції прямих простору E_3 .

1. Прямолінійна конгруенція. Якщо конгруенція S пря-

мих не вироджується в ω^1 циліндрів, випадок чого виключимо з подальшого розгляду, то форми ω_α^3 незалежні і їх можна взяти за базисні.

У 0-репері Q конгруенція C має своїми вихідними рівняннями

$$\omega^1 = K \omega_1^3 + L \omega_2^3, \quad \omega^2 = M \omega_1^3 + N \omega_2^3, \quad (1)$$

доповнені умовами зовнішнього замикання системи (1). Тут функції K, L, M, N – компоненти ф.г.о.-1 конгруенції C прямих.

У першому диференціальному околі біжучого променя конгруенції визначені рівно два її абсолютних функціональних інваріанти a та b , центр $M = A + t e_3$ її променя та інваріантний ортогональний до відповідного променя орт $e = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi$. Одержані у [8] формули (10), (11), (16) дають їхні зображення у неканонізованому репері

$$2a = M - L + h, \quad 2b = -M + L + h; \quad h = ((L + M)^2 + (N - K)^2)^{1/2} \quad (2)$$

$$\text{та ще значення} \quad t = (N + K)/2, \quad \operatorname{tg} 2\varphi = (N - K)/(L + M). \quad (3)$$

Отже, побудована повна система незалежних інваріантів a, b, M, e з першого диференціального околу конгруенції прямих C . Їхній геометричний зміст випливає з того, що граничні точки конгруенції та її фокуси визначаються на кожній прямій l відповідно радіус-векторами

$$r_{1,2} = M \pm (1/2)(a + b)e_3, \quad \rho_{1,2} = M \pm \sqrt{ab}e_3. \quad (4)$$

Інваріантний орт e колінеарний бісектрисі напрямів, зображуваних на сферичному зображенні конгруенції C її розгортними поверхнями, визначуваними диференціальним рівнянням $\omega^1 \omega_2^3 - \omega^2 \omega_1^3 = 0$. Часто застосовувана інваріантна функція $a - b$ називається аномальністю конгруенції, бо рівність $a - b = 0$ характеризує саме нормальні конгруенції. З (9) видно, що граничні точки (як і фокуси) розташовані на l симетрично відносно точки M , чим і виправдана її назва як центру променя.

Нарешті зауважимо, що традиційно використовуваний (внаслідок його зручності) канонічний репер Q виокремлюється зі множини допустимих 0-реперів рівностями $t = 0$ та $\varphi = 0$. У ньому система (1) та її зовнішнє диференціальне продовження виглядають відповідно так:

$$\omega^2 = a \omega_1^3, \quad \omega^1 = b \omega_2^3; \quad (5)$$

$$\begin{aligned} da &= 2x \omega_1^3 + 2y \omega_2^3, & \omega^3 + (a + b) \omega_1^2 &= 2y \omega_1^3 + 2z \omega_2^3, \\ \omega^3 - (a + b) \omega_1^2 &= 2p \omega_1^3 + 2q \omega_2^3, & db &= 2q \omega_1^3 + 2r \omega_2^3. \end{aligned} \quad (6)$$

Ця канонізована система (5), (6) основних диференціальних рівнянь C зручна для з'ясування геометричного змісту інваріантів її ф.г.о.-2.

2. Неголономні конгруенції та їхні інваріанти. Зіставимо з кожною прямою l тривимірного евклідового простору E_3 перпендикулярний їй орт e та четвірку симетрично розташованих точок R_1, F_1, F_2, R_2 на ній. До того ж, точки F_1, F_2 , які назвемо фокусами, повинні лежати всередині відрізка, утвореного точками R_1, R_2 , названими граничними. Множину таким чином оснащених прямих умов-

по назвемо неголономною конгруенцією. Очевидно, довільність задання неголономної конгруенції складає 4 функції чотирьох аргументів кожна.

Множину допустимих супровідних ортореперів $R \equiv (A; e_s)$ неголономної конгруенції можна вибрати так, що базисними формами стануть $\omega^\alpha, \omega_\beta^3$. В R орт e подається як

$$e = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi, \quad (7)$$

радіус-вектори граничних точок запишуться у вигляді

$$R_{1,2} = A + (t \pm \frac{a+b}{2})e_3, \quad (8)$$

а радіус-вектори фокусів — $F_{1,2} = A + (t \pm \sqrt{ab})e_3$. (9)

Диференціюючи рівності (1) – (3), одержимо

$$dl = -(\omega_1^2 + d\varphi)(e_1 \sin \varphi - e_2 \cos \varphi) + (\omega_1^3 \cos \varphi + \omega_2^3 \sin \varphi)e_3; \quad (10)$$

$$dR_{1,2} = [\omega^1 + (t \pm \frac{a+b}{2})\omega_3^1]e_1 + [\omega^2 + (t \pm \frac{a+b}{2})\omega_3^2]e_2 + \\ + [\omega^3 + d(t \pm \frac{a+b}{2})]e_3, \quad (11)$$

$$dF_{1,2} = [\omega^1 + (t \pm \sqrt{ab})\omega_3^1]e_1 + [\omega^2 + (t \pm \sqrt{ab})\omega_3^2]e_2 + \\ + [\omega^3 + d(t \pm \sqrt{ab})]e_3. \quad (12)$$

З рівностей (10) – (12) видно, що головними формами неголономної конгруенції є наступні:

$$\omega^\alpha, \omega_\beta^3; \quad (13)$$

$$\omega^3 + dt, da + db, adb + bda, \omega_1^2 + d\varphi. \quad (14)$$

Ми здійснимо невироджену заміну в кільці головних форм реперу, якщо від форм (14) перейдемо до таких:

$$\psi^1 = \omega^3 + dt - (a+b)\cos 2\varphi(\omega_1^2 + d\varphi) - (1/2)(da + db)\sin 2\varphi, \\ \psi^2 = -\sin^2 \varphi da + \cos^2 \varphi db - (a+b)\sin 2\varphi(\omega_1^2 + d\varphi), \\ \psi^3 = \cos^2 \varphi da - \sin^2 \varphi db - (a+b)\sin 2\varphi(\omega_1^2 + d\varphi), \\ \psi^4 = \omega^3 + dt + (a+b)\cos 2\varphi(\omega_1^2 + d\varphi) + (1/2)(da + db)\sin 2\varphi. \quad (15)$$

Тоді визначальну систему основних дифференціальних рівнянь неголономної конгруенції можна записати у вигляді

$$\Theta^A \equiv -\psi^A + z^{A\alpha}\omega_\alpha^3 + z_\alpha^A\omega^\alpha = 0, \quad (16)$$

$$D\Theta^A \equiv 0 \pmod{\Theta^\beta}. \quad (17)$$

У цій системі індекси змінюються у наступних межах: $\alpha, \dots = 1, 2$; $a, \dots = 1, 2, 3$; $A, \dots = 1, \dots, 4$. Такі самі межі й у виразах (13), (16) та (17).

3. Застосовуючи метод попередньої канонізації реперу [9, 11] можна показати, що повна система інваріантних функцій першого диференці-

льного околу неголономної конгруенції, окрім a та b , містить ще 16 алгебраїчно незалежних функціональних інваріантів, отже всього 18.

4. Якщо чотири головні параметри неголономної конгруенції пов'язати трьома істотними співвідношеннями, то у ній визначиться ∞^1 прямих, кожній з яких у спадок дістанеться дві граничні точки, два фокуси та перпендикулярний цій прямій орт. Таку множину прямих умовно назвемо лінійчатою поверхнею λ неголономної конгруенції.

Для геометричної побудови (з'ясування геометричного змісту) інваріантів першого диференціального околу неголономної конгруенції зручно звернутися до її лінійчатих поверхонь λ з певними властивостями. При цьому зокрема можна одержати аналітичні умови розширюваності неголономної конгруенції в ∞^2 голономних так, що об'єкти a, b, t, ϕ для них набувають традиційного відзначеного рівностями (2) і (3) змісту.

Візьмемо довільну пряму l з неголономної конгруенції. Тоді пряма $l + dl$, нескінченно близька прямій l у зміщенні вздовж кожної з лінійчатих поверхонь λ , визначає на l точку $L(\lambda)$ – основу спільного перпендикуляру прямих l та $l + dl$. Множина точок $L(\lambda)$ на l , відповідних різним виборам λ , неперервно заповнює відрізок $R_1 R_2$ і т.д. [9, 11].

5. Очевидно, супровідний тригранник $R \equiv (A; e_k)$ неголономної конгруенції можна повністю канонізувати у нульовому диференціальному околі, якщо на кожній її прямій вершину A триграннику R помістити посередині між граничними точками, а за орт e_1 взяти заданий орт e .

§ 4. Неголономні комплекси прямих

Геометричні об'єкти першого диференціального околу звичайного (класичного) комплексу прямих є вихідні для побудови неголономного.

1. **Комплекс прямих.** Канонізацію 0-реперу Q комплексу K можна здійснити, сумістивши його вершину A зі центром M променя l , а орт e_1 – з ортом головної нормалі E . Такий канонічний репер називається нормальним тригранником комплексу [6, 10].

У ньому основні диференціальні рівняння K запишуться системою

$$\omega^2 = k\omega_3^1 \quad (1); \quad \omega_1^2 = i_1\omega^1 + i_2\omega_3^1 + i_3\omega_3^2,$$

$$dk = i_2\omega^1 + i_4\omega_3^1 + i_5\omega_3^2, \quad k\omega_1^2 - \omega^3 = i_3\omega^1 + i_5\omega_3^1 + i_6\omega_3^2, \quad (2)$$

доповненою відповідними умовами її зовнішньої замкненості.

Істотним тут виявляється те, що перший диференціальний окіл комплексу визначає точно три його інваріанти: центр M променя, орт E головної нормалі та (скалярну) кривину k у біжучому його промені.

2. **Інваріанти неголономних комплексів.** Кожній прямій l з E_3 поставимо у відповідність перпендикулярний їй орт e та 2 точки J_1, J_2 на ній. Множину всіх оснащених таким способом прямих простору E_3 умовно назвемо неголономним комплексом. Зрозуміло, що

широта задання неголономного комплексу складає 3 функції чотирьох аргументів – по одній для задання положення двох точок і напряму e .

Умовимося, що застосовувані у сумі чи як номери рівностей малі грецькі індекси набирають значення 1 та 2, а малі латинські – 1, 2 та 3. При позначенні елементу множини вони набирають усіх своїх можливих відповідних значень.

У множині допустимих ортореперів $R \equiv (A; e_s)$ неголономного комплексу з базисними формами ω^α , ω_α^3 орт e зобразиться як

$$e = e_1 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi, \quad (3)$$

а радіус-вектори інваріантних точок – $J_{1,2} = A + (t \pm k)e_3$. (4)

Диференціюючи рівності (3) та (4) з'ясуємо, що головні форми неголономного комплексу – ω^α , ω_α^3 , (5)

$$\omega_1^2 + d\varphi, \quad dk, \quad \omega^3 + dt. \quad (6)$$

Заміна диференціальних форм (6) на

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \sec^2 \varphi (\omega_1^2 + d\varphi), \quad \Omega_2 = dk + t \sec^2 \varphi (\omega_1^2 + d\varphi) + \operatorname{tg} \varphi (\omega^3 + dt), \\ \Omega_3 &= k \sec^2 \varphi (\omega_1^2 + d\varphi) - (\omega^3 + dt) + \operatorname{tg} \varphi dk \end{aligned} \quad (7)$$

здійснює невиврожене перетворення у кільці головних форм. Тоді визначальна система диференціальних рівнянь неголономного комплексу –

$$\Theta_i = -\Omega_i + u_{i\alpha} \omega_3^\alpha + z_{i\alpha} \omega^\alpha = 0 \quad (8), \quad D\Theta_i \equiv 0 \pmod{\Theta_j}. \quad (9)$$

Тотожне виконання вимоги (9) гарантує цілковиту інтегровність (8).

Послідовно використовуючи розвинуті у [9, 12] алгоритмічні засоби, можна показати, що повна система інваріантів істотно першого диференціального околу неголономного комплексу містить усього 12 алгебраїчно незалежних інваріантних функцій (функціональних інваріантів).

§ 5. Неголономні криві та лінійчаті поверхні

Плоскі та просторові криві не мають функціональних чи векторних інваріантів у першому диференціальному околі. Вони там визначають лише локальні інваріантні напрями (їхніх дотичних). Тому в обраній у цьому дослідженні геометричній схемі їхніми неголономними аналогами слід вважати (відповідно плоске та просторове) поля напрямків.

Для лінійчатої поверхні справа не є настільки ж однозначною, бо цей многовид можна розглядати і як одновимірний лінійчатий і як двовимірний точковий. Ці дві вихідні позиції приводять і до двох істотно різних неголономних аналогів класичної лінійчатої поверхні.

Перші підходи до неголономних аналогів многовидів здійснені мною зокрема у [3-6] й оглянуті у [7, 9]. Обчислювальні формули для їхніх інваріантів у репері нульового порядку наведені у публікаціях [11, 12]. В їх аналітичній побудові мені істотну допомогу надала Г.С. Польща.

Підкреслимо, що історично усталений термін “ноголономна геометрія (зануреного в однорідний простір S) многовиду M ” означає “дифе-

ренціальна геометрія у S неголономного аналогу NM многовиду M , бо і термін “неголономний (занурений в однорідний простір S) многовид M ” означає всього лише “неголономний аналог NM многовиду M у S ”. Для перенесення цих побудов на проєктивні простори зручно використати дослідження Г.С. Польщі [7, 13, 14] з проєктивних розподілів точок.

Концептно найголовнішим у цій статті є уніфікована побудова неголономних аналогів класичних многовидів простору E_3 за геометрією першого диференціального околу їхніх голономних прототипів. Аналітичним здобутком є геометрична побудова систем визначальних диференціальних рівнянь (2.5)-(2.7), (3.16), (3.17), (4.8), (4.9) для цих аналогів.

Література

1. Борисов А.В., Мамаев И.С. Неголономные динамические системы. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. – 324 с.
2. Жермен П. Курс механики сплошных сред. – М.: Высшая школа, 1983. – 400 с.
3. Лісняк В.С. Інваріантні образи неголономної поверхні / Доповіді АН УРСР, 1970, 1, с. 13-15.
4. Лісняк В.С. До геометрії неголономних конгруенцій / Доповіді АН УРСР, 1970, 2, с. 124, 125.
5. Лісняк В.С. До геометрії відповідностей в лінійчастому просторі / Доповіді АН УРСР, 1970, 4, с. 318-320.
6. Лісняк В.С. Геометрия векторных полей в движущемся твердом теле. – М., 1975. – 56 с. Деп. в ВИНТИ 20.10.75, № 3228.
7. Лісняк В.С. Дослідження Г.С. Польщі з геометрії однорідних просторів. К., 1983 – 1993. – 22 с. Деп. у ДНТБ України 05.07.93, № 1373.
8. Лісняк В.С. Алгебраїчна побудова інваріантів прямолінійної конгруенції / Вісник Київськ. ун-ту, с. фіз.-м. н., вип. № 2, 2001 р., с. 148-158.
9. Лісняк В.С. Дослідження з неголономної геометрії. – 1994. – 23 с. Деп. у ДНТБ України 20.07.94, № 1318.
10. Лісняк В.С. Метричні інваріанти комплексу прямих / Вісник Київського університету, серія фіз.-мат. науки, вип. № 4, 2001 р., с. 124-129.
11. Лісняк В.С. Неголономні конгруенції евклідового простору / Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки, вип. № 2, 2004 р., с. 129-136.
12. Лісняк В.С. Неголономні комплекси прямих / Вісник Київськ. ун-ту, серія фіз.-мат. науки, вип. № 3, 2004 р., с. 137-143.
13. Польща Г.С., Лісняк В.С. Проективно-диференціальна геометрія розподілів точок / Вісник Київського університету, серія фіз.-мат. науки, вип. № 2, 2000 р., с. 91-101.
14. Польща Г.С., Лісняк В.С. Обчислювальні аспекти диференціальної геометрії многовидів / Журнал обчислювальної та прикладної математики, Київський університет, № 2(91), 2004 р., с. 121.
15. Шутц Б. Геометрические методы математической физики. – М.: Мир, 1984. – 304 с.

Надійшла до редколегії 20 квітня 2006 р.

УДК 519.21

Олег В. Перегуда
Оксана І. Ковтун

Oleg V. Pereguda
Oksana I. Kovtun

Якісний аналіз поведінки системи
двох згасаючих стохастичних
осциляторів.

Qualitative analysis of the behavior of
the system of damped stochastic
oscillators.

Отримано явний вигляд і
досліджено поведінку амплітуди
та фази системи згасаючих
стохастичних гармонічних
осциляторів.

The explicit form of the amplitude,
phase of the system of damped
oscillators is found. The behavior of
the amplitude, phase of the system of
damped oscillators is investigated.

Ключові слова: гармонічний
осцилятор, випадкові збурення
типу "білого шуму" у формі Іто,
амплітуда, фаза

Key words: harmonic oscillator,
random perturbation of "white noise"
in the Ito forms, amplitude, phase

Вступ.

Під системою двох гармонічних осциляторів з тертям розуміють систему,
рух якої зображається системою двох лінійним диференціальних рівнянь
другого порядку

$$\begin{cases} \ddot{u}_1(t) + 2h_1\dot{u}_1(t) + k_1^2u_1(t) = 0 \\ \ddot{u}_2(t) + 2h_2\dot{u}_2(t) + k_2^2u_2(t) = 0, \\ \dot{u}_1(0) = \dot{u}_{01}, \\ \dot{u}_2(0) = \dot{u}_{02}, \\ u_1(0) = u_{01}, \\ u_2(0) = u_{02}, \end{cases} \quad (1)$$

де $u_{0i}, \dot{u}_{0i}$ – початкові положення і швидкості осциляторів ($u_{0i}^2 + \dot{u}_{0i}^2 > 0$);
 $k_i > 0, h_i$ – параметри осциляторів (h_i – коефіцієнти тертя; $u_i(t), \dot{u}_i(t)$ –
положення і швидкість осциляторів в момент часу $t > 0; i = 1, 2$.)

Система (1) еквівалентна системі диференціальних рівнянь першого
порядку

$$\dot{x}(t) = Bx(t); \quad (2)$$

де

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -k_1^2 & -2h_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -k_2^2 & -2h_2 \end{pmatrix}; \quad x(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} x_1(t) = u_1(t); x_2(t) = \dot{u}_1(t); \\ x_3(t) = u_2(t); x_4(t) = \dot{u}_2(t). \end{matrix}$$

В декартовій системі координат стан системи (2) зображається точкою М з координатами $(x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t))$, яка рухається по фазовій траєкторії, фазова швидкість точки М є вектор $(x_2(t), -k_1^2 x_1(t) - 2h_1 x_2(t), x_4(t), -k_2^2 x_3(t) - 2h_2 x_4(t))$. Портрет можливих рухів точки М у фазовому просторі залежить від знаків $h_i^2 - k_i$, $i = 1, 2$.

Дослідження поведінки зображувальної точки М на фазовій площині $x_1 O x_2$ при випадкових збуреннях вздовж вектора фазової швидкості, у випадку одного гармонічного осцилятора, проведено в [2].

Постановка задачі.

У даній роботі досліджується поведінка зображувальної точки М при збуренні вектора фазової швидкості

$(x_2(t), -k_1^2 x_1(t) - 2h_1 x_2(t), x_4(t), -k_2^2 x_3(t) - 2h_2 x_4(t))$ "білим шумом" у формі Іто для випадку $|h_i| < k_i$, $i = 1, 2$.

При таких збуреннях система (2) перетворюється в систему рівнянь Іто. Для дослідження такої системи, розглядається загальна система рівнянь вигляду:

$$\dot{x}(t) = Bx(t)\xi; \quad \xi = (\xi_1(t), \xi_2(t)) \quad (3)$$

де

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1(t) &= g_{11}(t) + g_{21}(t)\dot{w}_1(t); \\ \dot{\xi}_2(t) &= g_{12}(t) + g_{22}(t)\dot{w}_2(t); \end{aligned}$$

$g_{ij}(t)$ – не випадкові функції; $\dot{w}_i(t)$ – "похідна" від вінерівського процесу ("білий шум" у формі Іто).

Рівняння (3) природньо розглянути як рівняння Іто

$$\dot{x}(t) = Bx(t)d\xi_i(t); \quad i = 1, 2; \quad (4)$$

$$\xi_1(t) = \int_0^t g_{11}(s)ds + \int_0^t g_{21}(s)dw_1(s); \quad \xi_2(t) = \int_0^t g_{12}(s)ds + \int_0^t g_{22}(s)dw_2(s).$$

Введемо наступні позначення:

$$\mu_{1i} = \sqrt{k_i^2 - h_i^2}; \quad \alpha_{1i} = \int_0^t g_{1i}(s)ds; \quad \alpha_{2i} = \int_0^t g_{2i}^2(s)ds; \quad i = 1, 2.$$

Має місце наступна теорема:

Теорема 1. Нехай $x(t)$ – розв'язок (3), тоді з ймовірністю 1 для всіх $t \geq 0$ мають місце рівності:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= A_{11}(t) \cos \varphi_{11}(t), \quad x_2(t) = k_1 A_{11}(t) \sin \varphi_{11}(t) + \gamma_{11}, \\ x_3(t) &= A_{12}(t) \cos \varphi_{12}(t), \quad x_4(t) = k_2 A_{12}(t) \sin \varphi_{12}(t) + \gamma_{12}. \end{aligned}$$

де

$$A_{1i} = \left(u_{0i}^2 + \frac{(h_i u_{0i} + \dot{u}_{0i})^2}{\mu_{1i}^2} \right)^{1/2} \exp \left\{ \left(\frac{k_i^2}{2} - h_i^2 \right) \alpha_{2i}(t) - h_i \xi_i(t) \right\};$$

$$\varphi_{1i}(t) = \varphi_{1i}(0) - h_i \mu_{1i} \alpha_{2i}(t) - \mu_{1i} \xi_i(t);$$

$$\operatorname{tg} \varphi_{1i}(0) = \frac{h_i u_{0i} + \dot{u}_{0i}}{\mu_{1i} u_{0i}}; \quad \operatorname{tg} \gamma_{1i} = -\frac{h_i}{\mu_{1i}}; \quad i = 1, 2.$$

Доведення

Розглянемо лінійне перетворення процесу $x(t)$, при якому матриця B в рівнянні (4) прийме жорданову форму.

Розглянемо процес $y(t) = Tx(t)$ з матрицею

$$T = \begin{pmatrix} \mu_{11} & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{12} & 0 \\ 0 & 0 & h_2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тоді відповідно

$$TBT^{-1} = \begin{pmatrix} -h_1 & \mu_{11} & 0 & 0 \\ -\mu_{11} & -h_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h_2 & \mu_{12} \\ 0 & 0 & \mu_{12} & -h_2 \end{pmatrix} - \text{жорданова форма матриці } B.$$

Завдяки рівнянню (4) для процесу $y(t)$ отримаємо стохастичне диференціальне рівняння Іто

$$y(t) = TBT^{-1} y(t) d\xi(t), \quad (5)$$

де

$$\begin{aligned} a_1(t, y) &= g_{11}(t)(-h_1 y_1 + \mu_{11} y_2, -\mu_{11} y_1 - h_1 y_2); \\ a_2(t, y) &= g_{12}(t)(-h_2 y_1 + \mu_{12} y_2, -\mu_{12} y_1 - h_2 y_2); \\ a_3(t, y) &= g_{11}(t)(-h_1 y_3 + \mu_{11} y_4, -\mu_{11} y_3 - h_1 y_4); \\ a_4(t, y) &= g_{12}(t)(-h_2 y_3 + \mu_{12} y_4, -\mu_{12} y_3 - h_2 y_4); \end{aligned} - \text{коефіцієнти переносу};$$

$$\begin{aligned} b_1(t, y) &= g_{21}(t)(-h_1 y_1 + \mu_{11} y_2, -\mu_{11} y_1 - h_1 y_2); \\ b_2(t, y) &= g_{22}(t)(-h_2 y_1 + \mu_{12} y_2, -\mu_{12} y_1 - h_2 y_2); \\ b_3(t, y) &= g_{21}(t)(-h_1 y_3 + \mu_{11} y_4, -\mu_{11} y_3 - h_1 y_4); \\ b_4(t, y) &= g_{22}(t)(-h_2 y_3 + \mu_{12} y_4, -\mu_{12} y_3 - h_2 y_4); \end{aligned} - \text{коефіцієнти дифузії};$$

Введемо нові процеси $r_1(t), \varphi_1(t), r_2(t), \varphi_2(t)$ через співвідношення:

$$\begin{aligned} y_1(t) &= r_1(t) \cos \varphi_1(t); \quad y_2(t) = r_1(t) \sin \varphi_1(t); \\ y_3(t) &= r_2(t) \cos \varphi_2(t); \quad y_4(t) = r_2(t) \sin \varphi_2(t). \end{aligned}$$

Тоді (згідно) при $t < \tau$, де $\tau = \inf \{t : |y(t)| = 0\}$ мають місце рівняння:

$$dr_i(t) = (-h_i g_{1i}(t) + \frac{1}{2} \mu_{1i}^2 g_{2i}(t) r_i(t) - h_i g_{2i}(t) r_i(t)) d\omega_i(t);$$

$$d\varphi_i(t) = -\mu_{1i} (g_{1i}(t) + h_i g_{2i}^2(t)) dt - \mu_{1i} g_{2i}(t) d\omega_i(t); \quad i = 1, 2.$$

Тому [4]:

$$\begin{cases} r_i(t) = r_i(0) \exp \left\{ \left(\frac{k_i^2}{2} - h_i^2 \right) \alpha_{2i}(t) - h_i \xi_i(t) \right\}; \\ \varphi_i(t) = \varphi_i(0) - h_i \mu_{1i} \alpha_{2i}(t) - \mu_{1i} \xi_i(t) \end{cases}; \quad (6)$$

$$\text{де } \operatorname{tg} \varphi_i(0) = \frac{h_i u_{0i} + \dot{u}_{0i}}{\mu_{1i} u_{0i}}, \quad r_i(0) = \left[\mu_{1i}^2 u_{0i}^2 + (h_i u_{0i} + \dot{u}_{0i})^2 \right]^{1/2}.$$

З явного вигляду $r(t)$ випливає, що $\tau = \infty$ з ймовірністю 1. Отже, рівності (6) мають місце з ймовірністю 1 для всіх $t \geq 0$.

Оскільки $x(t) = T^{-1}y(t)$, то враховуючи явний вигляд процесу $y(t)$, отримаємо завершення доведення твердження.

Зауваження. Маючи явний вигляд розв'язку рівняння (4) залежно від поведінки функцій $g_{ij}(t)$ можна будувати моделі незатухаючих осциляторів з довільним порядком росту амплітуд.

Теорема 2. Нехай $x(t)$ – розв'язок (3), (4) і виконується при $t \rightarrow \infty$ збіжність:

$$\begin{aligned} 1) & \alpha_{2i} \xrightarrow{P=1} \infty; \quad i = \overline{1,2}; \\ 2) & \beta_{2i} \xrightarrow{P=1} \infty; \quad i = \overline{1,2}; \\ 3) & \frac{(\alpha_{2i}(t) \ln \ln \alpha_{2i}(t))^{1/2}}{\beta_{1i}} \xrightarrow{P=1} 0; \quad i = \overline{1,2}; \end{aligned}$$

де

$$\beta_{1i} = \left(\frac{k_i^2}{2} - h_i^2 \right) \alpha_{2i} - h_i \alpha_{1i}(t), \quad \beta_{12} = \left(\frac{k_2^2}{2} - h_2^2 \right) \alpha_{22} - h_2 \alpha_{12}(t).$$

Тоді 1) $A_{1i}(t) \xrightarrow{P=1} 0$ при $t \rightarrow \infty$,

2) $\varphi_{1i}(t) \xrightarrow{P=1} \infty$, якщо $h_i < 0$; $\varphi_{1i}(t) \xrightarrow{P=1} -\infty$, якщо $h_i > 0$; $i = \overline{1,2}$.

Доведення.

Розглянемо загальний розв'язок рівняння амплітуд

$$A_{1t}(t) = A_{1t}(0) \exp \left\{ \beta_{1t}(t) - h_i \int_0^t g_{2t}(s) d\omega_i(s) \right\}, \text{ де}$$

$$\int_0^t g_{2t}(s) d\omega_i(s) = \tilde{\omega}_i(\alpha_{2t}(t)), \quad \tilde{\omega}_i(t) - \text{вінерівський процес.}$$

$$\text{Тоді } A_{1t}(t) = A_{1t}(0) \exp \left\{ \beta_{1t}(t) \left[1 - \frac{h_i \tilde{\omega}_i(\alpha_{2t}(t))}{\beta_{1t}(t)} \right] \right\}.$$

Використовуючи "закон повторного логарифма"

$$P \left\{ \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\tilde{\omega}_i(\alpha_{2t}(t))|}{[2\alpha_{2t}(t) \ln \ln \alpha_{2t}(t)]^{1/2}} = 1 \right\} = 1$$

і умов теореми маємо, що $A_{1t}(t) \xrightarrow{P=1} 0$ при $t \rightarrow \infty$. При цьому, із рівності

$$\beta_{1t} = \frac{k_i^2}{2} \alpha_{2t}(t) - h_i [h_i \alpha_{2t}(t) + \alpha_{1t}(t)] \text{ і умов теореми маємо збіжність}$$

$$h_i [h_i \alpha_{2t}(t) + \alpha_{1t}(t)] \xrightarrow{P=1} \infty \quad (7)$$

і при $t \rightarrow \infty$

$$\frac{[\alpha_{2t}(t) \ln \ln \alpha_{2t}(t)]^{1/2}}{h_i [h_i \alpha_{2t}(t) + \alpha_{1t}(t)]} \xrightarrow{P=1} 0.$$

Тому враховуючи рівність

$$\varphi_{1t}(t) = \varphi_{1t}(0) - \mu_{1t} [h_i \alpha_{2t}(t) + \alpha_{1t}(t)] - \mu_{1t} \tilde{\omega}_i(\alpha_{2t}(t)), \text{ маємо збіжність}$$

$$\varphi_{1t}(t) [h_i \alpha_{2t}(t) + \alpha_{1t}(t)]^{-1} \xrightarrow{P=1} -\mu_{1t} \quad (8)$$

при $t \rightarrow \infty$

Із (7), (8) випливає доведення теореми.

Висновки.

Для системи двох стохастичних спряжених осциляторів з тертям знайдено явний вигляд і досліджено поведінку амплітуд та фаз. Маючи явний вигляд амплітуд та фаз системи двох осциляторів залежно від поведінки функцій $g_v(t)$ можна будувати різні моделі незатухаючих осциляторів з довільним порядком росту амплітуд.

Література.

1. Андронов А.А., Вит А.А., Хайкин С. Э. Теория колебаний. – Москва: Наука, 1981.
2. Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические дифференциальные уравнения. Киев: Наукова думка, 1968.
3. Kulinich G. L. Qualitative analysis of the influence of random perturbations on the phase velocity of the harmonic oscillator // Random Oper. And Stoch. Eq.–1995.–3, № 2. – P. 141-152
4. Кулініч Г.Л., Перегуда О.В. Інваріантні множини стохастичних диференціальних рівнянь Іто. Київ, 2002.

Надійшла до редакції 10.11.2006

УДК 517.5

Тамара О. Петрова

**Один контрприклад для
опуклого наближення функцій,
що мають дробову похідну.**

В статті побудовано контрприклад, який показує, що для опуклого наближення результат роботи [2] не може бути поширеним на класи Соболева $W^r[0,1]$ з $r \in (2,3)$.

Ключові слова: дробові похідні, опукле наближення, контрприклад.

Tamara A. Petrova

**One counterexample for convex
approximation of function with
fractional derivatives.**

In this article is constructed counterexample for convex approximation of function. This counterexample proved, that result of work [2] is wrong for Sobolev's class $W^r[0,1]$, $r \in (2,3)$.

Key Words: fractional derivatives, convex approximation, counterexample.

Вступ.

Нехай $W^r[0,1]$ клас функцій f , таких, що $D_{0+}^r f$ абсолютно неперервна і $|D_{0+}^r f| \leq 1$ майже скрізь, $D_{0+}^r f$ - лівостороння дробова похідна ([1]). Будемо позначати через Π_n множину всіх алгебраїчних поліномів степеня $\leq n$ і через Δ^2 множину опуклих вниз на $[0,1]$ функцій.

Гопенгауз довів [2], що для апроксимації без обмежень для всіх $r \in \mathbb{N}$, для кожної функції $f \in W^r[0,1]$ і для кожного $n \in \mathbb{N}$, знайдеться $p_n \in \Pi_n$ такий, що оцінка

$$|f(x) - p_n(x)| \leq c \cdot \frac{1}{n^2} \left(\sqrt{x(1-x)} \right)^r, \quad x \in [0,1] \quad (1.1)$$

є вірною.

Для монотонного наближення при $r > 2$, $r \in \mathbb{N}$, доведено, що оцінка (1.1) є невірною ([3]). В роботі [4] побудовано контрприклад, якій показує, що результат не може бути поширеним і на клас $W^r[0,1]$ з $r \in (2,3)$.

Для опуклого наближення при $r > 2$, $r \in \mathbb{N}$, доведено, що оцінка (1.1) також є невірною ([5]).

Основним результатом цієї статті є теорема, яка узагальнює результат роботи [4] на класи $W^r[0,1] \cap \Delta^2$ з $r \in (2,3)$.

Загальні відомості про дробові інтеграли та дробові похідні.
Для n -кратного інтегралу відома формула

$$\int_a^x dx \int_a^x \dots \int_a^x \varphi(x) dx = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} \varphi(t) dt \quad (2.1)$$

доведення якої легко здійснити методом математичної індукції. Помітимо, що $(n-1)! = \Gamma(n)$, бачимо, що правій частині в (2.1) можна придати зміст і при нецілих значеннях n . Тому звичайно визначати інтегрування нецілого порядку наступним чином.

Означення 2.1. Нехай $\varphi(x) \in L_1(a, b)$. Інтеграли

$$(I_{a+}^\alpha \varphi)(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{\varphi(t)}{(x-t)^{1-\alpha}} dt, \quad x > a \quad (2.2)$$

$$(I_{b-}^\alpha \varphi)(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{\varphi(t)}{(t-x)^{1-\alpha}} dt, \quad x < b, \quad (2.3)$$

де $\alpha > 0$, називаються інтегралами дробового порядку α . Перший з них називають інколи лівостороннім, а другий - правостороннім. Оператори I_{a+}^α , I_{b-}^α називають операторами дробового інтегрування.

Що стосується дробового диференціювання, от його слід ввести як операцію обернену дробовому інтегруванню.

Означення 2.2. Для функції $f(x)$, що задана на відрізку $[a, b]$, кожен із виразів

$$(D_{a+}^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^\alpha} \quad (2.4)$$

$$(D_{b-}^\alpha f)(x) = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_x^b \frac{f(t) dt}{(x-t)^\alpha} \quad (2.5)$$

називається дробовою похідною порядку α , $0 < \alpha < 1$, відповідно лівосторонньою і правосторонньою.

Дробові похідні (2.4), (2.5) називають зазвичай похідними Рімана-Ліувілля.

Перейдемо до дробових похідних більших порядків $\alpha \geq 1$. Будемо користуватися стандартними позначеннями: $[\alpha]$ - ціла частина числа α , $\{\alpha\}$ - дробова частина числа α , $0 \leq \{\alpha\} < 1$ так що

$$\alpha = [\alpha] + \{\alpha\} \quad (2.6)$$

Якщо α - ціле число, то під дробовою похідною порядку α будемо розуміти звичайне диференціювання:

$$D_{a+}^{\alpha} = \left(\frac{d}{dx} \right)^{\alpha}, \quad D_{b-}^{\alpha} = \left(-\frac{d}{dx} \right)^{\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots \quad (2.7)$$

Якщо ж α - не ціле, то правильно ввести за формулами

$$D_{a+}^{\alpha} f \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]} D_{a+}^{[\alpha]} f = \left(\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]+1} I_{a+}^{1-[\alpha]} f \quad (2.8)$$

$$D_{b-}^{\alpha} f \stackrel{\text{def}}{=} \left(-\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]} D_{b-}^{[\alpha]} f = \left(-\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]+1} I_{b-}^{1-[\alpha]} f \quad (2.9)$$

Таким чином

$$D_{a+}^{\alpha} f = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^{\alpha-n+1}}, \quad n = [\alpha] + 1 \quad (2.10)$$

$$D_{b-}^{\alpha} f = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \int_x^b \frac{f(t) dt}{(t-x)^{\alpha-n+1}}, \quad n = [\alpha] + 1 \quad (2.11)$$

Введеним при $\alpha > 0$ операціям дробового інтегрування I_{a+}^{α} , I_{b-}^{α} і дробового диференціювання D_{a+}^{α} , D_{b-}^{α} можна надати змісту і при комплексних значеннях α таких, що $\operatorname{Re} \alpha > 0$.

Наступна теорема дає достатні умови для існування дробових похідних будь-якого комплексного порядку α , $\operatorname{Re} \alpha \geq 0$ ([1]).

Теорема 2.1. Нехай $\operatorname{Re} \alpha \geq 0$ та функція $f(x)$ має абсолютно неперервну похідну порядку n , $n = [\operatorname{Re} \alpha] + 1$. Тоді $D_{a+}^{\alpha} f$ існує майже скрізь і може бути представлена у вигляді

$$D_{a+}^{\alpha} f = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{(1+k-\alpha)} (x-a)^{k-\alpha} + \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(t) dt}{(x-t)^{\alpha-n+1}} \quad (2.12)$$

Основний результат.

Теорема: Нехай $r \in (2; 3)$. Тоді $\forall n \in \mathbb{N} \exists f = f_{r,n} \in W'[0,1] \cap \Delta^2$, така, що $\forall p_n \in \Pi_n \cap \Delta^2$

$$\text{або} \quad \limsup_{x \rightarrow 0} \frac{|f(x) - p_n(x)|}{\varphi'(x)} = +\infty \quad (3.1)$$

$$\text{або} \quad \limsup_{x \rightarrow 1} \frac{|f(x) - p_n(x)|}{\varphi'(x)} = +\infty \quad (3.2)$$

де $\varphi(x) = \sqrt{x \cdot (1-x)}$.

Доведення: Нехай $r \in (2; 3)$ - фіксовано. Розглянемо функцію

$$f(x) = \begin{cases} \frac{b^{\frac{2}{k}} \cdot x}{2!} - \frac{\left(b^{\frac{1}{k}} - x\right)}{3!} + \frac{b^{\frac{1}{k}} \cdot x^2}{2!} + \frac{b^{\frac{2}{k}}}{3!} - \frac{b^{\frac{1}{k}}}{2!} \cdot \left(1 - b^{\frac{1}{k}}\right) \cdot x^{2+b^{\frac{2}{k}}}, & 0 \leq x \leq b^{\frac{1}{k}} \\ \frac{b^{\frac{2}{k}} \cdot x}{2!} + \frac{b^{\frac{1}{k}} x^2}{2!} + \frac{b^{\frac{2}{k}}}{3!} - \frac{b^{\frac{2}{k}}}{3!} - \frac{b^{\frac{1}{k}}}{2!} \cdot \left(1 - b^{\frac{1}{k}}\right) \cdot x^{2+b^{\frac{2}{k}}}, & b^{\frac{1}{k}} < x \leq 1, \end{cases}$$

де $b = \frac{1}{(cn^2)^\beta}$, $\beta = \text{const}$, $\beta > 0$, $c = \text{const}$, а число $k > 0$ вибираємо з умов

$$\begin{cases} \frac{1,2}{k} > \frac{8}{10-r} \cdot \log_b \frac{1}{2} \\ \frac{1}{k} < \frac{r-2}{10-r} \cdot \log_b \frac{1}{2} \end{cases}$$

Побачимо, що $f(0) = f'(0) = f''(0) = 0$.

1. Доведемо що f опукла вниз. Оскільки $f'''(x) > 0$, $x \in (0, 1]$, то f'' зростає на $[0, 1]$ і враховуючи, що $f''(0) = 0$, маємо $f''(x) \geq 0$, $x \in [0, 1]$. Тому функція f опукла вниз на $[0, 1]$.

2. Розглянемо числа $y_1 = \frac{8}{10-r} \cdot \log_b \frac{1}{2}$, $y_2 = \frac{r-2}{10-r} \cdot \log_b \frac{1}{2}$. Бачимо, що

$$y_1 = y_2 + \log_2 \frac{1}{2}, \quad y_2 = \frac{r-2}{8} y_1, \quad y_1, y_2 \in \left(\frac{1}{k}; \frac{1,2}{k}\right). \quad \text{Тоді } \exists x < b^{\frac{1}{k}} \text{ таке, що}$$

$$\frac{x}{2} = b^{y_1} \text{ і } x = b^{y_2}.$$

Нехай (3.1) не виконується. Тоді

$$\exists A = \text{const} : |f(x) - p_n(x)| \leq A \cdot x^{\frac{r}{2}}, \quad x \in \left[0, b^{\frac{1}{k}}\right]$$

де $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^2$.

Отже, за теоремою Лагранжа $\exists \mu \in \left(\frac{x}{2}; x\right)$:

$$A \cdot x^{\frac{r}{2}} + \frac{A}{2^{\frac{r}{2}}} \cdot x^{\frac{r}{2}} \geq \left| f(x) - p_n(x) - f\left(\frac{x}{2}\right) + p_n\left(\frac{x}{2}\right) \right| = \frac{x}{2} \cdot |f'(\mu) - p'_n(\mu)|,$$

звідки

$$|f'(\mu) - p'_n(\mu)| \leq A_1 \cdot b^{y_2 \frac{r}{2} y_1} = A_1 \cdot b^{y_1 \frac{r-2}{2} \frac{r}{2} \log_b \frac{1}{2}}, \quad (3.3)$$

де $A_1 = \text{const}$.

З (4) та нерівності Маркова випливає:

$$2n^2 \cdot p_n(1) \geq p_n'(\mu) \geq f'(\mu) - A_1 \cdot b^{\frac{r-2}{2}y_1 - \frac{r}{2}\log_b \frac{1}{2}} \quad (3.4)$$

Зауважимо, що $\exists y: \mu = b^y$ і $y_1 > y < y_2$

Розглянемо похідну:

$$\begin{aligned} f'(\mu) = f'(b^y) &= -\frac{b^{\frac{2}{k}}}{2!} + \frac{\left(b^{\frac{1}{k}} - b^y\right)^2}{2!} + \frac{b^{\frac{1}{k}}}{1!} b^y - \frac{b^{\frac{1}{k}} \cdot \left(2 + b^{\frac{2}{k}}\right) \cdot \left(1 - b^{\frac{1}{k}}\right)}{2!} \cdot b^{y+y\frac{2}{k}} \sim \\ &\sim -\frac{b^{2y}}{2!} - \frac{b^{\frac{1}{k}} \cdot \left(2 + b^{\frac{2}{k}}\right) \cdot \left(1 - b^{\frac{1}{k}}\right)}{2!} \cdot b^{y+y\frac{2}{k}} \sim -\frac{b^{2y}}{2!} - \frac{3}{2} b^{\frac{1}{k}+y+y\frac{2}{k}}. \end{aligned}$$

Оскільки $f'(\mu) > 0$, то $\frac{1}{k} < y < \frac{1}{k\left(1 - b^{\frac{2}{k}}\right)}$ і виконується

$$f'(\mu) \geq A_2 \cdot b^{2y}, \quad A_2 = \text{const.}$$

З останньої нерівності та нерівності (3.4) випливає оцінка

$$2n^2 \cdot p_n(1) \geq A_1 \cdot b^{2y} - A_1 \cdot b^{\frac{r-2}{2}y_1 - \frac{r}{2}\log_b \frac{1}{2}} \quad (3.5)$$

У наслідок оцінки $y < \frac{1}{k\left(1 - b^{\frac{2}{k}}\right)}$, маємо $y < \frac{r-2}{10-r} \cdot \log_b \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1 - b^{\frac{2}{k}}} < \frac{r-2}{6} \cdot y_1$

і виконується нерівність $2 \cdot y < y_1 \frac{r-2}{2} - \frac{r}{2} \log_b \frac{1}{2}$.

Остання нерівність зумовлює оцінку $2n^2 \cdot p_n(1) \geq A_3 \cdot b^{2y}$, $A_3 = \text{const}$, або, що те саме,

$$p_n(1) \geq \frac{A_3 b^{2y}}{2n^2} = 2 \cdot c A_3 b^{2y + \frac{1}{\beta}} \quad (3.6)$$

Очевидно, $f(1) = \frac{b^{\frac{3}{k}}}{3!}$. Нехай $\beta = 2k$, тоді $2y + \frac{1}{\beta} = 2y + \frac{1}{2k} < \frac{3}{k}$.

Тому завжди можна вибрати сталу c в означенні числа β таким чином, що $\frac{b^{\frac{3}{k}}}{3!} < 2 \cdot c A_3 b^{2y + \frac{1}{\beta}}$. Остання нерівність означає, що $p_n(1) > f(1)$.

3. Доведемо, що $D_{0+}^r f$ обмежена. За теоремою 2.1 маємо

$$D_{0+}^r f = \frac{1}{\Gamma(3-r)} \cdot \int_0^x \frac{f^{(3)}(t) dt}{(x-t)^{r-2}} + \sum_{k=0}^2 \frac{f^{(k)}(0)}{\Gamma(3+k-r)} \cdot x^{k-r}, \quad x > 0.$$

Тому

$$D_{0+}^r f = \frac{1}{\Gamma(3-r)} \left(\int_0^x \frac{1}{(x-t)^{r-2}} dt + \int_0^x \frac{c_1}{(x-t)^{r-2} \cdot x^{1-b^{\frac{1}{k}}}} dt \right), \quad 0 < x < b^{\frac{1}{k}}$$

і

$$D_{0+}^r f = \frac{1}{\Gamma(3-r)} \left(\int_0^x \frac{1}{(x-t)^{r-2} \cdot x^{1-b^{\frac{1}{k}}}} dt \right), \quad b^{\frac{1}{k}} \leq x \leq 1$$

де $c_1 = \text{const}$.

Умови $r-2 < 1$ і $1-b^{\frac{1}{k}} < 1$ спричиняють збіжність усіх інтегралів у правих частинах рівностей. Тому $D_{0+}^r f$ обмежена. Таким чином $f \in W^r[0,1] \cap \Delta^2$ і теорему повністю доведено.

Література

1. Saniko, S.G, Kilbas A.A., Marichev O.L Fractional integrals and derivatives: theory and applications // ScL Publ. -London, 1987.
2. Gopengauz A.L Pointwise estimates of Hermitian interpolation // J. Approx. Theory. - 1994. - Vol. 77. -P. 31-41.
3. Gonska H.H., Leviatan D., Shevchuk L.A., Wenz H.-J. Interpolatory pointwise estimates for polynomial approximation // Constr. Approx. - 2000 - №16.-P. 603-629.
4. Петрова Т.О. Про поточкові інтерполяційні оцінки монотонного наближення функцій, що мають дробову похідну. // Вісник Випуск 10. - 2003 р. ст. 125-127.
5. Петрова Т.О. Контрприклад у інтерполяційному опуклому наближенні. Теорія набл. функцій та суміжні пит., праці ІМ НАН України, том 35, с. 107-113, 2002 р.

Надійшла до редакції 30.10.2006

УДК 517.9

Макар В. Плахотник,
Володимир В. Федоренко,
Юлія В. Федоренко

Одновимірні динамічні системи з обмеженими у сукупності потужностями орбіт^{*)}

Наведено критерії того, що неперервна на одновимірному многовиді функція, породжує динамічну систему, потужності орбіт якої обмежені у сукупності, та уточнено ці критерії для випадку диференційованої функції.

Ключові слова: динамічна система, орбіта, ω -гранична множина, цикл.

E-mail: makar_plakhotnyk@ukr.net

Вступ

Комбінаторна динаміка – розділ теорії маловимірних динамічних систем, який бере початок з теореми Шарковського про співіснування періодів періодичних орбіт динамічної системи, породженої неперервним відображенням прямої в себе. В цьому розділі вивчаються властивості об'єктів комбінаторики – графів, підстановок (відображень скінченної множини в себе), і т.д., які знаходять застосування в теорії динамічних систем. До цього часу в основному увага була спрямована на дослідження типів періодичних орбіт (підстановок, які породжуються обмеженням відображення на періодичну орбіту). Це зумовило те, що в класифікації Американського математичного товариства в 2000 році поряд з назвою комбінаторна динаміка з'явилося уточнення "типи періодичних орбіт". Клас динамічних систем, породжених підстановками, є найпростішим в тому сенсі, що кожна орбіта таких динамічних систем скінченна і містить в собі періодичну орбіту, або ж співпадає нею і, більш того, всі орбіти таких динамічних систем обмежені у сукупності: існує таке натуральне число, що потужність орбіти кожної точки обмежена цим числом. Тому, виходячи з мети комбінаторної динаміки, природно до кола питань цього розділу теорії динамічних систем включити ще і вивчення динамічних систем, кожна орбіта яких скінченна.

Makar V. Plakhotnyk,
Volodymyr V. Fedorenko,
Yulia V. Fedorenko

One-dimensional dynamical systems, whose cardinalities of orbits are uniformly bounded

Criteria for continuous function, which generates the dynamical system on one-dimensional manifold and has uniformly bounded cardinalities of orbits are given and they are specified for the case of differentiable function.

Key words: dynamical system, orbit, ω -limit set, cycle.

^{*)} Робота частково підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень Міністерства освіти і науки України, проект № 01.07/00081.

Залежно від фазового простору та гладкості відображення, яке породжує динамічну систему зі скінченними орбітами, відображення мають свою специфіку, але мають і загальні властивості. В роботі спочатку описуються найпростіші загальні властивості динамічних систем, які мають тільки скінченні, або обмежені у сукупності орбіти (леми 1 – 4). Основна увага зосереджена на властивостях неперервних та гладких відображень інтервалу та кола з обмеженими у сукупності орбітами (теореми 1 – 6).

Нехай X – компакт, f – відображення X в себе, $f^n = f(f^{n-1})$ – n -а ітерація відображення f , $n = 1, 2, \dots$, де f^0 – тотожне відображення. Послідовність $(x_n = f^n(x), n = 0, 1, 2, \dots)$ називається траєкторією точки $x_0 \in X$ відображення f , а множина її значень $\{x_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ називається орбітою цієї точки. Траєкторія і орбіта точки $x \in X$ позначаються відповідно $tr(x)$ та $orb(x)$. Точка $x \in X$ називається нерухомою точкою відображення f , якщо $f(x) = x$. Точка $x \in X$ називається періодичною періоду p , якщо $f^p(x) = x$ та $f^n(x) \neq x$ для кожного $n = 1, 2, \dots, p-1$. Множину нерухомих і періодичних точок відображення f позначимо відповідно $Fix(f)$ і $Per(f)$. Орбіта періодичної точки називається циклом. $\omega_f(x) = \bigcap_{n \geq 0} \overline{\bigcup_{j \geq n} f^j(x)}$ – ω -гранична множина точки $x \in X$ відображення f . $\omega(f) = \bigcup_{x \in X} \omega_f(x)$ – множина всіх ω -граничних точок відображення f . Потужність множини M позначається $card(M)$.

Лема 1. Для динамічної системи (X, f) наступні твердження еквівалентні:

- 1) орбіта динамічної системи (X, f) будь-якої точки скінченна;
- 2) орбіта динамічної системи (X, f^n) будь-якої точки скінченна при кожному цілому $n > 0$;
- 3) для кожного $x \in X$ існують такі цілі числа $n(x) \geq 0$ та $p(x) > 0$, що має місце рівність $f^{n(x)}(x) = f^{n(x)+p(x)}(x)$.

Лема 2. Якщо орбіта динамічної системи (X, f) скінченна, то її ω -гранична множина є циклом, а отже $Per(f) = \omega(f)$.

Динамічна система, кожна орбіта якої скінченна, може мати періодичні точки як завгодно великого періоду, а, отже, потужності її орбіт можуть не бути обмеженими у сукупності. Така динамічна система породжується, зокрема, поточково періодичним відображенням f , тобто таким, для якого $X = Per(f)$. Поточково періодичні відображення є взаємно-однозначними і досліджувались в [1]. В [2] побудовано приклад неперервного відображення інтервалу в себе, кожна орбіта якого скінченна.

відображення має періодичні точки як завгодно великого періоду, а також неперіодичні орбіти. В [3] досліджувались властивості напівгруп ітерацій неперервних відображень інтервалу дійсної прямої, які задовольняють умові $f^n(x) = f^{n+p}(x)$ для кожного x з інтервалу.

Лема 3. Для динамічної системи (X, f) наступні твердження еквівалентні:

- 1) орбіти динамічної системи (X, f) обмежені у сукупності;
- 2) орбіти динамічної системи (X, f^n) обмежені у сукупності при кожному цілому $n > 0$;
- 3) існують такі цілі числа $n \geq 0$ та $p > 0$, що має місце рівність $f^n(x) = f^{n+p}(x)$ для кожного $x \in X$;
- 4) існують такі цілі числа $n \geq 0$ та $p > 0$, що $f^n(X) = \text{Fix}(f^p)$;
- 5) напівгрупа ітерацій функції f скінченна.

Лема 4. Якщо X – зв'язний компакт, f – неперервне відображення X в себе і орбіти динамічної системи (X, f) обмежені у сукупності, то $\text{Per}(f)$ – зв'язний компакт.

Зауважимо, що при виконанні умов леми 4 множина $\text{Fix}(f)$ може бути незв'язною, але обов'язково замкненою.

Далі розглядаються динамічні системи на одновимірних зв'язних компактних многовидах, тобто на замкненому інтервалі або колі.

1. Неперервні відображення інтервалу з обмеженими у сукупності орбітами

Нехай тепер $X = [0, 1]$ – замкнений інтервал дійсної прямої, який позначимо I , $f \in C^0(I, I)$ ($C^1(I, I)$) – неперервне (один раз диференційоване) відображення інтервалу I в себе. Клас відображень $f \in C^0(I, I)$ зі скінченними орбітами належить (але не співпадає) класу відображень, у яких кожна ω -гранична точка є циклом. Властивості відображень $f \in C^0(I, I)$, кожна ω -гранична множина яких є циклом, описані в [4].

Лема 5. Якщо $f \in C^0(I, I)$ має періодичну точку періоду m , $m > 2$, то орбіти відображення не є обмеженими у сукупності.

Доведення. Нехай V – періодична орбіта періоду m , $m > 2$, яка складається з точок $\beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_m$. Позначимо через $\beta_0 = \max\{\beta \notin V \mid f(\beta) > \beta\}$ (множина $\{\beta \in V \mid f(\beta) > \beta\}$ непорожня). Оскільки $\beta_0 \neq \beta_m$, то множина $\{\beta \in V \mid \beta > \beta_0\}$ теж непорожня. Нехай $\beta_1 = \min\{\beta \in V \mid \beta > \beta_0\}$. Оскільки $m > 2$, то або $f(\beta_0) \neq \beta_1$, або $f(\beta_1) \neq \beta_0$. Нехай для визначеності $f(\beta_0) \neq \beta_1$. В силу вибору точок β_0 і β_1 , маємо, що $V \cap (\beta_0, \beta_1) = \emptyset$. Звідси $f(\beta_1) \leq \beta_0 < \beta_1 < f(\beta_0)$, або

$f[\beta_0, \beta_1] \supset [\beta_0, \beta_1]$. З цієї властивості випливає існування послідовності точок $(y_i, i=1, \dots)$ такої, що 1) $f(y_1) = \beta_1$, 2) $f(y_{i+1}) = y_i$, $i=1, 2, \dots$, 3) $\beta_0 < y_1 < y_2 < \dots < y_{2k+1} < y_{2k+2} < \dots < y_{2k+3} < y_{2k+4} < \dots < y_4 < y_2 < \beta_1$. Отже, для будь-якого i , $\text{card}(\text{orb}(y_i)) = i + m$, тобто орбіти відображення не є обмежені у сукупності.

Лема 5 еквівалентна наступній лемі.

Лема 6. Якщо орбіти відображення $f \in C^0(I, I)$ обмежені у сукупності, то періоди точок можуть дорівнювати лише 1 або 2, тобто $\text{Per}(f) = \text{Fix}(f^2)$.

Лема 7. Якщо орбіти відображення $f \in C^0(I, I)$ обмежені у сукупності, то $\text{Fix}(f)$ – замкнений інтервал (можливо вироджений).

Доведення леми 7 аналогічне доведенню леми 5.

Теорема 1. Для $f \in C^0(I, I)$ наступні твердження еквівалентні:

- 1) існують $n \geq 1$, $m > n$ такі, що $f^n(x) = f^m(x)$ для будь-якого $x \in I$;
- 2) існує $k \geq 1$ таке, що $f^{k+2}(x) = f^k(x)$ для будь-якого $x \in I$;
- 3) існує N таке, кожна орбіта відображення f містить не більше, ніж N точок.

Теорема 1 випливає з леми 3 та леми 6.

В силу леми 6, рівність $f^n(x) \equiv f^m(x)$ при $n=0$ еквівалентна рівності $f^2(x) \equiv x$. Тому в силу теореми 1, рівність $f^n(x) \equiv f^m(x)$ доцільно розглянути у випадку $n=1$ та $m=2$, або 3.

Теорема 2. Для $f \in C^0(I, I)$ наступні твердження еквівалентні.

- 1) $f^2(x) = f(x)$ для будь-якого $x \in I$;
- 2) $f^n(x) = f(x)$ для будь-якого $x \in I$ при кожному натуральному n ;
- 3) $f(x)$ – нерухома точка відображення f для будь-якого $x \in I$;
- 4) для відображення f існують дійсні числа a і b такі, що $0 \leq a \leq b \leq 1$, а будь-яка точка $x \in [a, b]$ є нерухомою точкою відображення f і $f(I) = [a, b]$;
- 5) для відображення f існують дійсні числа a і b і відображення $g \in C^0([0, a], [a, b])$, $h \in C^0([b, 1], [a, b])$ такі, що $0 \leq a \leq b \leq 1$, а відображення f можна представити наступним чином

$$f(x) = \begin{cases} g(x), & 0 \leq x \leq a, \\ x, & a \leq x \leq b, \\ h(x), & b \leq x \leq 1. \end{cases}$$

Еквівалентність тверджень 1) та 5) наведена в роботах [5] та [6]. Замість доведення теореми 2 доведемо теорему, яка описує властивості більш широкого класу відображень.

Теорема 3. Для $f \in C^0(I, I)$ наступні твердження еквівалентні:

- 1) існує $n \geq 3$ таке, що $f^n(x) = f(x)$ для будь-якого $x \in I$;
- 2) $f^3(x) = f(x)$ для будь-якого $x \in I$;
- 3) $f^{2^k+1}(x) = f(x)$ для будь-якого $x \in I$ при кожному натуральному k ;
- 4) для відображення f існують дійсні числа a і b такі, що $0 \leq a \leq b \leq 1$, а будь-яка точка $x \in [a, b]$ є нерухомою точкою відображення f^2 і $f(I) = [a, b]$;

5) $f(x)$ – нерухома точка відображення f^2 для будь-якого $x \in I$;

6) для відображення f існують дійсні числа a і b і відображення $g \in C^0([0, a], [a, b])$, $h \in C^0([b, 1], [a, b])$ та $\varphi \in C^0([a, b], [a, b])$ – відображення, графік якого симетричний відносно діагоналі $y = x$, причому $\varphi([a, b]) = [a, b]$ такі, що $0 \leq a \leq b \leq 1$, а відображення f можна представити наступним чином

$$f(x) = \begin{cases} g(x), & 0 \leq x \leq a, \\ \varphi(x), & a \leq x \leq b, \\ h(x), & b \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (1)$$

Доведення. $(2 \Rightarrow 1)$: тривіально.

$(1 \Rightarrow 2)$: Зафіксуємо довільне $x_0 \in [a, b]$. Оскільки $f^n(x) \equiv f(x)$, то $f(x_0)$ – нерухома точка f^{n-1} . Тому точка $f(x_0)$ є періодичною відображення f , і її період не більший за $n-1$. Нагадаємо, що за теоремою Шарковського [7], з існування періодичною точки періоду m випливає існування періодичних точок всіх періодів m_i , де $m \prec m_i$ і $\prec$ – порядок Шарковського, який влаштований таким чином:

$$3 \prec 5 \prec 7 \prec 9 \prec \dots \prec 2 \cdot 3 \prec 2 \cdot 5 \prec 2 \cdot 7 \prec 2 \cdot 9 \prec \dots \prec 2^l \prec 2^{l+1} \prec \dots \prec 4 \prec 2 \prec 1.$$

Легко бачити, що з існування періодичної точки довільного періоду вигляду $2^l(2k+1)$, де $k \neq 0$ випливає існування періодичних точок, періоди яких не обмежені в сукупності, що суперечить умові про те, що $f^n(x) \equiv f(x)$, з якої випливає обмеженість потужностей всіх орбіт. Тому довільна періодична точка функції f має період, що є степенем двійки.

Враховуючи лему 5, і те, що згідно з теоремою Шарковського існування періодичної точки періоду 4 випливає з існування періодичної точки довільного періоду, що більший 4 маємо, що всі періодичні точки функції f є нерухомі, або періоду 2.

Оскільки $f^n = f$, то для кожного $x_0 \in f([0, 1])$, точка $f(x_0)$ є періодичною, а відтак є або нерухомою, або має період 2, звідки випливає, що $f^3(x_0) = f(x_0)$ для кожної точки $x_0 \in [0, 1]$, що і було потрібно довести.

(2 $\Rightarrow$ 3): доводитимемо індукцією за k . База індукції $k = 1$ очевидна. Нехай для кожного $x \in [0, 1]$ $f^{2k+1}(x) = f(x)$. Тоді

$$f^{2(k+1)+1}(x) = f^{2k+3}(x) = f^3(f^{2k}(x)) = f(f^{2k}(x)) = f^{2k+1}(x) = f(x),$$

що і було потрібно.

(3 $\Rightarrow$ 2): Очевидно, якщо покласти $k = 1$.

(2 $\Rightarrow$ 4): Оскільки f неперервна, то інтервал $[0, 1]$ під дією f перейде в деякий інтервал $[a, b]$. Покажемо, що довільна точка $x \in [a, b]$ є нерухомою для відображення f^2 . Оскільки $x \in f([0, 1])$, то існує така $y \in [0, 1]$, що $f(y) = x$. Оскільки $f^3 \equiv f$, то $f^2(f(y)) = f(y)$, тобто $f^2(x) = x$, що і потрібно було довести.

(4 $\Rightarrow$ 2): Зафіксуємо довільну точку $x_0 \in [0, 1]$. Оскільки $f([0, 1]) = [a, b]$, то $y = f(x_0) \in [a, b]$. Оскільки кожна точка $x \in [a, b]$ є нерухомою для f^2 , то $f^2(y) = y$, що те саме, що і $f^2(f(x_0)) = f(x_0)$, тобто $f^3(x_0) = f(x_0)$, що і було потрібно довести, в силу довільності x_0 .

(4 $\Rightarrow$ 5): Оскільки $f([0, 1]) = [a, b]$, то для кожного $x \in [0, 1]$, $f(x) \in [a, b]$. Оскільки кожна точка $x \in [a, b]$ є нерухомою для f^2 , то для кожного $x \in [0, 1]$, $f(x)$ є нерухомою для f^2 .

(5 $\Rightarrow$ 4): Оскільки f неперервна, то інтервал $[0, 1]$ під дією f переходить в деякий інтервал $[a, b]$. Для будь-якої точки $x \in [a, b]$ існує така $y \in [0, 1]$, що $x = f(y)$. Оскільки $f(y)$ є нерухомою для f^2 , то x також є нерухомою точкою для f^2 .

(4 $\Rightarrow$ 6): Оскільки f неперервна, то існують такі a та b , що $f([0, 1]) = [a, b]$. Подамо f у вигляді (1). Оскільки $f([0, 1]) = [a, b]$, то очевидно, що $f([a, b]) \subseteq [a, b]$. Нехай $a \notin f([a, b])$. Тоді $a \notin f^2([a, b])$, але це суперечить тому, що a є нерухомою точкою f^2 , і доводить, що $a \in f([a, b])$. Аналогічно, якщо $b \notin f([a, b])$, то $b \notin f^2([a, b])$, що суперечить тому, що b є нерухомою для f^2 , звідки маємо, що $\varphi([a, b]) = [a, b]$.

Оскільки $f([0, 1]) = [a, b]$, то $g([0, a]) \subseteq [a, b]$ та $h([b, 1]) \subseteq [a, b]$, звідки $g \in C^0([0, a], [a, b])$, та $h \in C^0([b, 1], [a, b])$.

Залишилось показати, що графік φ симетричний відносно прямої $y = x$. Розглянемо довільну точку $x_0 \in [a, b]$. Оскільки за умовою вона є нерухомою для відображення f^2 , то до графіка функції f належать як точка $A = (x, f(x))$, так і точка $B = (f(x), f^2(x)) = (f(x), x)$. Легко бачити, що точки A та B симетричні відносно прямої $y = x$, що, в силу довільності вибору x , доводить потрібне.

($6 \Rightarrow 4$): Оскільки $\varphi([a, b]) = [a, b]$, то $f[0, 1] \supseteq [a, b]$. Оскільки ще $g \in C^0([0, a], [a, b])$, та $h \in C^0([b, 1], [a, b])$, то $f([0, 1]) = [a, b]$. Оскільки графік функції φ симетричний відносно прямої $y = x$, то для довільної точки $x \in [a, b]$ отримаємо, що точка $A = (x, \varphi(x))$ належить графіку f , звідки $B = (\varphi(x), x)$ також належить графіку f , що означає, що $f(\varphi(x)) = f^2(x) = x$ для кожної точки $x \in [a, b]$.

В [8] доведено, що з локальної поведінки графіка неперервного відображення, яке породжує динамічну систему з обмеженими у сукупності орбітами впливає глобальна, що дає повний опис неперервних відображень інтервалу в себе, орбіти яких обмежені у сукупності, тобто у випадку, коли рівність $f^n(x) \equiv f^{n+2}(x)$ виконується при $n > 1$.

2. Диференційовні відображення інтервалу з обмеженими у сукупності орбітами

Теорема 4. Для $f \in C^1(I, I)$ твердження 1)-5) теореми 2 еквівалентні твердженню:

б) або відображення f є відображенням $f(x) \equiv x$, або існує $a \in I$ таке, що $f(x) \equiv a$ для будь-якого $x \in I$.

Доведення. Нехай функція f не є тотожно сталою, і $f([0, 1]) = [a, b]$.

Якщо $a = 0$; $b = 1$, то $f(x) \equiv x$ на $[0, 1]$, і твердження очевидне. Інакше $a > 0$, або $b < 1$. Нехай $a > 0$. Оскільки $f(x) = x$, $x \in [a, b]$, то похідна f' в точці $a \in f'(a) = 1$, що суперечить тому, що точка a є точкою мінімуму f , і доводить теорему.

Аналогічно доводиться випадок, коли $b < 1$. Для нього $f'(b-) = 1$, але $f'(b+) < 0$, що також суперечить неперервності f' .

Теорема 5. Для $f \in C^1(I, I)$ твердження 1)-6) теореми 3 еквівалентні твердженню:

7) або відображення f є відображенням, графік якого симетричний відносно діагоналі $y = x$, або існує $a \in I$ таке, що $f(x) \equiv a$ для будь-якого $x \in I$.

Доведення. Оскільки $f^3 \equiv f$, то $f^4 \equiv f^2$. Розглянемо функцію $g(x) = f^2(x)$. Оскільки $f^4 \equiv f^2$, то $g^2 \equiv g$. Оскільки f диференційована, то $g = f^2$ також диференційована і задовольняє умови теореми 2, звідки $g(x) \equiv x$, або g тотожно стала.

Нехай $g(x) \equiv x$. Це означає, що $g([0, 1]) = f^2([0, 1]) = [0, 1]$, звідки $f([0, 1]) = [0, 1]$. Згідно з пунктом 6 теореми 3 в цьому разі графік f симетричний відносно прямої $y = x$, що і потрібно.

Нехай тепер $g(x) \equiv p$ для деякого $p \in [0,1]$. Оскільки за пунктом 6 теорема 3 $f([a,b]) = [a,b]$, де $[a,b]$ - образ відрізка $[0,1]$ під дією f , то $g([a,b]) = f^2([a,b]) = [a,b] = \{p\}$, тобто $f([0,1]) = \{p\}$, що означає, що f є тотожно сталою.

Зауважимо також, що множина гладких відображень, графік яких симетричний відносно діагоналі $y = x$ не обмежується одним відображенням $f(x) = x$, а існують й інші, наприклад відображення $f(x) = 1 - x$, або навіть однопараметрична сім'я аналітичних відображень $f(x) = -a + \sqrt{a^2 + (a+1)^2 - (x+a)^2}$, де a - додатне дійсне число.

3. Неперервні відображення кола з обмеженими у сукупності орбітами

Нехай S^1 - коло радіусу $\frac{1}{2\pi}$ на площині і f - неперервне відображення кола в себе. Нехай s_1, s_2 - точки на колі. Позначимо через $\langle s_1, s_2 \rangle$ дугу кола від точки s_1 до точки s_2 в додатному напрямку обходу. Зауважимо, що дуга гомеоморфна до інтервалу. Поворотом кола називається відображення $x \rightarrow (x + \alpha) \bmod 1$, де α - параметр, $x \in S^1$. Якщо $\alpha = \frac{p}{q} \in S^1$, то кожна точка $x \in S^1$ є періодичною періоду q .

Теорема 6. Нехай $f \in C^0(S^1, S^1)$, орбіти якого обмежені у сукупності. Тоді f має тільки одну з наступних властивостей:

- 1) $f(x) = x$ для всіх $x \in S^1$;
- 2) f має дві нерухомі точки s_1 та s_2 , причому $f(\langle s_1, s_2 \rangle) = \langle s_2, s_1 \rangle$, а $f(\langle s_2, s_1 \rangle) = \langle s_1, s_2 \rangle$;
- 3) відображення f топологічно спряжене з поворотом кола на раціональний кут;
- 4) $f(S^1) \subset f(S^1)$, а отже f на $f(S^1)$ має властивості, наведені в теоремах 1, 2 і 3.

Якщо $f \in C(S^1, S^1)$, то можемо розглянути випадки, коли $f(S^1) \subset S^1$, або $f(S^1) = S^1$. Нехай $f(S^1) \subset S^1$. В цьому разі множина $f(S^1)$ ізоморфна замкненому інтервалу $[0,1]$ і $f(f(S^1)) \subseteq f(S^1)$. Отже f на $f(S^1)$ також

Нехай тепер $f(S^1) = S^1$. Оскільки орбіти f обмежені у сукупності, то в силу леми 4 $Per(f)$ замкнена не порожня зв'язна множина. Тому існує k таке, що $Fix(f^k) \neq \emptyset$. Нехай $k = 1$, тобто $Fix(f) \neq \emptyset$ і існує $\beta \in Fix(f)$. Нехай $\langle s_1, s_2 \rangle$ - та максимальна замкнена дуга, що $\beta \in \langle s_1, s_2 \rangle$ (можливо $\beta = s_1 = s_2$).

Якщо $s_1 \neq s_2$, то f на $\langle s_1, s_2 \rangle$ топологічно спряжене з неперервним відображенням інтервалу в себе, кінцями якого є нерухомі точки. Аналогічно до того, як це зроблено в доведенні леми 5, можна показати, що таке відображення або тотожне, або його орбіти не є обмеженими у сукупності. Тому f на $\langle s_1, s_2 \rangle$ є тотожним відображенням.

Таким чином, якщо $\text{Fix}(f)$ містить невироджений інтервал, то f тотожне відображення.

Нехай тепер $\text{Fix}(f)$ не містить інтервалів. Покажемо, що якщо $\text{card}(f) \geq 3$, то f має орбіти, необмежені у сукупності. Нехай $s_i \in \text{Fix}(f)$, $i = 1, 2, 3$. Тоді або $f(\langle s_1, s_2 \rangle) \supseteq \langle s_1, s_2 \rangle$, або $f(\langle s_2, s_1 \rangle) \supseteq \langle s_2, s_1 \rangle$, отже $\text{card}(\text{Fix}(f)) \leq 2$. Якщо $\text{card}(\text{Fix}(f)) \leq 2$, то $f^2(\langle s_1, s_2 \rangle) = \langle s_1, s_2 \rangle$ і отже $f^2(x) = x$ і має місце випадок 2) теореми.

Розглянемо тепер випадок, коли $\text{card}(\text{Fix}(f)) = 1$. Нехай $\beta = \text{Fix}(f)$, а $x \in S^1 \setminus \{\beta\}$. Розглянемо дуги $S_1 = \langle \beta, x \rangle$, $S_2 = \langle x, \beta \rangle$ та їх образи. Оскільки $f(S^1) = S^1$, то якщо $f(S_1) \subset S_1$, то отримаємо $f(S_2) \supset S_2$, а отже орбіти f не є обмежені у сукупності. Таким чином $f(S_1) = S_1$, а отже існує ще одна нерухома точка. Тому випадок $\text{card}(\text{Fix}(f)) = 1$ неможливий для відображення з обмеженими у сукупності орбітами з умови $f(S^1) = S^1$.

Розглянемо тепер випадок $\text{Fix}(f^i) = \emptyset$ для всіх $i = 1, \dots, k-1$ та $\text{Fix}(f^k) \neq \emptyset$. Як показано вище, в цьому випадку для f^k виконано умови 1) або 2) теореми. Але умова 2) неможлива. Дійсно, якщо f^k має точки періодів 1 і 2, то f мусить мати точку періоду k , що дасть існування принаймні k нерухомих точок для відображення f^k звідки випливає, що f має більше ніж дві нерухомі точки.

Таким чином кожна точка кола є періодичною періодичну k , що означає, що f топологічно спряжене раціональному повороту кола.

І насамкінець зауважимо, що остання теорема залишиться правильною, якщо в її формулюванні замінити коло на одновимірний компактний зв'язний многовид.

Література

- [1] G. T. Whyburn, Analytic topology, New York: American mathematical society, Colloquim publications, v. XXVIII, 1942.
- [2] А. Н. Шарковский, О циклах и структуре непрерывного отображения, Укр. матем. журн., т. 17, № 3, 1965.
- [3] Е. Yu. Romanenko, Limit properties of the semigroup generated by a continuous map of an intervals, Доповіді НАН України, № 3, 1998.
- [4] A. N. Sharkovsky, S. F. Kolyada, A. G. Sivak, V. V. Fedorenko, Dynamics of One-Dimensional Maps. Kluwer Academic Publishers, 1997, 272 P.

[5] Г. П. Пелюх, А. Н. Шарковский, Введение в теорию функциональных уравнений, Киев: Наукова думка, 1974, 119 с.

[6] А. Н. Шарковский, О функциональных и дифференциально-функциональных уравнениях, у которых отклонение аргумента зависит от неизвестной функции. В кн: Дифференциальные и дифференциально-разностные уравнения, Киев: Ин-т математики АН УССР, 1974.

[7] А. Н. Шарковский, Существование циклов непрерывного преобразования прямой в себя, Укр. матем. журн., т. 16, № 1, 1964.

[8] М. В. Плахотник, Зображення скінченних циклических напівгруп неперервними відображеннями інтервалу, Вісник Київського університету 2006 № 3.

Надійшло до редакції 30. 10. 2006

УДК 517.925

Наталія В. Шарай

Про дослідження деякої напів'явної системи диференціальних рівнянь

Досліджується задача Коші для напів'явної системи звичайних диференціальних рівнянь. Одержані достатні умови існування аналітичних розв'язків задачі Коші навколо особливої точки.

Ключові слова: сингулярна задача Коші, аналітичні розв'язки, асимптотичне поведіння розв'язків

Nataliya V. Sharay

About the investigation of some semi-obvious system of differential equations

We study Cauchy problem for a semi-explicit system of ordinary differential equations and obtain sufficient conditions for existence of case of 1 analytical solutions of the Cauchy problem in a vicinity of a singular point.

Key Words: singular Cauchy problems, analytical solutions, asymptotic solutions behaviour

E-mail: rusnut@renome-i.net

1. Вступ

Розглядається задача Коші

$$\begin{cases} A(z)Y' = B(z)Y + F(z, Y) \\ Y(z) \rightarrow 0, z \rightarrow 0 \end{cases} \quad (1) \quad (2)$$

де однозначні матриці $A, B: D \rightarrow G_1 \times G_2$ розміру $m \times n$ аналітичні в області $D \subseteq C$; $0 \in D$ або $0 \in \partial D$; $G_1 \times G_2 \subseteq C^{m \times n}$, $(0, 0) \in \partial(G_1 \times G_2)$; однозначна функція $F: D \times G_2 \rightarrow G_1$ аналітична в $D \times G_2$. Припустимо, що $m \neq n$, т.ч. жмук матриць $A(z)\lambda + B(z)$ є сингулярним.

Дослідження систем диференціальних рівнянь (1) для лінійних систем у випадку сталого жмутка матриць було покладено Ф.Гантмахером. Ці дослідження стали передумовою для розповсюдження досліджень на випадки, коли жмук матриць $A(x)\lambda + B(x)$ стає змінним. У цьому напрямку слід відзначити роботи А.М.Самойленка, М.І.Шкиля, І.І.Старуна, В.П.Яковця, П.Ф.Самусенка, Ю.Є.Боярінцева, В.Ф.Чистякова, R.März, St.Campbell, А.Г.Руткаса та багатьох інших. В комплексній області такі дослідження проведені, в основному, для систем спеціального вигляду в роботах P.Bungart, W.Strodt, M.Roswida, Г.Є.Самковой та інших.

Метою цієї роботи є дослідження питань про існування аналітичних розв'язків задачі Коші (1)-(2), якщо z змінюється в деякій області з особливою точкою $z=0$ на межі, задовольняючих умові $Y'(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow 0$.

2.Об'єкт та методи досліджень

В роботі [8] доведена лема про ранг, у відповідності з якою, якщо матриця $A(z)$ аналітична в однозв'язній області $D \subset \mathbb{C}, (z=0) \in D; A: D \rightarrow \mathbb{C}^{m \times n}$ и $\text{rang} A(0) = k, 0 < k \leq \min(m, n)$, тоді існує область $D_{10} = \{z: 0 < |z| < R_1\}$ або $D_1 = \{z: |z| < R_1\} \subset D$, така, що ранг матриці $A(z)$ залишається сталим при $z \in D_{10}$ або при $z \in D_1$ і дорівнює k_1 , де $k \leq k_1 \leq \min(m, n)$.

Припустимо, що $m > n$, $\text{rang} A(z) = n$ при $z \in D_1$, матриці $A(z)$, $B(z)$ і вектор $F(z, Y)$ подані у вигляді:

$$A(z) = \begin{pmatrix} A_1(z) \\ A_2(z) \end{pmatrix}; B(z) = \begin{pmatrix} B_1(z) \\ B_2(z) \end{pmatrix}; F(z, Y) = \begin{pmatrix} F_1(z, Y) \\ F_2(z, Y) \end{pmatrix}; \quad (3)$$

де $A_1: D \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}; \det A_1(z) \neq 0$ при $z \in D_1$; $B_1: D \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}; F_1: D \times G_2 \rightarrow \mathbb{C}^n$.

Система (1) має бути переписана у вигляді:

$$\begin{cases} Y' = A_1^{-1}(z)B_1(z)Y + A_1^{-1}(z)F_1(z, Y) \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} A_2(z)Y' = B_2(z)Y + F_2(z, Y) \end{cases} \quad (5)$$

Припустимо, що матриця $A_1^{-1}(z)B_1(z)$ аналітична в області D_{10} і в точці $z=0$ має полюс q -того порядку, $q \in \mathbb{N}, q \geq 2$, і

$$A_1^{-1}(z)B_1(z) = z^{-q} \bar{B}_1(z), \quad (6)$$

де матриця $\bar{B}_1(z)$ є аналітичною в області D_1 . Система (4)-(5) у відповідності з (6) приймає вигляд:

$$\begin{cases} z^q Y' = P(z)Y + z^q f(z, Y) \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} A_2(z)Y' = B_2(z)Y + F_2(z, Y) \end{cases} \quad (8)$$

де $P(z) = (p_{ij}(z))_{i,j=1}^n = A_1^{-1}(z)\bar{B}_1(z); f(z, Y) = (f_i(z, Y))_{i=1}^n = A_1^{-1}(z)F_1(z, Y)$.

3.Результати

Введемо деякі поняття.

- **Означення.** Нехай на множині $A = \{(t, \nu): t \in (0, t_1], \nu \in [\nu_1, \nu_2], \nu_1 < \nu_2\}$ визначені функції $p(t, \nu)$ и $g(t, \nu)$, які приймають невід'ємні значення. Будемо казати, що функція $p(t, \nu)$ має властивість Q відносно функції $g(t, \nu)$ на множині A , якщо для кожного $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$ функція $p(t, \nu)$ є функцією більш високого порядку мализни, ніж $g(t, \nu)$ при $t \rightarrow +0$.
- **Означення.** Нехай функція $\varphi(z) = \text{col}(\varphi_1(z), \dots, \varphi_n(z)), \varphi: E \rightarrow \mathbb{C}^n$, аналітична в області $E \subset \mathbb{C}, 0 \in \partial E$, і така, що при $(t, \nu) \in A$ компоненти $\varphi(z(t, \nu))$, де $z(t, \nu) = te^{i\nu}$, мають вигляд: $\varphi_j(z(t, \nu)) = \psi_j(t, \nu)e^{i\omega_j(t, \nu)}$ ($j = \overline{1, n}$); причому $\psi_j(t, \nu) > 0, (\psi_j(t, \nu))'_t > 0, (\psi_j(t, \nu))'_\nu > 0, \psi_j(+0, \nu) = 0$. Будемо казати, що система (7) має властивість A , відносно функції $\varphi(z(t, \nu))$, якщо виконано:

1) $t^q(\psi_1(t, \nu))'_t = o(|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|)$ при $t \rightarrow +0$ рівномірно відносно $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$; 2) функції $t^{q-1}(\psi_1(t, \nu))'_\nu$ мають властивість Q відносно $|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|$ при $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$ рівномірно відносно $t \in (0, t_0]$; 3) $|p_{jk}(z(t, \nu))\psi_k(t, \nu)| = o(t^q(\psi_j(t, \nu))'_t)$ ($j, k = \overline{2, n}$) при $t \rightarrow +0$ рівномірно відносно $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$; 4) $|p_{jk}(z(t, \nu))\psi_k(t, \nu)|$ ($j, k = \overline{2, n}$) мають властивість Q відносно $t^{q-1}(\psi_j(t, \nu))'_\nu$;

5a) $|p_{1k}(z(t, \nu))\psi_k(t, \nu)| = o(|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|)$ ($k = \overline{2, n}$) при $t \rightarrow +0$ рівномірно відносно $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$;

5b) $|p_{1k}(z(t, \nu))\psi_k(t, \nu)|$ ($k = \overline{2, n}$) мають властивість Q відносно $|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|$.

При фіксованому $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$ покладемо $f(z(t, \nu), Y(z(t, \nu))) = f_{1\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t)) + if_{2\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t))$, де $Y(z(t, \nu)) = Y_1(t) + iY_2(t)$.

Позначимо як

$$\Omega(t, Y, \tau) = \left\{ (t, Y) : Y_1^2(t) + Y_2^2(t) < \tau_j^2 |\varphi_j(z(t, \nu))|^2, \tau_j > 0, j = \overline{1, n}, t \in (0, t_1) \right\}.$$

• **Означення.** Скажемо, що система (7) має властивість P_j відносно функції $f(z, Y)$, $f_j = f_{1j} + if_{2j}$, $j = \overline{1, m}$, якщо виконано:

1) для кожного фіксованого $Y(z(t, \nu))$ з множини $\Omega(t, Y, \tau)$ виконано:

$$t^q f_{k1\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t)) = o(|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|),$$

$$t^q f_{kj\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t)) = o(t^q(\psi_j(t, \nu))'_t), \quad k = 1, 2, j = \overline{2, n}, \text{ при } t \rightarrow +0 \text{ рівномірно відносно } \nu \in [\nu_1, \nu_2];$$

2) для кожного фіксованого $Y(z(t, \nu))$ з множини $\Omega(t, Y, \tau)$ функції $t^q f_{k1\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t))$ і $t^q f_{kj\nu}(t, Y_1(t), Y_2(t))$ мають властивість Q відносно функцій $|p_{11}(z(t, \nu))\psi_1(t, \nu)|$ і $t^{q-1}(\psi_j(t, \nu))'_t$, $k = 1, 2, j = \overline{2, n}$, відповідно.

Введемо на комплексній площині множини точок

$$\Phi_{3,1-}(t_1) = \left\{ (t, \nu) : \cos((q-1)\nu - \alpha_{11\nu}(t)) < 0, \sin((q-1)\nu - \alpha_{11\nu}(\nu)) < 0, t \in (0, t_1], \nu \in [\nu_1, \nu_2] \right\},$$

$$\Phi_{3,2-}(t_1) = \left\{ (t, \nu) : \cos((q-1)\nu - \alpha_{11\nu}(t)) > 0, \sin((q-1)\nu - \alpha_{11\nu}(\nu)) < 0, t \in (0, t_1], \nu \in [\nu_1, \nu_2] \right\},$$

де $t \in (0, t_1]$, $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$ і як $\alpha_{jk\nu}(t)$ і $\alpha_{jk\nu}(\nu)$ позначимо функції, косінуси і синуси яких :

$$\cos \alpha_{jk\nu}(t) = \frac{\operatorname{Re} p_{jk\nu}(t)}{\sqrt{(\operatorname{Re} p_{jk\nu}(t))^2 + (\operatorname{Im} p_{jk\nu}(t))^2}}; \sin \alpha_{jk\nu}(t) = \frac{\operatorname{Im} p_{jk\nu}(t)}{\sqrt{(\operatorname{Re} p_{jk\nu}(t))^2 + (\operatorname{Im} p_{jk\nu}(t))^2}}$$

де $p_{jk\nu}(t) = p_{jk}(z(t, \nu)) = \operatorname{Re} p_{jk}(t) + i \operatorname{Im} p_{jk}(t)$, $i, k \in \{1, \dots, n\}$ при фіксованому $\nu \in (0, 2\pi]$.

Позначимо як $\tilde{G}_{3,j}(\rho) = \{z: 0 < |z| \leq \rho, \text{Arg} z \in \Phi_{3,j}(\rho)\}, j \in \{1, 2\}$.

• **Означення.** Скажемо, що система (7) належить класу $K_{3,j}, j = 1, 2$, якщо матриця $P(z) = P(te^{i\nu})$ така, що $(t, \nu) \in \Phi_{3,j}(t_1)$.

• **Теорема 1.j. (j=1,2).** Нехай система (1) задовольняє наступні умови:

1) однозначна матриця $A: D \rightarrow C^{m \times n}, m > n$, аналітична в області D ;

2) існує область $D_1 \subset D, 0 \in D_1$, така, що в $D_1 \text{ rang} A(z) = n$;

3) матриці $A(z), B(z)$ і функція $F(z, Y)$ мають вигляд (3), причому матриця $A_1^{-1}(z)B_1(z)$ аналітична в області D_{10} , в точці $z=0$ має полюс q -го порядку ($q \geq 2$) та має вигляд (6); функція $F_1(z, Y)$ аналітична в $D_{10} \times G_{20}$ і в точці $(0,0)$ має ізольовану особливу точку;

4) система (7)-(8) така, що: а) система (7) має властивість A_3 відносно функцій $\varphi(z(t, \nu))$ при $t \in (0, t_1]$ рівномірно відносно $\nu \in [\nu_1, \nu_2]$;

б) система (7) належить класу $K_{3,j}$; в) система (7) має властивість P_3 відносно вектор-функції $f(z, Y), f_j = f_{1j} + if_{2j}, j = \overline{1, n}$, при $t \in (0, t_1], \nu \in [\nu_1, \nu_2]$; г) вздовж розв'язків системи (7) виконується умова сумісності (8) при $z \in D_3, D_3 \cap G_{2,j}(\rho) \neq \emptyset, D_3 \subseteq D_1, 0 \in D_3$.

Тоді при $j=1, 2$ знайдеться таке $\rho \in (0, t_1]$, що задача Коші для системи (1) з початковими значеннями (z_0, Y_0) :

$z_0 \in G_{3,j}(\rho), Y_0 \in \{Y: |Y_k(z_0)| < \delta_j, |\varphi_j(z_0)|, \delta_j > 0, j = \overline{1, n}, k = 1, 2\}$,

$Y_j(z) = Y_{1j}(z) + iY_{2j}(z), j = \overline{1, n}$, при $z \in G_{3,j}(\rho)$ має хоч би один аналітичний розв'язок, який задовольняє: $|Y_j(z)|^2 < \delta_j^2 |\varphi_j(z)|^2, j = \overline{1, n}$.

• **Доведення** теореми 1.1. проводиться в три етапи методом аналітичного продовження розв'язків за допомогою топологічного принципу Вайтманського (аналогічно [7], [8]).

На першому етапі доведено існування хоч би одного розв'язку системи (1), задовольняючого деякій оцінці, коли z змінюється вздовж відрізка променя, одним з кінців якого є точка $z=0$.

На другому етапі доведено існування нескінченної множини розв'язків системи з аналогічною першому етапу оцінкою, коли z змінюється вздовж дуги кола з центром в точці $z=0$.

На третьому етапі здійснюється аналітичне продовження розв'язків, які були знайдені на першому етапі, на область з особливою точкою $z=0$ на межі, при цьому знайдена оцінка продовжених розв'язків.

• **Висновок.** Для диференціальних систем вигляду (1) одержані достатні умови про існування аналітичних розв'язків задачі Коші (1)-(2). Вони є суттєво новими та істотно доповнюють відомі результати теорії диференціальних рівнянь.

Література

- 1.Самойленко А.М.,Шкиль М.І.,Яковець В.П.Лінійні системи диференціальних рівнянь з виродженнями. – Київ:Вища шк.,2000. – 294с.
2. März R.On the stability behaviour of systems obtained by index- reduction.// Journal of Comp.Applied Math.-1994.-56.-с.305-319.
- 3.Бояринцев Ю.Е.Методы решения вырожденных систем обыкновенных дифференциальных уравнений.-Новосиб.:Наука, 1988.
- 4.Чистяков В.Ф. О нетеровом индексе линейных алгебро-дифференциальных систем //Сиб.мат.журнал.-01993.-34,№3.-с.209-219.
5. Campbell St.Uniqueness of completions for linear time varying differentiation algebraic equations //Linear Algebra and Appl.-1992.-161.-с.55-67.
6. Руткас А.Г.О классификации и свойствах решений уравнения $Ax' + Bx = f(t)$ //Диф. уравнения.-1989.-25,№7.-с.1150-1155.
- 7.Самкова Г.Е., Шарай Н.В.Об исследовании некоторой полуявной системы дифференциальных уравнений в случае переменного пучка матриц //Нелінійні коливання. – 2002. -5.№2. – с.224-236.
- 8.Шарай Н.В.Об асимптотике решений полуявных систем дифференциальных уравнений // Нелінійні коливання. – 2005. -8.№1. – с.132-144.

Надійшла до редакції 14.12.06

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 517.956.6

Андрій В. Анікушин¹

Властивості узагальнених розв'язків лінійних операторних рівнянь в банахових просторах

Визначається нове поняття узагальненого розв'язку операторних рівнянь. Доведено достатні умови їх існування. Досліджено деякі властивості множини узагальнених розв'язків.

Ключові слова: лінійне рівняння, узагальнений розв'язок, існування, неперервність.

¹E-mail: anik_andrew@univ.kiev.ua

Andrii V. Anikushyn¹

Characteristics of generalized solution of linear operator equations in Banach spaces

A new concept of the generalized solution of the operator equations is given. Sufficient condition for existence of the generalized solution is proved. Investigated some characteristics of set of the generalized solution.

Key Words: linear equation, generalized solution, existence, continuously.

1. Вступні означення та факти. В [1] визначається нове поняття узагальненого розв'язку операторного рівняння з неперервним оператором $A : E \rightarrow F$

$$Ax = y, \quad x \in E, y \in F.$$

Наведемо його. Нехай E, F – банахові простори і $A : E \rightarrow F$ – неперервний лінійний оператор з усюди щільною в E областю визначення $D(A) \subset E$. Тоді цей оператор можна розширити за неперервністю на весь простір E . Збережемо за розширеним оператором попереднє позначення. Розглянемо операторне рівняння:

$$A(x) = y \quad (x \in E, y \in F) \tag{1}$$

і спряжене рівняння:

$$A'(f) = g \quad (g \in E', f \in F'), \tag{2}$$

де E', F' – спряжені до E, F банахові простори, A' – спряжений до A оператор. Будемо вважати, що множина значень $R(A) \subset F$ оператора A всюди щільна в просторі F і рівняння (1) однозначно розв'язно на $R(A)$ (нуль-простір $N(A)$ оператора A складається лише з нульового елемента $\theta : N(A) = \theta$).

Розглянемо також деякий лінійний підпростір $M \subseteq R(A')$, який задовольняє дві умови:

- 1) M знаходиться в двоїстості з E ,
 - 2) N знаходиться в двоїстості з F , де $N = \{f \in F' : A'f \in M\}$.
- Позначимо через $\bar{E}$ поповнення простору E за топологією $\sigma(E, M)$.

Означення 1. Будемо називати узагальненим розв'язком операторного рівняння (1) елемент $\bar{x} \in \bar{E}$, що задовольняє співвідношення

$$\bar{g}(\bar{x}) = f(y) \quad \forall f \in N, \quad (3)$$

де $\bar{g}$ - розширення на $\bar{E}$ функціоналу $g = A'f$.

Означення 2. Послідовність елементів $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset E$ назовемо майже розв'язком операторного рівняння (1), якщо $y_n = A(x_n) \rightarrow y$, $n \rightarrow \infty$ в метриці простору F і існує такий елемент $\bar{x}$ ($\bar{x} \in \bar{E}$), що $x_n = A^{-1}(y_n) \rightarrow \bar{x}$, $n \rightarrow \infty$, в топології $\sigma(E, M)$. Такий елемент $\bar{x} \in \bar{E}$ назовемо граничним елементом майже розв'язку.

В [1] доведено наступні теореми

Твердження 1. Елемент $\bar{x}$ буде узагальненим розв'язком операторного рівняння (1) тоді і тільки тоді, коли він є граничним елементом майже розв'язку.

Твердження 2. Якщо $y \in \overline{R(A)}$ то узагальнений розв'язок рівняння (1) існує і єдиний. Якщо $y \in R(A)$, то узагальнений розв'язок рівняння (1) співпадає із звичайним розв'язком рівняння $Ax = y$.

Означення 3. Через $\bar{A}$ позначимо розширення оператора A на простір $\bar{E}$, яке елементу $x \in \bar{E}$ ставить у відповідність елемент $y \in F$, де x узагальнений розв'язок рівняння (1) у сенсі означення 1.

Зауваження 1. Коректність означення випливає з того, що множина N знаходиться в двоїстості з F .

Якщо відмовитись від умови всюди щільності в просторі F області значень $R(A)$ оператора A , то виникає ситуація, коли $\overline{R(A)} \neq F$. При цьому, якщо права частина рівняння (1) не належить до $\overline{R(A)}$, то виникає природне узагальнення поняття розв'язку лінійного операторного рівняння. А саме: вважати x - узагальненим розв'язком рівняння з правою частиною y , якщо x - розв'язок у сенсі означення 1 рівняння з правою частиною, що є найкращим наближенням елемента y у просторі F . Дана стаття присвячена пошуку умов існування таких розв'язків і дослідженню їх властивостей. Сформулюємо означення.

Означення 4. Елемент $x \in \bar{E}$ назовемо узагальненим розв'язком для рівняння (1), якщо існує такий елемент $z \in \overline{R(A)}$, що

$$\tilde{A}x = z \text{ і } \|y - z\|_F = \inf_{v \in \overline{R(A)}} \|y - v\|_F. \quad (4)$$

2. Існування узагальненого розв'язку. Внаслідок твердження 2 при $z \in \overline{R(A)}$ завжди існує $x \in \bar{E}$ для якого $\tilde{A}x = z$. Тому для існування узагальненого розв'язку у сенсі означення 4 необхідно і достатньо існування $z \in \overline{R(A)}$, для якого $\|y - z\| = \inf_{v \in \overline{R(A)}} \|y - v\|$. Тобто

постає питання про існування найкращого наближення елемента $y \in F$ елементами підпростору $\overline{R(A)}$. Розглянемо цю задачу окремо.

Нехай F – банахів простір, $R \subseteq F$ – підпростір, а $y_0 \notin R$. Вивчимо існування "найкращого наближення" для y_0 елементами з підпростору R . Тобто, якщо

$$d = \rho(y_0, R) = \inf_{z \in R} \|z - y_0\|_F > 0,$$

то нас цікавить існування такого $y \in R$, що $\|y - y_0\|_F = d$. Нехай f – лінійний неперервний функціонал на F . Через $f|_M$ позначимо звуження f на $M \subseteq F$, а через

$$\|f|_M\| := \sup_{x \in M} \frac{|f(x)|}{\|x\|_F}.$$

Далі всюди вважаємо, що F – лінійний нормований простір, $R \subseteq F$, R – підпростір, а $y_0 \notin R$. В подальшому будемо користуватися такою теоремою:

Теорема 1. Для $y_0 \notin R$ існує найкраще наближення $y \in R$ тоді і тільки тоді, коли для будь-якого ЛНФ f з умови $R \subseteq \ker f$ випливає, що функціонал $f|_{R \oplus \{y_0\}}$ досягає своєї норми на одиничній кулі.

Відзначимо, що для її доведення досить довести наступні факти:

Твердження 3. Якщо $\rho(y_0, R) = d > 0$, то існує такий $f \in F'$, що

а) $R \subseteq \ker f$;

б) $f(y_0) = 1$;

в) $\|f\| = \frac{1}{d}$.

Твердження 4. Нехай $M = R \oplus \{y_0\} = \{y + \alpha y_0 : y \in R, \alpha \in \mathbb{R}\}$. Тоді, якщо $\tilde{f} \in F'$ задовольняє умови:

а) $R \subseteq \ker \tilde{f}$;

б) $\tilde{f}(y_0) = 1$;

то $\|\tilde{f}|_M\| = \frac{1}{d}$, де $d = \rho(y_0, R)$.

Лема 1. Якщо існує $y \in R : \|y - y_0\| = d > 0$ і такий $f \in F'$, що

a) $R \subseteq \ker f$;

б) $f(y_0) = 1$,

то $f|_{R \oplus \{y_0\}}$ досягає своєї норми на одиничній кулі, тобто існує елемент $z_0 \in R \oplus \{y_0\} \subseteq F$ такий, що $\|z_0\| = 1$ і

$$f(z_0) = \sup_{z \in R \oplus \{y_0\}} \frac{|f(z)|}{\|z\|}.$$

Лема 2. Якщо існує $y \in R : \|y - y_0\| = d$ і такий функціонал $f \in F'$, що $R \subseteq \ker f$, то $f|_{R \oplus \{y_0\}}$ досягає своєї норми на одиничній кулі.

Лема 3. Якщо для кожного $f \in F'$ функціонал $f|_{R \oplus \{y_0\}}$ досягає своєї норми на одиничній кулі ($R \subseteq \ker f$), то існує $y \in R$:

$$\|y - y_0\| = d = \rho(y_0, R).$$

Виникає природне питання: чи може взагалі для елемента $y \in F$ не існувати найкращого наближення?

Приклад 1. $F = l_1$, $f(x) = \sum_{n=2}^{\infty} (1 - \frac{1}{n}) x_n$.

Нехай $R = \ker f$, $y_0 = (0, 1, 0, 0, \dots, 0, \dots) \notin R$. Оскільки $(l_1)' = l_{\infty}$, то $\|f\| = 1$. Тоді

$$F = R \oplus \{y_0\}.$$

Застосовуючи теорему 1 легко показати, що найкращого наближення для y_0 не існує.

Розглянемо також випадок, коли $F = R \oplus \bigoplus_{k=1}^{\infty} \{y_k\}$, де $\{y_n\}_{n=1}^{\infty} \subseteq F \setminus R$ і в кожному з просторів $R \oplus \{y_n\}$ ЛН функціонали досягають своєї норми на одиничній кулі. Чи не впливає звідси, що будь-який ЛНФ в F досягає своєї норми на одиничній кулі? Наступний простий приклад спростовує це припущення.

Приклад 2. $F = l_1$, $f(x) = \sum_{n=2}^{\infty} (1 - \frac{1}{n}) x_n$, $R = \{x_1 \cdot (1, 0, 0, \dots), x_1 \in \mathbb{R}\}$.

Нехай e_n – координатний базис. Тоді для будь-якого $e_n = \underbrace{(0, 0, \dots, 0, 1, 0, 0, \dots)}_n$, $n > 1$ маємо $\|f|_{R \oplus \{e_n\}}\| = 1 - \frac{1}{n}$ і ця норма досягається на одиничній кулі в $R \oplus \{e_n\}$, але, як ми вже бачили, f не досягає своєї норми в $l_1 = F = R \oplus \bigoplus_{k=2}^{\infty} \{e_k\}$.

З лем 2 і 3 випливає наступна

Лема 4. Якщо для $y_0 \notin R$ існує найкраще наближення в підпросторі $R \subseteq F$, то для будь-якого $x_0 \in R \oplus \{y_0\}$ існує найкраще наближення у підпросторі R .

Твердження 5. (критерій рефлексивності банахового простору, R.C.James)

Банахів простір не є рефлексивним тоді і тільки тоді, коли існує ЛНФ, який не досягає своєї норми на одиничній кулі.

Доведення наведено наприклад у [5].

Теорема 2. Нехай F – банахів простір. Тоді наступні умови еквівалентні

- 1) F – рефлексивний простір;
- 2) для будь-якого підпростору $G \subseteq F$ і для будь-якого $y_0 \in F$ існує найкраще наближення у підпросторі G .

Доведення. 1) $\Rightarrow$ 2). Відомо ([6], с.50), що будь-який підпростір $E \subseteq F$ рефлексивний. Розглянемо $E = G \oplus \{y_0\}$. Згідно критерія рефлексивності Джеймса будь-який ЛНФ f на E досягає своєї норми на одиничній кулі. Розглядаючи лише ті ЛНФ на E для яких $\ker f = G$ і застосовуючи лему 3, отримуємо потрібне твердження.

2) $\Rightarrow$ 1). Розглянемо будь-який ЛНФ f . Нехай $G = \ker f$, $y_0 \notin G$. Тоді існує $y \in G$ – найкраще наближення для y_0 . Згідно леми 2 функціонал $f|_{G \oplus \{y_0\}}$ досягає своєї норми на одиничній кулі. Але $G \oplus \{y_0\} = F$. Тому f досягає своєї норми на одиничній кулі і згідно критерію Джеймса F – рефлексивний простір. $\square$

Наслідок. Банахів простір F буде рефлексивним тоді і тільки тоді, коли для будь-якого підпростору $G \subseteq F$ існує $y_0 \in F \setminus G$, що має найкраще наближення у підпросторі G .

Твердження 6. Нехай $L_1 \oplus L_2 = M$, де L_1 і L_2 – рефлексивні простори. Тоді M також рефлексивний простір.

Доведення. Нехай $V : x \rightarrow F_x$ – канонічне відображення M в M'' . Достатньо довести, що $R(V) = M''$. Якщо $x \in M$, то $x = x_1 + x_2$, де $x_1 \in L_1$, $x_2 \in L_2$. Нехай $f \in M'$. Тоді $f(x) = f|_{L_1}(x_1) + f|_{L_2}(x_2)$, тобто M' лінійно ізоморфний до $L'_1 \oplus L'_2$. Аналогічно M'' лінійно ізоморфний до $L''_1 \oplus L''_2$. Нехай тепер $F_0 \in M''$, а $F_x + F_y$ – розклад відповідного елемента в $L''_1 \oplus L''_2$. Оскільки L_1, L_2 – рефлексивні, то існують такі елементи $x \in L_1, y \in L_2$, що переводяться в F_x, F_y відповідно, при канонічному

відображенні. Розглянемо $V(x+y) = F_{x+y}$ і доведемо, що $F_{x+y} = F_0$. Дійсно, для будь-якого $f \in M'$ маємо $f = f|_{L_1} + f|_{L_2}$, тому

$$F_0(f) = F_x(f|_{L_1}) + F_y(f|_{L_2}) = f|_{L_1}(x) + f|_{L_2}(y) = f(x+y) = F_{x+y}(f).$$

□

Зробимо короткий огляд стосовно існування в підпросторі $G \subseteq F$ найкращого наближення для $y_0 \notin G$.

- якщо F - рефлексивний, то для будь-яких G, y_0 - найкраще наближення існує;

- якщо F - не є рефлексивним, то існує G і існує y_0 , для якого немає найкращого наближення в G ;

Відповідно до початкової задачі, $\overline{R(A)}$ - фіксований підпростір, а $y_0 \notin \overline{R(A)}$. Що можна сказати про існування найкращого наближення?

Як було показано для рефлексивного простору найкраще наближення буде існувати, але, взагалі кажучи, з існування найкращого наближення для одного підпростору не випливає рефлексивність простору в цілому. Дійсно, наведемо

Приклад 3. Нехай F - нерефлексивний простір, а $G \subseteq F$ скінченновимірний підпростір. Тоді згідно теореми ([2], с.119) для будь-якого y_0 існує найкраще наближення в G .

Повертаючись до початкових позначень стверджуємо, що для існування найкращого наближення для будь-якого елемента (а отже і для існування узагальненого розв'язку в сенсі означення 4) достатньо щоб $\overline{R(A)}$ - був рефлексивним простором.

Доведення. Якщо $\overline{R(A)}$ - рефлексивний, то згідно твердження 6 маємо, що $\overline{R(A)} \oplus \{y_0\}$ - також рефлексивний. А тому з теореми 2 випливає, що найкраще наближення для y_0 в підпросторі $\overline{R(A)}$ існує. □

3. Властивості узагальнених розв'язків. Зараз сформулюємо і доведемо деякі властивості множини узагальнених розв'язків рівняння (1), при умові, що вони існують. Спочатку відзначимо деякі властивості оператора $\tilde{A}$.

Твердження 7. $\tilde{A}$ - лінійний оператор.

Доведення цього факту просто випливає з означення оператора $\tilde{A}$.

Позначимо через S - множину узагальнених розв'язків рівняння (1) при фіксованому $y \in F$.

$$S = \{x \in \bar{E} : \|\bar{A}x - y\| = \min_{z \in D(\bar{A})} \|\bar{A}z - y\|\}.$$

Зрозуміло, що $S \subseteq D(\bar{A})$. Мають місце наступні твердження:

Твердження 8. S — опукла множина.

Твердження 9. Якщо оператор $\bar{A}$ — неперервний, то S — замкнена множина в топології $\sigma(\bar{E}, M)$.

Доведення. Нехай $x \in \bar{S}$. З неперервності оператора A випливає, що для будь-якого $\varepsilon > 0$, існує такий окіл нуля U_ε , що $\bar{A}(U_\varepsilon) \subseteq \{z \in F : \|z\| < \varepsilon\}$. Оскільки $x \in \bar{S}$, то для околу $x + U_\varepsilon$ точки x $(x + U_\varepsilon) \cap S \neq \emptyset$. Тоді існує $x_\varepsilon \in (x + U_\varepsilon) \cap S$. Отже,

$$\begin{aligned} \|\bar{A}x - y\| &= \|\bar{A}x + \bar{A}x_\varepsilon - \bar{A}x_\varepsilon - y\| \leq \|\bar{A}(x - x_\varepsilon)\| + \|\bar{A}x_\varepsilon - y\| = \\ &= \|\bar{A}(x - x_\varepsilon)\| + m \leq \varepsilon + m. \end{aligned}$$

Внаслідок довільності $\varepsilon : \|\bar{A}x - y\| = m$ і тому $x \in S$. Звідси $\bar{S} \subseteq S$. Отже, $\bar{S} = S$, а тому S — замкнена множина в топології $\sigma(\bar{E}, M)$. $\square$

Зауваження 2. Питання неперервності оператора A досліджено в [7].

Твердження 10. S — обмежена множина в топології $\sigma(\bar{E}, M)$.

Доведення. Скористаємось критерієм обмеженості в топологічному просторі [3]. Треба довести, що для будь-якої послідовності $\{x_i\}_{i=1}^\infty \subset S$, буде $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n \varepsilon_n = 0$, якщо $\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n = 0$. Для цього достатньо показати, що $\forall g \in M \quad g(\varepsilon_i x_i) \rightarrow 0$ при $i \rightarrow \infty$. Дійсно, зафіксуємо будь-який окіл нуля

$$U = \{x : |g_1(x)| < \varepsilon, |g_2(x)| < \varepsilon, \dots, |g_n(x)| < \varepsilon\}.$$

Для будь-якого $i = \overline{1, n}$ $g_i(\varepsilon_j x_j) \rightarrow 0$ при $j \rightarrow \infty$, а отже, існують N_i такі, що $\forall j > N_i \quad |g_i(\varepsilon_j x_j)| < \varepsilon$. Покладаючи $N = \max\{N_1, N_2, \dots, N_n\}$ отримаємо: для всіх $j > N : |g_i(\varepsilon_j x_j)| < \varepsilon$. Тобто, починаючи з номера N , всі елементи послідовності $x_j \varepsilon_j$ належать U . Отже, $x_j \varepsilon_j \rightarrow 0$ в топології $\sigma(\bar{E}, M)$. Зафіксуємо $g \in M, f \in N : A'f = g$ і розглянемо $\bar{A}(\{x_i : i \in \mathbb{N}\})$. Ясно, що

$$\bar{A}(\{x_i : i \in \mathbb{N}\}) \subseteq \bar{A}(S) \subseteq \{z \in F : \|z - y\| \leq m + 1\}.$$

Тоді $\bar{A}(\{x_i : i \in \mathbb{N}\})$ — обмежена, а отже, і $f(\bar{A}(\{x_i : i \in \mathbb{N}\}))$ — обмежена, бо f — неперервний. Але $f(\bar{A}z) = (A'f)(z) = g(z)$. Отже, $g(\{x_i : i \in \mathbb{N}\})$ — обмежена множина, і тоді $\{g(x_i) : i \in \mathbb{N}\}$ — обмежена, а тому $g(\varepsilon_i x_i) = \varepsilon_i g(x_i) \rightarrow 0$, бо $\varepsilon_i \rightarrow 0$. Вищезазначене зауваження завершує доведення обмеженості S . $\square$

Сформулюємо без доведення ще декілька властивостей про оператор $\tilde{A}$ і множину узагальнених розв'язків.

Твердження 11. $\tilde{A}^{-1}$ – неперервний оператор.

Доведення. Нехай $K \subseteq \overline{R(\tilde{A})}$, K – обмежена. Так само як в твердженні (10) доводиться, що $(\tilde{A})^{-1}(K)$ – обмежена множина. Отже, $(\tilde{A})^{-1}$ – обмежений, а оскільки F – ЛНП (з першою аксіомою зліченості), то $(\tilde{A})^{-1}$ – неперервний ([3], с.222). $\square$

Твердження 12. Нехай x – узагальнений розв'язок для y . Тоді x буде узагальненим розв'язком і для $z = \alpha \tilde{A}x + (1 - \alpha)y$ при будь-якому $\alpha \in (0, 1)$.

Твердження 13. Якщо F – строго нормований, то множина S складається не більше ніж з одного елемента.

Література

- [1] Петушін Ю. І., Савкіна М. Ю. Нова концепція узагальненого розв'язку операторних рівнянь в банаховому просторі // Журнал обчислювальної та прикладної математики – 1997. – № 1 – С.93-97
- [2] Люстернік Л. А., Соболев В. І. Елементи функціонального аналізу. – М.: Видавництво технічно-теоретичної літератури, 1951. – 360 с.
- [3] Колмогоров А. М., Фомін С. В. Елементи теорії функцій і функціонального аналізу. – М.: Наука, 1989. – 624 с.
- [4] Березанський Ю. М., Ус Г. Ф., Шефтель З. Г. Функціональний аналіз. – К.: Вища школа, 1990. – 600 с.
- [5] R. C. James. Characterizations of reflexivity // Studia mathematica. – 1964. V. XXIII. – P.205-216.
- [6] С. Г. Крейн. Функціональний аналіз. – М.: Наука, 1972. – 544 с.
- [7] Номіровський Д. А. Об обобщенной разрешимости линейных систем // Доповіді НАН України. – 2004. – № 10. – С. 26-33.

Надійшла до редколегії 18.05.2006

УДК 519.9

Павло П. Антосяк¹

**Алгоритм побудови
колективного ранжування на
основі методу вектора спаду**

Пропонується алгоритм
знаходження строгого результуючого
ранжування на основі методу вектора
спаду.

Ключові слова: ранжування,
вектор спаду, медіана Кемени-Снелла,
ВГ-медіана.

Pavlo P. Antosjak¹

**Construction of ranking algorithm
which is based on method of vector
decline**

At present the algorithm solving for the
strict resultant ranking which is based on
method of vector decline.

Key Words: ranking, vector decline,
median of Kemeni-Snell, VG-median

¹ E-mail: AntosP@ukr.net

1. Вступ

Як правило, в задачах колективного прийняття рішень інформація отримана від експертів є «не точною», «не чіткою». В таких випадках знаходження оптимального рішення, що вимагає величезних ресурсів часу, не доцільне. В [1] запропоновано алгоритм знаходження медіани Кемени-Снелла на основі методу ідеальної точки. Широке застосування серед алгоритмів локальної оптимізації здобули алгоритми метода вектора спаду, багаторічний досвід застосування яких для розв'язання задач дискретної оптимізації різних класів підтвердив високу степінь їх ефективності [2].

В даній роботі пропонується алгоритм побудови колективного ранжування на основі методу вектора спаду, що є «двоїстим» до алгоритму, побудованого в роботі [1].

2. Постановка задачі

На фіксованій множині об'єктів $O = \{o_1, \dots, o_n\}$ експертами, нормовані коефіцієнти компетентності α_l , $l \in L = \{1, \dots, m\}$, яких відомі, задаються матриці попарних порівнянь P^l , $l \in L$, елементи котрих $p_{ij}^l \in \{-1, 1\}$ являють собою результат порівняння l -им експертом об'єктів o_i та o_j , $i, j \in \{1, \dots, n\}$, $i \neq j$.

Розглянемо задачі визначення медіани Кемени-Снелла та ВГ-медіани [3] (на сьогодні найбільш обґрунтовані та найчастіше використовувані методи відшукування результуючого ранжування) в наступних постановках:

$$x^{KC} \in \operatorname{Arg} \min_{x \in D} \{F_1(x) = \sum_{l \in L} \alpha_l \sum_{j \in J} |c_{lj} - x_j|\}, \quad (1)$$

$$x^{VG} \in \operatorname{Arg} \min_{x \in D} \{F_2(x) = \max_{l \in L} \alpha_l \sum_{j \in J} |c_{lj} - x_j|\}, \quad (2)$$

де $J = \{1, \dots, N = n(n-1)/2\}$, $c_{ij} = p'_{ab}$, $j = (a-1)n + b - a(a+1)/2$, $1 \leq a < b \leq n$, $x = (x_j)_{j \in J}$, $x_j \in \{-1, 1\}$, D – множина варіантів, які відповідають ациклічним відношенням.

3. Алгоритм на основі метода вектора спаду

Згідно загальної схеми вектора спаду в задачах мінімізації необхідно визначити поняття «околу» і починаючи з деякого допустимого варіанту розв'язку задачі, новий варіант з кращим значенням цільової функції знаходиться в його околі. Якщо такий варіант знайдено, він приймається і пошук покращення розв'язку далі здійснюється вже в його околі – і т.д. Робота алгоритму закінчується, якщо досягнуто локальний оптимум.

В якості околу фіксованої точки x будемо розглядати множину наступних інвертувань:

$$x(j_1, j_2, \dots, j_s) = (x_1, \dots, -x_{j_1}, \dots, -x_{j_2}, \dots, -x_{j_s}, \dots, x_N), \quad (3)$$

$$1 \leq j_1 < \dots < j_s \leq N, 1 \leq s \leq N.$$

Очевидно, що не всяке інвертування виду (3) дає допустимий варіант. Позначимо множину допустимих інвертувань через

$$DI = \{(j_1, \dots, j_s) \mid x(j_1, \dots, j_s) \in D, 1 \leq j_1 \leq \dots \leq j_s \leq N, 1 \leq s \leq N\}.$$

В якості вектора спаду задач (1), (2) в деякому околі точки $x \in D$ будемо розглядати відповідно вектори:

$$R^k(x) = [\Delta^k(x, x(j_1, \dots, j_s))],$$

$$\Delta^k(x, x(j_1, \dots, j_s)) = F_k(x(j_1, \dots, j_s)) - F_k(x), k = 1, 2,$$

$$(j_1, \dots, j_s) \in J^s \cap DI.$$

Основною проблемою реалізації методу є розгляд на кожному h -му кроці ($h = 1, 2, \dots$) алгоритму точок околу. Оскільки в загальному випадку кількість можливих комбінацій для (3) дуже велика – $O(n^{2s})$ (для прикладу: при $n = 100$ та $s = 3$ вже маємо число комбінацій порядку 10^{12}), то (враховуючи практичний аспект) надалі пропонується обмежуватись розглядом випадку $s = 2$, для якого пропонується наступна процедура визначення множини допустимих інвертувань.

Процедура А.

Крок 1. Покладемо

$$\bar{J}_q^h = J, \tilde{J}_q^h = \{(j_1, j_2) \mid 1 \leq j_1 \leq j_2 \leq N\}.$$

Крок 2. Для кожної із можливих трійок $i_1, i_2, i_3 \in \{1, \dots, n\}$ виконуємо наступне: покладемо $p_1 = \varphi(i_1, i_2)$, $p_2 = \varphi(i_1, i_3)$, $p_3 = \varphi(i_2, i_3)$, де $\varphi(a, b) = (a-1)n + b - a(a+1)/2$. Далі здійснюємо перевірку наступних умов:

якщо $x_{p_1} = x_{p_2} = x_{p_3}$, то покладемо $\bar{J}_q^h = \bar{J}_q^h \setminus \{p_2\}$, $\tilde{J}_q^h = \tilde{J}_q^h \setminus \{(p_1, p_3)\}$;
якщо $x_{p_1} = x_{p_2} = -x_{p_3}$, то покладемо $\bar{J}_q^h = \bar{J}_q^h \setminus \{p_1\}$, $\tilde{J}_q^h = \tilde{J}_q^h \setminus \{(p_2, p_3)\}$;

якщо $x_{p_1} = x_{p_2} = x_{p_3}$, то покладемо $\bar{J}_q^{h_*} := \bar{J}_q^{h_*} \setminus \{p_3\}$, $\tilde{J}_q^{h_*} := \tilde{J}_q^{h_*} \setminus \{(p_1, p_2)\}$.

Крок 3. Покладемо $DI_q^{h_*} := \tilde{J}_q^{h_*} \cup \{(j_1, j_2) \mid j_1, j_2 \in \bar{J}_q^{h_*}, j_1 \leq j_2\}$.

Алгоритм

Крок 0. Задаємо деякий початковий набір допустимих варіантів розв'язку x_q^0 , $q = \overline{1, Q}$. Допустимий варіант можна формувати випадковим чином або вибрати його як розв'язок знайдений методом ідеальної точки [2]. Для кожного $q = \overline{1, Q}$ виконуємо наступні кроки.

Крок 1. Застосовуємо процедуру А визначення множини допустимих інвертувань $DI_q^{h_*}$.

Крок 3. Якщо $DI_q^{h_*} \neq \emptyset$, то генеруємо чергову точку околу $x \in L_p(x_q^{h_*})$: вибираємо деяке допустиме інвертування $(j_1, j_2) \in DI_q^{h_*}$ та покладаємо $x := x(j_1, j_2)_q^t$, $t = 1, 2$, $DI_q^{h_*} := DI_q^{h_*} \setminus \{(j_1, j_2)\}$. Перехід до наступного кроку. Інакше кінець алгоритму.

Крок 4. Якщо $F_t(x) < F_t(x_q^{h_*})$, $t = 1, 2$, то покладемо $x_q^{h_*} := x$, $h_q := h_q + 1$. Перехід до кроку 1. Інакше перехід до кроку 3.

За розв'язок приймається варіант $x_t^* \in \underset{q=\overline{1, Q}}{\operatorname{Arg\,min}} F_t(x_q^{h_*})$, $t = 1, 2$.

Зауваження. Слід також відмітити, що запропонований в даній роботі алгоритм побудови колективного ранжування може бути використаний, зокрема, для знаходження локально-оптимального розв'язку на скороченій множині варіантів [4].

Література

1. Антосяк П.П., Волошин О.Ф. Алгоритм знаходження медіани Кемені-Снелла методом ідеальної точки.// Вісник Київського університету. Вип.3 Серія: фіз.-мат. науки, Київ, 2005.
2. Сергієнко І.В. Інформатика в Україні: становлення, розвиток, проблеми. – К.: Наукова думка, 1999. – 354 с.
3. Волошин О.Ф., Мащенко С.О. Теорія прийняття рішень: Навчальний посібник. – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2006. – 304 с.
4. Антосяк П.П., Гнатієнко Г.Н. Алгоритм послідовного аналізу і отсеивання елементів в задаче определения медианы строгих ранжирований объектов//Proceeding of the XI-th International Conference "Knowledge-Dialogue-Solution", June 20-30, 2005, Varna (Bulgaria). Volume 1. – Sofia, FOI-COMMERCE-2005. – p.250-253.

Надійшла до редакції 5.09.2006

УДК 519.9

Тарас О. Галковський, Юрій Ю.
Мілейко, Богдан В. Рубльов

Taras O. Galkovsky, Yuriy I.
Mileyko, Bogdan V. Rublyov

**Статистичні дані випадкових
діаграм Вороного вищих
порядків на площині**

**Statistical data on higher order
random Voronoi diagrams on the
plane**

В статті проводиться статистична оцінка геометричних показників випадкових діаграм Вороного 1-3 порядків. Для отриманих статистичних даних для рівномірного розподілу запропоновані наближення щільностей розподілів у вигляді аналітичних функцій.

Ключові слова: випадкові діаграми Вороного вищих порядків на площині, очікувана площа клітинки випадкових діаграм Вороного, апроксимація щільності розподілу.

In this paper statistical estimation of geometric parameters of 1-3 order random Voronoi diagrams on the plane is held. For obtained statistical data for uniform distribution approximating analytical forms of probability density functions is proposed.

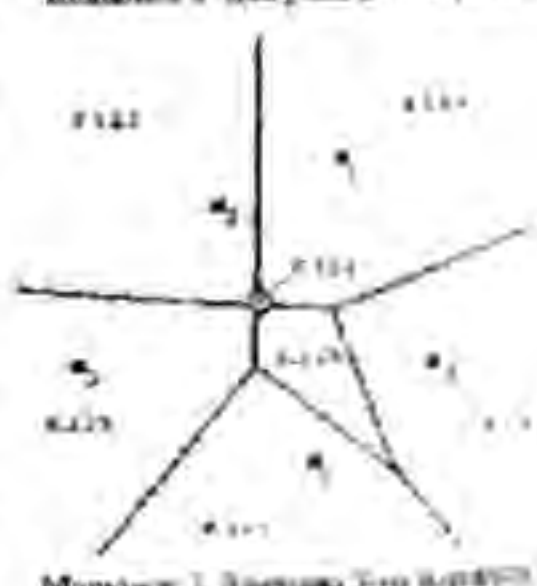
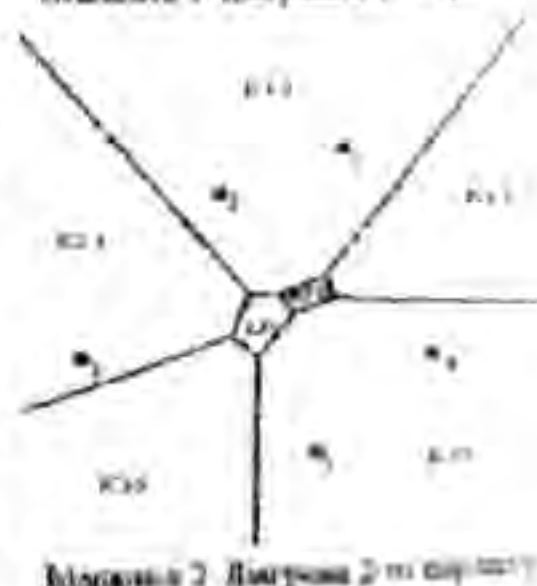
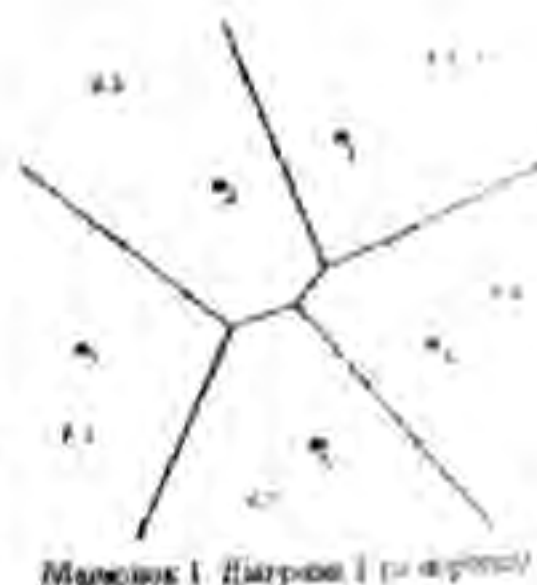
Key words: higher order random Voronoi diagrams on the plane, expected cell volume of random Voronoi diagram, probability density function approximation, General Gamma Distribution (GGD).

Вступ

Діаграми Вороного широко застосовуються в дослідженнях процесів кристалізації металів, кристалографії, географії, розпізнаванні образів, біології. Звідси виникає потреба в статистичних даних випадкових діаграм Вороного. Дослідження властивостей топологічних alpha-beta witness complexes, що проводиться спільно з Duke University, потребувало статистичних даних по діаграмам Вороного вищих порядків, які були відсутні.

Отримання оцінок, статистичних даних по випадкових діаграмах Вороного аналітично є надто складною задачею. Джерелом числових даних було комп'ютерне моделювання великої кількості випадкових діаграм. Отримані числові дані апроксимувалися аналітичними формами.

Визначимо поняття діаграми Вороного, та його узгальнення [1]. Якщо S множина точок на площині, і кожній точці площини співставлено найближчу точку з S , тоді площина стає поділеною опуклими полігонами – клітинками. Це розбиття називається діаграмою



Вороного. Кожна клітинка цього розбиття, що відповідає точці i з S , записується у вигляді:

$$V_i = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x - p_i\| < \|x - p_j\|, j \in \{1, \dots, n\} \setminus \{i\}\}, i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

Узагальнимо поняття діаграми Вороного. Нехай, S множина точок на площині, і кожній точці площини співставимо k найближчих точок з S . Тоді площина також стає поділеною опуклими полігонами – клітинками. Таке розбиття, за побудовою, називається діаграмою Вороного k -го порядку. Кожна клітинка цього розбиття, що відповідає точкам $i_1, \dots, i_k$ з S , записується у вигляді:

$$V_{i_1, \dots, i_k} = \{x \in \mathbb{R}^2 : \|x - p_{i_m}\| < \|x - p_j\|, j \in \{1, \dots, n\} \setminus \{i_1, \dots, i_k\}, m = 1, \dots, k\}, \quad (2)$$

$$\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}$$

Якщо множина S випадково згенерована, то відповідна їй діаграма Вороного називається випадковою.

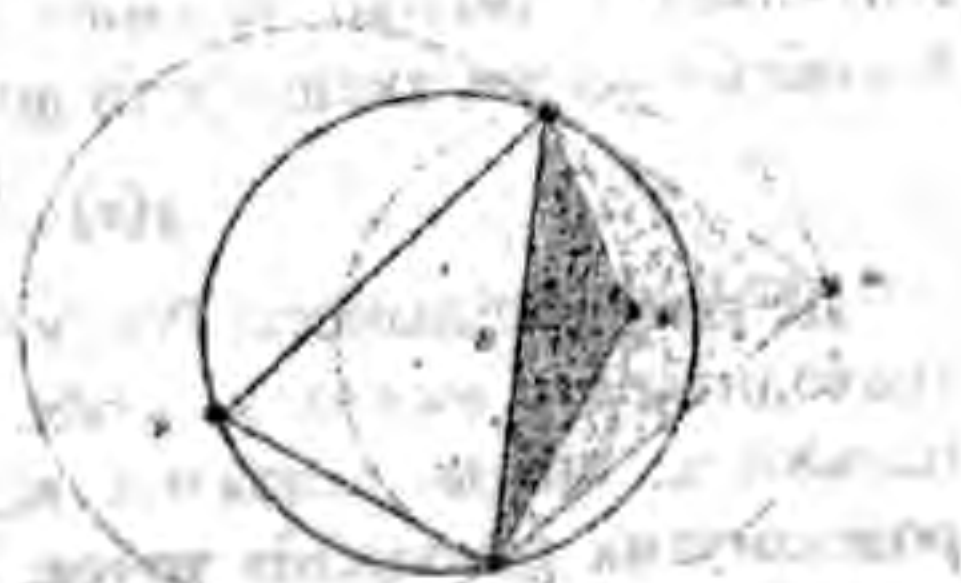
Достатньо повно досліджено діаграми першого порядку для Пуассонівського процесу [2,3,4,8]. У роботі [8] розглянуто також діаграми Вороного у 2-,3-,4-вимірному просторі. У деяких роботах наведено аналітичні формули, що апроксимують функції щільності випадкових величин [3,8].

Алгоритм побудови діаграми Вороного

Існує велика кількість ефективних алгоритмів побудови діаграм Вороного вищого порядку. В даному дослідженні діаграми вищих порядків будувалися з використанням k -дерева Делоне.

k -дерево Делоне уявляє собою орієнтовний ациклічний граф з корнем. Кожна вершина дерева – це трикутник, вершинами якого є точки з множини S . Нехай, описане коло трикутника містить k точок з множини S (це товщина трикутника), тоді, за побудовою, центр цього кола буде вершиною діаграми Вороного $(k+1)$ та $(k+2)$ порядків. Отже, цей трикутник – вершина k -дерева Делоне буде відповідати вершині діаграми Вороного. Основна властивість k -дерева Делоне – воно містить у якості своїх вершин всі трикутники товщини не більше k .

Після вставки нової точки ми оновлюємо структуру дерева: створюємо нові трикутники, що мають за вершину дану точку, та товщину не більше $k-1$, оновлюємо товщини існуючих до цього трикутників, і створюємо ієрархічні зв'язки між трикутниками. Кожна вершина дерева містить вказівники на своїх сусідів. З кожного свого ребра трикутник має по 2 сусіди: внутрішнього та зовнішнього. Поняття сусідства трикутників визначається таким чином. Для трикутника T зафіксуємо ребро E , через яке встановлюється сусід, та третю вершину p . Розглянемо рухаючийся диск, центр якого лежить на середині



перпендикулярі ребра E . Спочатку коло проходить через p , а потім рухається у напрямку, що виключає p з диску. Нехай, q_e – перша вершина яку рухаючися коло зустріне. Тоді трикутник $q_e E$ буде зовнішнім сусідом T по ребру E . Обираючи протилежний напрямок руху, маємо внутрішнього сусіда q_i . Звідси випливає основна властивість сусідів – їх товщина відрізняється рівно на 1.

Отже, процес оновлення сусідів є тривіальною задачею. При попаданні точки в описане коло якогось трикутника, нові трикутники, утворені нею становляться нащадками заповненого трикутника. Цей, ще один, тип зв'язку необхідний для зберігання властивості зв'язності дерева – тобто, щоб мати можливість обійти всі його вершини.

З двоїстості триангуляції Делоне та діаграми Вороного ми маємо можливість шляхом обходу k -дерева Делоне отримувати діаграми Вороного $1-k$ порядків. Ребра діаграми Вороного k -го порядку будуються між сусідніми трикутниками товщини $(k-1)$ та $(k-2)$ – це випливає з властивостей вершин дерева.

Оцінка часу роботи алгоритму для побудови діаграми k -го порядку з n точок за умови випадковості процесу вставки точок є $\Theta(k^2 n \log n)$. Великою перевагою алгоритму є побудова одночасно всіх необхідних порядків діаграми Вороного. Детальний опис дерева Делоне вищого порядку і алгоритму побудови подано у [7].

Результати моделювання

Було проведено моделювання випадкових діаграм з наступними розподілами точок на площині:

1. Рівномірний розподіл у одиничному квадраті $x \in \mathcal{U}[0..1]$, $y \in \mathcal{U}[0..1]$
2. Рівномірний розподіл у одиничному крузі $r \in \mathcal{U}\left[0, \sqrt{1/\pi}\right]$, $\varphi \in \mathcal{U}[0..2\pi]$

Досліджувалися діаграми 1-, 2-, 3-го порядків. Було застосовано 2 методи обрахунку статистики: всі обмежені клітинки, обмежені клітинки, що не межують з необмеженими (не мають спільних вершин). Статистика по деякій випадковій величині обчислюється як середнє з значень цієї в.в, отриманих у кожному експерименті.

В процесі дослідження виявилось, що встановити залежність між випадковою величиною (наприклад, математичне сподівання площі клітинки) і зміною певного параметра (наприклад, порядку діаграми) ймовірно легше, якщо брати до уваги щільність цієї випадкової величини.

$$g(x) = \frac{P(x, x+dx)}{dx}, \quad (3)$$

Де $g(x)$ – щільність, $P(x, x+dx)$ – ймовірність того, що розмір клітинки знаходиться у межах $x, x+dx$. Прийнято використовувати нормалізовану щільність, що не залежить від густини (кількості точок). Дійсно, і для розглянутих розподілів точок, залежність функції щільності від кількості точок може бути виражена аналітично, тобто була отримана залежність

функції щільності від кількості точок. Отже, ми будемо користуватися нормалізованою щільністю при наведені результатів.

У прикладних задачах набагато зручніше користуватися формулою, ніж табличними даними. Попередні дослідження [1,3,8] показали, що одним з можливих наближень досліджуваних функцій щільності є узагальнена Гамма-функція від трьох параметрів:

$$f(x) = a \frac{b^c}{2\Gamma(c)} x^{ac-1} \exp(-bx^a) \quad (4)$$

Апроксимація щільності

Припустимо, що функції щільності досліджуваних випадкових величин описуються узагальненою Гамма-функцією від трьох параметрів [5,6]. Для того, щоб наблизити щільність маючи таблицю значень, мінімізуємо різницю квадратів значень:

$$\min_{a>0, b>0, c>0} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \left(\frac{ab^c}{2\Gamma(c)} x_i^{ac-1} \exp(-bx_i^a) \right) \right)^2 \quad (5)$$

де n – кількість точок, в яких відоме значення функції, а y_i – значення в точці x_i .

Запишемо систему рівнянь, що задає розв'язок, прирівнявши часткові похідні (5) до нуля. Очевидно, маємо систему трьох рівнянь з трьома невідомими. Враховуючи загальність задачі, система завжди має єдиний розв'язок. Отже це забезпечує існування лише одного локального мінімуму, що, відповідно, і є мінімумом функції на області допустимих значень. Для знаходження цієї точки використовувався метод градієнтного зпуску.

Залежність від кількості точок

Отримані функції щільності для фіксованого розподілу вдалося внормувати за кількістю точок. Тобто, якщо $y = f(x)$ – графік нормованої щільності (однієї точки), то функція щільності для n точок має вигляд:

$$y = nf(nx) \quad (6)$$

Тепер спробуємо віднайти залежність функцій щільності від порядку діаграми Вороного. Зі спільного графіку можна зробити пропозицію, що функції щільності знову ж таки залежні. Але безпосередньо встановити залежність не вдалося. Очевидно лише, що така залежність буде несиметричною. Її пошук є предметом подальших досліджень.



Малюнок 6. Функції щільності
при $n = 50, 100, \dots, 500$

Числові дані

Запропонований загальний вигляд функції щільності:

$$f(x) = a \frac{n}{15} \frac{b^c}{2\Gamma(c)} \left(x \cdot \frac{n}{15}\right)^{ac-1} \exp\left(-b \left(x \cdot \frac{n}{15}\right)^a\right), \quad (7)$$

Де n – необхідна кількість точок.

Метод АВ – враховані всі обмежені клітинки, метод IV – враховані всі обмежені клітинки, що не мають спільних вершин з необмеженими.

Розподіл у квадраті ($x \in \mathbb{R}[0..1], y \in \mathbb{R}[0..1]$)				Розподіл у колі ($r \in \mathbb{R}\left[0, \sqrt{\frac{1}{\pi}}\right], \varphi \in \mathbb{R}[0..2\pi]$)			
Метод/порядок	A	B	C	Метод/порядок	A	B	C
IV1	0.776	42.50	5.237	IV1	1.404	36.176	0.777
IV2	2.993	810.00	0.09	IV2	2.9637	589.00	0.0412
IV3	2.5152	517.00	0.0591	IV3	4.0308	12096	-0.005
AB1	0.7672	41.340	5.256	AB1	1.2857	27.187	0.8626
AB2	3.0169	787.45	0.0895	AB2	2.9238	430.00	0.0424
AB3	2.5285	502.00	0.0592	AB3	4.0348	8831.0	-0.0047

Висновки

У даній статті були розглянуті методи отримання статистичних даних випадкових діаграм Вороного вищих порядків при рівномірному розподілі. Був проведений детальний аналіз чисельних даних, результатом якого стало віднайдення залежності між функцією щільності та густиною розподілу, аналітичні формули, що апроксимують функції щільності.

Важливість проведеного дослідження і його новизна полягає в тому, що були розглянуті випадкові діаграми Вороного вищих порядків. Дотепер не було необхідності в таких статистичних відомостях. Отримані результати будуть використані при дослідженні топологічних alpha-beta witness complexes сумісно з Duke University.

В подальшому планується дослідження діаграм Вороного у просторах з розмірністю 3 і більше, використовуючі різні випадкові розподіли точок.

Література

1. A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara and S. N. Chiu, Spatial Tesselations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams (Wiley, 2000)
2. A. Hinde, R. Miles, Statistical Computer Simulations (1980)
3. F. Jarai, Z. Neda, On the size-distribution of Poisson Voronoi Cells (2004)
4. K. Brakke, 2000000000 Random Voronoi Polygons (2005)
5. Jong Won Shin, Joon-Hyuk Chang, Nam Soo Kim, Speech Probability Distribution based on Generalized Gamma Distribution (2004)
6. T. Minka, Estimating a Gamma distribution (2002)
7. J. Boissonnat, O. Devillers, A Semi-Dynamic Construction of Higher Order Voronoi Diagrams and its Randomized Analysis (Algorithmica, 1993)
8. M. Tanemura, Random Voronoi Cells of Higher Dimensions (1991)

УДК 681.3

Олександр В. Замковий,
Олександр В. Шевченко*

Розробка програмного прототи- пу інформаційного інтелектуаль- ного пошукового агента

Описується методика функціо-
нування та архітектура прототипу
інформаційного інтелектуального пошу-
кового агента. Результатом роботи
агента є список ранжованих за однією з
базових моделей індексування посилань.
Розробка проведена на платформі .NET
компанії Microsoft з використанням мови
C#.

Ключові слова: Інтернет,
інформація, пошук, агент, індекс, .NET,
C#.

*E-mail: sheva@unicyb.kiev.ua

Olexandr V. Zamkovyi,
Olexandr V. Shevchenko*

Software prototype for information intellectual search agent develop- ment

Architecture and functioning methods
of informational intellectual search agent
are described. The result of its work is a list
of ranged links according to one of base
index models. Microsoft .NET platform and
programming language C# were used for
software development.

Key words: Internet, information,
search, agents, index, .NET, C#.

Вступ

У міру збільшення залежності людини від інформації, що надходить із Інтернет (її вірогідності, своєчасності, повноти й т.п.) пошук і розпізнавання інформації в Мережі перетворюється із разової операції у довгостроковий або навіть постійний процес. Для автоматизації такого пошуку необхідно використовувати спеціалізовані прикладні програми ("інтелектуальні агенти Інтернет"), які відслідковують зміни інформації, що перебуває в області інтересів конкретного користувача.

Агентами Інтернет називають програми, що автоматизують пошук, розпізнавання, отримання і аналіз інформації у Мережі, орієнтовані на потреби конкретного користувача (або групи користувачів).

Програмування агентів Інтернет є одним з найцікавіших напрямків в області пошуку й розпізнавання інформації в Мережі, що активно розвивається останнє десятиліття. Перспективність цього підходу була продемонстрована в ряді дослідницьких і комерційних проектів (див. огляди [1, 2]).

У даній статті описується створення працюючого прототипу інтелектуального пошукового агента на прогресивній та сучасній платформі .NET, яка ефективно функціонує як у складі серверного середовища, так і клієнтського середовища.

Методика пошуку інформації

Методи побудови пошукового агента ґрунтуються на різних системах індексації тематик, внесення індексованої інформації в каталоги і на ручному або автоматизованому пошуку інформації [3, 4, 5]. По каталогам забезпечується більш швидкий доступ до потрібної інформації.

При створенні програмного прототипу розглядалися методи пошуку інформації відносно документальних систем із статичним підходом, оснований на зборі і обліку статистики розподілу слів у документі або колекції документів відповідно запиту користувача, а також деякі аспекти семантичного підходу до пошуку інформації по тезаурусу, сутність якого міститься у розкриванні змісту окремих слів речення у контексті документу або колекції документів, що розташовані у Інтернет.

В пошуку тематичної інформації головними є: агент користувача, інформаційний агент, агент-посередник, агент постачальник інформації тощо [6, 7]. Розглянемо коротко їх функції.

Агент користувача – витягує із інформаційного середовища потрібні дані на запит користувача. В добуванні інформації йому допомагає агент-посередник та інформаційний агент.

Інформаційний агент – вилучає інформацію з зовнішніх джерел, аналізує і маніпулює отриманою інформацією з цих джерел, формує різні архіви та індекси. Він розбиває запит на частини для планування і підготовки їх для передачі іншим агентам для обробки відповідної частини, забезпечує з іншими агентами здобуття інформації із ресурсів мережі. До функцій цього агента відносяться:

- пошук інформації відповідно запиту;
- можливість автономного виконання частин завдань у запиті;
- фільтрацію потоків інформації;
- можливість доставки отриманої інформації користувачу та ін.

Цей агент також оброблює і частково неточну та неповну інформацію, яка міститься у різних ресурсах мережі.

Агент-посередник – забезпечує сервісні функції шляхом взаємодії з агентом користувачем і агентами постачальниками інформації. Він забезпечує доступ до БД або баз знань для формування відповіді на запит.

Агент-постачальник – перетворює запит у стандартизовану форму, яку зрозуміє інформаційний ресурс мережі.

За допомогою агентів значно спрощується пошук тематичної інформації, знижується вартість за рахунок одночасного обслуговування декількох запитів та підвищується якість пошуку за рахунок більш точного опису цілей та намірів користувачів.

Результатом роботи прототипу головного при виконанні запитів користувача [8, 9] інформаційного інтелектуального пошукового агента, є список ранжованих за однією з базових моделей індексування посилань.

Інструментальні засоби

Microsoft Visual Studio 2005 (MSVS 2005),— ланка продуктів фірми Майкрософт, що включає інтегроване середовище для розробки програмного забезпечення і ряд інших інструментальних засобів.

Для кодування агента було обрано мову програмування C#, тому що платформа цієї мови програмування .NET є однією із найбільш надлишкових і зручних для програмування.

Веб-сервер Apache HTTP Server v 2.0.56 – найпопулярніший в Інтернет (68%). Основними перевагами Apache вважаються надійність, відносна стійкість до зламу, гнучкість конфігурування, дозволяє підключати зовнішні модулі для надання даних, використовувати СУБД для авторизації користувачів, модифікувати повідомлення про помилки й т.п.

Для збереження даних, з якими працює агент використовується база даних *MySQL Database Community Edition 5.0 – Database Server and Client* найбільш популярною базою даних із відкритим кодом. За допомогою спеціального ODBC драйвера досить легко поєднується із C#, для транзакцій використовує типову мову SQL стандарту ANSI 1999-го року. MySQL характеризується великою швидкістю, стійкістю й легкістю у використанні, і є рішенням для малих і середніх додатків.

Інформаційним середовищем для агента є пошукова система (ПС) Google. Лідер пошуку в Інтернет, Google займає більш, ніж 70 % світового ринку, і таким чином, сім із десяти людей, що знаходяться у Мережі використовують саме Google для пошуку потрібної інформації. Зараз ця ПС реєструє близько 50 млн. пошукових запитів та індексує більше 8 мільярдів веб-сторінок щодня. Google може виконувати пошук інформації на 101-й мові. Інтерфейс Google пропонує доволі складну мову запитів, яка дозволяє звести зону пошуку до окремих доменів, мов, типів файлів і т. д.

Структура системи

Як вже було зазначено, агент використовує найбільш популярну ПС – Google та СУБД MySQL. Реалізована схема інтелектуального пошукового агента подана на рис. 1.

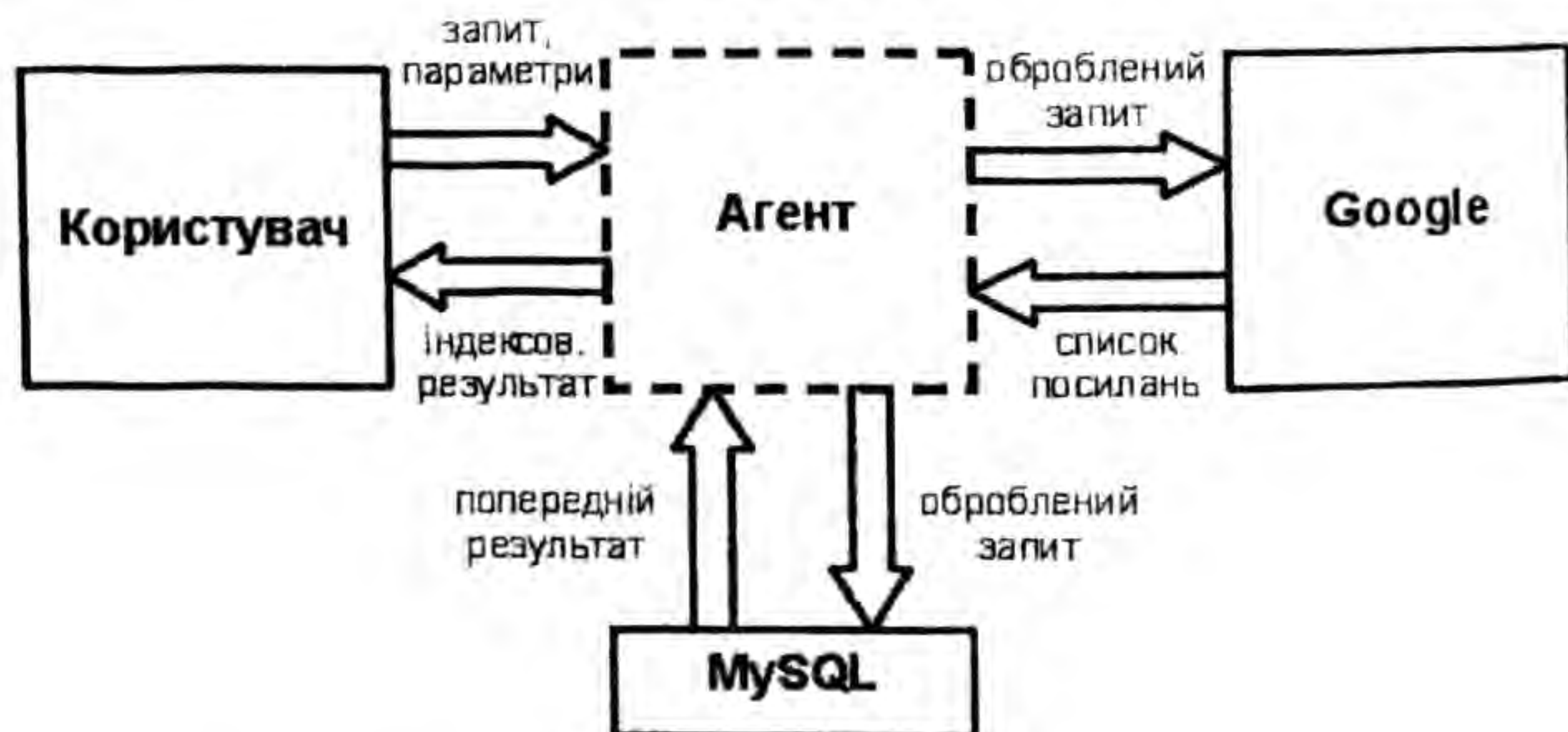


Рис. 1: Модель реалізованого агента.

Параметрами користувача (на рис.1) є:

1. Запит – власне пошуковий запит.
2. Точка актуальності – дата, пізніше якої документи вважаються застарілими (впливає на актуальність посилань у базі даних).
3. Коефіцієнт преференцій (від 0 до 1) – на скільки використовувати попередні дані, що зберігаються у базі даних, 1 – сильно використовувати, 0 – не використовувати.
4. Кількість URL – кількість посилань у ІС, які буде перебирати агент.
5. Час роботи – час, відведений на отримання результатів агентом, по закінченню робота агента припиняється і видається результат.
6. Метод – який метод індексації використовувати.

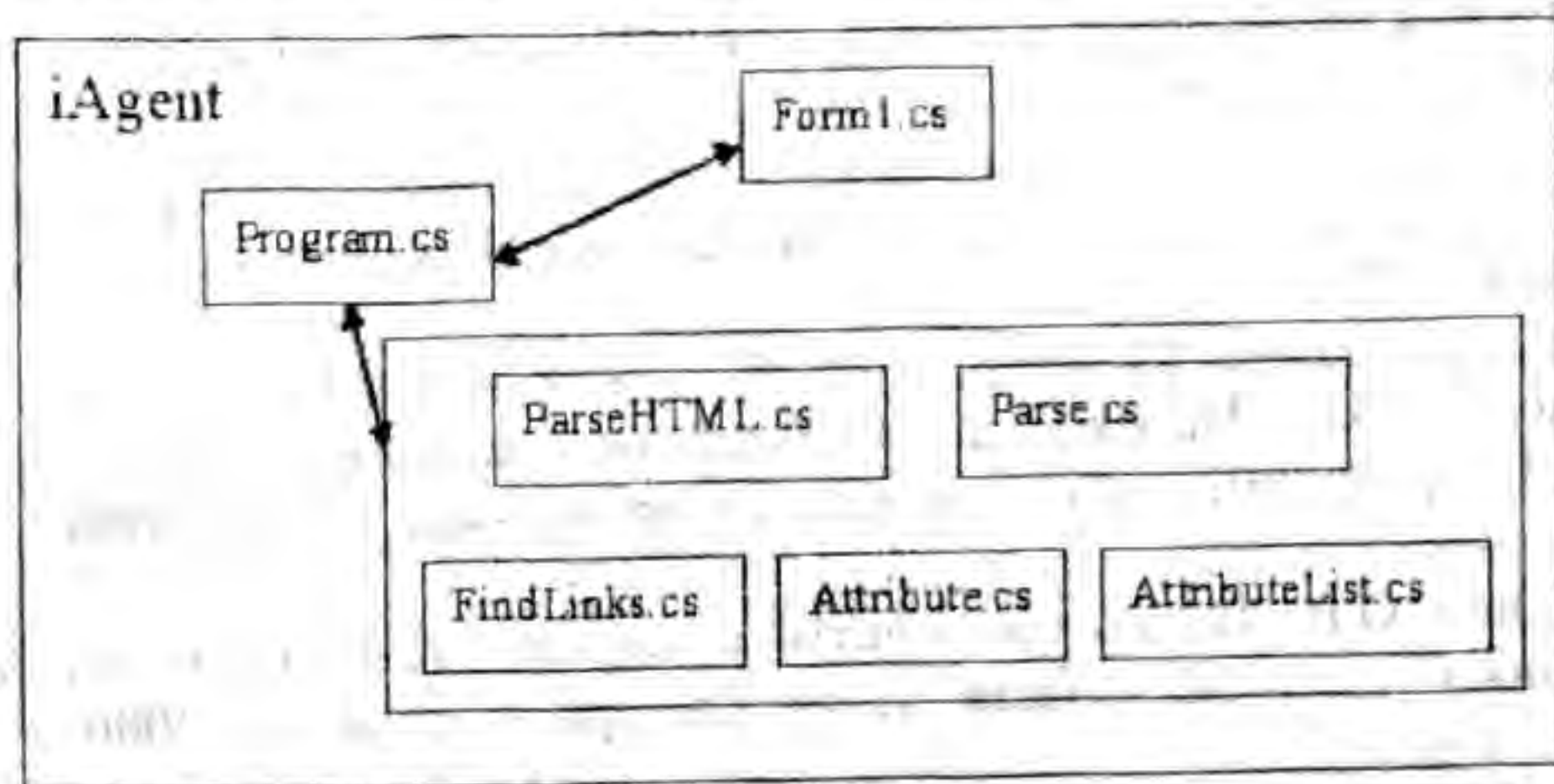
Після завдання параметрів користувача агент автономно викликає відповідний пошуковий запит у ІС і починає обхід сторінок. З'єднання із ІС відбувається асинхронно і автономно за допомогою посилання відповідного http-запиту. Обхід сторінок відбувається по http-відповідях за допомогою html-парсера на С#. Всі посилання зберігаються у базі даних для відповідного користувача. Далі за обраною моделлю індексації генеруються коефіцієнти релевантності до запиту.

Після обходу сторінок, що видає ІС, за обраною моделлю індексації формується найбільш відповідний заданому запиту минулий запит (із попередніх пошуків) і корегуючи результат, отриманий від ІС з урахуванням минулих пошуків генерується результат роботи агента.

Таким чином, користувач отримує список ранжованих адрес із відповідними витягами місць знаходження запиту і релевантністю. Користувач обирає необхідні посилання із списку, його поведінка відслідковується і запам'ятовується агентом у базі даних, щоб результат можна було використовувати для подальших запитів.

Програмна реалізація складається із наступних модулів: Program.cs – головний модуль, що відповідає за компонування всіх модулів, з'єднання з Мережею, містить основні алгоритми роботи та працює із СУБД, тобто зберігає оброблені гіперпосилання у MySQL, а також здійснює попередню фільтрацію непотрібних посилань (наприклад банерів) і відповідає за обробку результатів взаємодії з користувачем та генерацію самого результату. FindLinks.cs, Attribute.cs, AttributeList.cs, Parse.cs, ParseHTML.cs – відповідають за розпізнавання html-коду та пошук посилань на веб-сторінках, тобто виконують їх парсування із подальшим поділом на html-теги (наприклад
, <form></form> і т.д.), таким чином сторінка представляє у програмі вже не як текст, а як об'єкт. Із розпізнаних тегів окремо виділяються <a href>, що відповідають за гіперпосилання на веб-сторінці. Form1.cs – відповідає за взаємодію із користувачем (зчитує параметри отримання результату та налаштування для доступу у Мережу такі, як адреса проксі-сервера і т.п.).

Структуру проекту можна поділити на 2 рівні:



Висновки

- Запропоновано реалізацію мовою C# прототипу інтелектуального пошукового агента, при цьому з демонстраційною метою інтерфейс агента має діалогову структуру і являє собою процес взаємодії агента з одним користувачем.

- Розроблене програмне забезпечення становить 578 рядків мовою С#, 7 програмних модулів, 2 рівні.
- При взаємодії з клієнтом дані про запити та результати роботи зберігаються у базі даних разом із відомостями про сторінки, що відкриває користувач, це дозволяє використовувати інтелектуальність агента і на основі здійснених запитів і відгуків користувача перебудовувати коефіцієнти релевантності для сторінок-результатів у подібних запитах конкретного користувача.
- Виконано експериментальний пошук інформації із використанням інформаційного пошукового агента та агента-брокера.

Література

1. Davison A. Logic Programming Languages for the Internet // A. Kakas, F. Sadri (editors), Invited Submission for Computational Logic: From Logic Programming into the Future. - Springer, 2001.
(<http://fivedots.coe.psu.ac.th/~ad/papers/summBob.ps.gz>)
2. Morozov A.A., Obukhov Yu.V., Gulyaev Yu.V. On the Problem of Using Logic Object-Oriented Programming in the World Wide Web // Proc. of the Special Russian Session "The Internet Developments in Russia". First IEEE/Popov Workshop on Internet Technologies and Services. - Moscow, 1999. - PP. 54-59.
(<http://www.cplire.ru/Lab144/internet.pdf>)
3. Банков В.Д. Интернет: поиск информации и продвижение сайтов. - Спб. Питер.-2000.-288с.
4. Кураленок И.Е. Автоматическая классификация документов с использованием семантического анализа // Программирование, М.: 2000, № 4.-с.31-41.
5. Курник А.П. Поиск в Интернет. - Спб. -Питер.- 2001.-272с.
6. Шевченко О.В. Підходи до здобування тематичної інформації із мережі Інтернет // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки, 2006. - № 1 - с.156 - 160.
7. Шевченко О.В. Взаємодія агентів в мережі. Аналіз та методи її представлення // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки, 2006. - № 3 - с.165 - 170.
8. Андон П.І., Дерещкий В.О. Процесори пошуку та аналізу природо мовної тематичної інформації в аналітичних системах // Проблеми програмування.-2001.- №3-4.-с.144-165.
9. Плєскач В.Л., Рогушина Ю.В. Агентні технології, Київ.- КНТЕУ.- 2005.-337с.

Надійшла до редакції 15.09.2005

УДК 519.21

Олександр М. Іксанов

Моментні результати, пов'язані з процесами Гальтона-Ватсона

Для вгнутих функцій f знайдено критерій скінченності f -моментів граничної випадкової величини для нормалізованого надкритичного процесу Гальтона-Ватсона.

Ключові слова: процес Гальтона-Ватсона; моменти; випадковий степеневий ряд; заміна міри

E-mail: iksan@unicyb.kiev.ua
www: <http://unicyb.kiev.ua/~iksanov>

Alexander M. Iksanov

Moment results concerning Galton-Watson processes

For concave functions f a criterion is given for the finiteness of f -moments of a limit random variable for normalized supercritical Galton-Watson process.

Key words: Galton-Watson process; moments; random power series; change of measure.

1. Вступ та результати.

Нехай $Z_n, n=1,2,\dots$ - надкритичний процес Гальтона-Ватсона, у якому середнє число дітей одного індивідуума $m := EZ_1 \in (1, \infty)$. За теоремою Кестена-Стігума ([1], теорема I.10.1) невід'ємний мартингал $W_n = Z_n / EZ_n$ збігається майже напевно (м.н.) та в середньому до випадкової величини (в.в.) W з $EW = 1$ тоді і тільки тоді, коли

$$EZ_1 \ln(1 + Z_1) < \infty. \quad (1)$$

При цьому $\{\omega : W(\omega) > 0\} = \{\omega : Z_n(\omega) \rightarrow \infty\}$ м.н.

Нехай функції $f, g \geq 0$ вимірні, не обмежені на нескінченності та функціонально залежні у підходящому розумінні. У літературі існують результати ([2-4]), у яких вивчається зв'язок між існуванням f -моментів W та g -моментів Z_1 . Зокрема, еквівалентність

$$EW^p < \infty \Leftrightarrow EZ_1^p < \infty, \quad p > 1 \quad (2)$$

добре відома і може бути доведена різними способами. Перший, більш цікавий результат був отриманий у [2]:

$$EW \ln^p(1+W) < \infty \Leftrightarrow EZ_1 \ln^{p+1}(1+Z_1) < \infty, \quad p > 0. \quad (3)$$

Нехай C^* -клас опуклих та диференційованих функцій ϕ , що мають властивості: (1) $\phi(0) = \phi'(0) = 0$; (2) для деякого натурального n $\phi(x^{2^n})$ є опуклою функцією з вгнутою похідною; (3) $L\phi(x) := \int_0^x \int_0^s (\phi(r)/r) dr ds < \infty$.

Цей клас був введений у [4], де також була встановлена еквівалентність

$$0 < E\phi(W) < \infty \Leftrightarrow EL\phi(Z_1) < \infty, \quad \phi \in C^*.$$

Введемо умову A: функція $f \geq 0$ є вимірною, $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \infty$ та знайдеться $d \geq 0$ таке, що f зростає та є вгнутою на $[d, \infty)$. Визначимо

нову функцію так:

$$g(x) := \int_d^x (f(y)/y) dy \text{ при } x \geq d; \quad g(x) = 0 \text{ при } x < d.$$

Наведемо основний результат роботи.

Твердження 1.1. Якщо виконуються умова А та (1), то

$$EWf(W) < \infty \Leftrightarrow EZ_1 g(Z_1 \vee d) < \infty. \quad (4)$$

Зауваження. Для множини $D^* = \{f: f(x) = xf(x), f \text{ задовольняє умову А}\}$ маємо $D^* \cap C^* \neq \emptyset$. Але жодна з цих множин не є власною підмножиною іншої.

З еквівалентності (2) з $p \in (1, 2)$ випливає, що іноді у (4) g можна замінити на f . З іншого боку, з еквівалентності (3) випливає, що це можна зробити не завжди. Виникає питання: чи існують вгнуті функції f , відмінні від степеневих, для яких

$$EWf(W) < \infty \Leftrightarrow EZ_1 f(Z_1) < \infty. \quad (5)$$

Наслідок 1.2. Припустимо, що f задовольняє умову А, та при $x \geq d$ $f(x) = x^\alpha h(x)$, де $\alpha \in (0, 1)$, а $h(x)$ не спадає при $x \geq d$. Тоді (5) виконується.

Результати робіт [2-3] були отримані аналітичними методами. У [4] був запропонований імовірнісний підхід, що базується на використанні декількох моментних нерівностей для в.в., що є значеннями опуклих функцій з мартингалами в якості аргументу. Техніка даної роботи є узагальненням підходу до доведення твердження 4 [5]. Зазначимо, що у [5] розглядався більш загальний процес (гіллясте випадкове блукання), але існування f -моментів досліджувалось лише для степеневих функцій f . Наша техніка істотно базується на підхожій зміні міри, що вперше використовувалася у [6] (перехід від міри GW до $\overline{GW}$ описаний у розділі 2). Під дією міри $\overline{GW}$ в.в. W може бути «порівняна» зі збіжним випадковим степеневим рядом, аналіз якого набагато простіший. Оскільки наше доведення потребує залучення нерівності Йєнсена для умовних математичних сподівань, припущення вгнутості f здається необхідною складовою застосовності методу.

Детальні доведення містяться у розділі 2. У розділі 3 наведені приклади функцій, що ілюструють твердження 1.1 та наслідок 1.2.

2. Доведення.

При $x > d$ функція $f(x)/x$ не зростає, а права похідна f' визначена і не зростає. Нагадаємо, що вгнута функція f абсолютно неперервна, та f є версією її щільності.

Доведення наслідку 1.2. При $x > d$

$$f'(x) \leq f(x)/x = g'(x), \quad f(x) \leq g(x) + f(d) - g(d). \quad (6)$$

Тому з $EZ_1 g(Z_1 \vee d) < \infty$ завжди випливає $EZ_1 f(Z_1 \vee d) < \infty$ для довільної

функції f , що задовольняє умову А. З іншого боку,

$$g(x) = \int_d^x (f(u)/u) du \leq \alpha^{-1} f(x) - \alpha^{-1} d^a h(x).$$

Тому з $EZ_1 f(Z_1 \vee d) < \infty$ випливає $EZ_1 g(Z_1 \vee d) < \infty$ для $f(x) = x^a h(x)$, що задовольняє умову А. Залишається скористатися твердженням 1.1.

Результат, близький до леми 2.1, наведеної нижче, встановлений у теоремі 2 [7]. Але наші припущення та доведення інші.

Лема 2.1. Нехай $\{\xi_k : k = 1, 2, \dots\}$ - незалежні копії невід'ємної в.в. ξ з $E \ln(\xi + 1) < \infty$. Для фіксованого $b \in (0, 1)$ покладемо $X := \sum_{n=0}^{\infty} b^n \xi_n$. Тоді $X < \infty$

м.н. Якщо f та g задовольняють умову А, то з $Eg(\xi) < \infty$ випливає $Ef(X) < \infty$.

Доведення. М.н. скінченність X відома і випливає, наприклад, з ознаки Коші збіжності числових рядів та леми Бореля-Кантеллі.

Без обмеження загальності можемо вважати, що f зростає та є вгнутою на $[0, \infty)$, $f(0) = 0$ та $g(x) = \int_0^x (f(u)/u) du$. Щоб побачити це, замість

$f(x)$ достатньо розглянути функцію $f(x+d) - f(d)$. Надалі f' позначає правобічну похідну f .

З невід'ємності та вгнутості f випливає її субадитивність. Для кожного $k \in \mathbb{N}$ $Ef(\sum_{n=0}^k b^n \xi_n) \leq E \sum_{n=0}^k f(b^n \xi_n) = \sum_{n=0}^k \int_0^{\infty} P\{f(b^n \xi_n) > x\} dx =: I_k$. Зробивши заміну змінної $v = b^{-n} f^{-1}(x)$ та скориставшись нерівністю

$$f(v) \geq \int_{b^{n+1}v}^{b^n v} f'(y) dy = \sum_{n=0}^k \int_{b^{n+1}v}^{b^n v} f'(y) dy \geq (1-b)v \sum_{n=0}^k b^n f'(b^n v),$$

отримаємо $I_k = \sum_{n=0}^k \int_0^{\infty} P\{\xi_n > v\} b^n f'(b^n v) dv \leq \int_0^{\infty} P\{\xi > v\} (\sum_{n=0}^k b^n f'(b^n v)) dv \leq$

$$\leq (1-b)^{-1} \int_0^{\infty} P\{\xi > v\} (f(v)/v) dv = (1-b)^{-1} \int_0^{\infty} P\{\xi > v\} g(v) dv.$$

Таким чином, величина $Ef(\sum_{n=0}^k b^n \xi_n)$ обмежена зверху константою, що не залежить від k . Залишається скористатися теоремою Лебега про монотонну збіжність.

Доведення достатності у твердженні 1.1. Нехай $\{Y_k : k = 1, 2, \dots\}$ - незалежні копії в.в. Y з розподілом $P\{Y = k\} = kp_1/m$, $k = 1, 2, \dots$, де $\{p_k : k = 0, 1, \dots\}$ - розподіл числа дітей одного індивідуума. Нехай GW - ймовірнісна міра на множині дерев Гальтона-Ватсона. У роботі [6] на множині зсунутих за розміром дерев побудована ймовірнісна міра $\overline{GW}$.

Останні дерева мають таку структуру. Початковий предок v_0 (корінь дерева) народжує Y_1 дітей. Один з цих нащадків v_1 , обраний навмання, народжує Y_2 дітей, а всі інші діти індивідуума v_0 є коренями незалежних дерев Гальтона-Ватсона, незалежних також від Y_2 . Оберемо навмання одного з нащадків v_1 , назовемо його v_2 . Він має Y_3 дітей і т.д.

Нехай $E_{GW} Z_1 g(Z_1) < \infty$. Тоді

$$E_{\overline{GW}} g(Y-1) < \infty. \quad (8)$$

Позначимо через Ξ σ -алгебру, породжену $\{Y_k : k = 1, 2, \dots\}$. Згідно з результатами [6]

$$E_{\overline{GW}}(W_n | \Xi) = \sum_{k=1}^n (Y_k - 1) / m^k, \quad (9)$$

та W_n збігається до W $\overline{GW}$ м.н. Тому за лемою Фату

$$E_{\overline{GW}}(W | \Xi) \leq \sum_{k=1}^{\infty} (Y_k - 1) / m^k =: V \quad (10)$$

Оскільки f не спадає та є вгнутою, то, використовуючи нерівність Йенсена та застосовуючи оператор математичного сподівання ще раз, отримуємо

$$E_{\overline{GW}}(f(W) | \Xi) \leq f(E_{\overline{GW}}(W | \Xi)) \leq f(V); \quad E_{\overline{GW}} f(W) \leq E_{\overline{GW}} f(V). \quad (11)$$

За лемою 2.1 з умови (8) випливає скінченність правої частини (11).

Отже, $E_{GW} W f(W) = E_{\overline{GW}} f(W) < \infty$. Достатність доведена.

Для доведення необхідності у твердженні 1.1 потрібні три леми. Лема 2.2 є $\overline{GW}$ -аналогом нерівності, отриманої у лемі П.2.6 [8].

Лема 2.2. Для кожного достатньо малого $a > 0$ знайдеться $B > 1$ таке, що при $t > 1$ виконуються нерівності

$$\overline{GW}\{W > t\} \leq \overline{GW}\{\sup_{n \geq 0} W_n > t\} \leq B \overline{GW}\{W > at\}.$$

Лема 2.3. Нехай $\{\xi_k : k = 1, 2, \dots\}$ -незалежні копії в.в. ξ . Виберемо довільне $b > 0$ так, щоб $P\{\xi > b\} > 0$. Для довільних $k \in N$ та $a < bP\{\xi > b\}$

$$P\{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \xi_i > a\} \geq \frac{(E(\xi \wedge b) - a)^2}{E(\xi \wedge b - a)^2}. \quad (12)$$

Доведення. Якщо η -в.в. з $E\eta > 0$, то

$$P\{\eta > 0\} \geq \frac{(E\eta)^2}{E\eta^2}. \quad (13)$$

Покладемо $\zeta_i = \xi_i \wedge b - a$ та $\eta_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \zeta_i$. Оскільки $E\eta_k = E\zeta_1 > 0$, застосовна нерівність (13):

$$P\{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \xi_i > a\} \geq P\{\eta_k > 0\} \geq \frac{(E\eta_k)^2}{E\eta_k^2} = \frac{k(E\zeta_1)^2}{E\zeta_1^2 + (k-1)(E\zeta_1)^2} \geq \frac{(E\zeta_1)^2}{E\zeta_1^2}.$$

Остання нерівність є наслідком того, що функція $x \rightarrow \frac{x(E\zeta_1)^2}{E\zeta_1^2 + (x-1)(E\zeta_1)^2}$

не спадає при $x \geq 1$. Лема 2.3 доведена.

Доведення лема 2.2. Ліва нерівність очевидна. Доведемо праву. Під дією міри $\overline{GW}$ виконується рівність розподілів

$$W = m^{-n}W + m^{-n} \sum_{i=1}^{Y_n} V^{(i)}, \quad (14)$$

де при заданому Y_n , $\{V^{(k)}; k=1,2,\dots\}$ -умовно незалежні копії в.в. V з розподілом $\overline{GW}\{V \in \bullet\} = GW\{W \in \bullet\}$. Для $t > 1$ та $n=1,2,\dots$ розглянемо події $E_n = \{\max_{1 \leq i \leq Y_n} W_i \leq t, W_n > t\}$. Зафіксуємо $b > 0$ та виберемо довільне $a \in (0, bGW\{W > b\})$. Тоді $\overline{GW}$ м.н.

$$\overline{GW}\left\{\frac{1}{Y_n} \sum_{i=1}^{Y_n} V^{(i)} > a \mid \sigma(Y_1, \dots, Y_n)\right\} \stackrel{(12)}{\geq} \frac{(E_{\overline{GW}}(V \wedge b) - a)^2}{E_{\overline{GW}}(V \wedge b - a)^2} =: \frac{1}{B}.$$

$$\text{Отже, } \overline{GW}\{W > at \mid E_n\} \stackrel{(14)}{\geq} \overline{GW}\left\{\frac{1}{W_n m^n} \sum_{i=1}^{Y_n} V^{(i)} > \frac{at}{W_n} \mid E_n\right\} \geq$$

(скористаємось тим, що $W_n \leq Y_n m^n$ $\overline{GW}$ м.н.)

$$\geq \overline{GW}\left\{\frac{1}{Y_n} \sum_{i=1}^{Y_n} V^{(i)} > a \mid E_n\right\} = (\overline{GW}(E_n))^{-1} E_{\overline{GW}} \overline{GW}\{\bullet \mid \sigma(Y_1, \dots, Y_n)\} 1_{E_n} \geq \frac{1}{B}.$$

Нерівність $\overline{GW}\{W > at\} \geq \sum_{n=1}^{\infty} \overline{GW}\{W > at \mid E_n\} \overline{GW}(E_n) \geq B^{-1} \overline{GW}\{\sup_{n \geq 0} W_n > t\}$ завершує доведення лема.

Наступна лема—елементарний наслідок лема 2.2.

Лема 2.4. Для довільної невід'ємної, неспадної та анти-зіркоподібної (зокрема вгнутої) функції h

$$E_{\overline{GW}} h(W) < \infty \Leftrightarrow E_{\overline{GW}} h(\sup_{n \geq 0} W_n) < \infty.$$

Доведення необхідності у твердженні 1.1. Припустимо, що $E_{\overline{GW}} f(W) = E_{GW} W f(W) < \infty$. Під дією міри $\overline{GW}$ $Z_n \geq Y_n$, а f не спадає, тому

$$\infty > E_{\overline{GW}} f(\sup_{n \geq 0} W_n) \geq E_{\overline{GW}} f(\sup_{n \geq 0} (Y_n / m^n)),$$

при цьому перша нерівність випливає з лема 2.4.

Якщо носій розподілу Y обмежений зверху, то для всіх $r \in \mathbb{N}$ $E_{\overline{GW}} Y^r = m^{-1} E_{GW} Z_1^{r+1} < \infty$. З (2) випливає $E_{GW} W^{r+1} < \infty$, і результат твердження тривіально виконується. Надалі вважаємо, що $\overline{GW}\{Y > t\} > 0$ для великих t .

Внаслідок (1) $E_{\overline{GW}} \ln(Y+1) < \infty$. Виберемо $s > 0$ так, щоб

$\overline{GW}\{Y \leq ms\} > 0$. Тоді $\prod_{j=1}^{\infty} \overline{GW}\{Y \leq m^j s\} =: C > 0$, і при $t \geq s$

$$\overline{GW}\{\sup_{n \geq 0} (Y_n / m^n) > t\} = \sum_{n=1}^{\infty} \overline{GW}\{Y > m^n t\} \prod_{j=1}^{n-1} \overline{GW}\{Y \leq m^j t\} \geq \quad (15)$$

$$\geq \sum_{n=1}^{\infty} \overline{GW}\{Y > m^n t\} \prod_{j=1}^{n-1} \overline{GW}\{Y \leq m^j s\} \geq C \sum_{n=1}^{\infty} \overline{GW}\{Y > m^n t\}.$$

Для завершення доведення достатньо показати, що

$$\int_0^{\infty} g'(u) \overline{GW}\{Y > mu\} du < \infty.$$

Це випливає з таких нерівностей

$$\begin{aligned} \infty &> \int_0^{\infty} f'(t) \overline{GW}\{\sup_{n \geq 0} (Y_n / m^n) > t\} dt \stackrel{(15)}{\geq} C \int_0^{\infty} f'(t) \sum_{n=1}^{\infty} \overline{GW}\{Y > m^n t\} dt \geq \\ &\geq (m-1)^{-1} C \int_0^{\infty} f'(t) \int_{mt}^{\infty} z^{-1} \overline{GW}\{Y > z\} dz = \text{const} + (m-1)^{-1} C \int_0^{\infty} t^{-1} f(t) \overline{GW}\{Y > mt\} dt. \end{aligned}$$

Твердження 1.1 доведене.

3. Приклади.

Наведемо приклади пар функцій f та g , що задовольняють умову А, а також відповідні еквівалентності типу (4). В останніх мультиплікативні константи та доданки менших порядків будуть випущені.

(1) $f(x) = x^{p-1}$, $p \in (1, 2)$, $g(x) = (p-1)^{-1} x^{p-1}$ дають (2) з $p \in (1, 2)$;

(2) якщо $p \in (0, 1]$ $f(x) = e^{-1} x 1_{[0, e]}(x) + \ln^p x 1_{(e, \infty)}(x)$,

$g(x) = (p+1)^{-1} (\ln^{p+1} x - 1) 1_{[e, \infty)}(x)$, якщо $p > 1$ $f(x) = p(p-1)e^{1-p} x 1_{[0, e^{p-1}]}(x) +$
 $+ (\ln^p x + (p-1)^2) 1_{(e^{p-1}, \infty)}(x)$,

$g(x) = ((p+1)^{-1} (\ln^{p+1} x - (p-1)^p) + (p-1)^2 (\ln x - p + 1) 1_{(e^{p-1}, \infty)}(x))$ дають (3);

(3) $f(x) = \beta^{\beta} e^{-\beta - \exp \beta} x 1_{[0, \exp(\beta^{\beta})]}(x) + (\ln^{\beta} \ln x + c) 1_{(\exp(\beta^{\beta}), \infty)}(x)$ з $\beta > 0$, $c = (\beta/e)^{\beta} - \beta$,

$g(x) = (\ln x \ln^{\beta} \ln x - \beta e^{\beta} - \beta \int_{e^{\beta}}^{\ln x} \ln^{\beta-1} u du + c(\ln x - e^{\beta})) 1_{(e^{\beta}, \infty)}(x)$ дають

$$EW \ln^{\beta} \ln(W + e) < \infty \Leftrightarrow EZ_1 \ln(Z_1 + e) \ln^{\beta} \ln(Z_1 + e) < \infty.$$

Проілюструємо прикладом наслідок 1.2.

(4) $f(x) = b x 1_{[0, a]}(x) + (x^{\beta} \ln^{\gamma} x + c) 1_{(a, \infty)}(x)$ з $\beta \in (0, 1)$, $\gamma > 0$, $a = \exp(\gamma/(1-\beta))$,
 $b = a^{\beta-1} \ln^{\gamma-1} a (\beta \ln a + \gamma)$, $c = a^{\beta} \ln^{\gamma-1} a (\gamma - (1-\beta) \ln a)$ задовольняє умови наслідку 1.2. Тому

$$EW^{\beta+1} \ln^{\gamma} (W + 1) < \infty \Leftrightarrow EZ_1^{\beta+1} \ln^{\gamma} (Z_1 + 1) < \infty.$$

Література

1. Athreya K.B., Ney P. Branching processes.—New York: Springer, 1972.
2. Athreya K.B. A note on a functional equation arising in Galton-Watson branching processes // J. Appl. Prob. —1971. — V. 8. — p. 589-598.
3. Bingham N.H., Doney R.A. Asymptotic properties of supercritical branching processes I: The Galton-Watson process // Adv. Appl. Prob.—1974. —V. 6.—p. 711-731.

4. Alsmeyer G., Roesler U. On the existence of ϕ -moments of the limit of a normalized supercritical Galton-Watson process // J. Theor. Prob.—2004.— V. 17.— p. 905-928.
5. Iksanov A.M. Elementary fixed points of the BRW smoothing transforms with infinite number of summands // Stoch. Proc. Appl.—2004.—V. 114.— p. 27-50.
6. Lyons R., Pemantle R., Peres Y. Conceptual proofs of LlogL criteria for mean behaviour of branching processes // Ann. Prob.—1995.—V. 23.—p. 1125-1138.
7. Zerner M.P.F. Integrability of infinite sums of heavy-tailed i.i.d. random variables // Stoch. Proc. Appl.—2002. — V. 99.— p. 81-94.
8. Asmussen S., Hering H. Branching processes.—Boston: Birkhauser, 1983.

Надійшла до редакції 06.09.2006

УДК 517.9:519.3

Володимир О. Капустян, Олена А.
Капустян*, Іван Д. Фартушний

**Асимптотики мінімаксних оцінок
функціоналів від розв'язків кри-
тичної параболічної періодичної
крайової задачі в класі
обмежених функцій.**

*В роботі розглянуто задачі
мінімаксного оцінювання лінійних
функціоналів від розв'язків параболічних
сингулярно збурених періодичних
крайових задач в критичному випадку з
інтегральним оператором спостере-
ження. Побудовано асимптотики
довільного порядку точності та
наведено їх обґрунтування*

*Ключові слова: мінімаксна оцінка,
спостереження.*

Volodymyr O. Kapustyan, Olena A.
Kapustyan*, Ivan D. Fartushny

**Asymptotics of minimax estimates
of functionals from the solutions of
parabolic periodic boundary value
problem in the class of the limited
functions.**

*In work the problems of minimax
estimation of linear functional are
considered from the solutions of the
parabolic singular perturbed periodic
boundary value problems in the critical
case with the integral operator of
observation. Asymptotics of random order
of exactness are built.*

*Keywords: minimax estimation,
observation.*

*E-mail: alexkap@i.com.ua

В даній роботі розглянуто задачі мінімаксного оцінювання лінійних функціоналів від розв'язків параболічних сингулярно збурених періодичних крайових задач в критичному випадку з інтегральним оператором спостереження. Традиційний метод, запропонований для дослідження асимптотик розв'язків періодичних параболічних крайових задач в критичному випадку [1], не дає можливості однозначно визначити асимптотики. Це пояснюється недостатньою інформацією щодо поведінки розв'язків задачі мінімаксного оцінювання при $\varepsilon \rightarrow 0$. З'ясовано, що для згаданих розв'язків точка $\varepsilon = 0$ є полюсом скінченної кратності. Щоб отримати асимптотики в класі обмежених функцій, необхідно модифікувати вихідну задачу. Для останньої вже можна застосовувати метод [1]. В роботі побудовано асимптотики довільного порядку точності для задач оцінювання та наведено їх обґрунтування.

1. Постановка задачі. Основні співвідношення мінімаксного оцінювання. Нехай в області $Q = \{(x, t) : x \in [0, 1], t \in T = [0, 2\pi]\}$ деякий процес описується функцією $y^\varepsilon(x, t)$, яка задовольняє крайовій задачі із роботи [1]

$$\frac{\partial y^\varepsilon(x, t)}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial^2 y^\varepsilon(x, t)}{\partial x^2} + f_1(x, t), \quad (1)$$

$$y^e(0, t) = y^e(1, t) = 0, \quad (2)$$

$$y^e(x, 0) = y^e(x, 2\pi), \quad (3)$$

де $f_1(x, t) \in L_2(Q)$ - похибки опису процесу.

На розв'язках задачі (1) - (3) визначено спостереження

$$\varphi^e(t) = \int_0^1 g(x) y^e(x, t) dx + f_2(t), \quad (4)$$

де $g(x) \in L_2(0, 1)$ - ядро оператора спостереження, $f_2(t) \in L_2(0, 2\pi)$ - похибка спостереження.

На розв'язках задачі (1) - (3) задамо лінійний функціонал

$$l(y^e) = \int_Q l_0(x, t) y^e(x, t) dx dt, \quad (5)$$

де $l_0(x, t) \in L_2(Q)$ - задана функція.

Будемо вважати, що всі похибки належать еліпсоїду

$$\int_Q f_1^2(x, t) dx dt + \int_0^{2\pi} f_2^2(t) dt \leq q^2. \quad (6)$$

При фіксованих функціях $f_i, i=1, 2$, та значенні малого параметра ε задача (1) - (3) має єдиний розв'язок $y^e(x, t) \in W_{2, per}^{0, 2, 1}(Q)$ (див. [2]).

Позначимо через G множину функцій $F = \{f_1(x, t), f_2(t)\}$, яка задовольняє умові (6). Оцінку функціоналу (5) будемо розшукувати в класі лінійних оцінок вигляду

$$\hat{l}(y^e) = - \int_0^{2\pi} \varphi^e(t) u(t) dt, \quad (7)$$

де $u(t) \in L_2(0, 2\pi)$. Тоді мінімаксну оцінку функціоналу (5) в класі оцінок вигляду (7) будемо визначати із умови

$$\sigma^2(y^e) = \inf_{u \in L_2(0, 2\pi)} \sup_{F \in G} |l(y^e) - \hat{l}(y^e)|. \quad (8)$$

Розв'язок задачі (7) - (8) міститься в наступних теоремах [3].

Теорема 1. Мінімаксна оцінка функціоналу (5) має вигляд

$$\hat{l}(y^e) = \int_Q \varphi^e(t) g(x) p^e(x, t) dx dt, \quad (9)$$

де $p^e(x, t) \in W_{2, per}^{0, 2, 1}(Q)$ - єдиний елемент, що задовольняє співвідношенням

$$\frac{\partial p^e(x, t)}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial^2 p^e(x, t)}{\partial x^2} + z^e(x, t),$$

$$p^e(0, t) = p^e(1, t) = 0, \quad p^e(x, 0) = p^e(x, 2\pi), \quad (10)$$

$$-\frac{\partial z^e(x, t)}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial^2 z^e(x, t)}{\partial x^2} + l_0(x, t) - g(x) (g(\cdot), p^e(\cdot, t)),$$

$$z^e(0, t) = z^e(1, t) = 0, \quad z^e(x, 0) = z^e(x, 2\pi);$$

тут через (...) позначено скалярний добуток в $L_2(0,1)$.

Для похибки $\sigma(y^\varepsilon)$ мінімаксного оцінювання функціоналу $l(y^\varepsilon)$ справедлива нерівність

$$\sigma(y^\varepsilon) = \Sigma_\varepsilon = [l(p^\varepsilon)]^{1/2} |q| = \left[\int_Q l_0(x,t) p^\varepsilon(x,t) dQ \right]^{1/2} |q|, \quad (11)$$

де Σ_ε - апріорна похибка оцінювання.

Теорема 2. Мінімаксна оцінка функціоналу (9) має вигляд

$$\hat{l}(y^*) = l(\hat{y}^*) = \int_Q l_0(x,t) \hat{y}^*(x,t) dQ, \quad (12)$$

де функція $\hat{y}^*(x,t) \in W_{2,per}^{0,2,1}(Q)$ - єдиний розв'язок крайової задачі

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \hat{z}^\varepsilon(x,t)}{\partial t} &= \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \hat{z}^\varepsilon(x,t)}{\partial x^2} + g(x) (\varphi^\varepsilon(t) - (g(\cdot), \hat{y}^\varepsilon(\cdot, t))) \\ \frac{\partial \hat{y}^\varepsilon(x,t)}{\partial t} &= \varepsilon^2 \frac{\partial^2 \hat{y}^\varepsilon(x,t)}{\partial x^2} + \hat{z}^\varepsilon(x,t), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\hat{y}^\varepsilon(0,t) = \hat{y}^\varepsilon(1,t) = 0, \quad \hat{y}^\varepsilon(x,0) = \hat{y}^\varepsilon(x,2\pi).$$

Для систем теорем 1, 2 отримаємо апріорні оцінки розв'язків. З цією метою розглянемо більш загальну систему

$$\begin{aligned} -\frac{\partial R_1^\varepsilon(x,t)}{\partial t} &= \varepsilon^2 \frac{\partial^2 R_1^\varepsilon(x,t)}{\partial x^2} + r_1^\varepsilon(x,t) - g(x) (g(\cdot), R_2^\varepsilon(\cdot, t)) \\ \frac{\partial R_2^\varepsilon(x,t)}{\partial t} &= \varepsilon^2 \frac{\partial^2 R_2^\varepsilon(x,t)}{\partial x^2} + R_1^\varepsilon(x,t) + r_2^\varepsilon(x,t), \end{aligned} \quad (14)$$

$$R_i^\varepsilon(0,t) = R_i^\varepsilon(1,t) = 0, \quad R_i^\varepsilon(x,0) = R_i^\varepsilon(x,2\pi), \quad i = 1, 2,$$

де $r_i^\varepsilon(x,t) \in L_2(Q) \quad \forall \varepsilon > 0$.

Має місце наступна лема.

Лема 1. Для єдиного розв'язку задачі (14) $R_i^\varepsilon(x,t) \in W_{2,per}^{0,2,1}(Q)$, $i = 1, 2$, справедливі нерівності

$$\|R_1^\varepsilon\| \leq C\varepsilon^{-2} \|r^\varepsilon\|_1, \quad \left\| \frac{\partial R_2^\varepsilon}{\partial x} \right\| + \|R_2^\varepsilon\| \leq C\varepsilon^{-4} \|r^\varepsilon\|_1,$$

$$\text{де } \|r^\varepsilon\|_1 = \|r_1^\varepsilon\| + \varepsilon^{-2} \|r_2^\varepsilon\|$$

Лема 2. Нехай для правої частини задачі (16) майже для всіх $x \in [0,1]$ виконуються умови

$$\int_0^{2\pi} r_i^\varepsilon(x,t) dt = 0, \quad \forall \varepsilon \geq 0, \quad i = 1, 2.$$

Тоді для розв'язків цієї задачі справедливі нерівності

$$\varepsilon^2 \left\| \frac{d^2 R_i^\varepsilon}{dx^2} \right\| + \varepsilon \left\| \frac{dR_i^\varepsilon}{dx} \right\| + \left\| \frac{dR_i^\varepsilon}{dt} \right\| + \|R_i^\varepsilon\| \leq C \|r^\varepsilon\|_2, \quad i=1,2,$$

$$\partial \varepsilon \|r^\varepsilon\|_2 = \|r_1^\varepsilon\| + \|r_2^\varepsilon\|.$$

2. Асимптотики мінімаксних оцінок в класі обмежених функцій. Нехай $g(x) \in C^\infty(0,1)$, $l_0(x,0) = l_0(x,2\pi)$. Розв'язок задачі (10) будемо шукати стандартно [1] у вигляді

$$\begin{aligned} z_n^\varepsilon(x,t) &= \sum_{i=0}^n \varepsilon^i (\bar{z}_i(x,t) + Z_i(\eta,t) + Z_i(\tilde{\eta},t)), \\ p_n^\varepsilon(x,t) &= \sum_{i=0}^n \varepsilon^i (\bar{p}_i(x,t) + P_i(\eta,t) + P_i(\tilde{\eta},t)), \end{aligned} \quad (15)$$

де $\eta = x\varepsilon^{-1}$, $\tilde{\eta} = (x-1)\varepsilon^{-1}$; $\bar{z}_i(x,t)$, $\bar{p}_i(x,t)$ - коефіцієнти зовнішніх розвинень; $Z_i(\eta,t)$ ($Z_i(\tilde{\eta},t)$), $P_i(\eta,t)$ ($P_i(\tilde{\eta},t)$) - коефіцієнти внутрішніх розвинень.

Коефіцієнти зовнішніх розвинень задовольняють системам

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{p}_i(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \bar{p}_{i-2}^\varepsilon(x,t)}{\partial x^2} + \bar{z}_i(x,t), \\ -\frac{\partial \bar{z}_i(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \bar{z}_{i-2}(x,t)}{\partial x^2} + l_0(x,t)\delta_{0,i} - g(x)(\bar{p}_i(t) + v_{i-1}(t)), \\ \bar{p}_i(x,0) &= \bar{p}_i(x,2\pi), \quad \bar{z}_i(x,0) = \bar{z}_i(x,2\pi), \end{aligned} \quad (16)$$

де $\bar{p}_i(t) = (g(\cdot), \bar{p}_i(\cdot, t))$, $\delta_{0,i}$ - символ Кронекера,

$$v_i(t) = \sum_{j=0}^i \frac{1}{j!} \left(\frac{d^j g(0)}{dx^j} \int_0^\infty \eta^j P_{i-j}(\eta,t) d\eta + \frac{d^j g(1)}{dx^j} \int_{-\infty}^0 \tilde{\eta}^j P_{i-j}(\tilde{\eta},t) d\tilde{\eta} \right),$$

а функції $P_i(\eta,t)$, $Z_i(\eta,t)$ є розв'язками приграничного типу таких систем

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i(\eta,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 P_i(\eta,t)}{\partial \eta^2} + Z_i(\eta,t), \\ P_i(0,t) &= -\bar{p}_i(0,t), \quad P_i(\eta,0) = P_i(\eta,2\pi), \\ -\frac{\partial Z_i(\eta,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 Z_i(\eta,t)}{\partial \eta^2}, \\ Z_i(0,t) &= -\bar{z}_i(0,t), \quad Z_i(\eta,0) = Z_i(\eta,2\pi), \end{aligned} \quad (17)$$

функції ж $P_i(\tilde{\eta},t)$, $Z_i(\tilde{\eta},t)$ задовольняють системі (17), в якій $\tilde{\eta} \in (-\infty, 0]$.

Із (17) випливає, що функції $\bar{p}_i(t)$ є періодичними розв'язками системи рівнянь

$$\dot{\bar{p}}_i(t) = G_{i-2,p}(t) + \bar{z}_i(t),$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

$$V(x) = 0$$

алгоритмічний комплекс використовується для прийняття оперативних рішень при перевезенні відповідного товару з мінімальними транспортними витратами.

Постановка задачі. Нехай в пунктах $E_i, i=1,2,\dots,m$ зберігається (виробляється) однорідний товар, причому в пункті E_i зберігається a_i одиниць цього товару. В пунктах $P_j, j=1,2,\dots,n$ споживається даний товар в об'ємі b_j . Нехай c_{ij} – транспортні витрати на перевезення одиниці товару з пункту E_i в пункт P_j , причому деякі елементи c_{ij} можуть бути відсутніми. Задача полягає у відшуканні двох пунктів, для яких можна задовольнити споживачів з мінімальними транспортними затратами.

Формально задачу можна записати наступним чином

$$\min_{j_1, j_2 \in \{1, 2, \dots, n\}} \sum_{i=1}^m (c_{ij_1} x_{ij_1} + c_{ij_2} x_{ij_2}) \quad (1)$$

$$\sum_{l=1}^2 x_{ij_l} \leq a_i, \quad i=1, 2, \dots, m, \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^m x_{ij_l} \leq b_{j_l}, \quad l=1, 2, \quad (3)$$

$$x_{ij_l} \geq 0, \quad i=1, 2, \dots, m, \quad l=1, 2. \quad (4)$$

Тут x_{ij_l} – кількість товару, яка постачається з i -го пункту зберігання в j_l -ий пункт споживання, $i=1, 2, \dots, m, l=1, 2$.

Алгоритм розв'язування задачі. Для розв'язування такої задачі опишемо конструктивний алгоритм визначення тих пунктів зберігання однорідного товару, з яких би транспортні перевезення в два пункти споживання $j_l, l=1, 2$, були мінімальними. Знаючи розв'язок задачі для фіксованих $j_l, l=1, 2$, в подальшому нескладно методом перебору розв'язати поставлену задачу. Необхідно відмітити, що кількість варіантів, з яких перебором треба знаходити розв'язок поставленої задачі буде дорівнювати $C_n^2 = \frac{n(n-1)}{2}$.

Приведемо алгоритм розв'язування розглянутої задачі.

Крок 1. Впорядковуємо вартості перевезень для j -го пункту споживання

$$0 \leq c_{i_1j} \leq c_{i_2j} \leq \dots \leq c_{i_{n-1}j} \leq c_{i_nj}, \quad j=1, 2, \dots, n. \quad (5)$$

Крок 2. Фіксуємо два пункти призначення P_{j_1}, P_{j_2} . Позначимо W_1, W_2 – множини індексів пунктів, з яких товар перевозиться в пункти P_{j_1}, P_{j_2} відповідно, $W = W_1 \cup W_2, \bar{W} = W_1 \cap W_2$.

Крок 3. Використовуючи послідовність (5) знайдемо такі індекси $s_l, 1 \leq s_l \leq m, l = 1, 2$, для яких

$$\sum_{r=1}^{s_l-1} a_{i_r} < b_{j_l}, \quad \sum_{r=1}^{s_l} a_{i_r} \geq b_{j_l}, \quad l = 1, 2. \quad (6)$$

Формуємо множини $W_l = \{i : i \leq i_{s_l}\}, l = 1, 2$.

Крок 4. Обчислюємо кількість товару, який на попередньому кроці зафіксований для перевезення в обидва пункти призначення: $Q = \sum_{i \in W} a_i$.

Крок 5. Добираємо товару ще на величину Q . Причому якщо $c_{i_{s_l+1}, j_l} \leq c_{i_{s_l}, j_l}$, то збільшуємо $s_l := s_l + 1$, зменшуємо $Q := Q - a_{i_{s_l}}$ та заносимо i_{s_l+1} у множину $W_l (W_l := W_l \cup \{i_{s_l+1}\})$. В протилежному випадку виконуємо дану процедуру для P_{j_2} .

Повторюємо крок 5 поки величина Q стане додатною.

Крок 6. Визначаємо нові обмеження для пунктів $P_{j_1}, P_{j_2} : \bar{b}_{j_l} = b_{j_l} - \sum_{r \in \{r : i_r, s_l, i_r \in W\}} a_{i_r}$.

Крок 7. Для пунктів з множини $\bar{W}$ будемо послідовність чисел $\bar{c}_{i_q} = c_{i_q, j_1} - c_{i_q, j_2}, q = 1, 2, \dots, p$. Впорядковуємо дану послідовність $0 \leq \bar{c}_{i_{q_1}} \leq \bar{c}_{i_{q_2}} \leq \dots \leq \bar{c}_{i_{q_p}}$.

Крок 8. Для пунктів з $\bar{W}$ визначаємо пункт призначення.

Крок 8а. Фіксуємо $k := 1$.

Крок 8б. Якщо $\bar{b}_{j_1} > 0$ і $\bar{c}_{i_{q_k}} > 0$, то з пункту $E_{i_{q_k}}$ веземо в $P_{j_1} (W_2 := W_2 \cup \{i_{q_k}\})$.

Зменшуємо $\bar{b}_{j_1} := \bar{b}_{j_1} - a_{i_{q_k}}$. Збільшуємо $k := k + 1$.

Повторюємо крок 8б, поки виконуються відповідні умови.

Крок 8в. Фіксуємо $k := p$.

Крок 8г. Товар з $E_{i_{q_k}}$ веземо в $P_{j_2} (W_1 := W_1 \cup \{i_{q_k}\})$. Зменшуємо $k := k - 1$ та

$$\bar{b}_{j_2} := \bar{b}_{j_2} - a_{i_{q_k}}.$$

Процедуру завершуємо, коли $\bar{W} = \emptyset$ або $\bar{b}_{j_2} \leq 0$.

Крок 8д. Якщо $\bar{W} \neq \emptyset$, то $W_2 := W_2 \cup \bar{W}$.

Крок 9. План перевезень буде:

$$x_{ij_l} = a_i, i \in W_l, i \neq i_{s_l}, \quad x_{ij_{2l}} = b_i - \sum_{i \in W_l, i \neq i_{s_l}} a_i, \quad l = 1, 2$$

Вартість перевезень:

$$I = \sum_{i \in W_1} c_{y_1} x_{y_1} + \sum_{i \in W_2} c_{y_2} x_{y_2}$$

Крок 10. Виконуючи перебори по всіх парах пунктів призначення і вибравши пару, для якої транспортні затрати будуть мінімальними, ми одержимо розв'язок задачі.

Висновки. В даній роботі запропоновано конструктивний алгоритм для вибору двох пунктів доставки однорідного товару з мінімальними затратами. Розглянута задача є конкретизацією більш загальної задачі, яка приведена в роботі [1]. Така конкретизація дає можливість отримати ефективне програмно-алгоритмічне забезпечення. Адже на практиці виникають задачі одночасного забезпечення саме двох пунктів споживання з мінімальними затратами.

Даний алгоритм ввійшов до програмно-алгоритмічного комплексу, який створений для оптимізації транспортних перевезень сільськогосподарських продукції в порти України. Задача виявилася непростю, бо для нашого випадку $m = 604$, $n = 12$. Запропоновані алгоритми показали свою ефективність, так як вони дали змогу приймати такі оперативні рішення, завдяки яким вдалося суттєво понизити витрати на транспортні перевезення.

Розроблений програмно-алгоритмічний комплекс при невеликих модифікаціях можна використовувати для розв'язування інших задач такого типу. Тому важливим напрямком подальшої роботи є адаптація створеної інформаційно-аналітичної системи під інші предметні області, такі як оптимізація фінансових потоків, аналіз міграції робочої сили в межах виробничої галузі тощо.

Література

1. Гаращенко Ф.Г., Клименко В.Г. Об одном алгоритме оптимального выбора пунктов доставки однородного товара с минимальными транспортными затратами //Кибернетика и вычислительная техника, 2003. – Вып. 140. – С. 63-68.
2. Гаращенко Ф.Г., Башняков О.М., Клименко В.Г. Про інформаційно-аналітичну систему для аналізу та оптимізації транспортних перевезень //Вісник Київського університету, сер. "Фіз-мат. науки", 2005. – Вып. 1. – С. 167-171.

3. Гаращенко Ф.Г., Башняков О.М., Клименко В.Г. Розробка алгоритмічного та програмного забезпечення для аналізу та оптимізації транспортних перевезень // International conference "Theoretical and applied aspects of program systems development (TAAPSP'2004), Abstracts, 5-8 October, 2004, Kyiv, Ukraine. – Kyiv, 2004. – P. 261–163.
4. Клименко В.Г. Вибір пунктів доставки однорідного товару з мінімальними транспортними перевезеннями
// Десята міжнародна конференція імені академіка М. Кравчука, 13–15 травня 2004 року, Київ. Матеріали конференції. – К., 2004. – С. 128.
5. Гольштейн Е.Г., Юдин Д.Б. Задачи линейного программирования транспортного типа. – М.: Наука, 1969. – 382 с.
6. Карманов В.Г. Математическое программирование. – М.: Наука, 1975. – 272 с.
7. Ляшенко И.Н. и др. Линейное и нелинейное программирование. – К.: Вища школа, 1975. – 472 с.
8. Муртаф Б. Современное линейное программирование. – М.: Мир, 1984. – 224 с.
9. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384 с.
10. Попов Ю.Д., Тюптя В.І., Шевченко В.І. Методи оптимізації. – К.: Абрис, 1999. – 217 с.

Надійшла до редакції 25.10.2006

УДК 519.9

Дмитро А. Ключин

**Міра близькості між вибірками
із дискретних генеральних
сукупностей**

Побудовано нові міри близькості між випадковими вибірками, що взяті із дискретних генеральних сукупностей. Ці міри близькості базуються на довірчих межах для основної розподіленої маси значень генеральної сукупності, побудованих за допомогою порядкових статистик.

Ключові слова: міра близькості, атом, порядкова статистика, довірчий інтервал.

Dmitry A. Klyushin

**Proximity measure between
samples taken from discrete
populations**

The new proximity measures between random samples taken from discrete population are constructed. This proximity measures are based on the confidence intervals containing the bulk of population constructed on the order statistics.

Key Words: proximity measure, discrete population, order statistics, confidence interval.

E-mail: klyushin@unicyb.kiev.ua

WWW: <http://www.om.unicyb.kiev.ua/personnel/13.htm>

Перевірка гіпотези про те, що дві випадкові величини мають однаковий розподіл є однією з основних задач математичної статистики. Нехай вибірки $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ і $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ отримані шляхом простого випадкового вибору із дискретних генеральних сукупностей $G_x = \{\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_N\}$ і $G_y = \{\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_M\}$ із функціями розподілу F_x і F_y . Будемо вважати, що елементи вибірок x і y обчислені абсолютно точно (це припущення є природним для вибірок, що складаються з цілих чисел). Сформулюємо нульову гіпотезу

$$H : F_x = F_y$$

і альтернативну гіпотезу

$$H' : F_x \neq F_y$$

Оскільки гіпотеза H є непараметричною, для її перевірки необхідно застосувати непараметричний критерій. Вибір непараметричного критерію для перевірки гіпотези про ідентичність дискретних генеральних сукупностей є досить складною задачею. Наприклад, критерії Колмогорова–Смірнова, Вілкоксона і фон Мізеса не залежать від розподілу лише в тому випадку, коли вибірки складаються із незалежних і однаково розподілених випадкових величин із неперервною та строго зростаючою функцією розподілу [1]. Крім того, критерії, що базуються на обчисленні відстаней між оцінками щільності розподілу ядерного типу, наприклад, критерії Аллена [2], Ефрона і Тібширані [3] тощо, не є

непараметричними навіть для генеральних сукупностей із неперервними розподілами. Для розв'язання цієї проблеми в роботі Дюфура и Фархата [4] були проаналізовані два способи послаблення цих обмежень за допомогою методів перестановок і Монте-Карло. Зокрема, в цій роботі показано, що, комбінуючи ці методи, можна будувати непараметричні критерії, які дозволяють контролювати їхні довірчий рівень і потужність навіть у випадку дискретних розподілів. Проте застосування цих методів пов'язано з досить інтенсивними обчисленнями (зокрема, вони потребують генерування багатьох перестановок).

Індикаторна міра близькості. Розглянемо дещо інший і набагато простіший підхід до розв'язання поставленої задачі. Позначимо через A_i^x випадкову подію, яка полягає в тому, що деяке вибіркове значення із вибірки x набуває значення $\tilde{x}_i$, а через h_i^x — частоту цієї події у виборці x . Аналогічно, символом B_i^y позначимо випадкову подію, яка полягає в тому, що деяке вибіркове значення із вибірки y набуває значення $\tilde{x}_i$, а через h_i^y — частоту цієї події у виборці y . Будемо розглядати ці події як результати послідовності незалежних випадкових експериментів, що утворюють схеми Бернуллі $\{E_i^{(1)}\}_{i=1}^n$ і $\{E_i^{(2)}\}_{i=1}^m$ відповідно.

Використовуючи результати роботи [5], побудуємо довірчий інтервал для частоти h_i^y

$$I_i^x = (h_i^x - 2\tilde{\delta}_i, h_i^x + 2\tilde{\delta}_i),$$

де

$$\tilde{\delta}_i = \sqrt{\frac{h_i^x(1-h_i^x)}{n}} + \sqrt{\frac{h_i^y(1-h_i^y)}{m}}.$$

Цей інтервал містить частоту h_i^y із ймовірністю, що перевищує 0,95. Отже, рівень значущості цього інтервалу, тобто величина ймовірності $p(h_i^y \notin I_i^x)$, не перевищує 0,05.

Введемо випадкову величину

$$\chi_i = \begin{cases} 1, & \text{якщо } h_i^y \in I_i^x, \\ 0, & \text{якщо } h_i^y \notin I_i^x, \end{cases} i = 1, 2, \dots, k.$$

Мірою близькості між вибірками x і y будемо вважати статистику

$$\rho(x, y) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \chi_i.$$

Оскільки ця міра є сумою індикаторних випадкових величин, будемо називати її *індикаторною*. Якщо генеральні сукупності G_x і G_y

співпадають, то міра близькості $\rho(x, y)$ із ймовірністю, більшою за 0,95, набуває значення, більше ніж 0,05, тобто $P(\rho(x, y) \geq 0,95) \geq 0,95$.

Таким чином, критерій значущості для перевірки гіпотези H про рівність генеральних сукупностей G_x і G_y можна сформулювати так.

1. Якщо $\rho(x, y) \geq 0,95$, вибірки x і y не суперечать гіпотезі H .
2. Якщо $\rho(x, y) < 0,95$, гіпотеза H відхиляється.

Теорема. Рівень значущості критерію у випадку реалізації схем Бернуллі $\{E_i^{(1)}\}_{i=1}^n$ і $\{E_i^{(2)}\}_{i=1}^m$ не перевищує 0,05.

Доведення. Внаслідок центральної граничної теореми, статистика

$$\rho(x, y) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \chi_i$$

є асимптотично нормальною, і для неї справджується правило $2s$. Теорему доведено.

Зауваження. Отримана міра близькості не є симетричною. Для того щоб отримати симетричну міру близькості, треба поміняти вибірки x і y місцями, обчислити статистику $\rho(y, x)$ і знайти значення

$$\rho_{xy} = \frac{\rho(x, y) + \rho(y, x)}{2}.$$

Атомарна міра близькості. Можливий ще один підхід до порівняння вибірок із дискретних генеральних сукупностей. Його математичні основи викладені в роботі [6]. Нехай $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ — емпірична вибірка, отримана з дискретної генеральної сукупності F за допомогою простого випадкового вибору. Оскільки сукупність F є дискретною, то всі вибіркові значення x_k є атомами. В роботі [6] атомарні вибіркові значення інтерпретувалися як заокруглені результати вимірювання деякого неперервного випадкового показника. На цій підставі була побудована модифікація p -статистики [7], яку можна було використовувати для обчислення міри близькості між вибірками, що містять атоми, а також отримані відповідні критерії ідентифікації гіпотетичних розподілів. Але на ці ідеї можна поглянути і з іншого боку. Як відомо, найбільш поширені дискретні розподіли (наприклад, біноміальний, геометричний і пуасонівський) при великих об'ємах вибірок добре апроксимуються неперервними функціями розподілу. Отже, трактуючи похибку не як результат заокруглення, а як похибку апроксимації, при достатньо великих об'ємах вибірок для оцінки їх подібності можна застосовувати модифіковану p -статистику.

Розглянемо довільну генеральну сукупність G з неперервною функцією розподілу, що апроксимує дискретний розподіл D , і вибірку

$\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n)$, отриману із G шляхом простого випадкового вибору. Її вибіркові значення $\tilde{x}_k \in \tilde{x}$ є наближенням елементів емпіричної вибірки x із дискретної генеральної сукупності, тому вибірку $\tilde{x}$ будемо називати *наближеною*.

Позначимо через δ помилку апроксимації дискретного розподілу неперервним

$$|P_n(x) - x| \leq \delta,$$

де P_n — оператор апроксимації, наприклад, лінійний сплайн.

Нехай $z = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ — вибірка, отримана із дискретної генеральної сукупності D шляхом простого випадкового вибору, а $\tilde{z} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n)$ — відповідна наближена вибірка із генеральної сукупності G із неперервною функцією розподілу $F(v)$. Легко бачити, що $m \leq n$. Позначимо через $x_{(1)} < x_{(2)} < \dots < x_{(m)}$ і $\tilde{x}_{(1)} < \tilde{x}_{(2)} < \dots < \tilde{x}_{(n)}$ — варіаційні ряди, побудовані по вибіркам x і $\tilde{x}$ відповідно.

Якщо x^* — вибіркове значення із генеральної сукупності G , що не залежить від вибірки z , то, як відомо [8-11],

$$P(\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(k)}, \tilde{x}_{(k+1)}]) = \frac{1}{n+1}, \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad x_{(0)} = -\infty, \quad x_{(n+1)} = \infty. \quad (1)$$

Узагальнимо цю формулу на емпіричні вибірки, маючи на увазі, що ми повинні обчислювати міру близькості саме між дискретними вибірками, а не їх неперервними апроксимаціями. Для цього спочатку зауважимо, що при апроксимації дискретного розподілу неперервним порядковій статистиці $x_{(i)}$ емпіричної вибірки z відповідає кілька порядкових статистик $\tilde{x}_{(k)}$. Їхня кількість дорівнює кратності статистики $x_{(i)}$. В подальшому будемо вважати, що об'єм вибірки є настільки великим, що $|x_{(k+1)} - x_{(k)}| \leq \delta$. Кожний індекс порядкової статистики вибірки $\tilde{z}$ можна подати у вигляді $k + j$, де $k = 0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{m-1}$, а $j = 0, 1, \dots, \lambda_k$, так що $n = \sum_{i=1}^m \lambda_i$. Інакше кажучи, варіаційний ряд вибірки $\tilde{z}$ виглядає так:

$$x_{(1)}, x_{(2)}, \dots, x_{(\lambda_1)}, \dots, x_{(\lambda_1 + \lambda_2)}, \dots, x_{(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m)}.$$

Проілюструємо цей підхід наступним прикладом. Нехай спостерігається така емпірична цілочисельна вибірка.

62 64 64 62 62 64 63 61 62 61

З одного боку, її можна інтерпретувати як вибірку із дискретної генеральної сукупності і урахувати кратність елементів.

Значення	61	62	63	64
Кратність	2	4	1	3

З іншого боку, її можна вважати вибіркою наближених значень із генеральної сукупності із неперервним розподілом, яка стала цілочисельною завдяки відкиданню дробової частини. В такому випадку варіаційні ряди емпіричної та наближеної вибірок відповідно виглядають так.

$$61_2 \leq 62_4 \leq 63_1 \leq 64_3$$

$$61 \leq 61 \leq 62 \leq 62 \leq 62 \leq 62 \leq 63 \leq 64 \leq 64 \leq 64$$

(Нижнім індексом позначена кратність λ_i .) Таким чином, порядковій статистиці $x_{(1)} = 61$ відповідають порядкові статистики $\tilde{x}_{(1)} = \tilde{x}_{(2)} = 61$, порядковій статистиці $x_{(2)} = 62$ — порядкові статистики $x_{(3)} = x_{(4)} = x_{(5)} = x_{(6)} = 62$ тощо.

Лема [6]. Якщо гіпотетична функція розподілу $F(v)$ генеральної сукупності G є диференційованою і задовольняє умову Ліпшиця з модулем неперервності K

$$|F(v) - F(u)| \leq K|v - u|, \quad (2)$$

а вибіркове значення x^* не залежить від вибірки z , то для довільного $\delta > 0$ виконується нерівність

$$p(x_{(k)} - \delta \leq x^* < x_{(k)}) \leq K\delta(n - k + 1). \quad (3)$$

Звідси випливає така теорема.

Теорема. Якщо функція розподілу $F(v)$ генеральної сукупності G є диференційованою і задовольняє умову Ліпшиця з модулем неперервності K

$$|F(u) - F(v)| \leq K|u - v|, \quad (4)$$

вибіркове значення x^* не залежить від вибірки z , а порядкова статистика $x_{(i)}$ емпіричної вибірки $\tilde{z} = P(z) = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n)$ є атомом кратності λ_i , то

$$\frac{\lambda_i}{n+1} - K\delta \leq p(x^* \in [x_{(i)}, x_{(i+1)})) \leq \frac{\lambda_i}{n+1} + K\delta, \quad 1 \leq i \leq m,$$

де δ — похибка апроксимації.

Доведення. Розглянемо випадкові події

$$A = \{x^* \in [\tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{i-1})}, \tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_i)}]\}, \quad \bar{A} = \{x^* \in [\tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{i-1})}, \tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_i)}]\},$$

$$B = \{x^* \in [x_{(i-1)}, x_{(i)}]\}, \quad \bar{B} = \{x^* \in [x_{(i-1)}, x_{(i)}]\},$$

$$\mathfrak{A} = \{x^* \in [x_{(i-1)}, \tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{i-1})}]\}, \quad \mathfrak{B} = \{x^* = x_{(i)}\}, \quad \mathfrak{B} = \{x^* \in (x_{(i)} - \delta, x_{(i)})\}.$$

Якщо $x^* \in \bar{A}$, то $\tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{i-1})} \leq x^* \leq \tilde{x}_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_i)}$. Таким чином, $x^* \in \bar{B} \cup \mathfrak{B}$. З цього випливає, що

$$p(B) \leq p(A) + p(\mathfrak{A}). \quad (5)$$

Зауважимо, що

$$p(A) = p\left(\bigcup_{j=1}^{\lambda_i} \{\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(\lambda_{i-1})}, \tilde{x}_{(\lambda_{i-1}+j)}]\}\right) = \frac{\lambda_i}{n+1}. \quad (6)$$

Крім того, із леми випливає нерівність

$$p(\mathfrak{A}) \leq p(x_{(i)} - \delta \leq x^* \leq x_{(i)}) \leq K\delta.$$

Отже,

$$p(\bar{B}) \leq \frac{\lambda_i}{n+1} + K\delta.$$

З іншого боку,

$$p\{\bar{B}\} \geq p(A) - p(\mathfrak{B}).$$

З огляду на те, що $p(B) = p(\bar{B})$ і $p(\mathfrak{B}) = p(\mathfrak{A})$, маємо нерівність

$$\frac{\lambda_i}{n+1} - K\delta \leq p(B) \leq \frac{\lambda_i}{n+1} + K\delta. \quad (7)$$

Теорему доведено.

Наслідок. З точністю до похибки заокруглення

$$p(\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(k)}, \tilde{x}_{(k+1)}]) \approx \frac{\lambda_i}{n+1}. \quad (8)$$

З огляду на оцінку (8) можна стверджувати, що $p(\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(i)}, \tilde{x}_{(j)}])$, $i < j, 1 \leq i, j \leq m$ обчислюється за формулою

$$p_y = p(A_y) = p(\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(i)}, \tilde{x}_{(j)}]) \approx \gamma_i + \gamma_{i+1} + \dots + \gamma_{j-1} + \frac{j-i}{n+1}, \quad (9)$$

де $\gamma_i = (\lambda_i - 1)/(n+1)$, $A_y = \{\tilde{x}^* \in [\tilde{x}_{(i)}, \tilde{x}_{(j)}]\}$.

Позначимо через H гіпотезу про рівність функцій розподілу $F_G(u)$ і $F_{G'}(u)$ дискретних генеральних сукупностей G і G' відповідно. Нехай $\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) \in \tilde{G}$ і $\tilde{x}' = (\tilde{x}'_1, \dots, \tilde{x}'_m) \in \tilde{G}'$, $\tilde{x}_{(1)} \leq \dots \leq \tilde{x}_{(n)}$, $\tilde{x}'_{(1)} \leq \dots \leq \tilde{x}'_{(m)}$ — порядкові статистики, де $\tilde{G}$ і $\tilde{G}'$ — емпіричні генеральні сукупності, породжені гіпотетичними генеральними сукупностями G і G' . Припустимо, що $F_G(u) = F_{G'}(u)$. Позначимо через $A_y^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, m$ випадкову подію, яка полягає в тому, що $\tilde{x}'_k$ потрапляє в інтервал $(\tilde{x}_{(i)}, \tilde{x}_{(j)})$, тобто $A_y^{(k)} = \{\tilde{x}'_k \in (\tilde{x}_{(i)}, \tilde{x}_{(j)})\}$. Якщо $F_G(u) = F_{G'}(u)$ (тобто $G = G'$) імовірність цієї події обчислюється за формулою (9).

Введемо такі позначення.

$$\begin{aligned} p_y^{(1)} &= \frac{h_y^{(n)} m + g^2/2 - g\sqrt{h_y^{(n)}(1-h)m + g^2/4}}{m + g^2}, \\ p_y^{(2)} &= \frac{h_y^{(n)} m + g^2/2 + g\sqrt{h_y^{(n)}(1-h)m + g^2/4}}{m + g^2}, \end{aligned} \quad (10)$$

де $h_y^{(n)}$ — частота події $A_y^{(n)}$ в m випробуваннях. Величина g визначає рівень значущості довірчого інтервалу $I_y^{(n,m)} = (p_y^{(1)}, p_y^{(2)})$. За правилом 3σ при $g=3$ рівень значущості цього інтервалу не перевищує 0,05. Позначимо через N кількість всіх довірчих інтервалів $I_y^{(n,m)} = (p_y^{(1)}, p_y^{(2)})$, ($N = n(n-1)/2$) і L — кількість тих інтервалів $I_y^{(n,m)}$, що містять імовірності $p_y^{(n)}$. Покладемо $h^{(n,m)} = \rho(\bar{x}, \bar{x}') = \frac{L}{N}$. Оскільки $h^{(n,m)}$ — частота випадкової події $B = \{p_y^{(n)} \in I_y^{(n,m)}\}$, що має імовірність $\rho(B) = 1 - \beta$, то, покладаючи в формулі (10) $h_y^{(n)} = h^{(n,m)}$, $m = N$ і $g = 3$, ми отримаємо довірчий інтервал $I^{(n,m)} = (p^{(1)}, p^{(2)})$ для імовірності $\rho(B)$. Статистику $h^{(n,m)}$ називатимемо модифікованою p -статистикою. Вона є шуканою мірою близькості $\rho(\bar{x}, \bar{x}')$ між вибірками $\bar{x}$ і $\bar{x}'$.

Критерій значущості для перевірки гіпотези H про рівність генеральних сукупностей G і G' можна сформулювати так.

1. Якщо $\rho(x, y) \geq 0,95$, вибірки x і y не суперечать гіпотезі H .
2. Якщо $\rho(x, y) < 0,95$, гіпотеза H відхиляється.

Як доведено в роботі [7], якщо вибірки $\bar{x} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) \in \bar{G}$ и $\bar{x}' = (\bar{x}'_1, \dots, \bar{x}'_m) \in \bar{G}'$ мають однакові об'єми, то асимптотичний рівень значущості інтервалу $I^{(n)} = (p^{(1)}, p^{(2)})$, побудованого за правилом 3σ при $g = 3$ за допомогою формул (10), не перевищує 0,05.

Результати моделювання. Для порівняння експериментальних властивостей мір близькості було обрано три варіанти цілочисельних генеральних сукупностей, розглянутих в роботі Дюфура і Фархата [4]. Між собою порівнювались міра близькості Колмогорова–Смірнова, Вілкоксона, а також індикаторна та атомарні міри близькості (табл. 1). При обчисленні міри близькості між вибірками за Колмогоровим–Смірновим в якості еталонної використовувалася не емпірична (східчаста) функція розподілу, а її модифікація (кусково-лінійний сплайн). Це забезпечує існування оберненої функції розподілу, що є необхідною при обчисленні рівнів значущості при перевірці гіпотез.

Таблиця 1. Середні міри близькості між генеральними сукупностями

	Перший експеримент			
	Індикаторна	Атомарна	Колмогорова-Смірнова	Уїлкоксона
Bin(0,5; 20) – Geo(0,1)	0,517	0,068	0,081	0,128
Bin(0,5; 20) – P(10)	0,936	0,067	0,258	0,390
Bin(0,5; 20) – DU(19)	0,398	0,067	0,430	0,805
DU(19) – Geo(0,1)	0,828	0,068	0,195	0,366
DU(19) – P(10)	0,608	0,066	0,398	0,740
	Другий експеримент			
	Індикаторна	Атомарна	Колмогорова-Смірнова	Уїлкоксона
Bin(0,5; 33) – Geo(0,29)	0,763	0,068	0,005	0,010
Bin(0,5; 33) – P(5)	0,685	0,068	0,037	0,073
Bin(0,5; 33) – DU(10)	0,910	0,068	0,003	0,003
DU(10) – Geo(0,29)	0,219	0,067	0,250	0,465
DU(10) – P(5)	0,296	0,068	0,233	0,343
Geo(0,29) – P(5)	0,423	0,068	0,117	0,169
	Третій експеримент			
	Індикаторна	Атомарна	Колмогорова-Смірнова	Уїлкоксона
Bin(0,1; 10) – Geo(0,3)	0,207	0,067	0,278	0,272
Bin(0,1; 10) – P(5)	0,424	0,068	0,066	0,046
Bin(0,1; 10) – DU(10)	0,466	0,068	0,158	0,315
DU(10) – Geo(0,3)	0,225	0,067	0,248	0,463
DU(10) – P(5)	0,114	0,067	0,366	0,632
Geo(0,3) – P(5)	0,240	0,067	0,259	0,385

Перший варіант складався із вибірок, що належать генеральним сукупностям із однаковими математичними сподіваннями ($\mu = 10$) і різними значеннями дисперсії ($\sigma^2 = 30; 5; 90$ і 10). Для цього модулювалися випадкові вибірки із таких генеральних сукупностей: 1) дискретний рівномірний розподіл DU(19), тобто рівноймовірні цілі числа в інтервалі від 1 до 19; 2) біноміальний розподіл Bin($p; n$), де $p = 0,5$ і $n = 20$; 3) геометричний розподіл Geo(p), де $p = 0,1$; 4) пуасонівський розподіл $P(\lambda)$, де $\lambda = 10$.

Другий варіант складався із вибірок, що належать генеральним сукупностям із різними математичними сподіваннями ($\mu = 5,5; 16,5; 3,42$ і $8,25$) і різними значеннями дисперсії ($\sigma^2 = 8,25$). Для цього модулювалися випадкові вибірки із таких генеральних сукупностей: 1) дискретний рівномірний розподіл DU(10); 2) біноміальний розподіл Bin($p; n$), де $p = 0,5$ і $n = 33$; 3) геометричний розподіл Geo(p), де $p = ((\sqrt{34} - 1)/16,5)$; 4) пуасонівський розподіл $P(\lambda)$, де $\lambda = 8,25$.

Третій варіант складався із вибірок, що належать генеральним сукупностям із різними математичними сподіваннями ($\mu = 5,5; 1; 3,33$ і 5) і різними значеннями дисперсії ($\sigma^2 = 8,25; 0,9; 7,78$ і 5). Для цього модулювалися випадкові вибірки із таких генеральних сукупностей: 1) дискретний рівномірний розподіл DU(10); 2) біноміальний розподіл Bin($p; n$), де $p = 0,1$ і $n = 10$; 3) геометричний розподіл Geo(p), де $p = 0,3$; 4) пуасонівський розподіл $P(\lambda)$, де $\lambda = 5$.

Висновок. Як показують результати обчислювального експерименту, атомарна міра близькості виявилася найбільш стійкою до коливань об'ємів вибірок, забезпечивши при цьому високий рівень розпізнавання.

Література

1. Ван дер Варден Б.Л. Математическая статистика. — М.: Изд-во иностр. лит., 1960. — 436 с.
2. Allen D. L. Hypothesis testing using L_1 -distance bootstrap // The American Statistician. — 1997. — 51. — P. 145–150.
3. Efron B., Tibshirani R. J. An Introduction to the Bootstrap. — Monographs on Statistics and Applied Probability, vol. 57, New York: Chapman & Hall, 1993.
4. Dufour J.-M., Farhat A. Exact nonparametric two-sample homogeneity tests for possibly discrete distributions. — Center for Interuniversity research in Quantitative Economics (CIREQ). — Preprint 2001–23.
5. Ключин Д.А., Петунін Ю.І. Статистичний критерій для порівняння двох ймовірностей // Вісник Київського університету. — Кібернетика. — 2005. — № 6. — с. 35–40.
6. Ключин Д.А. Міра близькості між вибірками, що містять атоми // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. — 2005. — № 3. — С. 292–297.
7. Ключин Д.А., Петунин Ю.И. Непараметрический критерий эквивалентности генеральных совокупностей, основанный на мере близости между выборками // Укр. мат. журн. — 2003. — 55, № 2. — с.147–163.
8. Dempster A.P. On direct probabilities // Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological). — 1963. — 25, No. 1. — pp. 100–110.
9. Hill B.M. Posterior distribution of percentiles: Bayes' theorem for Sampling from a population // Journal of American Statistical Association. — 1968. — 63, No. 322. — pp. 677–691.
10. Hill B.M. De Finetti's theorem, induction, and A_n , or Bayesian nonparametric predictive inference (with discussion) // In: Bayesian Statistics 3 (eds J.M.Bernardo, M.H.DeGroot, D.V.Lindley and A.F.M.Smith), Oxford: Oxford University Press, pp. 211–241.
11. Мадрсимов И., Петунин Ю.И. Характеризация равномерного распределения с помощью порядковых статистик // Теор. вероятностей и мат. статистика. - 1982. - 27. - С. 96-102.

Надійшла до редакції 11.10.2006 р.

УДК 519.6

Володимир М. Лисюк
Віктор В. Семенов,
Володимир В. Семенов*
Юрій Б. Сорока

Volodymyr M. Lysyuk
Viktor V. Semenov
Volodymyr V. Semenov*
Yuriy B. Soroka

**Метод послідовної квадратичної
оптимізації розв'язання задач на
передопуклих множинах**

**Sequential quadratic optimization
method for the problems with pre-
convex sets solving**

*Розглянуто узагальнення методу
Розена проекції градієнта на випадок
передопуклих допустимих множин.
Доведено збіжність до множини
стаціонарних точок.*

*The generalization of Rosen's gradient
projection method for preconvex sets is
proposed. Method's convergence to the set
of stationar points is proved.*

*Ключові слова: метод Розена, умови
збіжності, передопуклість.*

*Key Words: Rosen method, conditions of
convergence, preconvexity.*

*E-mail: snakkar@univ.kiev.ua

Ряд задач імпульсно-точкового керування розподіленими системами та розміщення джерел фізичних полів породжують екстремальні задачі з так званими передопуклими обмеженнями. Клас передопуклих множин, що представляються у вигляді теоретико-множинної різниці двох опуклих множин, було введено у роботі [1] та використано у [2] для узагальнення класичного методу проекції градієнта. У статті [3] введено більш широкий клас неопуклих множин за якими збережена назва передопуклих і розглянуто модифікацію методу умовного градієнта мінімізації гладких функцій на цих множинах. Запропонована процедура ідейно близька до методів лінеаризації Б.М.Пшеничного, відтинаючих гіперплощин J.L.Kelly, і полягає у розв'язанні на кожній ітерації допоміжних задач мінімізації лінійних форм на спеціально побудованих опуклих множинах. У повідомленні [4] отримані результати розповсюджені на мінімаксні задачі.

Дана робота продовжує дослідження розпочаті у [2-4]. Розглядається узагальнення методу Розена проекції градієнта на випадок передопуклих допустимих множин. Доводиться збіжність алгоритму з програмним заданням кроку до множини стаціонарних точок.

Нагадаємо означення передопуклої множини.

Означення 1. ([3]) Множину $M \subseteq \mathbb{R}^n$ назовемо передопуклою, якщо існують такі опуклі множини $F_0, F_1, \dots, F_m$, що $M = F_0 \setminus \bigcup_{i=1}^m F_i$.

Розглянемо екстремальну задачу:

Роботу виконано при фінансовій підтримці ДФФД України.

$$f(x) \rightarrow \inf, \quad x \in X, \quad (1)$$

де множина $X \subseteq \mathbb{R}^n$ має наступну структуру: $X = F \setminus \bigcup_{k=1}^m \text{int } G_k$, де F – опуклий компакт, G_k – замкнені опуклі множини, причому межі G_k є регулярними многовидами. Таким чином, X – передопукла множина. Припустимо, що $\text{int } X \neq \emptyset$. Відносно функції f припускаємо неперервну диференційовність на X . Звичайно, існують допустимі точки $x \in X$, що мінімізують f на X .

Введемо позначення: $P_k(x)$ – проекція точки $x \in X$ на множину G_k , $k = \overline{1, m}$; $n_k(x)$ – вектор зовнішньої ортонормалі до G_k у точці $P_k(x)$, $k = \overline{1, m}$; $S_k(x) = \{y \in E : (n_k(x), y - P_k(x)) \geq 0\}$ – дотичний напівпростір до G_k у точці $P_k(x)$, $k = \overline{1, m}$; $P(x) = \bigcap_{k=1}^m P_k(x)$, де $P_k(x) = F \cap S_k(x)$. Відмітимо, що $x \in P(x)$.

Наведемо необхідні умови екстремуму f на множині X .

Лема 1. ([3]) Якщо $x^* \in X$ – точка локального мінімуму функції f на множині X , то

$$(f'(x^*), x - x^*) \geq 0 \quad \forall x \in P(x^*), \quad (2)$$

що рівносильно умові

$$x^* = P_{P(x^*)}(x^* - f'(x^*)), \quad (3)$$

де $P_{P(x^*)}(\cdot)$ – оператор проектування на множину $P(x^*)$.

Під множиною розв'язків задачі (1) будемо розуміти множину X^* точок $x \in X$, в яких виконуються необхідні умови мінімуму (2), (3) з леми 1.

Для розв'язання задачі (1) пропонуємо наступний ітераційний процес.

Алгоритм А.

(i) Нехай $s = 0$.

(ii) Нехай $x^s \in X$ – s -е наближення.

(iii) Будуємо множину $P(x^s) = \bigcap_{k=1}^m P_k(x^s)$.

(iv) Знаходимо $\bar{x}^s$ – розв'язок екстремальної задачі

$$(f'(x^s), x - x^s) + \frac{1}{2} \|x - x^s\|^2 \rightarrow \min, \quad x \in P(x^s),$$

що рівносильно знаходженню проекції $\bar{x}^s = P_{P(x^s)}(x^s - f'(x^s))$.

(v) Якщо $\bar{x}^s = x^s$, то $x^s \in X$ вважається розв'язком задачі, інакше $x^{s+1} = x^s + \rho_s(\bar{x}^s - x^s)$, $\rho_s \in [0, 1]$ та переходимо до (ii) з $s+1$.

Як видно, алгоритм генерує послідовності точок з допустимої множини. При $\bar{x}^s = x^s$ у точці $x^s \in X$ виконується необхідна умова мінімуму. Отже, завершення ітераційного процесу цілком коректне.

У подальшому будемо припускати, що послідовність $\{x^s\}$ нескінченна, тобто, всі її точки лежать за межами множини розв'язків. При побудові $\{x^s\}$ будемо вважати, що ρ_s обираються наступним чином:

$$\rho_s \in [0,1], \quad \rho_s \xrightarrow{s \rightarrow \infty} 0, \quad \sum_{s=1}^{\infty} \rho_s = +\infty. \quad (4)$$

Зробимо додаткове припущення відносно множини X :

$$\forall x \in X: \text{int } P(x) \neq \emptyset. \quad (5)$$

Теорема 1. Якщо виконуються умови (4), (5), то послідовність $\{x^s\}$, що побудовано за алгоритмом A , має граничну точку, яка лежить в множині X^* . У випадку, коли множина $f(X^*) = \{f(x): x \in X^*\}$ має всюди щільне доповнення, усі граничні точки послідовності $\{x^s\}$, що побудовано за алгоритмом A , утворюють зв'язну компактну підмножину X^* , а числова послідовність $\{f(x^s)\}$ має границю.

Доведення. Перевіримо виконання умов теореми про достатні умови збіжності ітераційних алгоритмів [5, с. 181]. За побудовою усі члени послідовності $\{x^s\}$ лежать у компактті X . Розглянемо підпослідовність $\{x^{s_k}\}$: $x^{s_k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} x^* \in X^*$. Маємо

$$\|x^{s_k+1} - x^{s_k}\| = \rho_{s_k} \|\bar{x}^{s_k} - x^{s_k}\| \leq \rho_{s_k} \text{diam}(X) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0.$$

Покажемо, що для підпослідовності $\{x^{s_k}\}$, яка збігається до точки $x^* \in X^*$, існує таке $\delta_0 > 0$, що для усіх k та $\delta \in (0, \delta_0]$:

$$\tau_k = \min_{s \geq s_k} \{s: \|x^s - x^{s_k}\| > \delta\} < +\infty.$$

Міркуємо від супротивного. Нехай для усіх $\delta_0 > 0$ існує таке $k_0 = k_0(\delta_0)$, що $\|x^s - x^{s_{k_0}}\| \leq \delta_0$ як тільки $s > s_{k_0}$. Тоді з нерівності трикутника маємо

$$x^s \in \bar{O}_{\delta_0}(x^{s_{k_0}}) \Rightarrow x^{s_k} \in \bar{O}_{\delta_0}(x^{s_{k_0}}) \Rightarrow x^s \in \bar{O}_{\delta_0}(x^{s_{k_0}}) \Rightarrow x^s \in \bar{O}_{2\delta_0}(x^*)$$

для усіх $s > s_{k_0}$.

Покладемо $W(\cdot) = f(\cdot)$. Розглянемо різницю

$$\begin{aligned} W(x^{s+1}) - W(x^s) &= (f'(x^s + \theta_s(x^{s+1} - x^s)))(x^{s+1} - x^s) = \\ &= (f'(x^s))(x^{s+1} - x^s) + (f'(x^s + \theta_s(x^{s+1} - x^s)) - f'(x^s))(x^{s+1} - x^s) = \\ &= \rho_s(f'(x^s)\bar{x}^s - x^s) + o(\rho_s) \leq \\ &\leq \rho_s(f'(x^s)\bar{x}^s - x^s) + \frac{1}{2}\rho_s\|\bar{x}^s - x^s\|^2 + o(\rho_s), \end{aligned} \quad (6)$$

де $s > s_{k_0}$, $\theta_s \in [0,1]$.

У нерівності (6) оцінимо величину $(f'(x^s)\bar{x}^s - x^s) + \frac{1}{2}\|\bar{x}^s - x^s\|^2$. Оскільки $x^* \in X^*$, то існує така стала $\gamma > 0$, що $\|\bar{x}^s - x^s\|^2 > \gamma > 0$, де $\bar{x}^s = \Pi_{P(x^s)}(x^s - f'(x^s))$. Із нерівності $(f'(x^s)\bar{x}^s - x^s) \leq -\|\bar{x}^s - x^s\|^2$ випливає, що

$$(f'(x^s)\bar{x}^s - x^s) + \frac{1}{2}\|\bar{x}^s - x^s\|^2 < -\frac{1}{2}\gamma < 0.$$

В силу неперервності $f'(\cdot)$ та скалярного добутку, знайдуться такі околиці $O_{\delta_1}(x^*)$, $O_{\delta_2}(\bar{x}^*)$, що для довільних пар точок $x_1 \in O_{\delta_1}(x^*)$, $x_2 \in O_{\delta_2}(\bar{x}^*)$ виконуватиметься нерівність:

$$(f'(x_1), x_2 - x_1) + \frac{1}{2} \|x_2 - x_1\|^2 < -\frac{1}{2} \gamma < 0.$$

Нехай $\tilde{x}$ – довільна точка з $\text{int } P(x')$, тоді $[\tilde{x}, \bar{x}') \subset \text{int } P(x')$. Візьмемо довільну точку $\tilde{x} \in [\tilde{x}, \bar{x}') \cap O_{\delta_1}(\bar{x}')$. В силу збіжності $\{x^k\}$ до x' при великих k має місце нерівність

$$(f'(x^k), \tilde{x} - x^k) + \frac{1}{2} \|\tilde{x} - x^k\|^2 < -\frac{1}{2} \gamma < 0. \quad (7)$$

Оскільки, для всіх $p = \overline{1, m}$:

$$\tilde{x} \in [\tilde{x}, \bar{x}') \cap O_{\delta_1}(\bar{x}') \subset [\tilde{x}, \bar{x}') \subset \text{int } P(x') = \text{int} \bigcap_{p=1}^m P_p(x') = \text{int} \bigcap_{p=1}^m \{P \cap S_p(x')\} \subset \text{int } S_p(x'),$$

то $(n_p(x'), \tilde{x} - \Pi_p(x')) > 0$, $p = \overline{1, m}$, і при великих k виконуються нерівності $(n_p(x^k), \tilde{x} - \Pi_p(x^k)) > 0$, $p = \overline{1, m}$, а отже, $\tilde{x} \in P(x^k)$.

Таким чином, існує точка $\tilde{x}$, що при великих k лежить в множинах $P(x^k)$ і така, що виконується (7).

Візьмемо $2\delta_0 < \delta_1$, тоді $(f'(x^s), \tilde{x} - x^s) + \frac{1}{2} \|\tilde{x} - x^s\|^2 < -\frac{1}{2} \gamma < 0$, $s > s_{k_0}$. Оскільки $\bar{x}^s = \arg \min_{x \in P(x^s)} \left\{ (f'(x^s), x - x^s) + \frac{1}{2} \|x - x^s\|^2 \right\}$, то

$$(f'(x^s), \bar{x}^s - x^s) + \frac{1}{2} \|\bar{x}^s - x^s\|^2 \leq (f'(x^s), \tilde{x} - x^s) + \frac{1}{2} \|\tilde{x} - x^s\|^2 < -\frac{1}{2} \gamma < 0.$$

Отже,

$$W(x^{s+1}) - W(x^s) < -\frac{1}{2} \gamma \rho_s + o(\rho_s), \quad s > s_{k_0}.$$

Узявши s_{k_0} достатньо великим, отримаємо

$$W(x^{s+1}) - W(x^s) < -\frac{1}{4} \gamma \rho_s, \quad s > s_{k_0}. \quad (8)$$

Складемо нерівності (8) при $s = \overline{s_k, r}$, $k > k_0$:

$$W(x^r) - W(x^{s_k}) < -\frac{1}{4} \gamma \sum_{s=s_k}^{r-1} \rho_s. \quad (9)$$

Здійснивши граничний перехід в (9) при $r \rightarrow \infty$ та урахувавши $\sum_{s=s_k}^{\infty} \rho_s = +\infty$, отримаємо протиріччя з обмеженістю на компактi X неперервної функції $W(\cdot)$. Отже, існує $\delta_0 > 0$, що для усіх k и $\delta \in (0, \delta_0]$:

$$\tau_k = \min_{s \geq s_k} \{s : \|x^s - x^{s_k}\| > \delta\} < +\infty.$$

Але, обираючи достатньо маленьке $\delta_0 > 0$ та велике k_0 , можна повторити доведення оцінки (9) для $s_k \leq s \leq \tau_k$. З іншого боку

$$\delta_0 < \|x^{\tau_k} - x^{s_k}\| \leq \sum_{s=s_k}^{\tau_k-1} \|x^{s+1} - x^s\| \leq \text{diam}(X) \sum_{s=s_k}^{\tau_k-1} \rho_s.$$

Тому $\sum_{s=s_k}^{\tau_k-1} \rho_s > \frac{\delta_0}{\text{diam}(X)}$. Ураховуючи останню нерівність в (9), отримуємо, що

$$W(x^{\tau_k}) - W(x^{s_k}) < -\frac{\gamma \delta_0}{4 \text{diam}(X)}, \quad \text{звідки } \lim_{k \rightarrow \infty} W(x^{\tau_k}) < \lim_{k \rightarrow \infty} W(x^{s_k}).$$

Таким чином, умови теореми з [5, с. 181] виконано, та, відповідно, усі граничні точки послідовності $\{x^i\}$ належать X^* і числова послідовність $\{f(x^i)\}$ має границю. Зв'язність та компактність множини граничних точок $\{x^i\}$ випливає з того, що $\|x^{i+1} - x^i\| = \rho, \|\bar{x}^i - x^i\| \leq \rho, \text{diam}(X) \xrightarrow{i \rightarrow \infty} 0$ та доведеного в [6, с. 78] твердження: якщо послідовність точок $\{x_k\}$ метричного простору E вкладена в деякий компакт K , $\rho_k(x_{k+1}, x_k) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$, то множина L граничних точок $\{x_k\}$ є зв'язним компактом. ■

Зауваження 1. Наближення x^* завжди будуть лежати у компоненті зв'язності множини X , яка містить початкове наближення, що ускладнює при незв'язності множини X знаходження глобального мінімуму f , навіть у випадку опуклості f . У даній ситуації слід запускати процес з початковими наближеннями з різних компонент зв'язності.

Зауваження 2. Використовуючи умови збіжності, наведені у [6], можна обґрунтувати збіжність процедури A з повнокроковим вибором ρ :

$$\rho_* = \arg \min_{\rho \in [0,1]} f(x^* + \rho(\bar{x}^* - x^*)),$$

або

$$\frac{\partial}{\partial \rho} f(x^* + \rho(\bar{x}^* - x^*))|_{\rho=\rho_*} = (f'(x^{*+1})_p \bar{x}^* - x^*) = \begin{cases} 0, & \rho_* \in (0,1), \\ \geq 0, & \rho_* = 1. \end{cases}$$

Література

1. Забогін В.И., Полонский Ю.А. Предвыпуклые множества, отображения и их приложения к экстремальным задачам // Кибернетика. 1981. № 5. С. 71-74.
2. Забогін В.И., Черняев Ю.А. Обобщения метода проекции градиента на экстремальные задачи с предвыпуклыми ограничениями // ЖВМ и МФ. 2001. № 3. С. 367-373.
3. Семенов В. В. Модификация метода условного градиента для решения экстремальных задач на одном классе невыпуклых множеств // Журнал обчислювальної та прикладної математики. - №1 (87). - 2002. - С. 72-76.
4. Семенов В.В., Семенова Н.В. SP-методы решения минимаксных задач на одном классе невыпуклых множеств // Обчислювальна та прикладна математика. Збірка тез міжнародної конференції (9.09-10.09.2002, Київ). 2002. - С. 87.
5. Ермольев Ю.М. Методы стохастического программирования. Москва: Наука, 1976. - 239 с.
6. Михалевич В.С., Гупал А.М., Норкин В.И. Методы невыпуклой оптимизации. Москва: Наука, 1987. - 278 с.

Надійшла до редакції 15.06.2006

УДК 517.988

Тетяна М. Малишева*

**Про точність інтерполювання та
збіжність послідовності
інтерполянтів, асимптотично
точних на поліномах в
гільбертовому просторі**

Для поліноміальних та аналітичних за Гато операторів отримано оцінки точності інтерполяційних формул, асимптотично точних на поліномах, та доведено збіжність послідовності таких інтерполянтів. Досліджено точність розв'язку інтерполяційної задачі з умовами типу Абеля-Гончарова в разі збурених значень диференціалів Гато вищих порядків оператора та знайдено мінімальне число вузлів, перевищення якого не покращує отриману раніше оцінку точності.

Ключові слова: інтерполянт, операторний поліном, диференціал Гато, аналітичний за Гато оператор, гільбертів простір, точність.

*E-mail: malysheva.t@gmail.com

Tetyana M. Malysheva*

**On accuracy of interpolation and
convergence of sequence of
interpolants that is asymptotically
accurate on polynomials in Hilbert
space**

We obtained an estimates of accuracy of interpolation formulas that is asymptotically accurate on polynomials and proved a convergence of sequence of these interpolants for polynomial and analytical by Gateaux operators. We investigated an accuracy of solution of interpolation problem with Abel-Honcharov type conditions under perturbed values of higher-order Gateaux differentials of operator and found the minimal number of nodes which excess does not improve obtained estimate of accuracy.

Key Words: interpolant, operator polynomial, Gateaux differential, analytical by Gateaux operator, Hilbert space, accuracy.

Дана стаття продовжує напрямок робіт [1-10], присвячених таким основним питанням загальної теорії поліноміального операторного інтерполювання як побудова операторного інтерполянта, його єдиність, властивість зберігання інтерполянтом операторних поліномів відповідного степеня, отримання оцінок точності інтерполювання, збіжність інтерполяційного процесу, аналіз точності інтерполяційних формул в умовах неточно заданої вихідної інформації. Відомо, що в нескінченновимірному гільбертовому просторі інтерполяційна задача має неєдиний розв'язок, а знаходження інтерполянтів, інваріантних відносно поліномів відповідного степеня, пов'язано з певними труднощами. Відмітимо, що властивість збереження інтерполяційними поліномами багаточленів того ж степеня є важливим для багатьох прикладних задач, а саме: отримання оцінок точності інтерполювання та теорем про збіжність інтерполяційних процесів при збільшенні числа вузлів; оцінок, що

використовують нерівність Лебега; побудова квадратурних формул при інтегруванні за мірою та ін. В [6,7] наведено результати з побудови інтерполянтів типу Ньютона, що зберігають багаточлени того ж степеня, але для їх побудови необхідне існування варіацій або похідних вищих порядків та відповідних кратних інтегралів Римана-Стілт'єса за оператором скалярного аргументу, що ускладнює застосування таких формул на практиці.

Ми будемо розглядати інтерполяційні операторні поліноми більш простої структури в порівнянні з [6,7], але з властивістю асимптотичного (в сенсі зростання числа вузлів) зберігання багаточленів відповідного степеня. Нехай X, Y – гільбертові простори (X – сепарабельний), Π_n – множина операторних поліномів $P_n: X \rightarrow Y$ степеня n

$$\Pi_n = \{P_n(x) = L_0 + L_1x + L_2x^2 + \dots + L_nx^n\},$$

де $L_0 \in Y$, $L_kx^k: X \rightarrow Y$ – k -й операторний степінь, що отриманий з k -лінійної неперервної симетричної операторної форми $L_k(v_1, v_2, \dots, v_k): X^k \rightarrow Y$ при $v_1 = v_2 = \dots = v_k = x$, $k = \overline{1, n}$. Нехай $e_1, e_2, \dots, e_m$ – перші m елементів ортонормального базису в X , $m \geq n$, $F: X \rightarrow Y$ – деякий (в загальному випадку нелінійний) оператор, π_n – множина операторних поліномів $P_{m,n}: X \rightarrow Y$ вигляду

$$P_{m,n}(x) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m a_{i_1, i_2, \dots, i_k} (x, e_{i_1})(x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}), \quad (1)$$

де $a_{i_1, i_2, \dots, i_k} \in Y$ – коефіцієнти, симетричні відносно своїх індексів, $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток в X . Інтерполянт, що асимптотично зберігає багаточлени відповідного степеня, будемо шукати на множині π_n , тобто будемо визначати невідомі коефіцієнти $a_{i_1, i_2, \dots, i_k}$, $i_j = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$, $k = \overline{0, n}$. Оскільки на підпросторі $G_m \subset X$, що утворений базисом $e_1, e_2, \dots, e_m$, поліноми $P_n(x)$ та $P_n\left(\sum_{i=1}^m (x, e_i)e_i\right)$ співпадають, то для $x \in G_m$ маємо

$$P_n(x) = P_n\left(\sum_{i=1}^m (x, e_i)e_i\right) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k})(x, e_{i_1})(x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}). \quad (2)$$

Таким чином, якщо $F \equiv P_n$, то для інтерполяційних задач Лагранжа, Ерміта, Ерміта-Біркхофа з інтерполяційними умовами на G_m , що забезпечують єдиність значень $a_{i_1, i_2, \dots, i_k}$ в (1), на основі (1),(2) отримуємо $a_{i_1, i_2, \dots, i_k} = L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k})$ та, відповідно,

$$P_{m,n}(x; P_n) \rightarrow P_n(x), \quad m \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Згідно (3) будемо казати, що інтерполянт з π_n

$$P_{m,n}(x; F) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m a_{i_1, i_2, \dots, i_k}(F)(x, e_{i_1})(x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_k}) \quad (4)$$

на всьому просторі X є асимптотично точним на поліномах степеня не вище n .

Нехай, як і раніше, $F: X \rightarrow Y$ – деякий (в загальному випадку не поліноміальний) оператор, $e_1, e_2, \dots, e_m$ – перші m елементів ортонормального базису в X . Для F поставимо задачу інтерполювання наступним чином. На множині π_n необхідно знайти такий інтерполянт $P_{m,n}(x, F)$, для якого коефіцієнти $a_{i,j,k}(F)$ визначаються однозначно з інтерполяційних умов при будь-якому $m \geq n$. При цьому, виникає питання, як підібрати інтерполяційні умови, що приведуть до системи лінійних алгебраїчних рівнянь з не виродженою матрицею для визначення цих коефіцієнтів. Наведемо основні результати досліджень, присвячених розв'язуванню поставленої задачі інтерполювання та пошуку відповідних інтерполяційних умов. В [2] для нелінійного оператора $F: X \rightarrow Y$, заданого своїми значеннями $F(x_i) \in Y$, $i = \overline{0, N}$, $N = \sum_{k=1}^n C_{m,k-1}^k$, на множині $\mathfrak{Z}(m) = \{0, e_{i_1} + e_{j_1} + \dots + e_{i_n}, i_j = \overline{1, m}, j = \overline{1, k}, k = \overline{1, n}, m \geq n\}$ за допомогою узагальнення метода ортогональних моментів [11] побудовано інтерполяційний поліном типу Лагранжа структури (4). В [1] показано, що множина значень коефіцієнтів такого інтерполянта є розв'язком системи лінійних алгебраїчних рівнянь, що отримана з інтерполяційних умов лагранжевого типу на множині вузлів $\mathfrak{Z}(m)$ та матриця цієї системи не вироджена. В [3] знайдено оцінки точності інтерполяційних формул та досліджено збіжність послідовності інтерполянтів типу Лагранжа до поліноміальних та цілих операторів при збільшенні числа вузлів. В [4] для аналітичних за Гато операторів та операторів, що мають скінчене число вищих похідних Фреше, розглянуто інтерполяцію типу Ерміта, коли задані значення $F^{(k)}(0)e_{i_1} \dots e_{i_k}$, $i_j = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$, $k = \overline{0, n}$, та побудовано інтерполяційне наближення вигляду (4) поліному Тейлора n -го степеня для $F(x)$. Там же отримано оцінки точності інтерполювання та наведено умови, що забезпечують збіжність інтерполяційного процесу типу Ерміта до аналітичного за Гато оператора при збільшенні числа вузлів та степеня інтерполянта. Зазначено, що для $F = P_n$ інтерполяційна лагранжева інформація на множині $\mathfrak{Z}(m)$ еквівалентна розглянутій ермітовій інформації (в сенсі однозначного визначення коефіцієнтів інтерполянту для полінома та їх співпадання), тому матриця системи лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів інтерполяційної формули типу Ерміта також не вироджена. Крім того, цей інтерполянт Ерміта має властивість асимптотичного ($m \rightarrow \infty$) зберігання поліномів відповідного степеня. Надалі Макаров В.Л. запропонував побудувати та дослідити інтерполянт Ерміта-Біркхофа з інтерполяційними умовами типу

Абеля-Гончарова [12]

$$F^{(k)}(e_i)e_{i_1} \dots e_{i_n} = P_{n,n}^{(k)}(e_i; F)e_{i_1} \dots e_{i_n}, \quad i_j = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, k}, \quad k = \overline{0, n}, \quad e_0 = 0. \quad (5)$$

В [5] знайдено розв'язок цієї задачі на множині π_n вигляду (4) та показано, що для поліноміальних операторів інтерполянти, що задовольняють інтерполяційним умовам Лагранжа [2], Ерміта [4] та типу Абеля-Гончарова (5) є асимптотично точними на багаточленах відповідного степеня та співпадають між собою, тоді як у випадку не поліноміального оператора вони різні. Відмітимо, що з результатів [5] є очевидною оборотність матриці системи лінійних алгебраїчних рівнянь, розв'язком якої є значення коефіцієнтів інтерполянта, побудованого за інтерполяційними умовами типу Абеля-Гончарова.

В роботі розв'язано наступні задачі. Для поліноміальних та аналітичних за Гато операторів отримано оцінки точності інтерполяційних формул структури (4), коефіцієнти яких визначено єдиним чином із інтерполяційних умов, та доведено збіжність послідовності таких інтерполянтів. Також досліджено точність розв'язку інтерполяційної задачі з умовами типу Абеля-Гончарова у випадку збурених значень диференціалів Гато вищих порядків оператора та знайдено мінімальне число вузлів, перевищення якого не покращує отриману раніше оцінку точності. Неважко бачити, що збіжність послідовності інтерполянтів $P_{n,n}(x; F) \in \pi_n$ вигляду (4) з однозначно визначеними коефіцієнтами до поліноміального оператора $P_n \in \Pi_n$ при збільшенні числа вузлів безпосередньо впливає з (3).

Знайдемо оцінку точності інтерполявання оператора $P_n \in \Pi_n$ за допомогою інтерполяційної формули (4). Для подальшого викладення введемо гауссову міру μ на X , перший момент якої дорівнює нулю, а ядерний оператор $Bx = \sum_{i=1}^{\infty} q^i(x, e_i)e_i$, $q \in (0, 1)$, є кореляційним оператором цієї міри, де e_i – власні елементи, а q^i – власні значення. Оснастимо множину Π_n скалярним добутком [1]

$$(P_1, P_2)_n = \sum_{k=0}^n \int \dots \int (L_k^{(1)}(v_1, \dots, v_k), L_k^{(2)}(v_1, \dots, v_k))_r \mu(dv_1) \dots \mu(dv_k)$$

та нормою $\|P\|_n = (P, P)_n^{1/2}$, де $L_k^{(1)}, L_k^{(2)}$ – k -лінійні неперервні симетричні операторні форми, що відповідають поліномам $P_1, P_2 \in \Pi_n$, $(\cdot, \cdot)_r$ – скалярний добуток в Y . На підставі [4] оцінка точності інтерполявання оператора $P_n \in \Pi_n$ поліномом $P_{n,n}(x; P_n)$ (4) визначається за формулою

$$\|P_n - P_{n,n}\|_n < \left[\sum_{k=1}^n k^2 \|L_k\|^2 (Tr B)^k \right]^{1/2} q^{n/2}, \quad (6)$$

де $\|L_k\|$ – традиційна норма k -лінійного оператора, $TrB = \sum_{i=1}^{\infty} q^i = \frac{q}{1-q}$.

Згідно отриманих в [5] результатів інтерполяційні умови типу Лагранжа [2], Ерміта [4] та Абеля-Гончарова на множині $\mathfrak{Z}(m)$ (5) дозволяють побудувати інтерполяційні формули вигляду (4) з однозначно визначеними коефіцієнтами, тому на основі (3) має місце збіжність послідовності таких інтерполянтів до поліному, що інтерполюється, коли $m \rightarrow \infty$. Крім того, у випадку інтерполювання поліноміального оператора всі три інтерполяційні формули співпадають, для їх побудови необхідна однакова кількість інтерполяційних умов – $\left(1 + \sum_{k=1}^n C_{m+k-1}^k\right)$, а точність інтерполяції визначається за формулою (6).

Нехай тепер $F: X \rightarrow Y$ – оператор, аналітичний за Гато в просторі X , $e_1, e_2, \dots, e_m$ – перші m елементів ортонормального базису цього простору, $P_{m,n}(x; F)$ – будь-який інтерполяційний для F операторний поліном з множини π_n структури (4), коефіцієнти якого визначені однозначно з інтерполяційних умов. Дослідимо збіжність $P_{m,n}$ до оператора F при збільшенні числа вузлів та степеня інтерполянта. Справедлива наступна

- **Теорема 1.** Нехай аналітичний за Гато оператор $F(x)$ такий, що ряд

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\|F^{(k)}(0)\|}{(k-1)!} \|x\|^k \text{ збігається для всіх } x \in X. \text{ Тоді}$$

$$\lim_{\substack{m \rightarrow \infty \\ n \rightarrow \infty}} \|F - P_{m,n}\|_H = 0, \quad (7)$$

тобто має місце збіжність інтерполяційного процесу $P_{m,n}(x; F)$ до $F(x)$ в метриці H .

- **Доведення.** В [4] для аналітичного за Гато оператора $F(x)$ отримана оцінка

$$\|F - P_{m,n}\|_H < \left[\sum_{k=1}^n \left(\frac{\|F^{(k)}(0)\|}{(k-1)!} \right)^2 (TrB)^k \right]^{\frac{1}{2}} q^{\frac{n}{2}} + \left[\sum_{k=n+1}^{\infty} \left(\frac{\|F^{(k)}(0)\|}{k!} \right)^2 (TrB)^k \right]^{\frac{1}{2}},$$

де $P_{m,n}(x; F)$ – інтерполяційний поліном ермітового типу [4] структури (4) з однозначно визначеними коефіцієнтами $a_{\eta_1, \dots, \eta_k}(F)$. З цієї оцінки в умовах теореми одразу випливає (7), тому рівність (7) є вірною для всіх інтерполянтів, коефіцієнти яких можуть бути визначені єдиним чином з інтерполяційних умов. Теорему доведено.

На результат розв'язання інтерполяційної задачі в конкретних функціональних просторах суттєво впливає неточність вихідної інформації, тому при побудові та аналізі точності інтерполяційних

наближень необхідно враховувати можливі похибки вихідних даних. В [8,9] наведено оцінки точності інтерполювання поліноміальних та цілих операторів у випадку збурених значень оператора у вузлах. В [10] отримано точність розв'язку інтерполяційної задачі типу Ерміта [4] за збурених значень диференціалів для аналітичних за Гато операторів та операторів, що мають скінчене число вищих похідних Фреше. Дана стаття є продовженням досліджень з аналізу точності інтерполювання поліноміальних та аналітичних за Гато операторів для інтерполянта з умовами типу Абеля-Гончарова у випадку збурено заданої вихідної інформації.

Для поліноміального оператора $P_n \in \Pi_n$ дослідимо точність розв'язку інтерполяційної задачі з умовами типу Абеля-Гончарова (5), коли значення диференціалів Гато оператора P_n задані зі збуреннями

$$\tilde{P}_n^{(k)}(e_k)e_{i_1} \dots e_{i_k} = P_n^{(k)}(e_k)e_{i_1} \dots e_{i_k} + \delta_{i_1 \dots i_k}, \quad \delta_{i_1 \dots i_k} \in Y, \quad k = \overline{0, n}.$$

В цьому випадку інтерполяційний поліном з π_n структури (4) має вигляд

$$\tilde{P}_{m,n}(x; P_n) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m \tilde{a}_{i_1 \dots i_k}(P_n)(x, e_{i_1}) \dots (x, e_{i_k}). \quad (8)$$

Оскільки інтерполянт $\tilde{P}_{m,n}$ лінійний за P_n , його можна подати у вигляді

$$\tilde{P}_{m,n}(x; P_n) = P_{m,n}(x; P_n) + P_{m,n}^{(\delta)}(x), \quad (9)$$

де $P_{m,n}^{(\delta)} \in \pi_n$ – інтерполянт, для якого диференціал Гато k -го порядку у вузлі e_k за напрямками $e_{i_1}, \dots, e_{i_k}$ дорівнює $\delta_{i_1 \dots i_k}$, $i_j = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$, $k = \overline{0, n}$. Оцінимо точність інтерполяційної формули (8) в метриці H у випадку обмеженості норм $\|\delta_{i_1 \dots i_k}\|_Y$, $k = \overline{0, n}$. Справедлива наступна

• **Теорема 2.** Нехай за збурених значень диференціалів Гато $\tilde{P}_n^{(k)}(e_k)e_{i_1} \dots e_{i_k}$, $k = \overline{0, n}$, оператора $P_n \in \Pi_n$ виконана умова $\|\delta_{i_1 \dots i_k}\|_Y \leq \delta_k$, $i_j = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$, $k = \overline{0, n}$. Тоді

$$\|P_n - \tilde{P}_{m,n}\|_H < C_n^{1/2} q^{m/2} + S_n^{1/2}, \quad (10)$$

де $C_n = \sum_{k=1}^n k^2 \|L_k\| (Tr B)^k$, $S_n = \sum_{k=0}^n \frac{\alpha_k^2}{(k!)^2} (Tr B)^k$, $\alpha_k = \delta_k + \frac{\alpha_{k+1}}{1!} + \frac{\alpha_{k+2}}{2!} + \dots + \frac{\alpha_n}{(n-k)!}$, $k = n-1, \dots, 0$, $\alpha_n = \delta_n$.

• **Доведення.** Приймаючи до уваги (9) маємо

$$\|P_n - \tilde{P}_{m,n}\|_H = \|P_n - P_{m,n} - P_{m,n}^{(\delta)}\|_H \leq \|P_n - P_{m,n}\|_H + \|P_{m,n}^{(\delta)}\|_H. \quad (11)$$

Очевидно, що для $\|P_n - P_{m,n}\|_H$ є вірною оцінка (6).

Оцінимо зверху $\|P_{m,n}^{(\delta)}\|_H$. Згідно (9), інтерполянт $P_{m,n}^{(\delta)}$ має вигляд

$$P_{m,n}^{(\delta)}(x) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}(x, e_{i_1}) \dots (x, e_{i_k}).$$

В [5] отримано рекурентну формулу для знаходження коефіцієнтів $a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}(F)$, $i_j = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$, інтерполянта структури (4)

$$a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}(F) = \frac{1}{k!} F^{(k)}(e_{i_k}) e_{i_k} \dots e_{i_1} - \sum_{j=1}^{n-k} C_{k+j}^j a_{i_1, \dots, i_k, \underbrace{k, \dots, k}_j}^{(\delta)}(F), \quad k = n, n-1, \dots, 0.$$

Отже, коефіцієнти $a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)} \in Y$ обчислюються за формулою

$$a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)} = \frac{1}{k!} \delta_{i_k, \dots, i_1} - \sum_{j=1}^{n-k} C_{k+j}^j a_{i_1, \dots, i_k, \underbrace{k, \dots, k}_j}^{(\delta)}, \quad k = n, n-1, \dots, 0. \quad (12)$$

Виходячи з означення скалярного добутку в H та використовуючи співвідношення $\int_X (v, e_i)(v, e_j) \mu(dv) = (Be_i, e_j) = q^i \delta_{ij}$, δ_{ij} – символ Кронекера,

[13] маємо

$$\begin{aligned} \|P_{m,n}^{(\delta)}\|_H^2 &= \sum_{k=0}^n \int_X \dots \int_X \left(\sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}(v_1, e_{i_1}) \dots (v_k, e_{i_k}), \right. \\ &\left. \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}(v_1, e_{i_1}) \dots (v_k, e_{i_k}) \right) \mu(dv_1) \dots \mu(dv_k) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m \|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y^2 q^{i_1} \dots q^{i_k}. \end{aligned} \quad (13)$$

Оцінимо зверху величину $\|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y$. На основі (12)

$$\|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y \leq \frac{1}{k!} \|\delta_{i_k, \dots, i_1}\|_Y + \sum_{j=1}^{n-k} C_{k+j}^j \|a_{i_1, \dots, i_k, \underbrace{k, \dots, k}_j}^{(\delta)}\|_Y \leq \frac{1}{k!} \|\delta_{i_k, \dots, i_1}\|_Y + \sum_{j=1}^{n-k} C_{k+j}^j \|a_{i_1, \dots, i_{k+j}}^{(\delta)}\|_Y \quad (14)$$

Послідовно приймаючи в (14) $j = n, n-1, \dots, 0$ та враховуючи обмеження $\|\delta_{i_k, \dots, i_1}\|_Y \leq \delta_k$, $k = \overline{0, n}$, знаходимо всі оцінки $\|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y$, $k = \overline{0, n}$. Дану процедуру можна записати у вигляді наступної рекурентної формули

$$\|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y \leq \frac{\alpha_k}{k!}, \quad k = n, n-1, \dots, 0, \quad (15)$$

де $\alpha_k = \delta_k + \frac{\alpha_{k+1}}{1!} + \frac{\alpha_{k+2}}{2!} + \dots + \frac{\alpha_n}{(n-k)!}$, $k = n-1, n-2, \dots, 0$, $\alpha_n = \delta_n$.

Підставляючи (15) в (13) отримуємо

$$\|P_{m,n}^{(\delta)}\|_H^2 = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^m \|a_{i_1, \dots, i_k}^{(\delta)}\|_Y^2 q^{i_1} \dots q^{i_k} \leq \sum_{k=0}^n \frac{\alpha_k^2}{(k!)^2} \left(\sum_{i=1}^m q^i \right)^k < \sum_{k=0}^n \frac{\alpha_k^2}{(k!)^2} (Tr B)^k$$

звідки

$$\|P_{m,n}^{(\delta)}\|_H < \left[\sum_{k=0}^n \frac{\alpha_k^2}{(k!)^2} (Tr B)^k \right]^{1/2} = S_n^{1/2}. \quad (16)$$

З (11), (6), (16) приходимо до оцінки (10). Теорему доведено.

- Зауваження 1. Нехай виконані умови теореми 2. Тоді, в разі збурених значень диференціалів Гато $\tilde{P}_n^{(k)}(e_i) e_{i_k} \dots e_{i_1}$, $k = \overline{0, n}$, точність

наближення в сенсі оцінки (10) не покращується при

$$m > \log_q \frac{S_n}{C_n},$$

що безпосередньо випливає з формули (10).

Перейдемо до дослідження точності наближення аналітичного за Гато оператора $F: X \rightarrow Y$ інтерполянтом $\tilde{P}_{m,n}(x; F)$ вигляду (4), що є розв'язком інтерполяційної задачі (5) за умов збурених значень диференціалів Гато оператора F

$$\tilde{F}^{(k)}(e_k)e_k \dots e_k = F^{(k)}(e_k)e_k \dots e_k + \delta_{k,i_1}, \delta_{k,i_1} \in Y, k = \overline{0, n},$$

та обмеження на норми $\|\delta_{k,i_1}\|_Y, k = \overline{0, n}$. Справедлива наступна

- **Теорема 3.** Нехай для аналітичного за Гато оператора $F(x)$ виконано умови теореми 1. Тоді в разі збурених значень диференціалів Гато $\tilde{F}^{(k)}(e_k)e_k \dots e_k, k = \overline{0, n}, \|\delta_{k,i_1}\|_Y \leq \delta_k, i_1 = \overline{1, m}, j = \overline{1, k}, k = \overline{0, n}$, має місце оцінка

$$\|F - \tilde{P}_{m,n}\|_H < C_n^{1/2} q^{m/2} + S_n^{1/2} + Q_n^{1/2}, \quad (17)$$

де C_n, S_n визначені у формулювання теорема 2, $Q_n = \sum_{k=n+1}^{\infty} \|L_k\|^2 (Tr B)^k$.

- **Доведення.** Для аналітичного за Гато оператора $F(x)$ маємо

$$\|F - \tilde{P}_{m,n}'\|_H = \|T_n + R_n - \tilde{P}_{m,n}'\|_H \leq \|T_n - \tilde{P}_{m,n}'\|_H + \|R_n\|_H, \quad (18)$$

де T_n – поліном Тейлора n -го степеня для F , R_n – залишок ряду.

Вважаємо, що

$$\frac{1}{k!} F^{(k)}(0)v_k \dots v_k = L_k(v_1, \dots, v_k),$$

де $L_k(v_1, \dots, v_k)$ – k -лінійна неперервна симетрична операторна форма. Відомо, що інтерполянти ермітового типу [4] та інтерполянти з умовами типу Абеля-Гончарова для поліноміальних операторів співпадають. Тому $\|T_n - P_{m,n}\|_H = \|P_n - P_{m,n}\|_H$ (див. (10)). Крім того, в [4] отримано оцінку для $\|R_n\|_H$

$$\|R_n\|_H \leq \left[\sum_{k=n+1}^{\infty} \|L_k\|^2 (Tr B)^k \right]^{1/2} = Q_n^{1/2}. \quad (19)$$

Враховуючи (10), (18), (19) маємо нерівність (17). Теорему доведено.

- **Зауваження 2.** Якщо для аналітичного за Гато оператора виконані умови теореми 4, то в разі збурених значень диференціалів Гато $\tilde{F}^{(k)}(e_k)e_k \dots e_k, k = \overline{0, n}$, точність наближення в сенсі оцінки (17) не покращується при $(m, n) \in \{(m, n): m \geq m_0, n \geq n_0\}$, де пара (m_0, n_0) визначається з умови

$$|C_n^{1/2} q^{m/2} + Q_n^{1/2} - S_n^{1/2}| \xrightarrow{m,n} \min,$$

що безпосередньо випливає з оцінки (17).

Література

1. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В., Янович Л.А. Интерполирование операторов. – Киев: Наук. думка, 2000. – 407с.
2. Хлобыстов В.В., Кашпур Е.Ф. К задаче интерполирования полиномиальных операторов // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №3. – С.106-108.
3. Хлобыстов В.В. К вопросу о сходимости интерполяционных процессов в гильбертовом пространстве // Кибернетика и системный анализ. – 2000. – №6. – С.166-172.
4. Хлобыстов В.В., Поповичева Т.Н. Об интерполяционном приближении дифференцируемых операторов в гильбертовом пространстве // Укр. мат. журн. – 2006. – 58, №4. – С. 554-565.
5. Хлобыстов В.В., Кашпур О.Ф., Малишева Т.М. Про множину операторних інтерполянтів, гранично інваріантних щодо поліномів // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки (в друці).
6. Егоров А.Д., Соболевский П.Н., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов. – Минск. Наука и техника, 1985. – 310с.
7. Filipsson L. Kergin interpolation in Banach Spaces // Journal of Approximation Theory 127(2004). – P.108–123.
8. Хлобыстов В.В., Кашпур Е.Ф. О точности полиномиального интерполирования в гильбертовом пространстве в случае возмущенных значений оператора в узлах // Кибернетика и системный анализ. – 2002. – № 1. – С. 168 – 173.
9. Хлобыстов В. В., Кашпур Е. Ф. Анализ точности интерполирования целых операторов в гильбертовом пространстве при возмущенных узловых значениях // Укр. мат. журн. – 2003. – 55, № 7. – С. 953 – 960.
10. Хлобыстов В.В., Малишева Т.М. Про оцінки точності інтерполювання диференційованих операторів в гільбертовому просторі в разі збурених значень їх диференціалів // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки (в друці).
11. Пупков К.И., Капалин В.И., Ющенко А.С. Функциональные ряды в теории нелинейных систем. – М.: Наука, 1976. – 448с.
12. Евграфов М.А. Интерполяционная задача Абеля-Гончарова. М., 1954.
13. Гихман И.И., Скороход А.В. Теория случайных процессов: В 3 т. – М.: Наука, 1971. Т. 1 – 664с.

Надійшла до редакції 19.06.2006 р.

УДК 519.8

Микола М. Маляр¹,
Валерій Ф. Баранник,
Маріанна М. Маляр

Mikola M. Malyar¹,
Valery F. Barannyk,
Marianna M. Malyar

Побудова інтегрованої цільової функції в аналітичному вигляді

Building of the integrated target function in analytic description

Розглядається підхід побудови функції згортки цільових функцій для багатокритеріальних задач вибору в аналітичному вигляді.

Approach to the convolution function of target functions building for the multicriteria tasks of choice in analytic description is observed.

Ключові слова: вибір, багатокритеріальна оптимізація, цільова функція, згортка.

Key Words: choice, multicriteria optimization, convolution, target function.

¹ E-mail: cyber@mail.uzhgorod.ua

Вступ. Багато соціально – економічних проблем можна представити за допомогою математичних моделей. Кожна проблема може бути змодельована по-різному, тобто за допомогою різних моделей. У зв'язку з цим і вирішення її може бути різне. В основному практичні проблеми зв'язані з багатокритеріальними задачами вибору, які моделюються і розв'язуються за допомогою задач векторної оптимізації. Одним із основних питань у задачах векторної оптимізації є зменшення кількості критеріїв, що можливо через їх групування (підходи описані в [1–6]) з подальшим їх згортанням у деякі інтегровані цільові функції.

Постановка задачі. Розглядається задача вибору по багатьох критеріях. Припустимо, що множину допустимих альтернатив можна описати за допомогою континуальної множини $D \subset R^n$, яка задається сукупністю лінійних нерівностей, тобто

$$D = \{x = (x_1, \dots, x_n) \mid Ax \geq b\}, \quad (1)$$

а критерій ефективності за допомогою лінійних цільових функцій $f_j(x)$: $j = \overline{1, k}$, k – кількість критеріїв.

Таким чином, модель задачі вибору можна записати у вигляді багатокритеріальної задачі лінійного програмування:

Знайти

$$\text{extr}_{x \in D} f_j(x) = \sum_{i=1}^n c_{ji} \cdot x_i. \quad (2)$$

Теоретичні результати. Нехай система лінійних нерівностей

Гранню опуклої багатогранної множини, що визначається системою (1), називається опукла багатогранна множина розв'язків системи, яка одержується з (1) заміною деяких нежорстких нерівностей (нерівність, що входить в систему (1) називається жорсткою, якщо для всіх розв'язків системи вона виконується тільки як рівність) на рівності. Одновимірні грані називаються ребрами, 0-вимірні грані – вершинами опуклої багатогранної множини.

З доведеної теореми випливає, що мінімальне значення на множині D функції $\varphi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n (f_i(x_1, \dots, x_n) - N_i)^2$ може досягатися тільки в точках якої-небудь її грані D_r (r – розмірність грані).

Позначимо через $T(O_1)$ сукупність всіх точок простору R^n , які задовольняють систему нерівностей (3). З доведеної теореми випливає важливий наслідок:

Наслідок. Функція $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ мінімізується в тих точках O_1 області D , для яких виконується умова $T(O_1) \cap D = \emptyset$.

Теорема 2. Якщо для всіх точок P кожної грані D_r розмірності $r > 1$ опуклої багатогранної множини D , що визначається системою (1), виконується умова $T(P) \cap D_r \neq \emptyset$ ($P \in D_r$), то мінімум функції $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ досягається або на деякому ребрі, або в деякій вершині опуклої багатогранної множини D .

Зауваження. У випадку коли система (3) немає розв'язку можна навести приклад, в якому функція $\varphi(x_1, \dots, x_n)$ досягає мінімуму у внутрішній точці області D .

Доведення. Розглянемо випадок $n = 2$. Нехай $f_1(x_1, x_2) = a_1x_1 + a_2x_2$, $f_2(x_1, x_2) = b_1x_1 + b_2x_2$. Припустимо, що $\max_{(x_1, x_2) \in D} f_i(x_1, x_2) = M_i$, $\min_{(x_1, x_2) \in D} f_i(x_1, x_2) = m_i$ ($i = 1, 2$), причому вектор $n_1 = \{a_1, a_2\}$ не колінеарний вектору $n_2 = \{b_1, b_2\}$. Очевидно

$\min_{(x_1, x_2) \in D} \{-f_1(x_1, x_2)\} = M_1$, Розглянемо функцію

$\varphi(x_1, x_2) = (f_1 - M_1)^2 + (-f_1 - m_1)^2 + (f_2 - M_2)^2 + (-f_2 - m_2)^2$. Очевидно, функція $\varphi(x_1, x_2)$ мінімізується у внутрішній точці області D , яка визначається з системи рівнянь

$$\begin{cases} a_1x_1 + a_2x_2 = \frac{M_1 - m_1}{2}, \\ b_1x_1 + b_2x_2 = \frac{M_2 - m_2}{2}. \end{cases}$$

Таким чином, сукупність чисел $\theta_1, \dots, \theta_n$, яка мінімізує суму квадратів (8), задовольняє нормальній системі для системи (9). Якщо стовпці матриці A лінійно незалежні, то нормальна система має єдиний розв'язок. Тому і наша задача про знаходження цільової функції $\varphi(x)$ з вказаними вище властивостями має єдиний розв'язок. У випадку, коли стовпці матриці A лінійно залежні, вибір розв'язку $\theta_1, \dots, \theta_n$ системи (9) буде одним із можливих.

Якщо розв'язок нормальної системи не єдиний, то виникає задача вибрати який-небудь з розв'язків. Таким вибирається розв'язок з мінімальною нормою.

Нормальним псевдорозв'язком системи лінійних рівнянь називається стовпець з мінімальною нормою серед всіх стовпців, що дають мінімальну по нормі нев'язку при підстановці в цю систему. Відомо [1], що кожна система лінійних рівнянь має один і тільки один нормальний псевдорозв'язок.

Отже, вибравши нормальний псевдорозв'язок системи, ми тим самим знайдемо цільову функцію $\varphi(x) = c_1x_1 + \dots + c_nx_n$ з вказаними властивостями.

Таким чином, має місце наступне твердження

Твердження. Для довільного скінченного набору цільових функцій $f_k(x) = c_{k1}x_1 + \dots + c_{kn}x_n$ (k – натуральне число, більше 1) існує цільова функція $\varphi(x)$, яка мінімізує суму квадратів відхилень даних цільових функцій від їхніх максимальних значень в області D .

Література

1. Баранник В.Ф., Маляр М.М. Зменшення кількості критеріїв ефективності // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки, Київ, 2001, С. 345-348.
2. Маляр М.М., Цицика Н.Е. Групування критеріїв ефективності // Вісник СевДТУ. Вип.47: Інформатика, електроніка, зв'язок. 36. наук. пр. – Севастополь: Вид-во СевДТУ, 2003. – с.75-79
3. Маляр М.М., Цицика Н.Е. Алгоритм зменшення кількості критеріїв в багатокритеріальній задачі лінійного програмування // Вісник Київського університету. Вип.2: Серія: фіз.-мат. науки, Київ, 2004, С. 288-291.
4. Маляр М.М., Кондрук Н.Е. Кластеризація критеріїв ефективності у задачах вибору. // Вісник Київського університету. Вип.3 Серія: фіз.-мат. науки, Київ, 2005, С. 288-291.
5. Беклемишев Д. Дополнительные главы линейной алгебры. – М.: Наука, 1983.

Надійшла до редакції 5.09.2006.

УДК 519.63:551.463.2

Євген С. Подласов

Про задачу націлювання променів у неоднорідному хвилеводі

Розглядається задача націлювання променів у задану точку простору, що виникає при моделюванні гідроакустичних полів за допомогою променевого наближення. Запропоновано розрахунковий алгоритм, що базується на використанні методів "розширеної променевої теорії". Описаний алгоритм дозволяє здійснювати націлювання променів у підводних неоднорідних хвилеводах із довільним рельєфом дна.

Ключові слова: хвилевод, променевий метод, задача Коші, чисельний алгоритм.

Ievgen S. Podlasov

On ray aiming problem in non-homogeneous waveguide

The problem of ray aiming into given space point which appears in hydroacoustical fields modelling using ray approximation is considered in the paper. The computational algorithm based on using enhanced ray theory methods is proposed. The described algorithm allows to fulfil ray aiming in underwater non-homogeneous waveguides with arbitrary bottom relief

Keywords: waveguide, ray method, Cauchy problem, numerical algorithm.

Вступ. Математичне моделювання процесів поширення звука в океані представляє інтерес з точки зору розв'язання задач акустичного моніторингу для потреб гідрографії, екології, зв'язку та інших галузей науки та техніки. При розрахунку високочастотних гідроакустичних полів широке розповсюдження отримали методи, що базуються на використанні променевого наближення [1,2]. Істотною перевагою променевих методів є принципова можливість обчислення поля у підводних хвилеводах зі змінною глибиною. Проте на сьогоднішній день розроблені розрахункові алгоритми лише для досить вузького класу таких хвилеводів [3], оскільки в загальному випадку виникає нетривіальна задача націлювання променів у задану точку простору.

У даній статті пропонується алгоритм розв'язання задачі націлювання променів у підводному неоднорідному хвилеводі із довільним рельєфом дна. Використання методів "розширеної променевої теорії" (enhanced ray theory) [4] забезпечує високу точність алгоритму.

Постановка задачі. Розглянемо підводний неоднорідний хвилевод

$$G = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3, (x, y) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq z \leq H(x, y)\},$$

заповнений середовищем із показником заломлення $n(x, y, z)$. Тут (x, y, z) – декартові координати із віссю z , направленою вертикально вниз, $H(x, y)$ – глибина у точці (x, y) , функції $n(x, y, z)$ та $H(x, y)$ вважаємо достатньо гладкими.

У рамках променевого наближення амплітуда акустичного поля обчислюється шляхом інтегрування деякого диференційного рівняння вздовж променів. Кожен промінь $\mathbf{r}(\tau)$ представляє собою криву, яка задовільняє системі диференційних рівнянь [4]

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\tau} = \mathbf{t}, \quad \frac{d\theta}{d\tau} = (\mathbf{v}, \mathbf{t}_\theta), \quad \frac{d\varphi}{d\tau} = \frac{1}{\cos\theta} (\mathbf{v}, \mathbf{t}_\varphi). \quad (1)$$

Тут і далі напівжирним шрифтом позначені вектори, $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток, $\mathbf{t} = i \cos\theta \cos\varphi + j \cos\theta \sin\varphi + k \sin\theta$, $\mathbf{t}_\varphi = -i \cos\theta \sin\varphi + j \cos\theta \cos\varphi$, $\mathbf{t}_\theta = -i \sin\theta \cos\varphi - j \sin\theta \sin\varphi + k \cos\theta$, i, j, k – орти декартової системи координат, $\mathbf{v} = \nabla n(\mathbf{r})/n(\mathbf{r})$, ∇ – оператор градієнта. Початкові умови для системи (1) у випадку джерела звука, зосередженого в точці $\mathbf{r}_0$, мають вигляд

$$\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0, \quad \theta(0) = \theta_0, \quad \varphi(0) = \varphi_0, \quad (2)$$

де θ_0, φ_0 – кути, що визначають напрямок виходу променя з джерела. Крім прямих променів, визначених задачею (1),(2), розглядаються також промені, відбиті від поверхні океана або дна. Ці промені також задовільняють системі (1), а початкові умови відповідають умові “дзеркального відбиття” від поверхні та дна. Одже, можна формально розглядати єдиний промінь, що складається з декількох сегментів, які відповідають прямій та відбитим хвилям.

Задачу націлювання променів сформулюємо наступним чином: для заданої точки хвилевода $\mathbf{r}'$ необхідно знайти всі пари (θ_0, φ_0) , для яких існує таке τ' , що $\mathbf{r}(\tau') = \mathbf{r}'$ при початкових умовах (2).

Варіація початкових умов. Далі будемо розглядати промені як функції параметра τ та початкових умов:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\tau, \alpha_0, \beta_0), \quad \theta = \theta(\tau, \alpha_0, \beta_0), \quad \varphi = \varphi(\tau, \alpha_0, \beta_0).$$

Згідно із теоремою про диференційовність розв'язку системи диференційних рівнянь за початковими умовами [5], функції $\mathbf{r}(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\theta(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\varphi(\tau, \theta_0, \varphi_0)$ є диференційовними за змінними θ_0 та φ_0 . Диференціюючи (1) за θ_0 , φ_0 , отримаємо систему диференційних рівнянь, яка дозволяє обчислювати значення частинних похідних функцій $\mathbf{r}(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\theta(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\varphi(\tau, \theta_0, \varphi_0)$ вздовж променя:

$$\frac{d\mathbf{r}_\theta}{d\tau} = \mathbf{t}_\theta \theta_\theta + \mathbf{t}_\varphi \varphi_\theta, \quad (3)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_\varphi}{d\tau} = \mathbf{t}_\theta \theta_\varphi + \mathbf{t}_\varphi \varphi_\varphi, \quad (4)$$

$$\frac{d\theta_\theta}{d\tau} = (Tr_\theta, t_\theta) + (v, t_{\theta\theta}\theta_\theta + t_{\theta\varphi}\varphi_\theta), \quad (5)$$

$$\frac{d\theta_\varphi}{d\tau} = (Tr_\varphi, t_\theta) + (v, t_{\theta\theta}\theta_\varphi + t_{\theta\varphi}\varphi_\varphi), \quad (6)$$

$$\frac{d\varphi_\theta}{d\tau} = \frac{1}{\cos\theta} [(Tr_\theta, t_\varphi) + (v, t_{\varphi\theta}\theta_\theta + t_{\varphi\varphi}\varphi_\theta)] + (v, t_\varphi) \frac{\sin\theta}{\cos^2\theta} \theta_\theta, \quad (7)$$

$$\frac{d\varphi_\varphi}{d\tau} = \frac{1}{\cos\theta} [(Tr_\varphi, t_\varphi) + (v, t_{\varphi\theta}\theta_\varphi + t_{\varphi\varphi}\varphi_\varphi)] + (v, t_\varphi) \frac{\sin\theta}{\cos^2\theta} \theta_\varphi, \quad (8)$$

де позначено $r_\theta = \frac{\partial r}{\partial \theta_0}$, $r_\varphi = \frac{\partial r}{\partial \varphi_0}$, $\theta_\theta = \frac{\partial \theta}{\partial \theta_0}$, $\theta_\varphi = \frac{\partial \theta}{\partial \varphi_0}$, $\varphi_\theta = \frac{\partial \varphi}{\partial \theta_0}$, $\varphi_\varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial \varphi_0}$,
 $t_{\theta\theta} = t_{\varphi\theta} = i \sin \theta \sin \varphi - j \sin \theta \cos \varphi$, $t_{\theta\varphi} = -i \cos \theta \cos \varphi - j \cos \theta \sin \varphi - k \sin \theta$,
 $t_{\varphi\varphi} = -i \cos \theta \cos \varphi - j \cos \theta \sin \varphi$, $T = \frac{\partial v}{\partial r}$ – квадратна матриця третього порядку.

Початкові умови для (3)–(8) у випадку прямих променів мають вигляд

$$r_\theta(0) = 0, r_\varphi(0) = 0, \theta_\theta(0) = 1, \theta_\varphi(0) = 0, \varphi_\theta(0) = 0, \varphi_\varphi(0) = 1. \quad (9)$$

Для променів, відбитих від поверхні або дна, початкові умови задаються у точці відбиття і враховують зміну положення цієї точки при варіації параметрів θ_0 , φ_0 :

$$r_\theta^{(1)} = r_\theta - \frac{(r_\theta, N)t}{(t, N)}, r_\varphi^{(1)} = r_\varphi - \frac{(r_\varphi, N)t}{(t, N)}, \quad (10)$$

$$\theta_\theta^{(1)} = (t_\theta^{(1)}, d_\theta), \theta_\varphi^{(1)} = (t_\theta^{(1)}, d_\varphi), \quad (11)$$

$$\varphi_\theta^{(1)} = \frac{1}{|\cos\theta^{(1)}|} (t_\varphi^{(1)}, d_\theta), \varphi_\varphi^{(1)} = \frac{1}{|\cos\theta^{(1)}|} (t_\varphi^{(1)}, d_\varphi). \quad (12)$$

Тут верхній індекс відноситься до відбитого променя, N – одиничний вектор нормалі до відбиваючої поверхні,

$$d_\theta = l_\theta - 2N[(l_\theta, N) + (t, N_\theta)] - 2(t, N)N_\theta,$$

$$d_\varphi = l_\varphi - 2N[(l_\varphi, N) + (t, N_\varphi)] - 2(t, N)N_\varphi,$$

де

$$l_\theta = t_\theta\theta_\theta + t_\varphi\varphi_\theta - \frac{(r_\theta, N)}{(t, N)} \left[(v, t_\theta)t_\theta + \frac{1}{\cos\theta} (v, t_\varphi)t_\varphi \right],$$

$$l_{\varphi} = t_{\theta}\theta_{\varphi} + t_{\varphi}\varphi_{\varphi} - \frac{(r_{\varphi}, N)}{(t, N)} \left[(v, t_{\theta})t_{\theta} + \frac{1}{\cos\theta}(v, t_{\varphi})t_{\varphi} \right],$$

$$N_{\theta} = \frac{\partial N}{\partial r} r_{\theta}^{(1)}, \quad N_{\varphi} = \frac{\partial N}{\partial r} r_{\varphi}^{(1)}.$$

Націлювання променів у довільну точку. Нехай необхідно розв'язати задачу націлювання променів у точку r' , причому відомі променеві координати деякої іншої точки $r'' = r(\tau'', \theta_0'', \varphi_0'')$. Розглянемо гладку криву $R(\sigma)$, $0 \leq \sigma \leq 1$, яка задовольняє умовам $R(0) = r''$, $R(1) = r'$, а також функції $\tau^*(\sigma)$, $\varphi_0^*(\sigma)$, $\theta_0^*(\sigma)$, такі, що

$$r(\tau^*(\sigma), \theta_0^*(\sigma), \varphi_0^*(\sigma)) = R(\sigma). \quad (13)$$

Диференціюючи співвідношення (13) за змінною σ , маємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно $\frac{d\tau^*}{d\sigma}$, $\frac{d\theta_0^*}{d\sigma}$, $\frac{d\varphi_0^*}{d\sigma}$:

$$t \frac{d\tau^*}{d\sigma} + \frac{\partial r}{\partial \theta_0} \frac{d\theta_0^*}{d\sigma} + \frac{\partial r}{\partial \varphi_0} \frac{d\varphi_0^*}{d\sigma} = \frac{dR}{d\sigma}. \quad (14)$$

Розв'язок системи (14) записується за допомогою формул Крамера:

$$\frac{d\tau^*}{d\sigma} = \frac{J_{\tau}}{J}, \quad \frac{d\theta_0^*}{d\sigma} = \frac{J_{\theta}}{J}, \quad \frac{d\varphi_0^*}{d\sigma} = \frac{J_{\varphi}}{J}. \quad (15)$$

Початкові умови для (15) мають вигляд

$$\tau^*(0) = \tau'', \quad \theta_0^*(0) = \theta_0'', \quad \varphi_0^*(0) = \varphi_0''. \quad (16)$$

Розв'язавши задачу Коші (15), (16), можна визначити променеві координати $(\tau', \theta_0', \varphi_0')$ точки r' . При цьому значення $J, J_{\tau}, J_{\theta}, J_{\varphi}$ в (15) виражаються через часткові похідні функцій $r(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\theta(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, $\varphi(\tau, \theta_0, \varphi_0)$, і можуть бути обчислені інтегруванням системи (3)–(8) з початковими умовами (9) або (10)–(12). Зазначимо, що знайдені таким чином величини $(\tau', \theta_0', \varphi_0')$ не залежать від вибору кривої $R(\sigma)$.

Одже, для пошуку променів, що приходять у задану точку r' , може бути запропонований наступний алгоритм.

1. В області зміни (θ_0, φ_0) вводиться сітка із кроками h_{θ}, h_{φ} .
2. Розраховуються траєкторії променів із параметрами $(\theta_{0i}, \varphi_{0j})$, що відповідають вузлам сітки.
3. Знаходяться усі промені $r_k(\tau)$, які проходять через певний окіл U точки r' і на кожному з них вибирається деяка точка $r_k'' \in U$.

4. Вводиться сімейство кривих $R_k(\sigma)$, $0 \leq \sigma \leq 1$, таких, що $R_k(0) = r_k''$, $R_k(1) = r'$, і для кожної кривої розв'язується задача Коші (15), (16).

При застосуванні алгоритму постає питання вибору радіуса околу U та кроків h_θ , h_φ сітки, що визначають розрішаючу спроможність алгоритму для пошуку усіх променів, які приходять у точку r' . Априорних оцінок для раціонального вибору h_θ та h_φ наразі не існує, тому доцільно спочатку покласти у якості початкового наближення деякі довільні значення, а потім проводити розрахунки при $h_\theta^{(m)} = h_\theta^{(0)} / 2^m$, $h_\varphi^{(m)} = h_\varphi^{(0)} / 2^m$, $m = 1, 2, \dots$. На кожній ітерації розрішаюча спроможність алгоритму буде покращуватися, одже, буде знайдено все більше і більше променів. Критерієм зупинки обчислень може бути стабілізація кількості знайдених променів або обчисленої вздовж них сумарної амплітуди поля.

Висновки. Описаний алгоритм є гнучким та ефективним засобом дослідження хвильових процесів, що дозволяє розв'язувати задачу націлювання променів у підводних неоднорідних хвильоводах із довільним рельєфом дна та просторовим розподілом коефіцієнта заломлення. При цьому точність знаходження початкових параметрів кожного знайденого променя визначається точністю вибраного чисельного метода розв'язання задач Коші для систем диференціальних рівнянь (1), (3)–(8) та (15).

Література

1. Кравцов Ю.А., Орлов Ю.И. Геометрическая оптика неоднородных сред. – М.: Наука, 1980. – 304 с.
2. Engquist B., Runborg O. Computational high frequency wave propagation //Acta Numerica, 2003, pp. 181-266.
3. Комиссарова Н.Н. Расчет лучей в прибрежной зоне с произвольным рельефом дна //Акустический журнал, 1998, т.44, №1, с. 68-75.
4. Maltsev N. Enhanced ray theory //J. Comput. Acoust., 2001, v.9 No.1, pp. 169-182.
5. Библиков Ю.Н. Курс обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Высшая школа, 1991. – 304 с.

Надійшла до редколегії 28.09.2006

УДК 518:517.944/947

Володимир С. Саженьок *,
Василь І. Гаркуша,
Андрій І. Риженко

**Застосування методу штрафу та
фіктивних областей для
параболічних варіаційних
нерівностей другого порядку з
обмеженням усередині області**

*Використовуючи методи штрафу та
фіктивних областей, для параболічних
варіаційних нерівностей другого порядку
з обмеженням усередині області
побудовано нелінійну крайову задачу,
яка апроксимує варіаційну нерівність.
Отримано оцінку швидкості збіжності
в нормі $W_2^{1,0}(Q_T)$.*

*Ключові слова: варіаційна
нерівність, метод штрафу, метод
фіктивних областей.*

Vladimir S. Sazhenyuk,
Vasil I. Garkusha,
Andrei I. Rizhenko

**Application of the methods of
penalty and fictitious domains for
variation second order parabolic
inequalities with restriction inside
the domain**

*Using methods of penalty and
fictitious domains for variation second
order parabolic inequalities with restriction
inside the domain with reducing to
nonlinear boundary-value problem is
obtained. The convergence rate of
approximated solutions in $W_2^{1,0}(Q_T)$ is
derived.*

*Key words: variation inequality,
method of penalty, method of fictitious
domains.*

*E-mail: moe@unicyb.kiev.ua

При побудові чисельних алгоритмів розв'язування варіаційних нерівностей, зокрема при використанні методу сіток, виникають складнощі пов'язані з геометрією області, де шукається розв'язок. У випадках складних областей при знаходженні розв'язків крайових задач використовується метод фіктивних областей [1].

В роботі [2] запропоновано та обгрунтовано алгоритм застосування методу фіктивних областей для еліптичних варіаційних нерівностей з обмеженням усередині області, що базується на застосуванні методу штрафу.

В цій статті досліджується клас параболічних варіаційних нерівностей з обмеженням усередині області. За допомогою методу штрафу та фіктивних областей побудовано нелінійні крайові задачі, що апроксимують варіаційну нерівність. Розглядаються два варіанти методу фіктивних областей. Отримано оцінки швидкості збіжності розв'язку побудованих нелінійних крайових задач до розв'язку задачі зі штрафом та розв'язку варіаційної нерівності в нормі $W_2^{1,0}(Q_T)$.

1. Нехай $Q_T = \{(x, t) : x \in \Omega, t \in (0, T)\}$ - циліндр, Ω - область з границею Γ класу C^2 , $S_T = \{(x, t) : x \in \Gamma, t \in (0, T)\}$ - бокова поверхня Q_T ,

$$a(v_1, v_2) = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega} a_{ij}(x, t) \frac{\partial v_1}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v_2}{\partial x_j} dx_1 dx_2 + \int_{\Omega} q(x, t) v_1 v_2 dx_1 dx_2,$$

$$(v_1, v_2) = \int_{\Omega} v_1 v_2 dx_1 dx_2, \forall v_1, v_2 \in W_2^{1,0}(Q_T),$$

$$q(x, t) \geq q_0 > 0, \quad q(x, t), b_i(x, t) \in L_{\infty}(Q_T), \quad a_{ij}(x, t) = a_{ji}(x, t), \quad a_{ij}(x, t) \in W_{\infty}^1(Q_T),$$

білінійна форма $a(v_1, v_2)$ є коерцитивною.

Розглянемо узагальнену постановку наступної задачі розв'язування параболічної варіаційної нерівності з обмеженням у середині області: знайти функцію $u \in K$, $u(0, x) = u_0(x)$, $u_0(x) \geq 0$, $x \in \Omega$ таку, що:

$$- \int_{Q_T} \frac{\partial v}{\partial t} (v - u) dx dt + \int_0^T a(u, v - u) dt \geq \int_0^T (f, v - u) dt - \frac{1}{2} \int_{\Omega} |v(0, x) - u_0(x)|^2 dx, \quad \forall v \in K, \quad (1)$$

де $f \in L_2(Q_T)$, $u_0 \in W_2^2(\Omega)$, $K = \{v \mid v \in W_2^{1,0}(Q_T), v \geq 0 \text{ майже всюди в } Q_T\}$.

Задача (1) має єдиний розв'язок $u \in W_2^{2,1}(Q_T)$ [3].

Варіаційній нерівності (1) поставимо у відповідність наступну задачу зі графом:

$$\begin{aligned} &\text{Знайти функцію } u_{\varepsilon} \in W_2^{1,0}(Q_T) \text{ таку, що } u_{\varepsilon}(0, x) = u_0(x), \\ &- \int_{Q_T} \frac{\partial v}{\partial t} u_{\varepsilon} dx dt + \int_0^T a(u_{\varepsilon}, v) dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^T (u_{\varepsilon}^-, v) dt = \int_0^T (f, v) dt + \int_{\Omega} u_0 \cdot v(x, 0) dx, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\forall v \in W_2^{1,1}(Q_T), \quad v(x, T) = 0,$$

де $u_{\varepsilon}^- = 0,5 u_{\varepsilon} (\text{sign} u_{\varepsilon} - 1)$, $\varepsilon > 0$.

Задача (2) має єдиний розв'язок, у класі функцій $W_2^{2,1}(Q_T)$ [3]. Має місце [3,4] наступна

Теорема 1. Розв'язок задачі (2) збігається при $\varepsilon \rightarrow 0$ до розв'язку варіаційної нерівності (1), при чому має місце оцінка

$$\|u - u_{\varepsilon}\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_T \sqrt{\varepsilon} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}). \quad (3)$$

(тут і надалі через M будемо позначати додатні сталі, які не залежать від ε та δ).

Нехай $Q_T^0 = \{(x, t) : x \in \Omega_0, t \in (0, T)\}$ - паралелепіпед, Ω_0 - прямокутник з границею Γ_0 , $S_T^0 = \{(x, t) : x \in \Gamma_0, t \in (0, T)\}$ - бокова поверхня Q_T^0 , $\Omega_1 = \Omega_0 - \Omega$; $Q_T^1 = \{(t, x), x \in \Omega_1, t \in (0, T)\}$; $Q_T^0 = Q_T^1 + Q_T$.

Для задачі (2) розглянемо два варіанти методу фіктивних областей [5]

Варіант 1:

знайти $u_\delta \in W_2^{1,0}(Q_T^0)$ таке, що

$$-\int_{Q_T} \frac{\partial v}{\partial t} u_\delta dx dt + \int_{Q_T} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial u_\delta}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) u_\delta v dx dt + \frac{1}{\delta} \int_{Q_T} u_\delta v dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} u_\delta v dx dt = \int_{Q_T} f(x,t) v dx dt + \int_{\Omega} u_0 \cdot v(x,0) dx, \quad (4)$$

$$\forall v \in W_2^{1,0}(Q_T^0), v(x,T) = 0, \delta > 0$$

Варіант II:

знайти $u_\delta \in W_2^{1,0}(Q_T^0)$ таке, що

$$-\int_{Q_T} \frac{\partial v}{\partial t} u_\delta dx dt + \int_{Q_T} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial u_\delta}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) u_\delta v dx dt + \frac{1}{\delta} \int_{Q_T} \left(\sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial u_\delta}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_j} \right) dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} u_\delta v dx dt = \int_{Q_T} f(x,t) v dx dt + \int_{\Omega} u_0 \cdot v(x,0) dx, \quad (5)$$

$$\forall v \in W_2^{1,0}(Q_T^0), v(x,T) = 0, \delta > 0.$$

Задачі (4) та (5) мають єдині розв'язки, що належать простору $W_2^{2,1}(Q_T)$ [6]. Справедливі наступні теореми.

Теорема 2. Розв'язок задачі (4) збігається при $\delta \rightarrow 0$ до розв'язку варіаційної нерівності (1), при чому має місце оцінка

$$\|u - u_\delta\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_2 \sqrt{\delta} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}).$$

Теорема 3. Розв'язок задачі (5) збігається при $\delta \rightarrow 0$ до розв'язку варіаційної нерівності (1), при чому має місце оцінка

$$\|u - u_\delta\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_3 \sqrt{\delta} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}). \quad (6)$$

Доведення теореми 2.

Введемо функцію $w(x,t) = \bar{u}(x,t) - u_\delta(x,t)$,

де $\bar{u}(x,t) = u_\varepsilon(x,t)$, $(x,t) \in Q_T$; $\bar{u}(x,t) = 0$, $(x,t) \in Q_T^1$,

$u_\varepsilon(x,t)$ - розв'язок задачі зі штрафом (2). Неважко бачити, що функція $u_\varepsilon(x,t)$ задовольняє інтегральній тотожності

$$-\int_{Q_T} \frac{\partial v}{\partial t} u_\varepsilon dx dt + \int_{Q_T} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) u_\varepsilon v dx dt - \int_{S_T} \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} v dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} u_\varepsilon v dx dt = \int_{Q_T} f(x,t) v dx dt + \int_{\Omega} u_0 \cdot v(x,0) dx, \quad \forall v \in W_2^{1,0}(Q_T^0), v(x,T) = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} = \sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x_j} \cos(n, x_i).$$

Віднімемо з (7) рівність (4). Для функції $w(x,t)$ отримаємо задачу

$$- \int_{Q_T^0} \frac{\partial v}{\partial t} w \, dx dt + \int_{Q_T^0} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial w}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) w v \, dx dt + \frac{1}{\delta} \int_{Q_T} w v \, dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} ((w + u_\varepsilon)^- - u_\varepsilon^-) v \, dx dt = \int_{S_T} \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} v \, dx dt,$$

$$\forall v \in W_2^{1,0}(Q_T^0), \quad v(x, T) = 0.$$

Звідси випливає співвідношення

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega_0} w^2 \, dx + \int_{Q_T^0} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial w}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial w}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) w^2 \, dx dt + \frac{1}{\delta} \int_{Q_T} w^2 \, dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} ((w + u_\varepsilon)^- - u_\varepsilon^-) w \, dx dt = \int_{S_T} \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} w \, dx dt, \quad \forall t \in [0, T].$$

Використовуючи монотонність функції $-v^-$, нерівність Коші-Бун'яковського та оцінки [7]

$$\left\| \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} \right\|_{L_2(S_T)} \leq M_4 \|u_\varepsilon\|_{W_2^{1,1}(Q_T)} \leq M_5 \|f\|_{L_2(Q_T)},$$

$$\|w\|_{L_2(S_T)} \leq M_6 \left(\frac{1}{\sqrt{\delta}} \int_0^T \|w\|_{L_2(\Omega_t)}^2 \, dt + \sqrt{\delta} \int_0^T |w|_{W_2^1(\Omega_t)}^2 \, dt \right)^{\frac{1}{2}}$$

з останньої рівності, після нескладних перетворень, виводимо

$$\int_0^T \|w\|_{W_2^1(\Omega_0)}^2 \, dt + \frac{1}{\delta} \int_0^T \|w\|_{L_2(\Omega_t)}^2 \, dt \leq M_7 \sqrt{\delta} (\|u_0\|_{W_2^1(\Omega)} + \|f\|_{L_2(Q_T)}).$$

Звідси

$$\|w\|_{W_2^{1,0}(Q_T^0)} \leq M_8 \sqrt{\delta} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}).$$

Таким чином

$$\|u_\varepsilon - u_\delta\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_9 \sqrt{\delta} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}).$$

Далі, в силу оцінки (3) маємо

$$\|u - u_\varepsilon\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq \|u - u_\delta\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} + \|u_\delta - u_\varepsilon\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_{10} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\delta}) (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}).$$

Поклавши $\varepsilon = \sqrt{\delta}$, переконуємось у справедливості теореми. Теорему 2 доведено.

Доведення теореми 3.

Для похибки $w(x,t)$ аналогічно отримаємо рівняння

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega_0} w^2 \, dx + \int_{Q_T^0} \left(\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}(x,t) \frac{\partial w}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial w}{\partial x_j} \right) dx dt + \int_{Q_T} q(x,t) w^2 \, dx dt + \frac{1}{\delta} \int_{Q_T^0} \left(\frac{\partial w}{\partial x_i} \right)^2 \, dx dt - \frac{1}{\varepsilon} \int_{Q_T} ((w + u_\varepsilon)^- - u_\varepsilon^-) w \, dx dt = \int_{S_T} \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial g} w \, dx dt, \quad \forall t \in [0, T].$$

Звідси

$$\int_0^T \|w\|_{W_2^1(\Omega)}^2 \, dt + \frac{1}{\delta} \int_0^T |w|_{W_2^1(\Omega_t)}^2 \, dt \leq M_{11} (\|u_0\|_{W_2^1(\Omega)} + \|f\|_{L_2(Q_T)}) \cdot \|w\|_{L_2(S_T)}.$$

Використовуючи оцінку [7] $\|w\|_{L_2(S_T)} \leq M_{12} \int_0^T \|w\|_{W_1^1(\Omega_t)} dt$, нерівність

Фрідрікса, звідси отримаємо

$$\|w\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_{13} \delta (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}) , \quad \|w\|_{W_1^{1,0}(Q_T)} \leq M_{14} \sqrt{\delta} \cdot (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_1^1(\Omega)}) .$$

Аналогічно доведенню теореми 2 можна отримати оцінку

$$\|u - u_\delta\|_{W_2^{1,0}(Q_T)} \leq M_{15} (\sqrt{\varepsilon} + \sqrt{\delta}) (\|f\|_{L_2(Q_T)} + \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)}) .$$

Поклавши $\varepsilon = \delta$, отримаємо оцінку (6). Доведення теореми 3 завершено.

Література.

1. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. - М. Наука, 1977, 456 с.
2. Войцеховский С.А., Гаврилюк И.П., Саженьюк В.С. Оценки скорости сходимости метода штрафа и метода фиктивных областей для одного класса вариационных неравенств второго порядка с ограничением внутри области. - Докл. АН УССР, 1985, №8.
3. Бенсусан А., Лионс Ж.-Л. Импульсное управление и квазивариационные неравенства: Пер. с франц. - М.: Наука, 1987. - 600с.
4. Саженьюк В.С. Оценки скорости сходимости методов штрафа, фиктивных областей и сеток для некоторых параболических вариационных неравенств. Киев, ун-т, 1985, (Рукопись деп. в УкрНИИНТИ 19 апреля 1985 г., № 776 Ук-85 Деп.).
5. Войцеховский С.А. Метод фиктивных областей для параболических уравнений второго порядка. - В сб. Вычислительная и прикладная математика, Киев, 1982, вып. 47, с. 35-42
6. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. -М., Наука, 1967, 736 с.
7. Михайлов В.П. Дифференциальные уравнения в частных производных. - М. Наука, 1976, 392 с.

Надійшла до редакції 26.06.2006

УДК 518:517. 944/947

Володимир С. Саженьюк*,
Андрій І. Риженко

**Оцінка швидкості збіжності
методу сіток для варіаційних
еліптичних нерівностей
четвертого порядку з
обмеженням усередині області**

*Використовуючи методи
штрафу та сіток, побудовано
різницеву схему для варіаційної
еліптичної нерівності четвертого
порядку в прямокутнику з
обмеженням усередині області,
яка має перший порядок точності
в нормі $W_2^3(\omega)$.*

*Ключові слова: варіаційна
нерівність, метод штрафу,
різницєва схема.*

Vladimir S. Sazhenyuk,
Andrei I. Rizhenko

**Estimate of velocity of convergence
for method of grids in variation
elliptic inequalities of second order
with restriction inside the domain**

*Using methods of penalty and
grids, difference scheme for variation
elliptic inequalities of fourth order in
rectangle with restriction inside the
domain was built. First order of
accuracy in norm $W_2^3(\omega)$ was proved.*

*Key words: variation inequality,
method of penalty, difference scheme.*

*E-mail: moe@unicyb.kiev.ua

У багатьох випадках задачі механіки і фізики формуються у вигляді крайових задач для рівнянь четвертого порядку при додаткових умовах, які накладаються на шуканий розв'язок. При визначених умовах такі задачі можна описати за допомогою варіаційних нерівностей четвертого порядку з обмеженням в середині області [1,2].

При побудові чисельних алгоритмів розв'язування задач з обмеженням одночасно з методами скінченно-мірної апроксимації (сітковими методами) використовують методи асимптотичної апроксимації варіаційних нерівностей. Ці методи дозволяють звести задачу пошуку розв'язку варіаційної нерівності до задачі пошуку єдиного розв'язку деякої крайової задачі, що наближає нерівність. Одним з поширених методів асимптотичної апроксимації варіаційних нерівностей є метод штрафу [1].

В статті розглядається варіаційна нерівність четвертого порядку з обмеженням у середині області. Запропоновано і обґрунтовано метод чисельного розв'язування варіаційної нерівності, який базується на застосуванні методів штрафу та сіток. Побудована різницєва схема. Отримані

оцінки швидкості збіжності методу штрафу порядку $\sqrt{\varepsilon}$ у нормі $W_2^1(\Omega)$ та різницевої схеми порядку h у нормі $W_2^1(\omega)$.

1. Постановка задачі.

Нехай Ω – прямокутник з границею Γ . Введемо функціональний простір $V = \{v \mid v \in W_2^1(\Omega), \Delta v \in W_2^1(\Omega)\}$. В V виділимо замкнуту опуклу множину $K = \{v \mid v \in V, -\Delta v \geq 0 \text{ майже всюди в } \Omega\}$.

Позначимо

$$a(v_1, v_2) = \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} \frac{\partial \Delta v_1}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \Delta v_2}{\partial x_i} dx_1 dx_2 + \sum_{i=1}^2 \int_{\Omega} \frac{\partial v_1}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v_2}{\partial x_i} dx_1 dx_2 + \int_{\Omega} \Delta v_1 \Delta v_2 dx_1 dx_2,$$

$$(v_1, v_2) = \int_{\Omega} v_1 v_2 dx_1 dx_2.$$

Розглянемо задачу: $\forall f \in L_2(\Omega)$ знайти $u \in K$, таке, що

$$a(u, v - u) \geq (f, -\Delta(v - u)), \forall v \in K \quad (1)$$

Легко бачити, що нерівність (1) еквівалентна наступній системі

$$u \in K, \quad a(u, v) \geq (f, -\Delta v), \quad \forall v \in K \quad (2)$$

$$a(u, u) = (f, -\Delta u). \quad (3)$$

2. Метод штрафу.

Апроксимуємо варіаційну нерівність (1) наступною задачею зі штрафом:

знайти $u_\varepsilon \in V$ таке, що

$$a(u_\varepsilon, v) - \frac{1}{\varepsilon} ((\Delta u_\varepsilon)^+, (-\Delta v)) = (f, -\Delta v), \quad \forall v \in V, \quad (4)$$

де $v^+ = 0,5v \cdot (\text{Sign } v + 1)$, $\varepsilon > 0$.

Можна довести (див. [3]), що задачі (1) та (4) мають єдині розв'язки у класі функцій $W_2^4(\Omega)$, причому справедливі наступні оцінки

$$\|u_\varepsilon\|_{W_2^4(\Omega)} \leq M_1 \|f\|_{L_2(\Omega)}, \quad \|u\|_{W_2^4(\Omega)} \leq M_2 \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (5)$$

$$\|(\Delta u_\varepsilon)^+\|_{L_2(\Omega)} \leq M_3 \varepsilon \|f\|_{L_2(\Omega)}, \quad \|(\Delta u_\varepsilon)^+\|_{W_2^1(\Omega)} \leq M_4 \sqrt{\varepsilon} \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (6)$$

де M_i – додатні сталі, що не залежать від ε та h .

Зауваження. Варіаційна нерівність (1) еквівалентна наступній нелінійній крайовій задачі з обмеженням в області:

$$\begin{aligned} -\Delta u(\Delta^2 u - \Delta u + u - f) &= 0, \\ -\Delta u &\geq 0, \quad \Delta u - \Delta u + u - f \geq 0, \quad x \in \Omega \\ u &= 0, \quad \Delta u = 0, \quad x \in \Gamma. \end{aligned} \quad (7)$$

У свою чергу задача зі штрафом (4) еквівалентна задачі:

$$\Delta^2 u_\varepsilon - \Delta u_\varepsilon + u_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} (\Delta u_\varepsilon)^+ = f, \quad x \in \Omega$$

$$u_\varepsilon = 0, \quad \Delta u_\varepsilon = 0, \quad x \in \Gamma. \quad (8)$$

Встановимо оцінку швидкості збіжності розв'язку задачі зі штрафом (4) до розв'язку варіаційної нерівності (1).

Теорема 1. Розв'язок задачі (4) збігається при $\varepsilon \rightarrow 0$ до розв'язку варіаційної нерівності (1), причому виконується оцінка

$$\|u_\varepsilon - u\|_{W_2^1(\Omega)} \leq M_5 \sqrt{\varepsilon} \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (9)$$

Доведення. Відніmemo (2) та (3) з (4) ($v = u$). Тоді для функції $w = u_\varepsilon - u$ отримаємо систему

$$a(w, v) - \frac{1}{\varepsilon} ((\Delta u_\varepsilon)^+, -\Delta v) \leq 0, \quad \forall v \in K \quad (10)$$

$$a(w, u) = \frac{1}{\varepsilon} ((\Delta u_\varepsilon)^+, -\Delta u). \quad (11)$$

З (11) випливає нерівність $a(w, u) \geq 0$. Тому

$$a(w, w) \leq a(w, u_\varepsilon) \quad (12)$$

Виберемо в нерівності (10) $v \in K$ таке, що $-\Delta v = (\Delta u_\varepsilon)^+$, де

$$(\Delta u)^+ = (\Delta u_\varepsilon)^+ - \Delta u_\varepsilon. \quad (13)$$

Тоді отримаємо

$$-\int_{\Omega} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \Delta w}{\partial x_i} \frac{\partial (\Delta u_\varepsilon)^+}{\partial x_i} dx - \int_{\Omega} \Delta w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx + \int_{\Omega} w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} (\Delta u_\varepsilon)^+ (\Delta u_\varepsilon)^+ dx \leq 0.$$

Так, як $(\Delta u_\varepsilon)^+ \cdot (\Delta u_\varepsilon)^+ = 0$, то

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \Delta w}{\partial x_i} \frac{\partial (\Delta u_\varepsilon)^+}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} \Delta w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx - \int_{\Omega} w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx \geq 0.$$

Використовуючи останню нерівність, а також нерівність (12) та рівність (13), можна легко отримати

$$a(w, w) \leq \int_{\Omega} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \Delta w}{\partial x_i} \frac{\partial (\Delta u_\varepsilon)^+}{\partial x_i} dx + \int_{\Omega} \Delta w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx - \int_{\Omega} w (\Delta u_\varepsilon)^+ dx.$$

Враховуючи оцінки (5) і (6), з останньої нерівності знайдемо

$$\|\Delta w\|_{W_2^1(\Omega)} \leq M_6 \sqrt{\varepsilon} \|f\|_{L_2(\Omega)}.$$

Але [2] для $\forall v \in W_2^1(\Omega)$, $\Delta v \in W_2^1(\Omega)$, виконується $\|v\|_{W_2^1(\Omega)} \leq M_7 \|\Delta v\|_{W_2^1(\Omega)}$.

Таким чином маємо

$$\|w\|_{W_2^1(\Omega)} \leq M_8 \sqrt{\varepsilon} \|f\|_{L_2(\Omega)}.$$

Теорему доведено.

3. Різницева схема.

У прямокутнику $\bar{\Omega}$ введемо рівномірну сітку $\bar{\omega}$. Позначимо через $\gamma = \bar{\omega} - \omega$ множину граничних вузлів. Нехай $g_\varepsilon(v) = \frac{1}{\varepsilon} v^+$, $\forall v \in V$.

Задачу (8) апроксимуємо наступною різницевою схемою

$$\begin{aligned} \Lambda^* y - \Lambda y + y - g_\varepsilon(\Lambda y) &= T_1 T_2 f, & x \in \omega \\ y &= 0, \quad \Lambda y = 0, & x \in \gamma \end{aligned} \quad (14)$$

$$\Lambda^* y = y_{x_1 x_1} + 2y_{x_1 x_2} + y_{x_2 x_2},$$

$$\Lambda y = y_{x_1 x_1} + y_{x_2 x_2},$$

$$T_i v(\cdot) = \int_0^1 (1-t) \cdot v(x_1 + (2-i)th_1, x_2 + (i-1)th_2) dx, \quad i=1,2$$

- усереднюючі оператори [5].

Помножимо (14) послідовно на $- \Lambda y$ та $-(\Lambda y)^+$ та просумуємо по вузлах сітки. Після нескладних перетворень отримаємо оцінки

$$\|y\|_{1,\omega} \leq M_9 \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (15)$$

$$\|g(\Lambda y)\|_{0,\omega} \leq M_{10} \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (16)$$

(ми скористались оцінкою [3] $\|y\|_{1,\omega}^2 \leq M \cdot (\|y\|_{1,\omega}^2 + \|\Lambda y\|_{1,\omega}^2 + \|\Lambda y\|_{0,\omega}^2)$ та монотонністю функції $g_\varepsilon(v)$).

Справедлива наступна теорема про збіжність.

Теорема 2. Розв'язок різницевої схеми (14) ($\varepsilon = h^2$) збігається при $h \rightarrow 0$ до розв'язку варіаційної нерівності (1), при цьому справедлива оцінка швидкості збіжності

$$\|y - u\|_{1,\omega} \leq M_{11} h \|f\|_{L_2(\Omega)} \quad (17)$$

Доведення.

Функцію $u_\varepsilon(x)$ продовжимо непарним способом відносно сторін прямокутника Ω з збереженням класу та норми на деяку область $\hat{\Omega} \supset \Omega$ [4]. За отриманою таким чином функцією збережено такі ж самі позначення. Для похибки $z = y - u_\varepsilon$ маємо задачу:

$$\Lambda^* z - \Lambda z + z - T_1 T_2 ((g_\varepsilon(\Lambda y) - g_\varepsilon(\Lambda u_\varepsilon))) = \sum_{i=1}^2 (\eta_{i0}^{(y)} - \eta_{i0}^{(u)}) + \eta_0, \quad (18)$$

де

$$\eta_i = T_{3-i} \left(\frac{\partial^2 u_\varepsilon(\cdot)}{\partial x_i^2} - u_{\varepsilon x_i x_i} \right), \quad \eta^{(u)} = P_i T_{3-i} \left(\frac{\partial u_i(\cdot)}{\partial x_i} - u_{\varepsilon x_i} \right), \quad i=1,2$$

$$\eta_0 = T_1 T_2 u_\varepsilon - u_\varepsilon,$$

$$P_i v(\cdot) = \int_0^1 v(x_1 + (2-i)th_1, x_2 + (i-1)th_2) dt, \quad i=1,2.$$

Помножимо (18) скалярно на $(-\Lambda z)$. Підсумувавши частинами отримаємо

$$\sum_{i=1}^2 \|(\Lambda z)_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)}^2 + \|\Lambda z\|_{0,\omega}^2 + \|z\|_{1,\omega}^2 - ((g_\varepsilon(\Lambda y) - T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon)), -\Lambda z) \leq M_{17} \left\{ \sum_{i=1}^2 (\|\eta_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)}^2 + \|\eta^{(i)}\|_{0,\omega}^2) + (\|g_\varepsilon(\Lambda y)\|_{0,\omega} + \|T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon)\|_{0,\omega}) \cdot \right.$$

$$\left. \|(\Lambda z)_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)} + \|\eta^{(i)}\|_{0,\omega} \cdot \|(\Lambda z)_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)} + \|\eta_0\|_{0,\omega} \cdot \|\Lambda z\|_{0,\omega} \right\}.$$

Крім того

$$\begin{aligned} & -(T_1 T_2 (g_\varepsilon(\Lambda y) - g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon)), -\Lambda z) = (g_\varepsilon(\Lambda y) - T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon), \Lambda y - \Lambda u_\varepsilon) = \\ & (g_\varepsilon(\Lambda y) - T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon), \Lambda y - T_1 T_2(\Delta u_\varepsilon)) + (g_\varepsilon(\Lambda y) - T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon), T_1 T_2(\Delta u_\varepsilon) - \Lambda u_\varepsilon), \\ & (g_\varepsilon(\Lambda y) - T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon), \Lambda y - T_1 T_2(\Delta u_\varepsilon)) \geq 0, \\ & \text{і } \|z\|_{3,\omega}^2 \leq M_{18} \cdot (\|z\|_{1,\omega}^2 + \|\Lambda z\|_{1,\omega}^2 + \|\Lambda z\|_{0,\omega}^2). \end{aligned}$$

Враховуючи це отримаємо оцінку

$$\|z\|_3^2 \leq M_{18} \cdot \left\{ \sum_{i=1}^2 (\|\eta_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)}^2 + \|\eta^{(i)}\|_{0,\omega}^2) + (\|g_\varepsilon(\Lambda y)\|_{0,\omega} + \|T_1 T_2 g_\varepsilon(\Delta u_\varepsilon)\|_{0,\omega}) \cdot \right. \quad (19)$$

$$\left. \|T_1 T_2(\Delta u_\varepsilon) - \Lambda u_\varepsilon\|_{0,\omega} \right\}.$$

Доданки в правій частині нерівності (19) оцінимо за допомогою леми Брембля-Гильберта [5,6]:

$$\|\eta_{\tilde{x}_i}\|_{L_2(\Omega)} \leq M_{15} h \|u_\varepsilon\|_{W_2^1(\Omega)},$$

$$\|\eta^{(i)}\|_{0,\omega} \leq M_{16} h^2 \|u_\varepsilon\|_{W_2^1(\Omega)}, \quad i = 1, 2;$$

$$\|\eta_0\|_{0,\omega} \leq M_{17} h^2 \|u_\varepsilon\|_{W_2^1(\Omega)},$$

$$\|T_1 T_2(\Delta u_\varepsilon) - \Lambda u_\varepsilon\|_{0,\omega} \leq M_{18} h^3 \|u_\varepsilon\|_{W_2^1(\Omega)}, \quad h = \max \{h_1, h_2\}.$$

Підставляючи останні оцінки в (19) та враховуючи (6) і (16) знаходимо

$$\|z\|_{3,\omega} \leq M_{19} h \|f\|_{L_2(\Omega)}. \quad (20)$$

Можна встановити нерівність [3] $\|v\|_{3,\omega} \leq M_{20} \|v\|_{W_2^1(\Omega)}$, яка виконується

$$\forall v \in W_2^1(\Omega).$$

Враховуючи це та оцінку (9), з (20) отримаємо:

$$\|y - u\|_{3,\omega} \leq M_{21} (h + \sqrt{\varepsilon}) \|f\|_{L_2(\Omega)}.$$

Поклавши $\varepsilon = h^2$ переконуємось у справедливості теореми. Теорему доведено.

Література.

1. Гловински Р., Лионс Ж.-Л., Тремольер Р. Численное исследование вариационных неравенств. Пер. с франц. – М.: Мир, 1979. – 574 с.
2. Lions J.L. Some remarks on variational inequalities. Conference on Functional Analysis. Tokyo April 1969. p.270-282.
3. Гаврилюк И.П., Сажениук В.С., Методы штрафа и сеток для вариационных неравенств четвертого порядка. □ Киев, ун-т,

Киев, 1985, 20 с. (рукопись деп. в УкрНИИНТИ 19 апреля 1985 г., № 777 Ук-85 Деп.).

4. Гаврилюк И.П., Лазаров Р.Д., Макаров В.Л., Пирназаров С.П.,
Оценки скорости сходимости разностных схем для уравнения
четвертого порядка эллиптического типа.
Журн. вычисл. матем. и матем. физики, 1983, т. 23, № 2, с.355-365.
5. Самарский А. А., Лазаров Р. Д., Макаров В. Л. Разностные схемы для
дифференциальных уравнений с обобщенными решениями. – М.:
Высшая школа, 1987. – 296с
6. Сьярле Ф. Метод конечных элементов для эллиптических задач: Пер..
с англ. – М.: Мир, 1980. – 512с

УДК 681.5

Олександр С. Слабоспицький *

**Розщеплена процедура
оцінювання нестационарних
параметрів нелінійних
неперервних систем методом
найменших квадратів зі змінним
фактором забування**

Для нелінійних об'єктів з неперервним часом розглядається проблема оцінювання параметрів, які повільно змінюються з часом у випадку, коли кожне рівняння системи має свій власний вектор параметрів. Для оцінки параметрів вищезгаданих систем методом найменших квадратів зі змінним фактором забування та зваженого залишкового інтегралу квадратів отримані відповідні розщеплені алгоритми оцінювання.

Ключові слова: оцінювання нестационарних параметрів, розщеплений алгоритм, неперервна система, нелінійна система, метод найменших квадратів, змінний фактор забування, зважений залишковий інтеграл квадратів.

Alexander S. Slabospitsky *

**Splitted estimation procedure of
nonstationary parameters for
nonlinear continuous systems by
the least squares method with
variable forgetting factor**

The estimation problem of slowly time-varying parameters is considered for nonlinear objects with continuous time in the case when each system equation has its own parameter vector. Corresponding splitted estimation algorithms are obtained for parameter estimate of above-mentioned systems by the least squares method with variable forgetting factor and weighted residual integral of squares.

Key words: time-varying parameter estimation, splitted algorithm, continuous system, nonlinear system, least squares method, variable forgetting factor, weighted residual integral of squares.

* E-mail: sl@univ.kiev.ua

Проблема визначення нестационарних параметрів для складних об'єктів є однією з найбільш актуальних в теорії оцінювання, а її ефективне розв'язання має велике практичне значення. Дійсно, далеко не у всіх випадках можна задовільнитися математичною моделлю з постійними параметрами, що спонукає переходити до використання моделі зі змінними параметрами.

Розглянемо випадок, коли невідомі параметри можуть з часом повільно дрейфувати. У цій ситуації можна скористатися методом найменших квадратів зі змінним фактором забування [1]. При справедливості класичних припущень відповідні результати по визначенню нестационарних параметрів цим методом для дискретних лінійних систем представлені у роботах [1, 2], а у випадку неперервного

часу для регресійних моделей, лінійних та білінійних динамічних систем проблема розглянута у статті [3]. Відповідна процедура для класу нелінійних неперервних динамічних систем наведена у роботі [4]. Об'єми обчислень, які виникають при використанні останнього алгоритму, викликають бажання провести його модифікацію з метою їх зменшення. У дискретному випадку це зроблено у роботі [5] для класу об'єктів у яких кожне окреме рівняння з системи, яка описує еволюцію вектора фазового стану об'єкта, має свій власний вектор невідомих параметрів. Отримана процедура для цього класу об'єктів розпадається на декілька процедур подібної конструкції, а відповідний алгоритм було названо *розщепленим*. У даній роботі отримано розщеплений алгоритм для аналогічного класу систем з неперервним часом.

Розглянемо задачу оцінювання нестационарних параметрів α методом найменших квадратів зі змінним фактором забування для нелінійних динамічних об'єктів з неперервним часом математична модель яких має вигляд:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = F(x(\tau), u(\tau), \tau)\alpha + g(x(\tau), u(\tau), \tau) + \xi(\tau), \quad \tau \geq t_0, \quad (1)$$

де вектор фазового стану $x(\tau) \in R^n$, вектор керувань $u(\tau) \in R^m$, вектор збурень $\xi(\tau) \in R^n$, вектор параметрів $\alpha \in R^p$, а $F(x(\tau), u(\tau), \tau)$, $g(x(\tau), u(\tau), \tau)$ - задані матрична та векторна функції відповідно, причому будемо вважати, що кожне з рівнянь системи (1) має свій власний вектор невідомих параметрів α_j , тобто справедливо

$$F(x(\tau), u(\tau), \tau) = \begin{pmatrix} f_1^T(x(\tau), u(\tau), \tau) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f_2^T(x(\tau), u(\tau), \tau) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & f_n^T(x(\tau), u(\tau), \tau) \end{pmatrix},$$

$$\alpha^T = (\alpha_1^T, \alpha_2^T, \dots, \alpha_n^T), \quad f_j(x(\tau), u(\tau), \tau), \alpha_j \in R^{p_j}, \quad j = \overline{1, n}, \quad p = \sum_{j=1}^n p_j,$$

$(^T)$ - символ транспонування.

Це дозволяє записати j -те рівняння об'єкту (1) у наступному представленні:

$$\dot{x}_j(\tau) = f_j^T(x(\tau), u(\tau), \tau)\alpha_j + g_j(x(\tau), u(\tau), \tau) + \xi_j(\tau), \quad \tau \geq t_0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (2)$$

$$\text{де } x(\tau) = \begin{pmatrix} x_1(\tau) \\ x_2(\tau) \\ \vdots \\ x_n(\tau) \end{pmatrix}, \quad g(x(\tau), u(\tau), \tau) = \begin{pmatrix} g_1(x(\tau), u(\tau), \tau) \\ g_2(x(\tau), u(\tau), \tau) \\ \vdots \\ g_n(x(\tau), u(\tau), \tau) \end{pmatrix}, \quad \xi(\tau) = \begin{pmatrix} \xi_1(\tau) \\ \xi_2(\tau) \\ \vdots \\ \xi_n(\tau) \end{pmatrix}.$$

Припустимо, що вектор параметрів системи α може повільно дрейфувати з часом, а його оцінювання здійснюється методом найменших квадратів зі змінним фактором забування. Тоді його оцінка є розв'язком оптимізаційної задачі:

$$\tilde{\alpha}(t) = \arg \min_{\alpha} \tilde{Q}(\alpha, t), \quad (3)$$

де $\tilde{Q}(\alpha, t) = \int_{t_0}^t w(\tau, t) \|\xi(\tau)\|^2 d\tau$, $w(\tau, t)$ - вагова функція, яка визначається наступним чином:

$$w(\tau, t) = e^{\int_{t_0}^t \lambda(s) ds}, \quad t_0 \leq \tau \leq t,$$

($\lambda(s)$ - фактор забування, $0 < \lambda(s) \leq 1$, $s \geq t_0$).

Перепишемо функціонал $\tilde{Q}(\alpha, t)$ у вигляді

$$\tilde{Q}(\alpha, t) = \sum_{j=1}^n \tilde{Q}_j(\alpha_j, t), \quad \text{де } \tilde{Q}_j(\alpha_j, t) = \int_{t_0}^t w(\tau, t) \xi_j^2(\tau) d\tau.$$

Це дозволяє шукати оцінки векторів α_j для систем (2), як точки у яких досягають мінімумів функціонали $\tilde{Q}_j(\alpha_j, t)$, $j = \overline{1, n}$. Тобто наша задача оцінювання (1,3) розщеплюється на n підзадач знаходження параметрів α_j об'єктів (2) з критеріями $\tilde{Q}_j(\alpha_j, t)$ зі спільним фактором забування $0 < \lambda(s) \leq 1$, $s \geq t_0$, $j = \overline{1, n}$.

Але у подальшому розв'яжемо більш загальні підзадачі, коли у кожній з них фігурує свій власний фактор забування $0 < \lambda_j(s) \leq 1$, $s \geq t_0$. Тобто перейдемо до знаходження оцінки

$$\hat{\alpha}(t) = \arg \min_{\alpha} Q(\alpha, t), \quad (4)$$

$$\text{де } Q(\alpha, t) = \sum_{j=1}^n Q_j(\alpha_j, t), \quad Q_j(\alpha_j, t) = \int_{t_0}^t w_j(\tau, t) \xi_j^2(\tau) d\tau,$$

$$w_j(\tau, t) = e^{\int_{t_0}^t \lambda_j(s) ds}, \quad t_0 \leq \tau \leq t, \quad \lambda_j(s) - \text{фактор забування для } j - \text{ої підзадачі} \\ (0 < \lambda_j(s) \leq 1, \forall s).$$

А це, в свою чергу, дозволяє стверджувати, що оцінки параметрів α_j для об'єктів (2) можна шукати, як розв'язки оптимізаційних задач:

$$\hat{\alpha}_j(t) = \arg \min_{\alpha_j} Q_j(\alpha_j, t), \quad j = \overline{1, n}. \quad (5)$$

Нехай, починаючи з деякого моменту часу, матриці $\int_{t_0}^t w_j(\tau, t) f_j(x(\tau), u(\tau), \tau) f_j^T(x(\tau), u(\tau), \tau) d\tau$ є невиродженими, тоді легко отримати явний вигляд оцінок (5) методу найменших квадратів зі змінним

фактором забування для системи (1):

$$\hat{\alpha}_j(t) = \left[\int_{t_0}^t w_j(\tau, t) f_j(x(\tau), u(\tau), \tau) f_j^T(x(\tau), u(\tau), \tau) d\tau \right] \times \\ \times \left[\int_{t_0}^t w_j(\tau, t) f_j(x(\tau), u(\tau), \tau) (\dot{x}_j(\tau) - g_j(x(\tau), u(\tau), \tau)) d\tau \right]. \quad (6)$$

Тут і скрізь далі будемо припускати інтегрованість усіх згадуємих функцій.

Тоді для оцінок $\hat{\alpha}_j(t)$ справедлива

Теорема 1. Розщеплена процедура для оцінок (6) методу найменших квадратів зі змінним фактором забування векторів нестационарних параметрів α_j у задачі оцінювання (1,4) має наступний вигляд:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{\alpha}_j(t)}{dt} = R_j(t) f_j(x(t), u(t), t) [\dot{x}_j(t) - f_j^T(x(t), u(t), t) \hat{\alpha}_j(t) - g_j(x(t), u(t), t)] \\ \frac{dR_j(t)}{dt} = -\ln(\lambda_j(t)) R_j(t) - R_j(t) f_j(x(t), u(t), t) f_j^T(x(t), u(t), t) R_j(t), \quad j = \overline{1, n}. \end{cases}$$

Доведення. Дійсно, так як задача (1, 4) звелася до n підзадач виду (2, 5) знаходження параметрів α_j у об'єктах (2) з критеріями $Q_j(\alpha_j, t)$, то достатньо виписати потрібні алгоритми тільки для цих підзадач.

Застосування результатів роботи [3] до розв'язання підзадач виду (2, 5) і дає потрібну розщеплену процедуру для оцінок (6). Теорема доведена.

Аналогічним чином не важко перевірити, що з теореми 1 публікації [3] випливає наступна

Теорема 2. Для зважених залишкових інтегралів квадратів $q_j(t) = Q_j(\hat{\alpha}_j(t), t)$, ($j = \overline{1, n}$) у задачі (1,4) оцінювання векторів параметрів α_j системи (1) методом найменших квадратів зі змінним фактором забування справедливо:

$$\frac{dq_j(t)}{dt} = \ln(\lambda_j(t)) q_j(t) + [\dot{x}_j(t) - f_j^T(x(t), u(t), t) \hat{\alpha}_j(t) - g_j(x(t), u(t), t)]^2.$$

Зауваження. Якщо порівняти отримані у теоремах 1, 2 диференціальні рівняння з раніш запропонованими для нелінійних систем у роботі [4], легко бачити, що вони вимагають суттєво меншого об'єму обчислень.

Застосуємо отримані результати до задачі оцінювання нестационарної матриці A у лінійній системі

$$\dot{x}(\tau) = Ax(\tau) + \xi(\tau), \quad \tau \geq t_0, \quad (7)$$

$$\hat{A}(t) = \arg \min_A Q(A, t), \quad (8)$$

де вектор фазового стану $x(\tau) \in R^n$, $\xi(\tau)$ - вектор помилок моделі,

$$A = \text{column}(a_1^T, a_2^T, \dots, a_n^T), \quad \hat{A}(t) = \text{column}(\hat{a}_1^T(t), \hat{a}_2^T(t), \dots, \hat{a}_n^T(t)),$$

$$Q(A, t) = \sum_{j=1}^n Q_j(a_j, t), \quad Q_j(a_j, t) = \int_{t_0}^t w_j(\tau, t) \xi_j^2(\tau) d\tau,$$

$$w_j(\tau, t) = e^{\int_{\tau}^t \ln(\lambda_j(s)) ds}, \quad t_0 \leq \tau \leq t, \quad \lambda_j(s) - \text{фактори забування } (0 < \lambda_j(s) \leq 1, \forall s).$$

Тоді має місце наступна

Теорема 3. Оцінки $\hat{a}_j(t)$ методу найменших квадратів зі змінним фактором забування для задачі оцінювання (7, 8) задовольняють системі диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{a}_j(t)}{dt} = R_j(t)x(t)[\dot{x}_j(t) - x^T(t)\hat{a}_j(t)] \\ \frac{dR_j(t)}{dt} = -\ln(\lambda_j(t))R_j(t) - R_j(t)x(t)x^T(t)R_j(t), \quad j = \overline{1, n}. \end{cases}$$

А зважені залишкові інтеграли квадратів $q_j(t) = Q_j(\hat{a}_j(t), t)$ є розв'язками рівнянь:

$$\frac{dq_j(t)}{dt} = \ln(\lambda_j(t))q_j(t) + [\dot{x}_j(t) - x^T(t)\hat{a}_j(t)]^2, \quad j = \overline{1, n}.$$

Справдливості останньої теореми випливає з теорем 1, 2.

Література

1. Ljung L. System Identification: Theory for the User.- Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1987.
2. Hsia T.C. System identification. Least-squares methods. - Toronto: Lexington Books, 1977.
3. Слабоспицький О.С. Оцінювання нестационарних параметрів неперервних систем методом найменших квадратів зі змінним фактором забування. // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2001. - 2. - с. 338-343.
4. Слабоспицький О.С. Оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів зі змінним фактором забування нелінійних динамічних систем з неперервним часом// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2005. - 3. - с. 351-355.
5. Слабоспицький О.С. Розщеплений рекурентний алгоритм оцінювання нестационарних параметрів нелінійних дискретних систем при неklasичних припущеннях// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2006. - 3.

Надійшла до редакції 21.09.2006

УДК 519.11.176

Надія К. Тимофієва

Nadija K. Tymofijeva

Розв'язний випадок задачі розміщення

A solvable case of a location problem

Для задачі розміщення, вхідні дані в якій задано функціями натурального аргументу, що інтерполюються періодичними функціями, знайдено перестановки, для яких цільова функція набуває мінімального або максимального значень. Показано, як змінюється значення цільової функції в залежності від упорядкування перестановок у їх множині.

For a location problem, in which input data are given by the functions of natural argument that interpolated periodic functions is found a permutations for which an objective function came to of the minimum or maximal values. It is shown, as a value of objective function changes depending on ordering of permutations.

Ключові слова: комбінаторна оптимізація, цільова функція, задача розміщення, перестановка.

Key Words: combinatorial optimization, objective function, location problem, permutation.

E-mail: Nadija_Tymofijeva@uasoiro.org.ua

Вступ. В теорії комбінаторної оптимізації існують такі основні напрями: а) для розв'язання задач комбінаторної оптимізації використовуються методи та алгоритми, які ґрунтуються на частковому переборі варіантів; б) розробляються підходи розв'язання задач цього класу, що ґрунтуються на аналізі структури вхідної інформації. При цьому підході зусилля вчених направлене на знаходження розв'язних варіантів задач певного класу і розроблення алгоритмів розпізнавання структури вхідної інформації (перевпорядкованих матриць). Але викладені в літературі дослідження, що стосуються другого напрямку, проводилися і проводяться, в основному, для задачі комівояжера [1–2], не висвітлюють широкого класу задач і недостатні для виявлення загальних закономірностей, що властиві цим задачам. Наведені в літературі результати, які стосуються способів розв'язання задач комбінаторної оптимізації без перебору варіантів, що ґрунтуються на аналізі структури вхідних даних, вимагають узагальнення.

В задачах комбінаторної оптимізації клас цільової функції залежить від упорядкування комбінаторних конфігурацій (аргумента). Використовуючи цю властивість, на прикладі задачі розміщення об'єктів на заданій поверхні проводиться розділення множини перестановок на підмножини з ураху-

ванням незалежних від вхідних даних параметрів. Для заданого упорядкування одержаних підмножин з урахуванням структури вхідних даних установлюється закономірність зміни значень цільової функції. Цей підхід, що названий методом структурно-алфавітного пошуку, зменшує залежність результату розв'язку задачі від вхідних даних і дозволяє з урахуванням їх структури знаходити ті підмножини, які містять оптимальний розв'язок.

Задача розміщення задається на множинах $A = \{a_1, \dots, a_n\}$ і $B = \{b_1, \dots, b_n\}$. Назвемо ці множини базовими. Покладемо, що $n = p$. Кожну з цих множин подамо графом, вершинами якого є їх елементи, а кожному ребру поставлено у відповідність число $c_{ij} \in R$, яке називають вагою ребра; R – множина дійсних чисел. Числове значення зв'язків між елементами (ваги) назвемо вхідними даними і задамо їх матрицями, одна з яких комбінаторна. Елементи комбінаторної матриці $Q(\omega^k)$ відповідають кількості зв'язків між елементами a_s, a_t базової множини A , де ω^k – перестановка, яка є аргументом цільової функції, $k \in \{1, \dots, n!\}$ – порядковий номер ω^k у їх множині Ω . Елементи матриці C задають кількість зв'язків між елементами b_s, b_t заданої множини B . Послідовність наддіагональних елементів матриці $Q(\omega^k)$ задамо комбінаторною функцією $\beta(f(j), \omega^k)|_1^m$, а матриці C – функцією $\varphi(j)|_1^m$, де $m = \frac{n(n-1)}{2}$.

Цільова функція набуде вигляду: $F(\omega^k) = \sum_{j=1}^m \beta_j(f(j), \omega^k) \varphi(j)$.

Для визначення аргумента цільової функції за структурою вхідних даних без перебору варіантів, для якого цільова функція набуває найбільшого або найменшого значень, необхідно знати правила утворення з елементів матриць, якими задаються вхідні дані, варіанта розміщення $u(\omega^k, t)|_1^m = (u_1(\omega^k, 1), \dots, u_m(\omega^k, m))$, де $u_j(\omega^k, j) = \beta_j(f(j), \omega^k) \varphi(j)$, $j = \overline{1, m}$. Множина варіантів розміщення H складається з підмножин H_1 , $t = \overline{1, m}$, для кожного $u(\omega^k, j)|_1^m$, що входить до однієї і тієї ж H_1 , значення $\beta_1(f(1), \omega^k)$ комбінаторних функцій однакові, тобто $\beta_1(f(1), \omega^k) = \beta_1(f(1), \omega^i)$, $k \neq i$, $k, i \in \{1, \dots, n!\}$. Кількість $u(\omega^k, j)|_1^m$ у H_1 дорівнює $2(n-2)!$, а кількість H_1 дорівнює m . Відповідно на підмножини $K_1, \dots, K_m$ розбивається і множина перестановок.

Розглянемо задачу розміщення, вхідні дані в якій задано числовою і комбінаторною функціями, які інтерполюються періодичними функціями [3]. Покладемо $Z \in \{2, 4, \dots, 2j\}$, $Z_1 \in \{1, 3, \dots, 2j-1\}$.

Теорема. Якщо $\beta_j(f(j), \omega^1) = \frac{b}{2}(1 + (-1)^j) + \frac{a}{2}(1 + (-1)^{j+1})$, $\varphi(j) = \frac{b}{2}(1 + (-1)^j) + \frac{a}{2}(1 + (-1)^{j+1})$, $j = \overline{1, m}$, і $a < b$, то в задачі розміщення для найменшого значення $F(\omega^{k*})$ перестановка $\omega^{k*} \in K_s$, де $s \in Z$, якщо $m \in Z$, і $s \in Z_1$ для $m \in Z$. Для найбільшого значення $F(\omega^{i*})$ перестановка $\omega^{i*} \in K_1$. Найменшого значення функція цілі набуває для перестановки

$$\omega^{k*} = \begin{cases} (2, 1, 4, 3, 6, 5, \dots, \omega_j^{k*}, (\omega_j^{k*} - 1)_{j+1}, (\omega_j^{k*} + 2)_{j+2}, (\omega_j^{k*} + 1)_{j+3}, \dots \\ \dots, (n-2)_{n-3}, (n-3)_{n-2}, (n)_{n-1}, (n-1)_n, & \text{якщо } n \in Z, \\ (1, 3, 2, 5, 4, \dots, \omega_j^{k*}, (\omega_j^{k*} - 1)_{j+1}, (\omega_j^{k*} + 2)_{j+2}, (\omega_j^{k*} + 1)_{j+3}, \dots \\ \dots, (n-2)_{n-3}, (n-3)_{n-2}, (n)_{n-1}, (n-1)_n, & \text{якщо } n \in Z_1, \end{cases} \quad (1)$$

а найбільшого – для перестановки

$$\omega^{i*} = (1, 2, 3, \dots, n-1, n). \quad (2)$$

Найменше значення цільової функції дорівнює

$$F(\omega^{k*}) = \begin{cases} \frac{n(n-2)}{2}ab + \frac{n}{4}(a^2 + b^2), & \text{якщо } m \in Z, n \in Z, \\ \frac{n(n-2)+1}{2}ab + \frac{n-1}{4}(a^2 + b^2), & \text{якщо } m \in Z, n \in Z_1, \\ \frac{n(n-2)}{2}ab + \frac{n-2}{4}b^2 + \frac{n+2}{4}a^2, & \text{якщо } m \in Z_1, n \in Z, \\ \frac{n(n-2)+1}{2}ab + \frac{n-3}{4}b^2 + \frac{n+1}{4}a^2, & \text{якщо } m \in Z, n \in Z_1, \end{cases} \quad (3)$$

а найбільше –

$$F(\omega^{i*}) = \begin{cases} \frac{n(n-1)}{4}(a^2 + b^2), & \text{якщо } m \in Z, \\ \frac{n(n-1)-2}{4}(a^2 + b^2) + a^2, & \text{якщо } m \in Z_1. \end{cases} \quad (4)$$

Доведення. Спочатку доведемо, що $F(\omega^{k*}) < F(\omega^{i*})$. Для перестановки ω^{k*} значення цільової функції дорівнює $F(\omega^{k*}) = (a^2 + ab + ab + \dots + ab + b^2 + ab + \dots + ab + a^2 + ab + \dots + ab + b^2) = \frac{n}{4}a^2 + \frac{n}{4}b^2 + \sum_{j=1}^{\frac{n(n-2)}{2}} ab = \frac{n(n-2)}{2}ab + \frac{n}{4}(a^2 + b^2)$, а значення цільової функції для перестановки ω^{i*} дорівнює $F(\omega^{i*}) =$

$$= (a^2 + b^2 + a^2 + b^2 + \dots + a^2 + b^2) = \sum_{j=1}^n a^2 + \sum_{j=1}^n b^2 = \frac{n(n-1)}{4} (a^2 + b^2).$$

Порівняємо ці вирази $\frac{n(n-2)}{2}ab + \frac{n}{4}(a^2 + b^2) < \frac{n(n-1)}{4}(a^2 + b^2)$. Після нескладних перетворень одержимо $2a^2 - 4ab + 2b^2 < na^2 - 2nab + nb^2$ або $2 < n$, що і доводить теорему для $m \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{Z}$, якщо $n > 2$.

Розглянемо, чи існує перестановка ω^1 , для якої значення цільової функції було б менше за вираз (3) або більше за вираз (4). Із функцій $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$ і $\varphi(j)_1^m$ випливає, що варіант розміщення $u(\omega^1, j)_1^m$ може містити лише a^2 , b^2 або ab , причому елементи a^2 або b^2 в одному варіанті $u(\omega^1, j)_1^m$ можуть зустрічатися не більше $\frac{m}{2}$ раз.

Дослідимо, як змінюється вираз (4), якщо у варіанті розміщення $u(\omega^1, j)_1^m$ елемент a^2 або b^2 замінити на ab . Нескладно замітити, що заміна елемента a^2 в $u(\omega^1, j)_1^m$ на ab вимагає заміну відповідного елемента b^2 на ab . Оскільки $a^2 + b^2 > 2ab$, то заміна будь-якої складової у виразі (4) приводить до зменшення значення цільової функції. Виходячи з цього, можна сказати, що найбільшого значення цільова функція для заданих у теоремі умов набуває для перестановки (2) і дорівнює виразу (4). Так як заміна у варіанті розміщення значень b^2 на ab вимагає одночасну заміну a^2 на ab і при цьому функція зменшується, то з цього випливає, що найменше значення функції цілі може бути $\sum_{j=1}^m ab$. Такому значенню

функція цілі може дорівнювати лише тоді, коли $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$ – інверсія першої функції $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$ у множині цих функцій, тобто $\beta_j(f(j), \omega^1) = \frac{a}{2}(1 + (-1)^j) + \frac{b}{2}(1 + (-1)^{j+1})$.

Як відомо [4], в задачі розміщення не існує ні однієї перестановки ω^1 , для якої функція $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$ була б інверсією першої функції $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$. Тому значення $F(\omega^k) \neq \sum_{j=1}^m ab$.

Розглянемо комбінаторну матрицю $Q(\omega^1)$, послідовність наддіагональних елементів якої відповідає послідовності значень $\beta_j(f(j), \omega^1)$ функції $\beta(f(j), \omega^1)_1^m$. З аналізу $Q(\omega^1)$ видно, щоб у варіанті

розміщення $u(\omega^{k*}, j)|_1^m$ замінити усі значення a^2 або b^2 на ab необхідно в перестановці $\omega^1 \in \Omega$ провести попарно транспозицію усіх сусідніх елементів, тобто для $\omega^1 = (1, 2, 3, 4, \dots, n-1, n)$ одержимо $\omega^{k*} = (2, 1, 4, 3, \dots, n, n-1)$. Для перестановки ω^{k*} елементи в усіх рядках матриці $Q(\omega^{k*})$, крім тих, які знаходяться на перетині рядків і стовпців, над якими проведено операцію транспозиції, помінялися a на b і b на a . Так як у перестановці ω^1 проведено $\frac{n}{2}$ транспозицій, то кількість значень $\beta_j(f(j), \omega^{k*})$, які не змінили своїх позицій по відношенню до першої $\beta(f(j), \omega^1)|_1^m$, дорівнює $\frac{n}{2}$, з них кількість a або b дорівнює $\frac{n}{4}$. Таким чином найменше значення цільової функції набуває для перестановки (1), що і доводить теорему для $n \in Z, m \in Z$.

Для $n \in Z, m \in Z_1, n \in Z_1, m \in Z, n \in Z_1, m \in Z_1$ теорема доводиться аналогічно.

Теорему доведено.

Отже, в задачі розміщення множина перестановок розділяється на m підмножин. Якщо числова і комбінаторна функції інтерполюються синусоїдами або косинусоїдами, то для найменшого значення $F(\omega^{k*})$ перестановка $\omega^{k*} \in K_s$, де $s \in Z$, якщо $m \in Z$, і $s \in Z_1$, якщо $m \in Z_1$. Для найбільшого значення $F(\omega^{l*})$ перестановка $\omega^{l*} \in K_1$.

Список літератури

1. Дейнеко В.Г. Розв'язність в комбінаторній оптимізації. Розв'язні випадки проблеми комівояжера та евристичні алгоритми. Автореф. дис. ... докт. фіз.мат. наук: 01.05.01/Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України. – К., 1995. – 48 с.
2. Демиденко В.М. Экстремальные значения линейных функционалов на множестве циклов симметрической группы // Изв. НАН Беларуси, Сер. физ.-мат. наук. – 2001. – № 3. – С. 60-64.
3. Тимофієва Н.К. Залежність цільової функції від структури вхідних даних у задачі розміщення // Праці міжнародної конференції "Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXII)", Україна, Крим, Велика Ялта, с.м.т. Кацивелі, 19-23 вересня 2005 року. – Київ, 2005. – С. 198-199.
4. Тимофеева Н.К. Матрицы в задачах комбинаторной оптимизации // Проблемы управления и информатики. – 1996. – № 3. – С. 104-113.

Надійшла до редакції 24.05.2006

УДК 519.9

Даулетбай Утебаев*

**Исследование разностных схем
метода конечных элементов для
уравнения колебания с
диссипацией**

Для операторного уравнения второго порядка, содержащего и первую производную, получены оценки устойчивости по начальным данным и правой части для схемы метода конечных элементов. Доказана сходимость решения схемы для достаточно гладкого решения дифференциальной задачи с четвертым порядком по шагу дискретизации.

Ключові слова: метод конечных элементов, разностная схема, оценки точности.

Dauletbay Utebaev

**Research of difference schemes of
finite-element method for
dissipative oscillation equation**

For operator equation of second order that contains a first derivative too there are derived stability estimates by starting data and right-hand member for the scheme of finite-element method. There is proved convergence of the scheme solution for sufficiently smooth solution of differential problem of fourth order in discretization step.

Key words better: finite element method, the difference scheme, errors estimates.

*E-mail: ssposmrk@rol.uz

Введение В данной работе схемы метода конечных элементов по временной переменной с эрмитовыми полиномами третьей степени для абстрактной задачи Коши для уравнения второго порядка, построенные в работах [1], [2], применены для решения уравнения второго порядка с диссипацией. Доказывается устойчивость этих схем и получена оценка точности.

Рассмотрим следующую абстрактную задачу Коши для уравнения второго порядка

$$D\ddot{u} + B\dot{u} + Au = f(x), \quad u(0) = u_0, \quad \dot{u}(0) = u_1, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (1)$$

Здесь A, B, D – постоянные операторы (матрицы),

$$A^* = A > 0, \quad B^* = B \geq 0, \quad D^* = D > 0, \quad (2)$$

действующие в гильбертовом пространстве H ; $\ddot{u} = \frac{d^2 u}{dt^2}$, $\dot{u} = \frac{du}{dt}$.

Для решения задачи (1) применим метод конечных элементов по времени. Параметры $y^n, \dot{y}^n, y^{n+1}, \dot{y}^{n+1}$ приближения для решения $u(t)$ задачи (1) в виде кубического эрмитового сплайна

$$y(t) = y^n \varphi_{00}^n(t) + \dot{y}^n \varphi_{10}^n(t) + y^{n+1} \varphi_{01}^n(t) + \dot{y}^{n+1} \varphi_{11}^n(t),$$

где $\varphi_{ij}(t)$ – кубические эрмитовы полиномы [1], [2], удовлетворяют трехпараметрической разностной схеме:

$$\begin{cases} D_\gamma \dot{y}_i + B y_i + A \frac{\hat{y} + y}{2} = \varphi_1, \\ D_\alpha y_i - \frac{\tau^2}{12} B \dot{y}_i - D_\beta \frac{\hat{y} + \dot{y}}{2} = \varphi_2, \\ y^0 = u_0, \quad \dot{y}^0 = u_1. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь

$$y = y'' = y(t_n), \quad \hat{y} = y^{n+1}, \quad D_\gamma = D - \gamma \tau^2 A, \quad D_\alpha = D - \alpha \tau^2 A, \quad D_\beta = D - \beta \tau^2 A, \\ \varphi_1 = \int_0^1 f(t_n + \tau \xi) d\xi, \quad \varphi_2 = \int_0^1 f(t_n + \tau \xi) \vartheta_2(\xi) d\xi, \quad \vartheta_2(\xi) = s_1 \tau \left(\xi - \frac{1}{2} \right) + \\ + s_2 \tau \left(\xi - \frac{1}{2} \right) \xi (\xi - 1), \quad s_1 = 180\beta - 40\alpha, \quad s_2 = 1680\beta - 280\alpha,$$

α, β, γ – параметры, которые подчиняются условию четвертого порядка аппроксимации

$$\alpha + \gamma = \beta + \frac{1}{6}. \quad (4)$$

Исследуем устойчивость схемы (3) по начальным данным и по правой части. Сведем двухслойную векторную разностную схему (3) к скалярной трехслойной разностной схеме. Предположим, что

$$AD = DA, \quad AB = BA, \quad DB = BD \quad (5)$$

$$D_\omega = D - \omega \tau^2 A \geq \delta D, \quad \delta > 0, \quad \omega = \alpha, \beta, \gamma. \quad (6)$$

Из первого уравнения (3) находим

$$\dot{y}_i = D_\gamma^{-1} \left(\frac{\varphi_1 + \varphi_1}{2} - B y_i - A \frac{\hat{y} + 2y + \dot{y}}{4} \right). \quad (7)$$

С другой стороны из того же уравнения можно получить

$$\dot{y}_{ii} = D_\gamma^{-1} \left(\varphi_{1,i} - B y_{ii} - A y_i \right). \quad (8)$$

Подставляя (7), (8) во второе уравнение (3) и учитывая, что

$$D_\beta D_\gamma = D_\gamma D_\beta, \quad D_\gamma D_\alpha = D_\alpha D_\gamma, \quad D_\beta B = B D_\beta, \quad \frac{\hat{y} + 2y + \dot{y}}{4} = y + \frac{\tau^2}{4} y_{ii},$$

получим искомую трехслойную схему относительно только y :

$$\tilde{D} y_{ii} + \tilde{B} y_i + \tilde{A} y = \tilde{\varphi}_1, \quad (9)$$

где

$$\bar{D} = D_\alpha + \frac{\tau^2}{12} BD_\gamma^{-1} B + \frac{\tau^2}{4} D_\beta D_\gamma^{-1} A, \quad \bar{B} = D_\beta D_\gamma^{-1} B + \frac{\tau^2}{12} BD_\gamma^{-1} A,$$

$$\bar{A} = D_\beta D_\gamma^{-1} A, \quad \bar{\varphi}_1 = \varphi_{2,t} + D_\beta D_\gamma^{-1} \frac{\varphi_1 + \bar{\varphi}_1}{2} + \frac{\tau^2}{12} BD_\gamma^{-1} \varphi_{1,t}.$$

Исключая теперь из (3) y , $\hat{y}$ аналогичным способом, получим трехслойную схему для $\dot{y}$:

$$\bar{D}\dot{y}_t + \bar{B}\dot{y}_t + \bar{A}\dot{y} = \bar{\varphi}_2, \quad (10)$$

где

$$\bar{D} = D_\gamma + \frac{\tau^2}{12} BD_\alpha^{-1} B + \frac{\tau^2}{4} AD_\alpha^{-1} D_\beta, \quad \bar{B} = BD_\alpha^{-1} D_\beta + \frac{\tau^2}{12} AD_\alpha^{-1} B,$$

$$\bar{A} = AD_\alpha^{-1} D_\beta, \quad \bar{\varphi}_2 = \varphi_{1,t} - BD_\alpha^{-1} \varphi_{2,t} - AD_\alpha^{-1} \frac{\varphi_2 + \bar{\varphi}_2}{2}.$$

Определим начальные условия для схемы (9), (10). Ясно, что $y^0 = u_0$, $\dot{y}^0 = u_1$. Из второго уравнения схемы (3) имеем

$$D_\alpha y_t = \varphi_2 + \frac{1}{2} \left(D_\beta + \frac{\tau}{6} B \right) \hat{y} + \frac{1}{2} \left(D_\beta - \frac{\tau}{6} B \right) \dot{y}. \quad (11)$$

Первое уравнение схемы (3) дает

$$\hat{y} = \dot{y} + \tau D_\gamma^{-1} \left(\varphi_1 - B y_t - A \frac{\dot{y} + y}{2} \right). \quad (12)$$

Подставляя (12) в (11), получим

$$\bar{D} \dot{y}_t + \frac{\tau}{2} \bar{B} \dot{y}_t + \frac{\tau}{2} \bar{A} \dot{y} = \bar{\varphi}_1^0,$$

где

$$\bar{\varphi}_1^0 = \varphi_2 + \frac{\tau}{2} \left(D_\beta + \frac{\tau}{6} B \right) D_\gamma^{-1} \varphi_1 + D_\beta u_1 - \frac{\tau^2}{12} BD_\gamma^{-1} A u_0.$$

Аналогично для $\dot{y}$ имеем

$$\bar{D} \dot{y}_t + \frac{\tau}{2} \bar{B} \dot{y}_t + \frac{\tau}{2} \bar{A} \dot{y} = \bar{\varphi}_2^0,$$

где

$$\bar{\varphi}_2^0 = \varphi_1 - \left(B + \frac{\tau}{2} A \right) D_\alpha^{-1} \varphi_2 - BD_\alpha^{-1} D_\beta u_1 - A u_0.$$

Исследуем устойчивость трехслойной схемы (9). В предположениях (2), (5), (6) имеем

$$\bar{D} - \frac{\tau^2}{4} \bar{A} = D_\alpha + \frac{\tau^2}{12} BD_\gamma^{-1} B > 0, \quad \bar{A} > 0.$$

Выполнение этих неравенств гарантируют устойчивость схемы (9) в полунорме:

$$\|Y^{n+1}\|_{(1)}^2 = \frac{1}{4}\|y^{n+1} + y^n\|_{\tilde{A}}^2 + \left(\left(\tilde{D} - \frac{\tau^2}{4}\tilde{A} \right) y_t^n, y_t^n \right).$$

Чтобы получить оценку в обычной норме, предположим дополнительно к (6) выполнения условия [3]:

$$D \geq \frac{1+\varepsilon}{4}\tau^2 A, \quad \varepsilon > 0. \quad (13)$$

Тогда для полунормы имеем оценку снизу:

$$\|Y^{n+1}\|_{(1)}^2 \geq \delta \frac{\varepsilon}{1+\varepsilon} \|y^{n+1}\|_A^2.$$

Заметим, что условие (17) выполнено при справедливости оценки $D - \frac{\tau^2}{4}A \geq \delta D$, $0 < \delta < 1$. При этом $\varepsilon = \frac{\delta}{1-\delta}$ и $\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon} = \delta$.

При тех же условиях решение схемы (10) устойчиво в норме $\|\dot{y}^{n+1}\|_D$ (см. [4]).

На основании [3], [4] отсюда получаем утверждение:

Теорема 1. Пусть выполнены условия (2), (5), и

$$D_\omega = D - \omega\tau^2 A \geq \delta D, \quad 0 < \delta < 1, \quad \omega = \max[\alpha, \beta, \gamma, \frac{1}{4}]. \quad (14)$$

Тогда для решения схемы (3) верны оценки:

$$\begin{aligned} \|y^{n+1}\|_A &\leq M\delta \left(\|y(0)\|_A + \|y_t(0)\|_{\tilde{D}} + \sum_{l=1}^T \tau \|\tilde{\varphi}_1(t')\|_{\tilde{D}^{-1}} \right), \\ \|\dot{y}^{n+1}\|_D &\leq M\delta \left(\|y(0)\|_{\tilde{D}} + \|\tilde{D}\dot{y}_t(0)\|_{\tilde{A}^{-1}} + \left(\sum_{l=1}^T \tau \left\| \sum_{s=\tau}^l \tau \tilde{\varphi}_2(s) \right\|^2 \right)^{1/2} \right). \end{aligned}$$

Для исследования точности схемы (9) введем ошибку схемы $z^n = y^n - u^n$ которая удовлетворяет соотношениям

$$\tilde{D}z_{tt} + \tilde{B}z_t + \tilde{A}z = \tilde{\psi}_1,$$

$$z^0 = 0, \quad \left(\tilde{D} + \frac{\tau}{2}\tilde{B} \right) z_t^0 = \tilde{\psi}_1^0,$$

где

$$\tilde{\psi}_1 = \tilde{\varphi}_1 - \tilde{D}u_{tt} - \tilde{B}u_t - \tilde{A}u, \quad t = t_n, \quad \forall n \geq 1,$$

$$\tilde{\psi}_1^0 = \tilde{\varphi}_1 - \left(\tilde{D} + \frac{\tau}{2}\tilde{B} \right) u_t^0 - \frac{\tau}{2}\tilde{A}u^0.$$

Аналогичную задачу получим и для $\dot{z}^n = \dot{y}^n - \dot{u}^n$:

$$\bar{D}\dot{z}_{it} + \bar{B}\dot{z}_i + \bar{A}\dot{z} = \tilde{\psi}_2,$$

$$\dot{z}^0 = 0, \quad \left(\bar{D} + \frac{\tau}{2} \bar{B} \right) \dot{z}_i^0 = \tilde{\psi}_2^0,$$

где

$$\tilde{\psi}_2 = \tilde{\varphi}_2 - \bar{D}\dot{u}_{it} - \bar{B}\dot{u}_i - \bar{A}\dot{u}, \quad t = t_n, \quad \forall n \geq 1,$$

$$\tilde{\psi}_2^0 = \tilde{\varphi}_2 - \left(\bar{D} + \frac{\tau}{2} \bar{B} \right) \dot{u}_i^0 - \frac{\tau}{2} \bar{A} \dot{u}^0.$$

Представим погрешности аппроксимации $\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2$ в виде

$$\tilde{\psi}_1 = D_\gamma^{-1} \bar{\psi}_1, \quad \tilde{\psi}_2 = D_\alpha^{-1} \bar{\psi}_2,$$

где например,

$$\bar{\psi}_1 = \bar{\varphi}_1 - (D_\gamma D_\alpha + \frac{\tau^2}{12} B^2) u_{it} - (D_\beta B + \frac{\tau^2}{12} BA) u_i - D_\beta A \frac{\hat{u} + 2u + \check{u}}{4},$$

$$\bar{\varphi}_1 = D_\gamma \varphi_{2,i} + D_\beta \frac{\varphi_1 + \check{\varphi}_1}{2} + \frac{\tau^2}{12} B \varphi_{1,i}.$$

Разлагая $u(t_n \pm \tau), \dot{u}(t_n \pm \tau)$ и подинтегральные функции в выражениях для φ_1, φ_2 в ряд Тейлора (при достаточной гладкости этих функций) после несложных преобразований получим

$$\bar{\psi}_1 = \tau^2 A \left[\left(\alpha + \gamma - \frac{1}{4} \right) D \ddot{u} + \left(\beta - \frac{1}{12} \right) B \dot{u} + \left(\beta - \frac{1}{12} \right) A u - \left(\beta - \frac{1}{12} \right) f \right] +$$

$$+ \frac{\tau^2}{12} D \left[-D \overset{(4)}{u} - B \overset{(3)}{u} - A \ddot{u} + \left(s_1 - \frac{s_2}{10} + 2 \right) \ddot{f} \right] + O(\tau^4),$$

$$\bar{\psi}_2 = \tau^2 A \left[\left(\alpha + \gamma - \frac{1}{6} \right) D \ddot{u} + \beta B \ddot{u} + \beta A \dot{u} - \left(\alpha + \frac{1}{12} \left(s_1 - \frac{s_2}{10} \right) \right) \ddot{f} \right] +$$

$$+ \frac{\tau^2}{12} B \left[-D \overset{(4)}{u} - B \overset{(3)}{u} - A \ddot{u} + \left(-s_1 + \frac{s_2}{10} \right) \ddot{f} \right] + O(\tau^4).$$

Отсюда, если учесть выбор s_1, s_2 и условие (4), убеждаемся, что $\bar{\psi}_1 = O(\tau^4), \bar{\psi}_2 = O(\tau^4)$. При этом четвертый порядок аппроксимации обеспечивается, если $u(t) \in C^6[0, T], f(t) \in C^4[0, T]$. В силу (14) и $\tilde{\psi}_1 = D_\gamma^{-1} \bar{\psi}_1 = O(\tau^4), \tilde{\psi}_2 = D_\alpha^{-1} \bar{\psi}_2 = O(\tau^4)$.

Из этих оценок и утверждения теоремы 1 имеем следующее утверждение:

Теорема 2. Пусть выполнены условия (2), (4), (5), (14). Тогда решение схем (9) и (10) сходится к достаточно гладкому решению задачи (1) с четвертым порядком так, что справедливы оценки

$$\|y^n - u(t_n)\|_A \leq M\tau^4, \quad \|\dot{y}^n - \dot{u}(t_n)\|_D \leq M\tau^4.$$

Заклучение Таким образом в работе исследована устойчивость и точность схем метода конечных элементов по временной и пространственной переменным для уравнения второго порядка с диссипацией. Благодаря использованию кубического эрмитового элемента по времени получены оценки четвертого порядка точности по шагу временной дискретизации.

Литература

1. Москальков М.Н. Схема метода конечных элементов повышенной точности для решения нестационарных уравнений второго порядка // Диф. уравнения. т. 16, №7, 1980, с. 1280-1292.
2. Moskalkov M.N., Utebaev D. Investigation of difference schemes of finite element method for second-order unsteady-state equations // J. Comput. Appl. Math., No. 92, 2005, pp. 70-76.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977.
4. Москальков М.Н. О точности разностных схем аппроксимирующих волновое уравнение с кусочно-гладкими решениями // Журнал выч. мат. и матем. физики. т.14., №2, 1974, с. 390-401.

Надійшла до редакції 20.02.2006

УДК 519.688

Денис В. Холод*

Побудова сервісно-орієнтованої системи електронного навчання

В статті описано технології побудови системи University Learning Directory, яка дозволить поєднати існуючі навчальні та адміністративні програмні модулі в єдину систему. Описано схему побудови компонентів системи та її взаємодію з системою Microsoft Class Server.

Ключові слова: Microsoft Class Server, Web-сервіси, .Net framework, електронне навчання

Denys V. Kholod

Development of Service oriented E-learning system

The article describes the technologies of development of University Learning Directory E-learning system, which gives the abilities to integrate existing E-learning and administrative components into one system

The design of components and methods of integration with Microsoft Class Server is also given.

Key Words: Microsoft Class Server, Web services, .Net framework, E-learning

*E-mail: kholod@unicyb.kiev.ua

Вступ

На основі досвіду розробки і експлуатації системи „Академ Офіс” описаної в [1], запропоновано технології побудови системи яка дозволить поєднати існуючі навчальні та адміністративні програмні модулі в єдину систему. В [2] описано схему побудови ядра системи. Одним з основних висновків зроблених в [2] є рекомендація інтегрувати та використовувати вже існуючі систем електронного навчання, в якості підсистем для розроблюваної системи. Виходячи з даного висновку було вирішено проаналізувати систему Microsoft Class Server, [4]сформулювати ряд вимог, що не підтримуються її базовою функціональністю, а також запропонувати методи розробки необхідних програмних розширень, додаткових модулів тестування та модулів для інтеграції в розроблювану систему. Досвід отриманий в процесі впровадження та випробовування системи та відповідні висновки викладені в [3].

Далі сформулюємо загальні вимоги яким має відповідати система:

- централізоване керування навчальним процесом
- багатофункціональні базові можливості системи
- відкриті інтерфейси для взаємодії з системою
- можливість використання системи Microsoft Class server, та існуючої інфраструктури серверної системи Microsoft Windows
- можливість реалізації додаткових модулів для розширення функціональності системи
- технологічна та платформна незалежність розроблюваних модулів

На рис.1. зображено схему компонентів системи University Learning Directory (ULD).

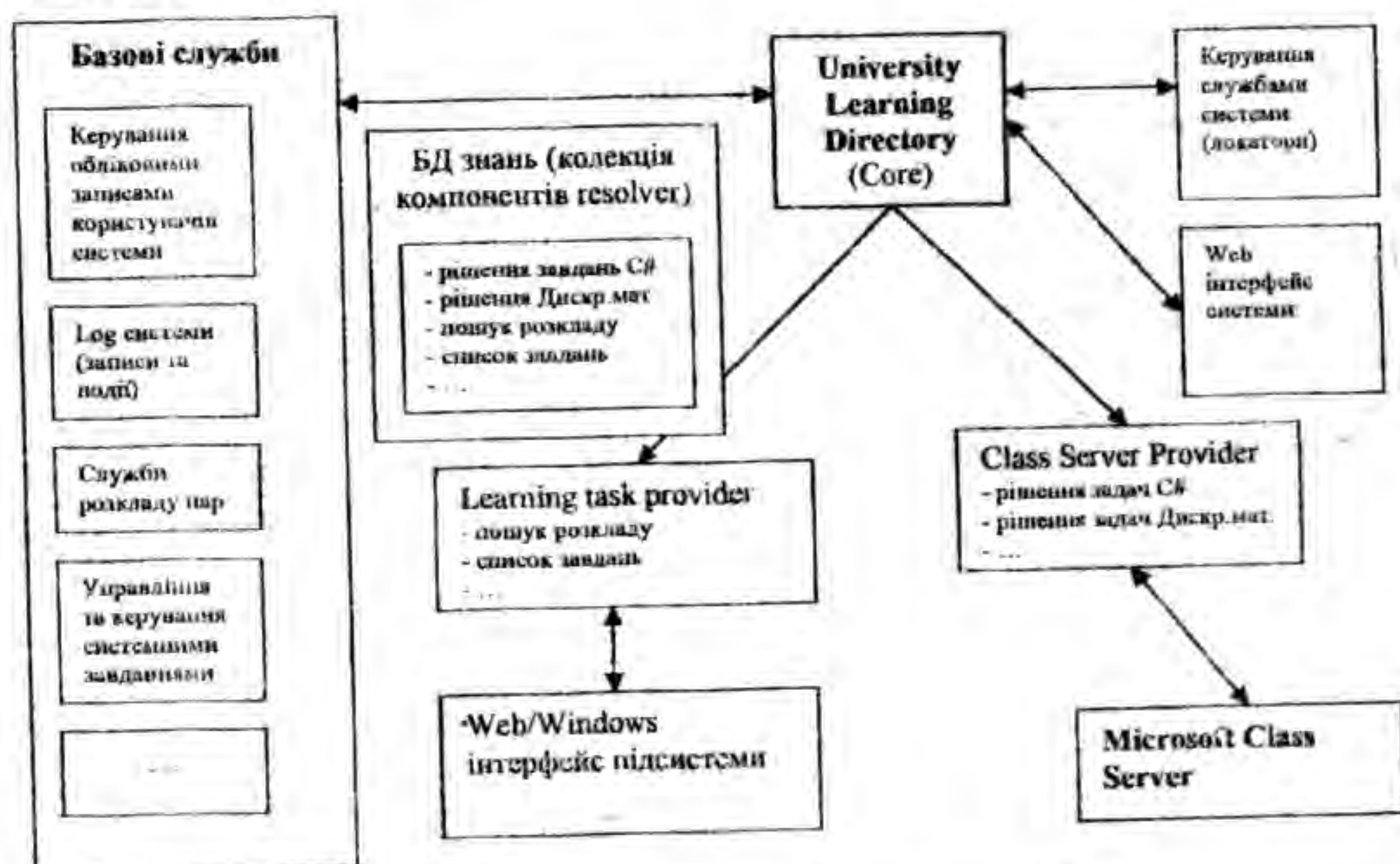


Рис.1.Схема компонентів системи ULD.

Для реалізації системи найбільш оптимальною є платформа .Net, зокрема її компонент .Net Framework та технологія розробки Web-клієнтів та Web-сервісів – ASP.Net.

Опис компонентів системи.

Ядром (Core) системи є компонент, що контролює виконання всіх системних завдань, обробляє події, керує запуском чи зупинкою служб системи та веде облік роботи та реалізовує механізми безпеки системи.

Під керуванням ядра виконуються базові служби системи такі як аутентифікація та авторизація користувачів системи, робота з розкладом пар та інші. Функції базових служб доступні розробникам які планують інтегрувати власну систему до ULD. Взаємодія з сервісами відбувається на базі відкритих протоколів Web-сервісів, що не накладає обмежень на платформу реалізації системи, що інтегрується.

Локатори системи слугують для управління службами системи такими як додавання, вилучення, пошук ресурсів. Детально локатори та механізми реалізації описані в [2].

Одне з основних призначень ядра вирішувати системні та прикладні задачі. При вирішенні задач ядро опирається на базу даних знань. БД знань підтримує інтеграцію нових модулів знань, тобто за допомогою

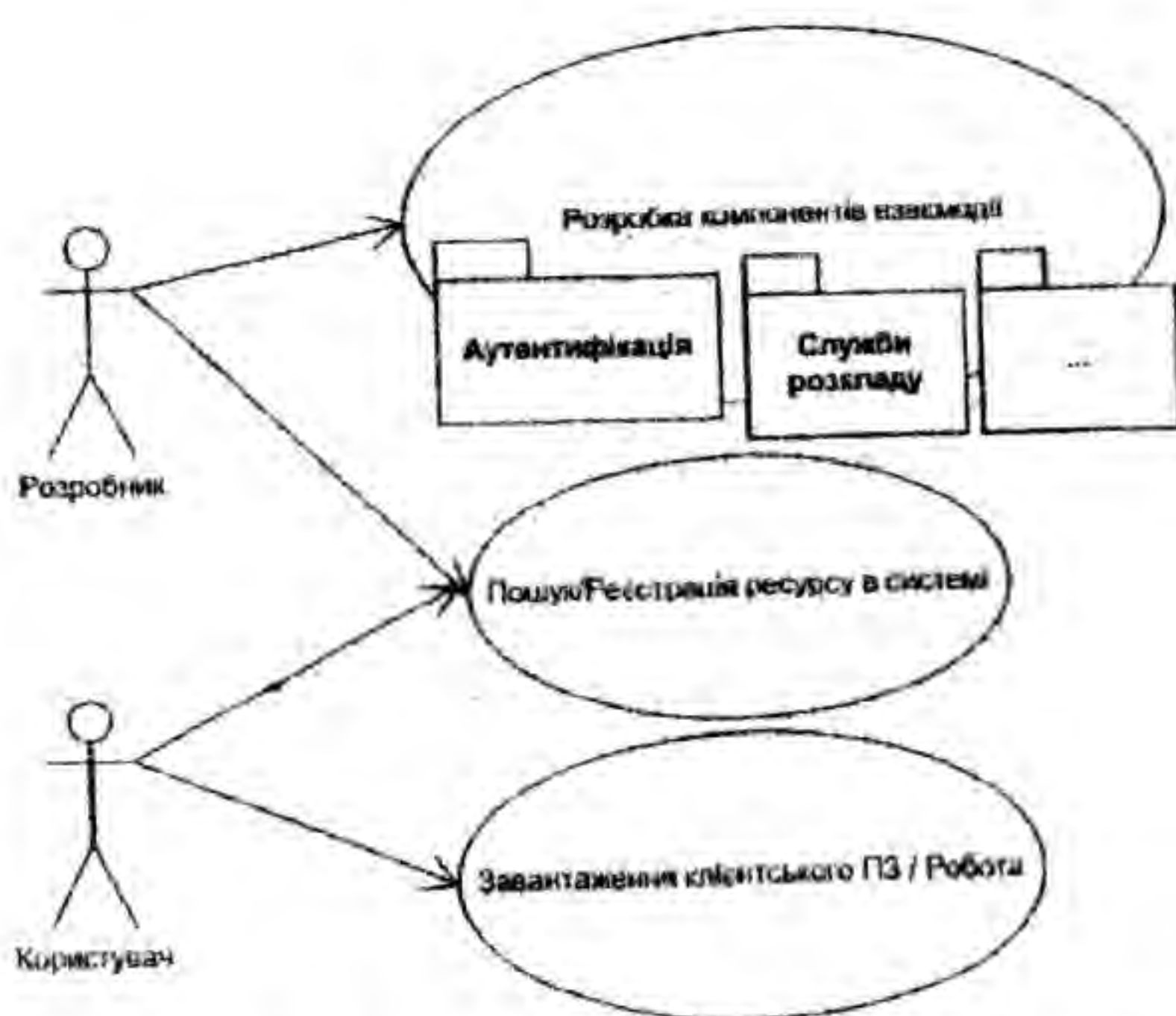


Рис. 3. Етапи інтеграції розроблених рішень в систему.

Для тісної інтеграції власного рішення з системою ULD необхідно виконати розробку компонентів, що слугуватимуть посередниками між власною системою та ULD. Є лише одне обмеження на платформу розробки інтегрованого рішення - підтримка технологій Web-сервісів [5]. Далі системна інформація (про викладача, про предмет, розклад пар, та інше) використовується всіма підсистемами через власні проксі об'єкти.

Для розробки компонентів використовується ULD SDK (інструментарій розробника), з описом інтерфейсів системи прикладами та утилітами.

Висновки.

Розроблена архітектура системи базується на відкритій технології Web-сервісів. З точки зору проектування така система є не просто об'єктно орієнтованою, а сервісно-орієнтованою. Ядро системи функціонує як Web-сервіс, тому відкриває можливості тісної інтеграції з багатьма існуючими системами.

Як приклад розглянуто використання викладеного підходу для налагодження роботи сумісно з системою Microsoft Class Server, та показано механізм розширення функціональних можливостей Class Server при взаємодії з системою ULD.

Література.

1. Костянтин Даниленко, Денис Холод "Розробка програмних засобів автоматизації дистанційної освіти" - Вісник Київського Університету 2002,4. Серія: фізико математичні-науки.
2. Денис В. Холод "Технології та методи розробки систем електронного навчання" - Вісник Київського Університету 2005,4. Серія: фізико математичні-науки.
3. Денис В. Холод "Методи розробки додаткових модулів тестування для системи Microsoft Class Server" - Вісник Київського Університету 2006,3. Серія: фізико математичні-науки.
4. <http://www.microsoft.com/Education/ClassServer.mspx>
5. <http://www.w3.org/TR/wsa-reqs/>

Надійшла до редакції 16.11.2006

УДК 517.929

Денис Я. Хусайнов*, Анатолій Ф.
Іванов**, Ірина В. Коварж*

**Розв'язок рівняння коливання
із післядією.**

Розв'язок одновимірного рівняння коливання із запізненням було отримано у вигляді ряду із застосуванням спеціальних функцій. У роботі приведено умови збіжності ряду, що доводить існування та єдиність розв'язку.

Ключові слова: одновимірне хвильове рівняння, запізнення, початкові умови, крайові умови, ряди, збіжність

*E-mail: dkh@unicyb.kiev.ua

**E-mail: afil@psu.edu

У роботі розглядається розв'язок крайової задачі для рівняння коливання струни із часовим аргументом, що запізнюється. В [1-3] було отримано розв'язок такої задачі, який має вигляд ряду. Для цього використано спеціальні функції, названі запізнюючим косинусом і запізнюючим синусом. Дана робота є продовженням цих робіт. Представлено умови існування та єдиності такого розв'язку.

Розглядається перша крайова задача для одновимірного рівняння коливання струни із запізнюючим аргументом

$$u_{tt}(x,t) = a^2 u_{xx}(x,t-\tau) + f(x,t), \quad 0 \leq x \leq l, \quad t \geq 0, \quad (1)$$

початкова умова має вигляд

$$u(x,t) = \varphi(x,t), \quad 0 \leq x \leq l, \quad -\tau \leq t \leq 0, \quad (2)$$

а крайові

$$u(0,t) = \mu_1(t), \quad u(l,t) = \mu_2(t), \quad t \geq -\tau$$

і виконуються умови «узгодження»

$$\varphi(0,t) = \mu_1(t), \quad \varphi(l,t) = \mu_2(t), \quad -\tau \leq t \leq 0. \quad (3)$$

Denys Ya. Khusainov*, Anatoli F.
Ivanov**, Irina V. Kovarzh*

**The solution of wave equation
with delay.**

The solution of a scalar wave equation with delay is derived in the form of a series by using the special function. Conditions for the convergence of the formal series are established.

Key Words: one-dimensional wave equation, time delay, initial conditions, boundary condition, series, convergence

* Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, факультет кібернетики. ** Університет штату Пенсільванія (США), факультет математики, дослідження частково підтримані грантом NSF INT-0203702

Загальний розв'язок крайової задачі (1) - (3) має вигляд [1-3]

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \Phi_n(-\tau) \cos_n \frac{\pi n}{l} at + \frac{l}{\pi n a} \dot{\Phi}_n(-\tau) \sin_n \frac{\pi n}{l} at + \right. \\ \left. + \frac{l}{\pi n a} \int_0^{\tau} \sin_n \frac{\pi n}{l} a(t-\tau-\xi) \ddot{\Phi}_n(\xi) d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{l}{\pi n a} \int_0^{\tau} \sin_n \frac{\pi n}{l} a(t-\tau-\xi) F_n(\xi) d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \mu_1(t) + \frac{x}{l} [\mu_2(t) - \mu_1(t)], \quad (5)$$

де

$$\Phi_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^{\tau} \varphi(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds + \frac{2}{\pi n} [(-1)^n \mu_2(t) - \mu_1(t)], \\ F_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^{\tau} f(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds + \frac{2}{\pi n} \frac{d^2}{dt^2} [(-1)^n \mu_2(t) - \mu_1(t)]. \quad (6)$$

Сформулюємо наступну теорему про розв'язок першої крайової задачі (1) - (3).

Теорема 1. Нехай функції $f(x, t)$, $\varphi(x, t)$, $\mu_1(t)$ і $\mu_2(t)$ такі, що для коефіцієнтів $\Phi_n(t)$, $F_n(t)$ і відповідних похідних $\dot{\Phi}_n(t)$ на проміжку $0 \leq t \leq t^*$, $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$ виконуються умови "швидкого зменшення" по індексу n , тобто виконується

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{0 \leq t \leq t^*} |F_n(t)| n^{2k+1} = 0, \quad -\tau \leq t \leq t^* - \tau, \quad (7)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{0 \leq s \leq \tau} |\dot{\Phi}_n(s) n^{2(k+1)}| = 0, \quad -\tau \leq s \leq 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} |\Phi_n(-\tau) n^{2(k+1)}| = 0.$$

Тоді розв'язок першої крайової задачі (1) - (3) має вигляд (5), (6). При цьому можливе дворазове почленне диференціювання ряду по x та t , отримані ряди сходяться абсолютно та рівномірно при $0 \leq x \leq l$, $0 \leq t < t^*$.

Доведення. Запишемо вираз (5) у вигляді суми чотирьох рядів

$$u(x, t) = S_{11}(x, t) + S_{12}(x, t) + S_2(x, t) + S_3(x, t) + \mu_1(t) + \frac{x}{l} [\mu_2(t) - \mu_1(t)],$$

$$\text{де } S_{11}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{1n}(t) \sin \frac{\pi n}{l} x, \quad S_{12}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n}(t) \sin \frac{\pi n}{l} x, \quad S_2(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n(t) \sin \frac{\pi n}{l} x,$$

$$S_3(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) \sin \frac{\pi n}{l} x, \quad A_{1n}(t) = \Phi_n(-\tau) \cos_n \frac{\pi n}{l} at, \quad A_{2n}(t) = \frac{l}{\pi n a} \dot{\Phi}_n(-\tau) \sin_n \frac{\pi n}{l} at,$$

$$B_n(t) = \frac{l}{\pi n a} \int_0^{\tau} \sin_n \frac{\pi n}{l} a(t-\tau-\xi) \ddot{\Phi}_n(\xi) d\xi, \quad C_n(t) = \frac{l}{\pi n a} \int_0^{\tau} \sin_n \frac{\pi n}{l} a(t-\tau-\xi) F_n(\xi) d\xi$$

і розглянемо умови збіжності та диференційованості кожного з них.

1. Для коефіцієнтів $A_{1n}(t) = \Phi_n(-\tau) \cos_n \frac{\pi n}{l} at$, $n=1, 2, \dots$ для довільного фіксованого моменту часу t^* : $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$ маємо наступне

$$|A_{1n}(t^*)| \leq \left| \cos_n \frac{\pi n}{l} at^* \right| |\Phi_n(-\tau)| \leq \\ \leq \left| 1 - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \frac{t^{*2}}{2!} + \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^4 \frac{(t^* - \tau)^4}{4!} + \dots + (-1)^k \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^{2k} \frac{[t^* - (k-1)\tau]^{2k}}{(2k)!} \right| |\Phi_n(-\tau)|.$$

Перший співмножник при фіксованому t^* по змінній n являє собою многочлен ступеня $2k$ і, якщо коефіцієнти $\Phi_n(-\tau)$ такі, що виконується

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\Phi_n(-\tau)| n^{2k} = 0, \quad k = \left\lfloor \frac{t^*}{\tau} \right\rfloor + 1,$$

то ряд $S_{11}(x, t)$ сходиться абсолютно й рівномірно.

2. Для коефіцієнтів другого ряду

$$A_{2n}(t) = \frac{l}{\pi n a} \dot{\Phi}_n(-\tau) \sin_{\tau} \frac{\pi n}{l} a t, \quad n = 1, 2, \dots$$

для довільного фіксованого моменту часу t^* : $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$ маємо

$$\begin{aligned} |A_{2n}(t^*)| &\leq \left| \frac{l}{\pi n a} \sin_{\tau} \frac{\pi n}{l} a t^* \right| |\dot{\Phi}_n(-\tau)| \leq \\ &\leq \left| (t^* + \tau) - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \frac{t^{*3}}{3!} + \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^4 \frac{(t^* - \tau)^5}{5!} + \dots + (-1)^k \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^{2k} \frac{[t^* - (k-1)\tau]^{2k+1}}{(2k+1)!} \right| |\dot{\Phi}_n(-\tau)|. \end{aligned}$$

Аналогічно попередньому: якщо коефіцієнти $\Phi_n(-\tau)$ такі, що виконується $\lim_{n \rightarrow \infty} |\dot{\Phi}_n(-\tau)| n^{2k} = 0$, $k = \left\lfloor \frac{t^*}{\tau} \right\rfloor + 1$, то ряд $S_{12}(x, t)$ сходиться абсолютно й рівномірно.

3. Для коефіцієнтів третього ряду, взявши інтеграл по частинам, отримаємо

$$B_n(t) = B_{n1}(t) - B_{n2}(t) + B_{n3}(t),$$

де
$$B_{n1}(t) = \frac{l}{\pi n a} \dot{\Phi}_n(0) \sin_{\tau} \frac{\pi n}{l} a(t - \tau), \quad B_{n2}(t) = \frac{l}{\pi n a} \dot{\Phi}_n(-\tau) \sin_{\tau} \frac{\pi n}{l} a t,$$

$$B_{n3}(t) = \int_{-\tau}^0 \cos_{\tau} \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \dot{\Phi}_n(\xi) d\xi.$$

Якщо коефіцієнти $\Phi_n(0)$ й $\Phi_n(-\tau)$ такі, що виконується $\lim_{n \rightarrow \infty} |\dot{\Phi}_n(0)| n^{2k} = 0$ і $\lim_{n \rightarrow \infty} |\dot{\Phi}_n(-\tau)| n^{2k} = 0$, $k = \left\lfloor \frac{t^*}{\tau} \right\rfloor + 1$, то ряди $\sum_{n=1}^{\infty} B_{n1}(t) \sin \frac{\pi n}{l} x$ й $\sum_{n=1}^{\infty} B_{n2}(t) \sin \frac{\pi n}{l} x$ будуть сходиться абсолютно й рівномірно.

Для третього члену $-B_{n3}(t)$, зробивши заміну $t - \tau - \xi = s$, одержимо

$$B_{n3}(t) = \int_{t-\tau}^t \cos_{\tau} \frac{\pi n}{l} a s \dot{\Phi}_n(t - \tau - s) ds, \quad n = 1, 2, \dots$$

Нехай $t = t^*$: $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$. Розіб'ємо інтеграл на суму двох інтегралів і запишемо

$$\begin{aligned} B_{n3}(t^*) &= \int_{t^*-\tau}^{(k-1)\tau} \left[1 - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \frac{s^2}{2!} + \dots + (-1)^{(k-1)} \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^{2(k-1)} \frac{[s - (k-2)\tau]^{2(k-1)}}{[2(k-1)]!} \right] \dot{\Phi}_n(t^* - \tau - s) ds + \\ &+ \int_{(k-1)\tau}^{t^*} \left[1 - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \frac{s^2}{2!} + \dots + (-1)^k \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^{2k} \frac{[s - (k-2)\tau]^{2k}}{[2k]!} \right] \dot{\Phi}_n(t^* - \tau - s) ds. \end{aligned}$$

Використовуючи теорему про середнє, знайдемо величини s_1, s_2 , при яких

$$|B_{n1}(t^*)| \leq \tau \left[1 - n^2 \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \frac{s_1^2}{2!} + \dots + n^{2(k-1)} \left(\frac{\pi}{l} a \right)^{2(k-1)} \frac{[s_1 - (k-2)\tau]^{2(k-1)}}{[2(k-1)!]} \right] |\dot{\Phi}_n(t^* - \tau - s_1)| + \\ + \left[1 + n^2 \left(\frac{\pi}{l} a \right)^2 \frac{s_2^2}{2!} + \dots + n^{2k} \left(\frac{\pi}{l} a \right)^{2k} \frac{[s_2 - (k-1)\tau]^{2k}}{(2k)!} \right] |\dot{\Phi}_n(t^* - \tau - s_2)| \tau.$$

Якщо $\dot{\Phi}_n(t)$ такі, що виконується $\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{0 \leq s \leq t^*} |\dot{\Phi}_n(s)| n^{2k} = 0$, $-\tau \leq s \leq 0$,

$k = \left\lceil \frac{t^*}{\tau} \right\rceil + 1$, то ряд $\sum_{n=1}^{\infty} B_{n1}(t) \sin \frac{\pi n}{l} x$ сходиться абсолютно й рівномірно.

4. Для коефіцієнтів четвертого ряду, для фіксованого моменту часу $t = t^*$: $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$ зробимо заміну $t^* - \tau - \xi = s$ і представимо інтеграл сумою інтегралів і розглянемо кожен інтеграл окремо

$$\left(\frac{\pi n}{l} a \right) C_n(t^*) = \int_{-\tau}^0 \left(\frac{\pi n}{l} a \right) (s + \tau) F_n(t^* - \tau - s) ds + \\ + \int_0^{\tau} \left[\left(\frac{\pi n}{l} a \right) \frac{(s + \tau)}{1!} - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^3 \frac{s^3}{3!} \right] F_n(t^* - \tau - s) ds + \\ + \int_{(k-2)\tau}^{t^*} \left[\left(\frac{\pi n}{l} a \right) \frac{(s + \tau)}{1!} - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^3 \frac{s^3}{3!} + \dots + (-1)^{k-1} \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^{2k-1} \frac{[s - (k-2)\tau]^{2k-1}}{(2k-1)!} \right] F_n(t^* - \tau - s) ds$$

Використовуючи теорему про середнє, знайдемо величини $-\tau \leq s_1 \leq 0$, $0 \leq s_2 \leq \tau, \dots, (k-2)\tau \leq s_k \leq t^* - \tau$, при яких буде виконуватися

$$C_n(t^*) = \tau F_n(t^* - \tau - s_1) + \tau \left[1 - n^2 \left(\frac{\pi}{l} a \right)^2 \frac{s_2^2}{3!} \right] F_n(t^* - \tau - s_2) + \dots \\ + [t^* - (k-1)\tau] \left[(s_k + \tau) - n^2 \left(\frac{\pi}{l} a \right)^2 \frac{s_k^2}{3!} + \dots + (-1)^{k-1} n^{2(k-1)} \left(\frac{\pi}{l} a \right)^{2(k-1)} \frac{[s_k - (k-2)\tau]^{2k-1}}{(2k-1)!} \right] \times F_n(t^* - \tau - s_k).$$

Звідси

$$|C_n(t^*)| \leq \left[(k-1) + (k-2)n^2 \left(\frac{\pi}{l} a \right)^2 \frac{(t^*)^2}{3!} + \dots + n^{2(k-1)} \left(\frac{\pi}{l} a \right)^{2(k-1)} \frac{[t^* - (k-2)\tau]^{2k-1}}{(2k-1)!} \right] \times \tau \max_{-\tau \leq s \leq t^*} |F_n(s)|.$$

Якщо коефіцієнти $F_n(t)$ такі, що виконується $\lim_{n \rightarrow \infty} \max_{-\tau \leq t \leq t^*} |F_n(t)| n^{2(k-1)} = 0$, $-\tau \leq t \leq t^* - \tau$, то ряд $S_3(x, t)$ буде сходиться абсолютно й рівномірно.

Таким чином показано, що для абсолютної та рівномірної збіжності рядів $S_1(x, t)$, $S_2(x, t)$, $S_3(x, t)$ потрібно "швидке зменшення" по індексу n коефіцієнтів Фур'є $\Phi_n(t)$, $-\tau \leq t \leq 0$, $F_n(t)$, $0 \leq t \leq t^*$ і похідних $\dot{\Phi}_n(t)$, $-\tau \leq t \leq 0$. Збіжність похідних впливає із властивостей диференційовності запізнаючих синуса та косинуса.

Представлення розв'язку крайової задачі (1)-(3) у формі (5) не завжди зручне. Перепишемо (5), розділивши початкові та крайові функції

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{2}{l} \int_0^l \varphi(s, -\tau) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \cos, \frac{\pi n}{l} at + \frac{2}{\pi n a} \left[\int_0^l \dot{\varphi}_1(s, t)_{t=-\tau} \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \sin, \frac{\pi n}{l} at + \right. \\ & \left. + \frac{2}{\pi n a} \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l \ddot{\varphi}_1(s, t)_{t=-\xi} \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi n a} \left\{ \int_0^l \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l f(s, \xi) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \frac{2}{\pi n} [(-1)^n \mu_2(-\tau) - \mu_1(-\tau)] \cos, \frac{\pi n}{l} at + \frac{2l}{(\pi n)^2 a} [(-1)^n \dot{\mu}_2(-\tau) - \dot{\mu}_1(-\tau)] \sin, \frac{\pi n}{l} at + \right. \\ & \left. + \frac{2l}{(\pi n)^2 a} \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) [(-1)^n \ddot{\mu}_2(\xi) - \ddot{\mu}_1(\xi)] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \mu_1(t) + \frac{x}{l} [\mu_2(t) - \mu_1(t)]. \end{aligned}$$

Оскільки

$$\begin{aligned} & \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) [(-1)^n \ddot{\mu}_2(\xi) - \ddot{\mu}_1(\xi)] d\xi = \\ = & \sin, \frac{\pi n}{l} a(-\tau) [(-1)^n \dot{\mu}_2(t) - \dot{\mu}_1(t)] - \sin, \frac{\pi n}{l} at [(-1)^n \dot{\mu}_2(-\tau) - \dot{\mu}_1(-\tau)] + \\ & + \frac{\pi n}{l} a \left\{ \cos, \frac{\pi n}{l} a(-\tau) [(-1)^n \mu_2(t) - \mu_1(t)] - \cos, \frac{\pi n}{l} at [(-1)^n \mu_2(-\tau) - \mu_1(-\tau)] \right\} - \\ & - \left(\frac{\pi n}{l} a \right)^2 \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - 2\tau - \xi) [(-1)^n \mu_2(\xi) - \mu_1(\xi)] d\xi. \end{aligned}$$

Після підстановки отриманого виразу та скорочень маємо

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{2}{l} \int_0^l \varphi(s, -\tau) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \cos, \frac{\pi n}{l} at + \frac{2}{\pi n a} \left[\int_0^l \dot{\varphi}_1(s, t)_{t=-\tau} \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \sin, \frac{\pi n}{l} at + \right. \\ & \left. + \frac{2}{\pi n a} \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l \ddot{\varphi}_1(s, t)_{t=-\xi} \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi n a} \left\{ \int_0^l \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l f(s, \xi) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x + \\ & - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2a}{l} x \left\{ \int_{-\tau}^0 \sin, \frac{\pi n}{l} a(t - 2\tau - \xi) [(-1)^n \mu_2(\xi) - \mu_1(\xi)] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x. \end{aligned}$$

Позначимо суму, що залежить від початкових умов

$$\tilde{S}_1[\varphi] = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{2}{l} \int_0^l \varphi(s, -\tau) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \cos \frac{\pi n}{l} at + \frac{2}{\pi na} \left[\int_0^l \dot{\varphi}_1(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] \sin \frac{\pi n}{l} at + \right. \\ \left. + \frac{2}{\pi na} \int_{-\tau}^0 \sin \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l \ddot{\varphi}_1(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x, \quad (8)$$

суму, що залежить від зовнішніх впливів

$$\tilde{S}_2[f] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi na} \left\{ \int_0^l \sin \frac{\pi n}{l} a(t - \tau - \xi) \left[\int_0^l f(s, \xi) \sin \frac{\pi n}{l} s ds \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x, \quad (9)$$

суму, що залежить від крайових умов

$$\tilde{S}_3[\mu_1, \mu_2] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2a}{l} \left\{ \int_{-\tau}^0 \sin \frac{\pi n}{l} a(t - 2\tau - \xi) \left[(-1)^n \mu_2(\xi) - \mu_1(\xi) \right] d\xi \right\} \sin \frac{\pi n}{l} x. \quad (10)$$

Теорема 2. Нехай функції $\varphi(x, t)$, $f(x, t)$, $\mu_1(t)$ і $\mu_2(t)$ такі, що на інтервалі, $-\tau \leq t \leq t^*$, $(k-1)\tau \leq t^* < k\tau$ для їхніх коефіцієнтів Фур'є

$$\varphi_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds, \quad \dot{\varphi}_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l \dot{\varphi}_1(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds, \quad \ddot{\varphi}_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l \ddot{\varphi}_1(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds, \quad -\tau \leq t \leq 0, \\ f_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l f(s, t) \sin \frac{\pi n}{l} s ds,$$

$$\text{і } \mu_n = \frac{2a}{l} \left\{ \int_{-\tau}^0 \sin \frac{\pi n}{l} a(t - 2\tau - \xi) \left[(-1)^n \mu_2(\xi) - \mu_1(\xi) \right] d\xi \right\}, \quad -\tau \leq t, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

виконуються умови "швидкого зменшення" по індексу n , тобто

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{2k+1} \max_{s \leq t^*} |f_n(s)| = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{2k} \max_{s \leq t^*} |\mu_n(s)| = 0,$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{2(k+1)} \max_{s \leq t^*} |\varphi_n(s)| = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{2(k+1)} \max_{s \leq t^*} |\dot{\varphi}_n(s)| = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{2(k+1)} \max_{s \leq t^*} |\ddot{\varphi}_n(s)| = 0, \quad -\tau \leq s \leq 0.$$

Тоді при $0 \leq t \leq t^*$ розв'язок першої крайової задачі (1) -(3) має вигляд

$$u(x, t) = \tilde{S}_1[\varphi] + \tilde{S}_2[f] + \tilde{S}_3[\mu_1, \mu_2],$$

де $\tilde{S}_1[\varphi]$, $\tilde{S}_2[f]$, $\tilde{S}_3[\mu_1, \mu_2]$ визначені в (8), (9), (10).

Доведення. Твердження доводиться аналогічно доведенню теореми 1. ■

Висновки

Формально розв'язок крайової задачі для хвильового рівняння із післядією виписується у вигляді ряду. В роботі визначено умови збіжності такого ряду, а значить - умови існування та єдиності розв'язку.

Література

1. Коварж И.В., Хусайнов Д.Я. Одномерное волновое уравнение с запаздыванием. //Журнал обчислювальна та прикладна математика, №2(91), 2004. - С.99.
2. Коварж И.В. Уравнение колебания струны с запаздыванием. //Международная конференция «Интегральные уравнения и их применения». Тезисы докладов. Одесса, 29 июня-4 июля 2005. - С.65.
3. Хусайнов Д.Я., Иванов А.Ф., Коварж И.В. Представления розв'язку одновимірного рівняння коливання із запізненням. //Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. - 2006, в.3.

Надійшла до редакції 20.04.06р.

IVANOV, THE DISCREPANCY IN THE RESULTS...

Figure 2. Net rate of growth.

4. $\frac{1}{2} \leq \frac{1}{3} \leq \frac{1}{4}$, $\frac{1}{4} \leq \frac{1}{5} \leq \frac{1}{6}$.

THE UNIVERSITY OF CHICAGO PRESS

PACS: 52.65.-y

Ігор О. Анісімов¹,
Тарас Є. Літошенко²

Нелінійна взаємодія модульованого електронного пучка з областю локального плазмового резонансу: двовимірне моделювання

Шляхом числового моделювання досліджено нелінійну взаємодію тонкого модульованого електронного пучка з неоднорідною плазмою.

Виявлено ефекти генерації ленгмюрівських хвиль в області локального плазмового резонансу та утворення каверни іонної густини на профілі концентрації плазми.

Ключові слова: плазмово-пучкова взаємодія, область локального плазмового резонансу, каверна іонної густини.

¹ E-mail: ioa@univ.kiev.ua

WWW: <http://ioa.rpd.univ.kiev.ua>

² E-mail: shine@mechmat.univ.kiev.ua

Igor O. Anisimov¹,
Taras Eu. Litoshenko²

Nonlinear interaction of the modulated electron beam with the local plasma resonance region: 2D simulation

Non-linear interaction of thin modulated electron beam with inhomogeneous plasma was investigated using numerical simulations.

The effects of Langmuir waves generation in the region of local plasma resonance and ions' density cavity formation on the plasma concentration profile were studied.

Key Words: beam-plasma interaction, local plasma resonance region, ions' density cavity.

1. Вступ

Плазмово-пучкова взаємодія є об'єктом інтенсивного дослідження протягом останніх десятиліть. Більш глибоке розуміння цього явища спричинить прогрес як у фундаментальній науці, так і в цілому ряді практичних застосувань, таких як конструювання плазмово-пучкових генераторів та підсилювачів НВЧ, використання пучків як випромінювачів електромагнітних хвиль у верхній атмосфері та космосі, та ін. Зазначимо, що в усіх названих застосуваннях фігурують модульовані пучки.

Взаємодія модульованого електронного пучка із неоднорідною плазмою в одновимірній геометрії досить детально вивчена як аналітично [1-3], так і за допомогою методів числового моделювання [4-7]. Показано, що такий пучок збуджує інтенсивні коливання електричного поля в області локального плазмового резонансу (ОЛПР), де частота його модуляції збігається з електронною ленгмюрівською частотою плазми. Збудження названих коливань супроводжується випромінюванням ленгмюрівських хвиль у бік більш розрідженої плазми. Далі, під дією високочастотного електричного поля, плазма витискається з ОЛПР, і там утворюється ямка густини – каверна. Спотворення профілю концентрації плазми приводить до пере-

інjektуватися модульований за густиною моноенергетичний електронний пучок. Початкова ширина пучка складає $L_{beam}=0.8$ см, а його вісь суміщена з поздовжньою віссю системи. Електрони пучка інjektуються із швидкостями, що значно перевищують теплові швидкості електронів плазми: $v_{beam,x}=50 v_{Te}$, $v_{beam,y}=0$. Частота модуляції пучка ω_{beam} дорівнює ленгмюрівській частоті плазми $\omega_p(x)$ у точці локального плазмового резонансу $x_{lpr}=0.29$ м: $\omega_{beam}=\omega_p(x_{lpr}=0.29 \text{ м})=1.0 \cdot 10^9$ рад/с. Параметри пучка підбиралися таким чином, щоб профіль його густини не зазнавав помітної деформації на шляху до ОЛПР.

3. Початкова стадія плазмово-пучкової взаємодії: лінійне збудження ленгмюрівських хвиль у точці локального плазмового резонансу

Нескомпенсований електричний заряд пучка є джерелом макроскопічних полів, які поширюються в плазмі разом з пучком. На рис. 1 показано просторові розподіли потенціалу (а), електричного поля (б) та густини електронів пучка (в) в один із початкових моментів часу.

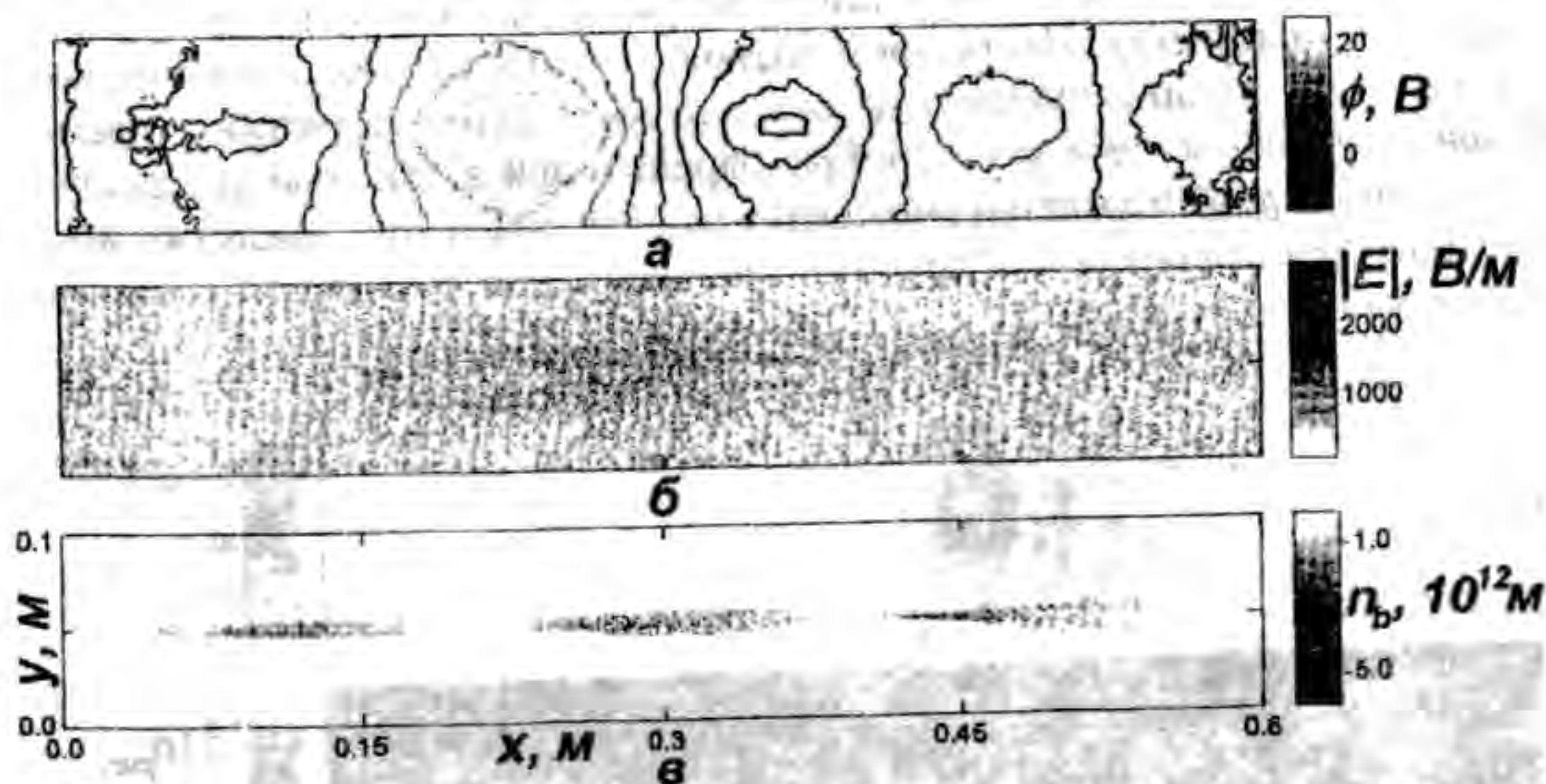


Рис. 1. Просторовий розподіл еквіпотенціальних ліній (а), модуля напруженості електричного поля (б) та густини електронів пучка (в) в момент часу $t=4.8 T_{mod}$.

Легко бачити, що найсильніші поля відразу збуджуються саме в ОЛПР, а еквіпотенціальні лінії є еліпсоподібними, що наближено відповідає формі інjektованих у плазму згустків.

Вже на ранніх стадіях плазмово-пучкової взаємодії при досліджуваних параметрах проявляються ефекти розбухання та стиснення пучка у поперечному напрямку. Збільшення поперечних розмірів пучка спричинене силами електростатичного відштовхування, які діють на заряди всере-

дині пучка. Ефект стиснення пучка проявляється переважно в закритичній плазмі (для якої виконується співвідношення $\omega_p > \omega_{beam}$) в задній частині згустків. Можливе пояснення цього ефекту пов'язане з радіальними коливаннями електронів плазми під дією поля електронного пучка. Після проходження середньої частини електронного згустку через деяку точку плазми її електрони витискаються полем згустку з області його проходження. В результаті в області локалізації пучка з'являється нескомпенсований заряд іонів, який і фокусує своїм електричним полем задню частину згустку. Відзначимо, що на пізніх моментах часу ефекти як розбухання центральної частини згустку, так і фокусування його задньої частини стають менш помітними. Це можна пов'язати з тим, що в область локалізації пучка натягаються з об'єму плазми іони, які в середньому компенсують його об'ємний заряд.

З часом в ОЛПР інтенсивність коливань електричного поля помітно зростає, і ця область стає, по суті, точковим джерелом ленгмюрівських хвиль, які поширюються в бік зменшення концентрації плазми (рис. 2). Швидкість поширення, а, отже, й довжина цих хвиль спадає зі зменшенням координати x . Фронт хвиль не є плоским внаслідок обмеженості пучка в поперечному напрямку. Найбільш помітною відмінністю від одновимірної випадку є швидке зменшення інтенсивності ленгмюрівських хвиль, обумовлене збільшенням довжини їхніх фронтів при віддаленні від джерела. В одновимірній же плазмі зменшення інтенсивності цих хвиль обумовлене лише зростанням їхньої групової швидкості при зменшенні концентрації плазми.

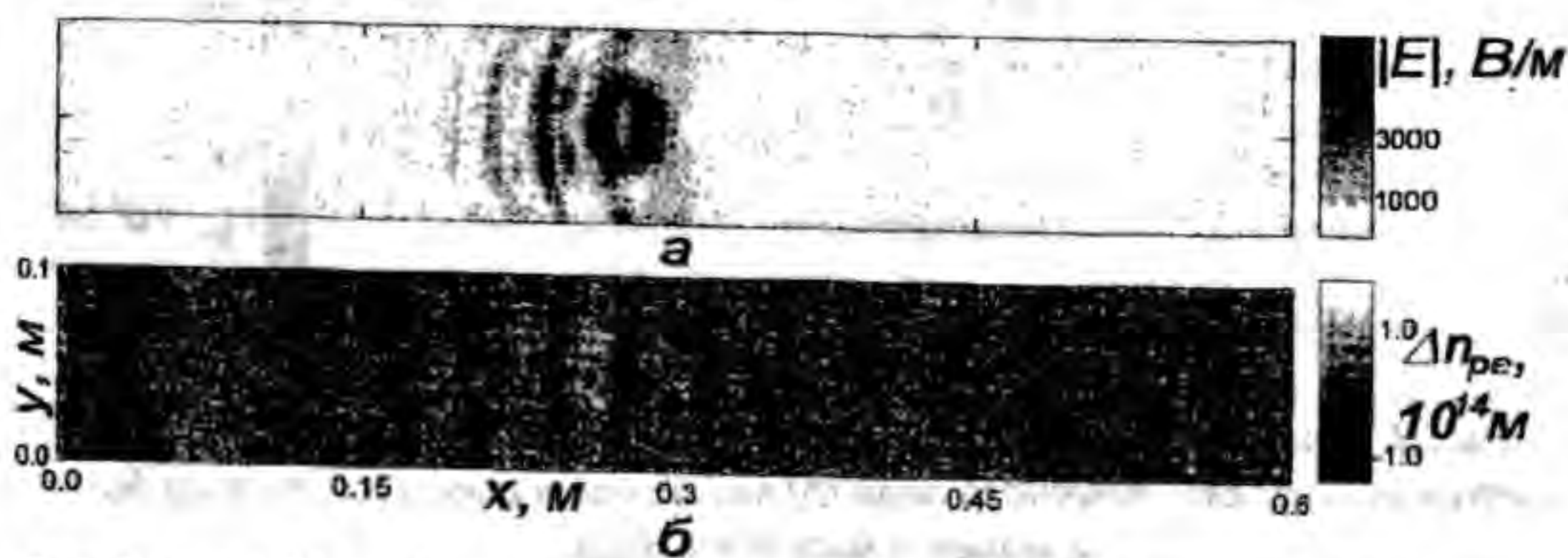


Рис. 2. Розподіл модуля напруженості електричного поля (а) та збурення густини електронів плазми (б) в момент часу $t = 63.7 T_{mod}$

При поширенні в бік лівого електроду ленгмюрівські хвилі інтерферують із хвилями просторового заряду пучка, які поширюються праворуч. Внаслідок цього, інтенсивність коливань електричного поля на осі системи може зменшуватись, як це видно на рис. 2а.

4. Формування каверни іонної густини в області локального плазмового резонансу

Високочастотні коливання електричного поля в ОЛПР є джерелом пондеромоторної сили, яка діє на плазму. Під дією цієї сили вона, як уже вказувалося, витискається з області локалізації сильного поля, і за час порядку іонного плазмового періоду там утворюється каверна – ямка густини плазми (рис. 3). Поздовжній розмір каверни складає величину порядку довжини ленгмюрівської хвилі, поперечний розмір помітно перевищує товщину пучка. Як видно з рис. 3б, в момент виникнення ямка на іонному профілі має форму кільця, в центральній області якого існує локальний максимум густини. Спотворення густини електронів прямо протилежне – воно має вигляд ямки, оточеної кільцевим у плані максимумом (рис. 3в).

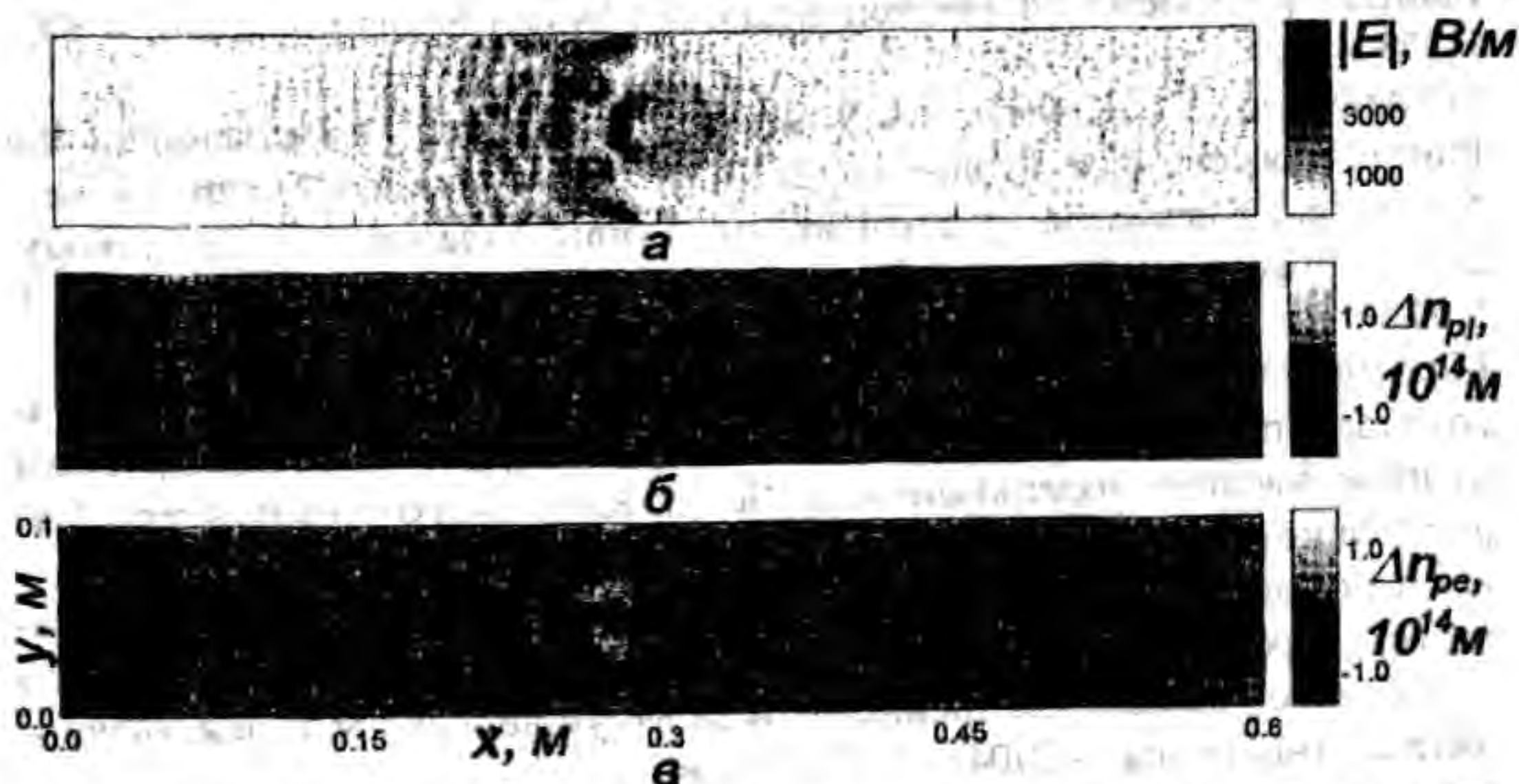


Рис. 3. Розподіл модуля напруженості електричного поля (а), збурення густини іонів плазми (б) та збурення густини електронів плазми (в) в момент часу $t = 127.3 T_{mod}$.

Спотворення профілю концентрації плазми суттєво впливає на розподіл електричного поля в системі. Найбільш помітний ефект – це зменшення його максимальної інтенсивності. Крім того, в ОЛПР розподіл стає менш регулярним, а фронт ленгмюрівської хвилі роздроблюється (рис. 3а).

5. Висновки

1. На ранній стадії взаємодії модульованого електронного пучка з неоднорідною плазмою в ОЛПР генеруються ленгмюрівські хвилі з опуклими фронтами, що є наслідком скінченного поперечного розміру області резонансної взаємодії.
2. За кілька іонних періодів на профілі концентрації плазми формується

каверна в результаті дії пондеромоторної сили з боку високочастотного електричного поля. Форма такої каверни у двовимірній геометрії досліджена вперше.

3. Як і в одновимірному випадку, деформація профілю концентрації плазми в ОЛПР призводить до зменшення інтенсивності електричного поля в цій області та зміни його просторового розподілу.

Література

1. Ерохин Н.С., Мойсеев С.С. Трансформация волн в неоднородной неустойчивой плазме. // ЖЭТФ. – 1973. – 65. С.1431-1447.
2. Shamrai K.P. Transformation and amplification of waves in a non-uniform plasma involving monoenergetic electron beam. // J. Plasma Phys. – 1984. – 31. P.301-311.
3. Anisimov I.O., Borisov O.A. Electrical Field Excitation in Non-Uniform Plasma by a Modulated Electron Beam. // Physica Scripta. – 2000. – 62. – P.375-380.
4. I.O.Anisimov, O.I.Kelnyk, T.V.Siversky, S.V.Soroka. Deformation of the Plasma Concentration Profile due Field of the Modulated Electron Beam: Numerical Simulation. // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma electronics and new acceleration methods (3). – 2003. – 4. P.91-93.
5. І.О.Анісімов, О.І.Кельник, Т.В.Сіверський, С.В.Сорока. Збудження високочастотних полів у неоднорідній плазмі модульованим електронним пучком: числове моделювання. // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2003. – 1. С.229-236.
6. І.О.Анісімов, С.В.Сорока. Взаємодія неоднорідної плазми з модульованим електронним пучком: утворення ямки густини в області локального плазмового резонансу. // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2004. – 2. С.385-394.
7. I.O.Anisimov, O.I. Kelnyk, T.V. Siversky, S.V. Soroka. Interaction of the Modulated Electron Beam with Inhomogeneous Plasma: Plasma Density Profile Deformation and Langmuir Waves Excitation. // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Physics (11). – 2005. – 2. P.122-124.
8. Ч.Бэдсел, А.Ленгдон. Физика плазмы и численное моделирование. – М.: Энергоатомиздат, 1989.
9. T.Eu.Litoshenko, I.O.Anisimov. 2D electrostatic simulation of the modulated electron beam interaction with inhomogeneous plasma. // Proceedings of the II International Conference "Electronics and Applied Physics", Kyiv, 2006. P. 137-138.

Надійшла до редакції 28.11.2001

УДК 537.534

Тетяна В. Афанас'єва¹, Ігор П.
Коваль², Микола Г. Находкін,
Максим М. Сторчак

Адсорбція та обертання димерів Bi на поверхні Si(001)2x1

Адсорбція та обертання димера Bi над димерним рядом на поверхні Si(001) досліджувались за допомогою розрахунків з перших принципів. Розраховані дві стабільні конфігурації димера Bi A та B типів. Димери Bi B типу є більш енергетично вигідними. Визначено різницю енергій між димерами в A та B конфігураціях, що склала 0.34 eV. Визначено найвигідніші шляхи обертання димера Bi і відповідний енергетичний бар'єр. Досліджено вплив поля вістря СТМ та дефектів на бар'єр обертання димера Bi.

Ключові слова: адсорбція, дифузія, *ab initio* розрахунки.

Tetyana V. Afanasieva¹, Igor P.
Koval², Mykola G. Nakhodkin,
Maksim M. Storchak

Adsorption and rotation of Bi dimers on the Si(001)2x1

Adsorption and rotation of Bi dimers on top of dimer row of Si(001)2x1 surface were investigating using *ab-initio* calculations. Two stable A and B configurations for Bi dimer on top of dimer row were considered. B configuration of Bi dimer is found to be the most stable one while A configuration differs by 0.34 eV from B. Optimal pathway and energy barrier for Bi dimer rotation were found. Also influence of surface defects and STM tip field were considered.

Key Words: adsorption, diffusion, *ab initio* calculations.

¹ E-mail: afanasieva@univ.kiev.ua

² E-mail: ifk@univ.kiev.ua

Вступ

Використання гетероструктур на основі Si/Ge є дуже перспективним напрямком розвитку мікроелектроніки. Si/Ge гетероструктури є багатообіцяючою основою для виготовлення інтегральних схем, запам'ятовуючих, оптоелектронних та швидкодіючих пристроїв. Контрольоване вирощування Si/Ge гетероструктур можливе за допомогою молекулярно-променевої епітаксії. При цьому постає серйозна проблема, що полягає в нерівності сталих ґратки та поверхневих енергій Si та Ge. Ge має більшу сталу ґратки, ніж Si, тому при спробі епітаксії Si на Ge, одразу починається острівцевий ріст. Якщо ж вирощувати Ge на Si, то вдається виростити лише декілька шарів, після чого також починається острівцевий ріст. Для покращення гетероепітаксії Ge/Si використовуються сурфактанти (речовини, що пасивують поверхню, насичуючи вільні зв'язки і зменшуючи поверхневу енергію). Найбільш поширеними сурфактантами для гетероепітаксії Ge/Si є елементи V підгрупи (As, Sb, Bi) [1]. Серед згаданих елементів Bi є найкращим, оскільки його атоми за рахунок великих розмірів не перемішуються з атомами підкладки [1].

Крім того, на поверхні Si(100) зареєстрована самоорганізація нанониток Bi [2] та Sb [3,4], які можуть бути використані як основа нанорозмірних приладів.

Для розуміння дії сурфактантів та процесів самоорганізації потрібні дослідження властивостей чистої поверхні Si, вкритої шаром сурфактанту, а також елементарних актів дифузії атомів сурфактанту. Серед методів дослідження поверхні, що забезпечують атомарне розрізнення найбільш поширеними є скануюча тунельна мікроскопія та обчислювальні методи квантової хімії. Основні характеристики поверхні (довжина димерів, стабільні конфігурації) були визначені за допомогою СТМ, але кінетика руху залишилася невідомою.

Дослідження за допомогою СТМ виявили, що атоми Bi формують на поверхні Si(001) димери A та B типу, як і елементи IV групи Si та Ge [5,6,7]. Також визначені енергії перетворення димерів A типу в димери B типу і навпаки [7]. Але детальні атомні шляхи залишилися невідомі. Одна з переваг квантовохімічних методів – можливість безпосереднього дослідження кінетичних явищ з довільною деталізацією в часі. Крім того, методи широко використовуються для інтерпретації СТМ-зображень.

У роботі визначались найбільш ймовірні шляхи та енергії перетворення димера Bi з A-конфігурації в B-конфігурацію. Також порівнювались механізми обертання димерів елементів V і IV групи на ряду поверхневих димерів Si(001).

Методика

Обчислення проводилися з перших принципів методом Хартрі-Фока в одноклеточному наближенні за допомогою програми GAMESS [8]. Для всіх атомів використовувався набір базисних функцій SBK (Stevens, Basch, Krauss, Jasien, Cundari) [9] для валентних електронів і ефективний SBK потенціал - для внутрішніх. Оскільки передбачалося, що в системі немає напівзаповнених молекулярних орбіталей, то при оптимізації електронної підсистеми використовувався обмежений метод Хартрі-Фока RHF (Restricted Hartree-Fock).

Поверхня кремнію моделювалась кластером $\text{Si}_{29}\text{H}_{28}$. Усі довжини зв'язків Si-Si були покладені рівними 2.35 Å, що відповідає довжині зв'язку в об'ємі Si. Проблема вільних валентностей на граничних атомах кластеру усувалась шляхом насичення обірваних зв'язків атомами водню, що розміщувались на відстані 1.48 Å. Проводилась оптимізація координат атомів Bi та двох верхніх шарів Si.

Результати

Чиста поверхня Si, A і B димери.

Спочатку були досліджені стабільні конфігурації димера Bi на поверхні Si(100)2x1 – A та B димери. A-димер відповідає такій

конфігурації димера на поверхні, коли він напрямлений перпендикулярно ряду поверхневих димерів Si, а В-димер – паралельно. Поверхня Si(100)2x1 моделювалася кластерами Si₁₅H₁₈ та Si₂₉H₂₈. При цьому досліджувався вплив кількості шарів, що оптимізуються на властивості кластера. Результати розрахунку енергій та структур А і В димерів для кластерів різних розмірів наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Порівняння одержаних результатів з експериментальними. ΔE – різниця між енергіями адсорбції димера Ві в А і В конфігураціях. $D_{\text{Ві-Ві}}$ – довжина димера Ві.

	Si ₁₅ H ₁₈ , оптимізація 1 шару		Si ₁₅ H ₁₈ , оптимізація 2 шарів		Si ₂₉ H ₂₈ , оптимізація 2 шарів		Експеримент	
	ΔE	$D_{\text{Ві-Ві}}$	ΔE	$D_{\text{Ві-Ві}}$	ΔE	$D_{\text{Ві-Ві}}$	ΔE	$D_{\text{Ві-Ві}}$
А-димер	0.61 eV	3.03 Å	0.46 eV	3.08 Å	0.34 eV	3.06 Å	0.2 eV [7]	2.94 Å [10]
В-димер		3.06 Å		3.06 Å		3.05 Å		

Як видно з таблиці 1, різниця енергій адсорбції А і В димерів зменшується зі збільшенням розмірів кластера і кількості атомних шарів, що оптимізуються, і прямує до експериментальних значень. Розбіжність значень енергії адсорбції можна пояснити крайовими ефектами та різною кількістю ступеней вільності реальної поверхні та моделюючого її кластера. Отримані довжини зв'язків не залежать від розмірів кластера і добре узгоджуються з експериментальними даними. Таким чином, видно, що обраний метод дає стійкі результати, які майже не залежать від зміни розмірів кластера. Результати добре узгоджуються з експериментальними даними (наведені в таблиці 1).

В-димер виявився більш енергетично вигідним, ніж А-димер. Різниця енергій між А і В димерами складає 0.34 eV. Це значення добре узгоджується з експериментальним даними (0.2 eV) [7]. Довжина зв'язку В-димера Ві становить 3.05 Å. Також була визначена довжина А-димера, яка виявилася рівною 3.06 Å. Ці значення також відповідають експерименту [10].

В СТМ дослідженнях було зафіксоване існування не тільки симетричних димерів Ві, а й асиметричних димерів [11]. Для перевірки можливості утворення змішаних димерів була визначена енергія формування змішаного димера Si-Ві в В-конфігурації на поверхні, де один з атомів Si першого шару кластеру замінений на Ві. Вона виявилася на 0.5 eV більшою, ніж енергія димера Ві-Ві у відповідному положенні.

Дослідження впливу електричного поля вістря СТМ на енергію адсорбції димера Ві в В-конфігурації на поверхні Si(100)2x1.

Зовнішнє електричне поле проникає всередину напівпровідника, тому безпосередньо до поверхні прикладена лише частина різниці

потенціалів вістря-зразок. Напруженість приповерхневого поля визначається як об'ємними властивостями зразка (рівень легування, концентрація носіїв), так і поверхневими (такими, як наявність поверхневих станів та адсорбованих домішок). Звичайно, поле вістря не є однорідним, але цим можна знехтувати, зважаючи на співвідношення розмірів кластера, вістря і відстані між вістрями і поверхнею. Детальний розгляд в [12] різних геометрій вістрів та оцінки впливу проникнення електричного поля в напівпровідник показали, що при типових значеннях напруг ($\pm 2\text{В}$) на зразках $\text{Si}(001)$ та типових тунельних відстанях ($0,3\div 0,5\text{нм}$) електричне поле лежить у межах $\pm 0,1\div 0,3\text{ В/Å}$. В наших розрахунках діапазон електричних полів лежав у межах $\pm 0\div 0,25\text{ В/Å}$.

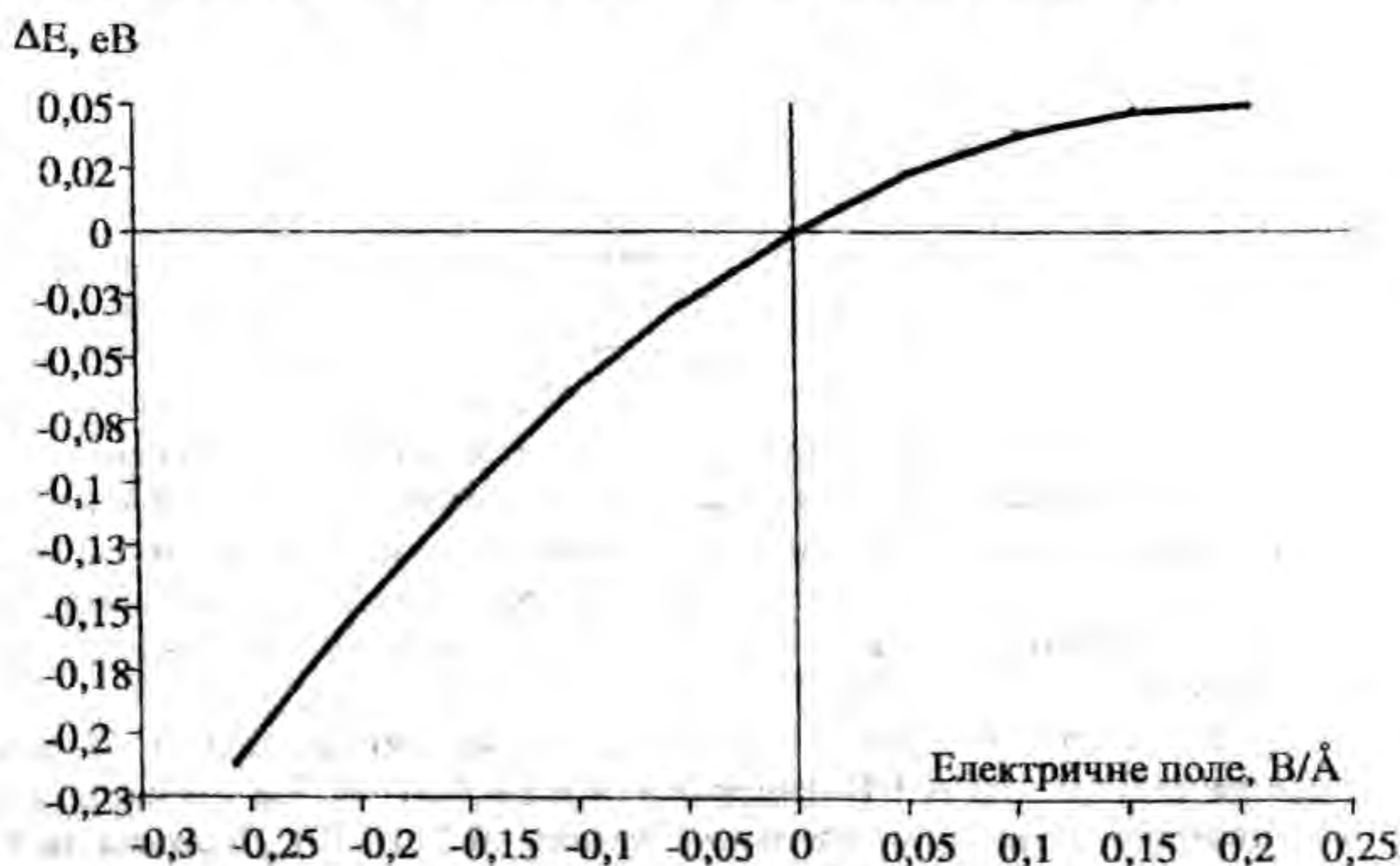


Рисунок 1. Залежність зміни енергії зв'язку димера Vi в V -конфігурації з поверхнею $\text{Si}(001)2\times 1$ від прикладеного електричного поля.

При прикладанні поля в напрямку кластера (+ на вістрі, – на поверхні) виявилось, що зміна енергії зв'язку димера з поверхнею змінюється менше ніж на 0.05 еВ , що не перевищує похибки методу. Якщо ж змінити напрямок поля на протилежний (+ на поверхні, – на вістрі), то енергія зв'язку зменшується на величину до 0.2 еВ . Таким чином, можна зробити висновок, що в обраній моделі поле, створене позитивною напругою зміщення на зразку, призводить до зменшення енергії адсорбції димера Vi , в той час, як поле зворотного напрямку майже не впливає на енергію зв'язку. Це можна пояснити таким розподілом електричного заряду, при якому Vi набуває позитивного заряду, а Si – негативного. Такий розподіл підтверджується нашими попередніми розрахунками [13].

Дослідження процесу обертання димера Ві на поверхні Si(100)2x1.

Досліджено обертання димера, що знаходиться над рядом димерів кремнію на поверхні Si(100)2x1. Положення кожного атома димера задавалося двогранним кутом, що утворювався з площини, перпендикулярної димерному ряду, і площини, що проходить через центр кластера і відповідний атом (рис 2а).

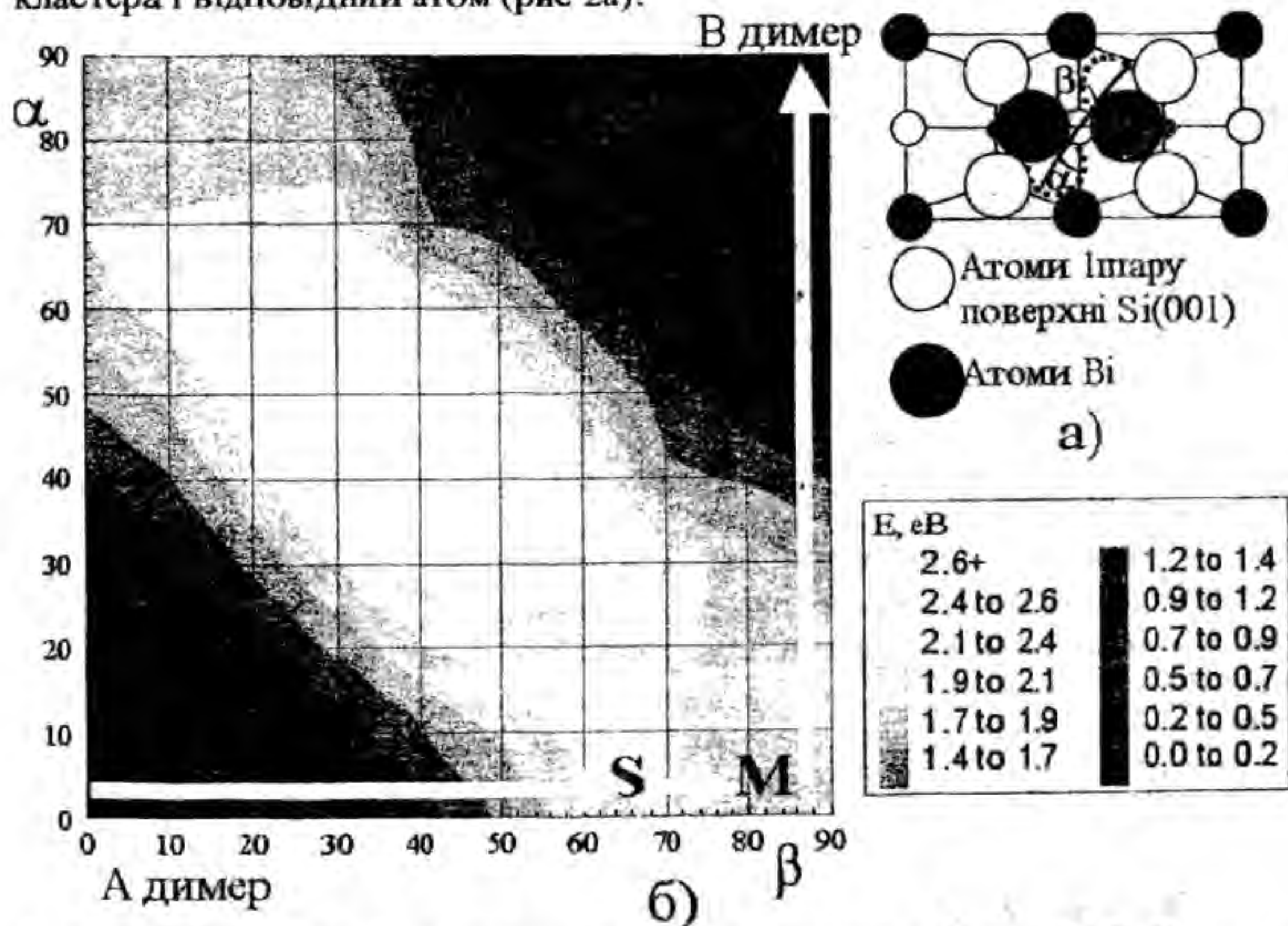


Рисунок 2. а) Схема системи координат обертання димера Ві б) Поверхня енергії адсорбції димера Ві в залежності від кутів α , β . Енергія відрахована від енергії адсорбції В-димера. Стрілками позначено оптимальний шлях обертання. А димер – $\alpha=0$, $\beta=0$; В димер – $\alpha=90$, $\beta=90$; S – сідлова точка, $\alpha=0$, $\beta=70$; М – проміжна точка, $\alpha=0$, $\beta=90$.

Для визначення найбільш вигідного шляху для обертання димера Ві була побудована поверхня енергії адсорбції димера Ві в залежності від кутів α , β . Крок зміни кутів – 10° . Поверхня енергії адсорбції показана на рис.2б. З рис.2б видно, що найбільш енергетично вигідний шлях пролягає таким чином, що спочатку рухається один атом (поки не займе свого кінцевого положення), а потім інший. Літерою S позначена сідлова точка, яка відповідає положенню димера ($\alpha=0$, $\beta=70$) (один з атомів знаходиться в положенні А, а інший – в близькому до В). Такий характер руху притаманний димерам елементів IV групи (Si-Ge, Si-Si, Ge-Ge) на поверхні

Si(001) [5,6]. Енергетичний бар'єр для обертання димера із положення В в положення А складає 2.14 еВ, та 1.8 еВ для зворотного процесу. За даними СТМ експерименту ці величини становлять 1.04 і 0.84 еВ, відповідно [7].

В СТМ експерименті спостерігаються довгі (від 5-7 димерів і більше) ділянки букльованих (тобто непаралельних підкладці) димерів ряду, над яким знаходиться аддимер. Ці ділянки починаються від позиції адсорбції. Видно, що ці димери букльовані не так, як решта підкладки (с(2x4)) [7,14]. Розрахунки дають 12-15.4° для димерів біля аддимеру Ві [15] і 15-16° для чистої поверхні [16]. При цьому димери, над якими знаходиться димер Ві, є симетричними (зняття буклювання в А і В конфігураціях підтверджується зробленими розрахунками).

В точці S спостерігається значне (порівняно з іншими точками) буклювання. Кут нахилу димера Si відносно його положення в В-конфігурації складає 7°. Можна очікувати, що сусідні поверхневі димери будуть букльовані ще сильніше, але обмежені розміри кластера не дозволяють спостерігати такий ефект.

Дослідження впливу дефектів на енергетичний бар'єр для обертання димера Ві.

Розраховані значення порогів обертання виявилися дещо завищеними порівняно з експериментальними результатами (таблиця 1), а в експерименті процеси дифузії (і зокрема обертання) спостерігаються біля поверхневих дефектів [7], які, в свою чергу, викликають перерозподіл електричного заряду на поверхні, тому була проведена спроба змодельовати вплив перерозподілу електричного заряду на енергетичні пороги обертання.

Таблиця 2. Вплив додаткового заряду кластера на енергію адсорбції та довжину димера Ві. ΔE – різниця між енергіями адсорбції димера Ві у відповідних конфігураціях (зазначені в дужках). D – довжина димера Ві і поверхневих димерів підкладки у відповідному положенні. Наведені значення для нейтральної системи та систем з додатковим зарядом $+e$ та $-e$.

Q	ΔE (B,A)	ΔE (B,S)	ΔE (A,S)	$D_{\text{Bi-Bi}}$ (B)	$D_{\text{Bi-Bi}}$ (A)	$D_{\text{Bi-Bi}}$ (S)	$D_{\text{Si-Si}}$ (B)
+1e	0.81 eV	1.08 eV	0.27 eV	3.03 Å	3.08 Å	2.99 Å	3.04/ 2.44 Å
-1e	0.06 eV	-0.18 eV	-0.25 eV	3.01 Å	3.01 Å	3.04 Å	2.54/ 2.51 Å
0e	0.34 eV	2.14 eV	1.8 eV	3.05 Å	3.06 Å	2.97 Å	2.45/ 2.45 Å

Оскільки ми обмежені розмірами кластера, то для моделювання впливу дефектів на величину бар'єра обертання димера в систему вносився

додаткові заряди $+1e$ та $-1e$. Результати такого моделювання представлені в таблиці 2. Виявилося, що заряд суттєво впливає на величину бар'єра. У випадку заряду $+1$ суттєво зменшився бар'єр обертання до 1.07 еВ для $B \rightarrow A$ процесу і 0.27 еВ для зворотного. Крім того в B конфігурації спостерігався розрив одного з поверхневих димерів підкладки. При нанесенні заряду -1 виявилося, що значення енергії в сидловій точці S менше, ніж в положеннях A і B . Важливо відмітити, що внесення заряду не впливає на довжину димера Bi , а призводить до розриву одного з димерів підкладки. Це означає, що наявність на поверхні дефектів такого типу суттєво зменшує бар'єр, і обертання спостерігається саме на таких ділянках поверхні.

Значний вплив заряду на енергетичні бар'єри можна пояснити обмеженими розмірами кластера, оскільки об'єм кластера значно менше ефективного об'єму, в якому розподіляється заряд, пов'язаний з дефектом.

Висновки

Досліджено обертання димера Bi над димерним рядом на поверхні $Si(100)$. Визначено різницю енергій між димерами в A та B конфігураціях, що склала 0.34 еВ. Визначено найвигідніший шлях обертання і бар'єр перетворення $B \rightarrow A$ і навпаки – 2.14 еВ і 1.8 еВ відповідно. Проаналізовано можливість перетворення $B \rightarrow A$ з обміном атома Bi на атом Si поверхневого димера. Досліджено вплив поля вістря СТМ та дефектів на бар'єр обертання димеру $Bi-Bi$. Виявилося, що поле вістря майже не впливає на величини бар'єрів, а перерозподіл заряду дуже сильно змінює величини бар'єрів.

Автори вдячні за можливість використовувати обчислювальний кластер Інформаційно-Обчислювального центру Київського Національного університету імені Тараса Шевченка.

Література

1. Sakamoto K., Kyoya K., Miki K., Matsuhata H. Which surfactant shall we choose for the heteroepitaxy of $Ge/Si(001)-Bi$ as a surfactant with small self-incorporation // *Jpn.J.Appl.Phys.* – 1993. – Vol.32. № 2A. P.L204–L206.
2. M. Naitoh, H. Shimaya, S. Nishigaki, N. Oishi and F. Shoji // *Appl. Surf. Sci.* – 1999 – Vol. 142 – p. 3842.
3. Kubo O., Ryu J.-T., Tani H., Harada T., Kobayashi T., Katayama M., Oura K. STM study of structural changes on $Si(001)2 \times 1-Sb$ surface induced by atomic hydrogen. // *App. Surf. Sci.* – 2001 – Vol. 169-170 – P. 93-99.
4. Rogge S., Timmerman R.H., Scholte P.M.L.O., Geerligs L.J., Salemink H.W.M. Surface polymerization of epitaxial Sb wires on $Si(001)$. // *Phys. Rev. B.* – 2000 – Vol. 62 – № 23 – P.15341-15344.
5. S. Swartzentruber, A. P. Smith and H. Jónsson. Experimental and

Theoretical Study of the Rotation of Si Ad-dimers on the Si(100) Surface // Phys. Rev. Lett. – 1996 – Vol. 77 – P. 2518-2521.

6. Zhong-Yi Lu, Feng Lui, Cai-Zhuang Wang, Qin X. R., Swartzentruber B. S., Lagally M. G. And Kai-Ming Ho. Unique Dynamic Appearance of Ge-Si Ad-dimer on Si(001) // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 85, – P. 5603-5606.

7. S.Yu. Bulavenko, I.F. Koval, P.V. Melnik, N.G. Nakhodkin, H.J.W. Zandvliet. STM investigation of the initial adsorption stage of Bi on Si(100)-(2x1) and Ge(100)-(2x1) surfaces // Surf. Sci. – 2001. – Vol. 482-485. – P. 370.

8. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., Gordon M. S., Jensen J. H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K. A., Windus T. L., Su S., Dupuis M., Montgomery J. A. Jr. GAMESS, The General Atomic and Molecular Electronic Structure System // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol. 14. – P. 1347-1358.

9. Stevens W. J., Basch H., Krauss M. // Chem. Phys. – 1984. – Vol. 81. – P. 6026-6036.

10. Franklin G.E., Tang S., Woicik J. C., Bedzyk M. J., Freeman A. J., Golovchenko J. A. High-resolution structural study of Bi on Si(100). // Phys. Rev. B. – 1995 – Vol. 52 – P. 5515-5518.

11. S.Yu. Bulavenko, I.F. Koval, P.V. Melnik, N.G. Nakhodkin. The concerted movements of weakly bonded Bi dimers on the Si(100)2x1 surface // Surf. Sci. – 2002. – Vol. 507-510. – P. 119-123.

12. A. Pomyalov. Relaxation of the adsorption geometry of Sb and K on Si(001) surface induced by an electric field. // Phys. Rev. B. – 1998 – Vol. 57 – P. 8989-8996.

13. 14. Афанас'єва Т.В., Коваль І.П., Находкін М.Г., П'ятницький М.Ю. Адсорбція металів V-групи та кисню на поверхні Si(001)2x1. I. Адсорбція As, Sb і Bi. // УФЖ. – 1999. – 44, № 9. – С. 1133 – 1141.

14. T. V. Afanasieva, S. Yu. Bulavenko, I. F. Koval, H. J. W. Zandvliet. Diffusion of Si and Ge dimers on Ge (001) surfaces // J. App. Phys. – 2003. – Vol. 93 – №. 3. – P. 1452-1456.

15. R. H. Miwa, G. P. Srivastava. Self-organized Bi lines on the Si(001) surface: A theoretical study // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66 – №. 23. – P. 235317-235323.

16. S. C. A. Gay and G. P. Srivastava. Dimer length variation for different reconstructions of Si, Ge, and mixed Si-Ge dimers on Si(001) and Ge(001) substrates // Phys. Rev. B. – 1999. – Vol. 60 – Issue 3. – P. 1488-1492.

Надійшла до редакції 01.12.2006

УДК 537.52; 533.9:537.872

Іда Л. Бабіч*, Анатолій М. Веклич*,
Віталій Є. Осідач

Ida L. Babich*, Anatoly M. Veklich*,
Vitaly Ye. Osidach

**Дослідження плазми електроду-
гового розряду між композицій-
ними електродами на основі міді**

**Investigation of the electric arc dis-
charge plasma between composition
electrodes on the copper base**

*Методами оптичної спектроскопії
одержані радіальні профілі темпера-
тури та електронної концентрації в
плазмі електричної дуги між
композиційними електродами на основі
міді: Cu-W та Cu-Mo. У припущенні
локальної термодинамічної рівноваги
розрахований склад плазми електро-
дугового розряду.*

*The radial profiles of the tempe-
rature and electron density in plasma of
electric arc between composition
electrodes on the copper base Cu-W and
Cu-Mo are obtained by optical
spectroscopy techniques. In the assump-
tion of local thermodynamical equilibrium
the mixture of electric arc discharge
plasma is calculated.*

*Ключові слова: електрична дуга,
плазма, домішки металів, локальна
термодинамічна рівновага.*

*Key words: electric arc, plasma,
metal vapours, local thermodynamical
equilibrium.*

*E-mail: ibabich@univ.kiev.ua, van@univ.kiev.ua

Вступ

Мідь і композиційні матеріали на її основі широко застосовуються для виготовлення, зокрема, контактів комутуючої апаратури, завдяки їхнім унікальним електричним та теплофізичним властивостям.

Процеси, що мають місце між контактами пристроїв для перемикання електричних кіл, зручно вивчати на модельних об'єктах. Одним із таких об'єктів може бути електрична дуга, що вільно горить у повітрі.

В цій роботі вивчалась плазма електродугового розряду між електродами з композиційних матеріалів на основі міді: Cu-Mo (50/50) і Cu-W (50/50). Використовувались композиційні матеріали, одержані методом порошкової металургії, зокрема, твердофазним спіканням, що чергується з допресуванням.

Експеримент

Дуговий розряд запалювався у повітрі між неохолоджуваними електродами. Діаметр циліндричних електродів дорівнював 6 мм. Міжелектродний проміжок $l_{\text{ак}}$ – 2, 4, 6 або 8 мм, розрядний струм – 30 А. У зв'язку з просторовою та часовою нестабільністю розряду застосовувався метод однократної томографічної реєстрації випромінювання спектральних

ліній. Швидкісне сканування просторових розподілів інтенсивності випромінювання забезпечувала ПЗЗ-лінійка (B/W) SONY ILX526A з 3000 пікселів. У комбінації зі спектральним приладом вона дозволяла виконувати записи радіального розподілу випромінювання у середньому перерізі розряду нестационарної дуги [1].

Радіальні профілі температури плазми $T(r)$ електричної дуги визначались за відносними інтенсивностями спектральних ліній CuI 510.5; 521.8; 465.1 нм у припущенні локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР).

Профілі електронної концентрації $N_e(r)$ визначались з ширини спектральної лінії CuI 515.3 нм, оскільки домінуючим механізмом її розширення є квадратичний ефект Штарка [2]. Методика вимірювання контурів спектральних ліній у неоднорідній плазмі із застосуванням інтерферометра Фабрі-Перо детально описана в [3].

Результати та їх обговорення

На рис. 1 представлені, як приклад, радіальні профілі температури $T(r)$ та електронної концентрації $N_e(r)$ в плазмі електродугового розряду між Cu-W електродами (міжелектродний проміжок $l_{ak} = 4$ мм).

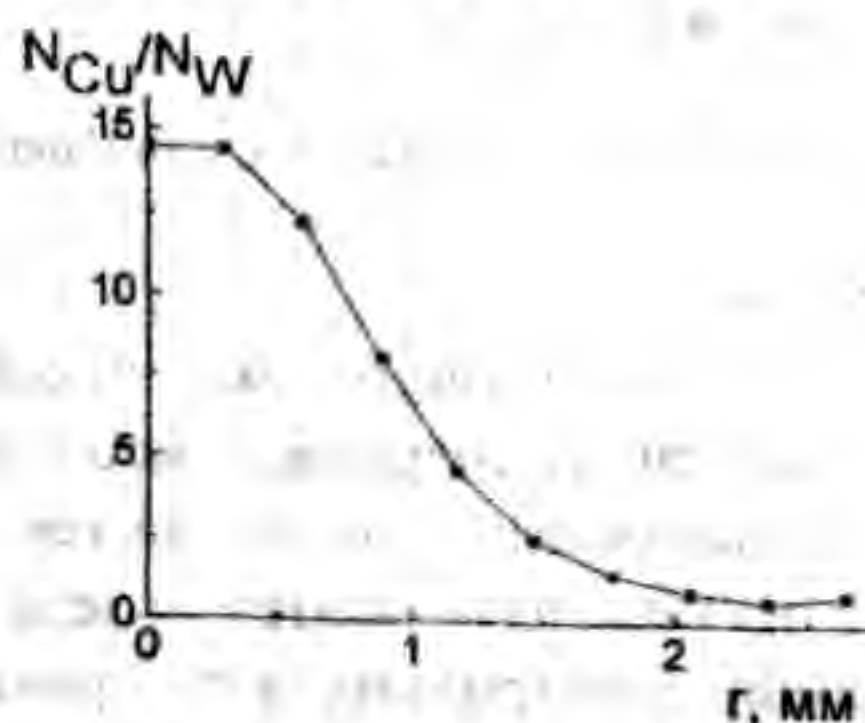
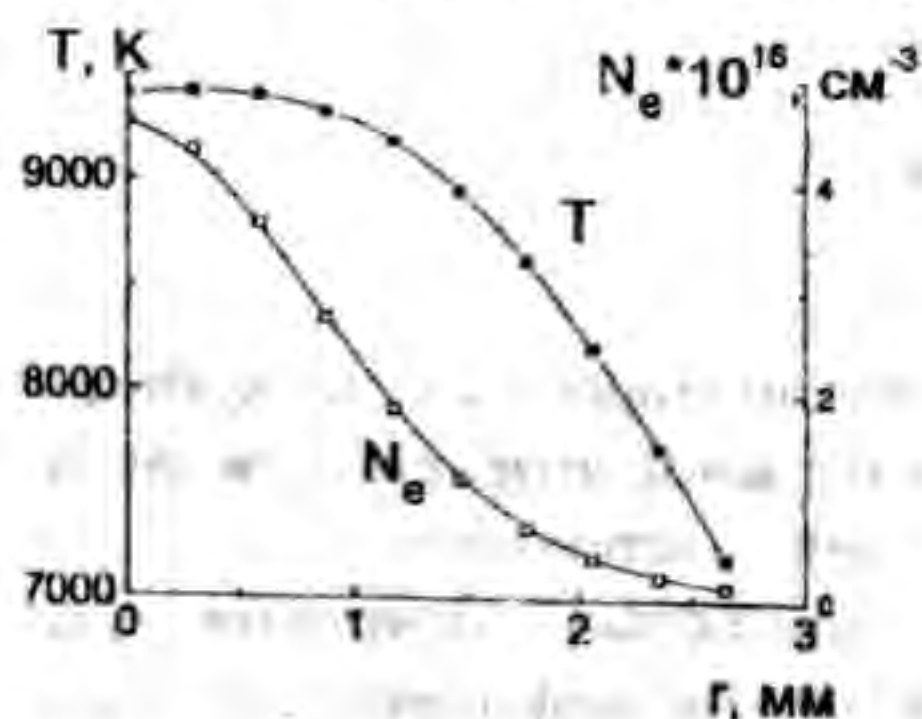


Рис.1. Радіальні профілі $T(r)$ та $N_e(r)$ плазми електричної дуги, що горить між Cu-W електродами ($l_{ak} = 4$ мм) Рис.2. Радіальний профіль відношення концентрацій атомів міді та вольфраму в плазмі дуги

Для розрахунку складу досліджуваної плазми у припущенні наявності стану ЛТР необхідно експериментально визначити ще один незалежний параметр. Таким параметром може бути відношення концентрацій атомів N_{Cu}/N_W , яке обчислювалось з радіальних профілів інтенсивностей спектральних ліній міді (CuI 521.8 нм) та вольфраму (WI 589.1 нм) у припущенні рівноважного заселення енергетичних рівнів (рис. 2).

Таким чином, для розрахунку рівноважного складу маємо повну систему рівнянь:

чотири рівняння Саха для міді, азоту, кисню та вольфраму;
два рівняння дисоціації для молекул азоту та кисню;

рівняння електронейтральності плазми;
рівняння ідеального газу;
співвідношення між кількістю частинок кисню та азоту у повітрі;
Результати розрахунків представлені на рис.3 та 4.

Вміст міді в плазмі електричної дуги (рис.4.) визначався із співвідношення $X_{Cu}, \% = (n_{Cu} + n_{Cu+}) * 100 / \sum n_i$. Аналогічно визначався вміст вольфраму.

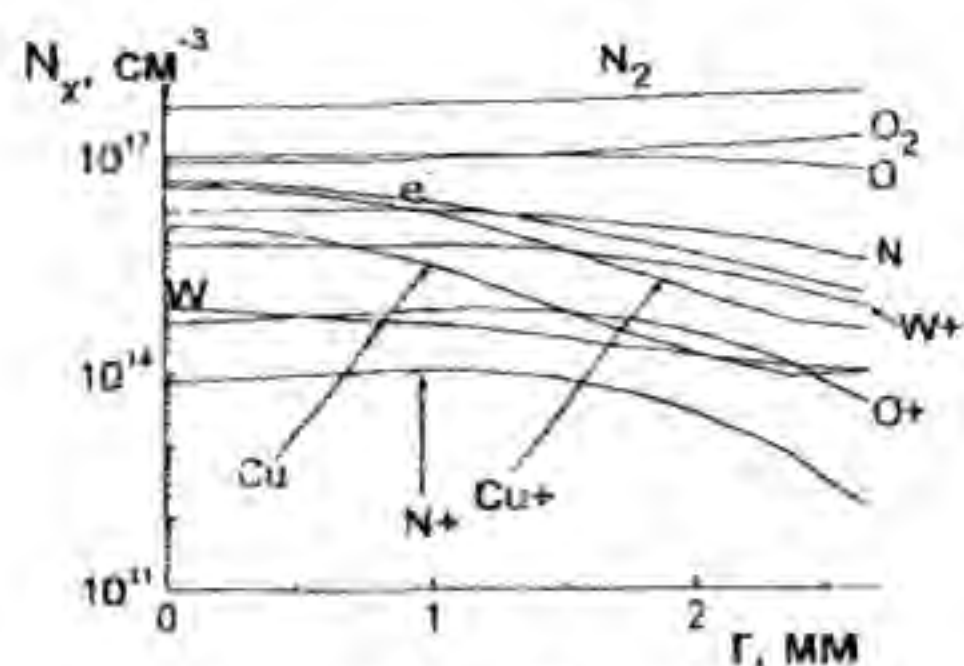


Рис.3. Радіальні профілі концентрацій частинок N_x у плазмі електродугового розряду між Cu-W електродами

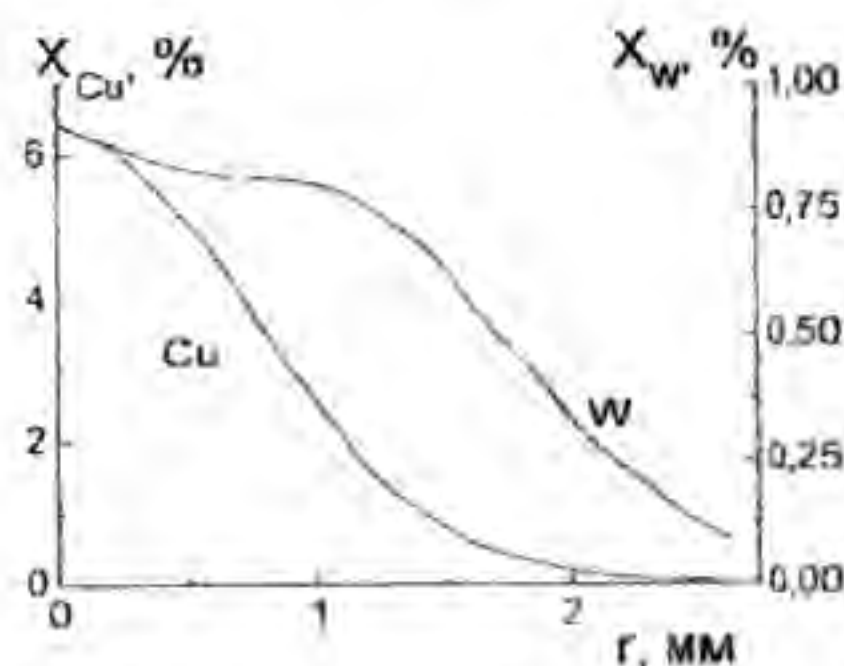


Рис.4. Радіальні профілі вмісту міді та вольфраму в плазмі електродугового розряду між Cu-W електродами

Аналогічні дослідження виконані у плазмі електродугового розряду між композиційними Cu-Mo електродами у тих же режимах.

На рис. 5 представлені, як приклад, радіальні профілі $T(r)$ та $N_e(r)$ в міжелектродному проміжку $l_{ak} = 4$ мм.

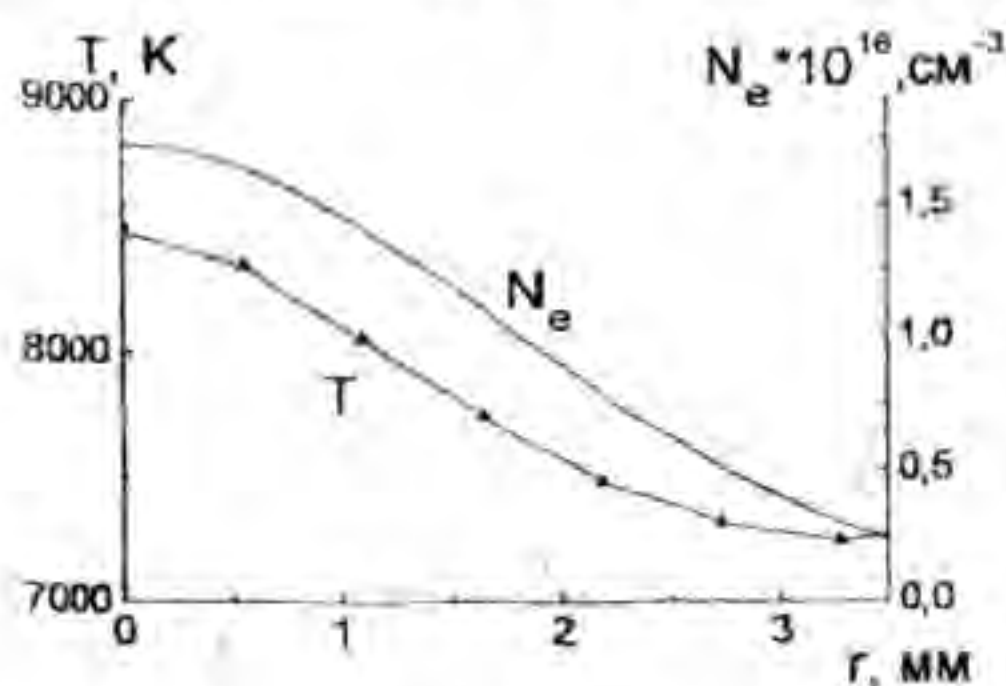


Рис.5. Радіальні профілі $T(r)$ та $N_e(r)$ плазми електричної дуги, що горить між Cu-Mo електродами ($l_{ak} = 4$ мм)

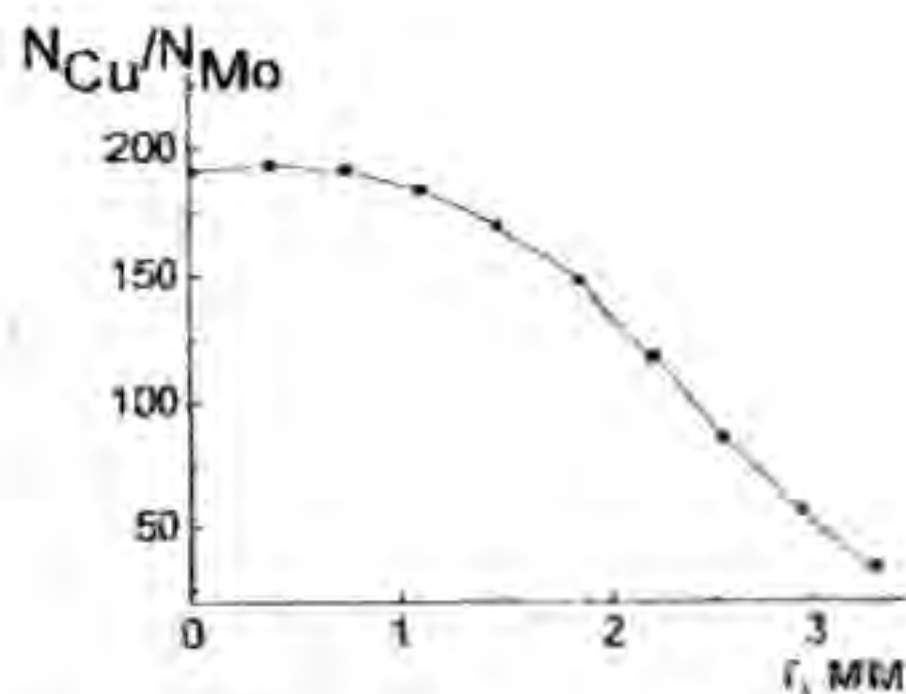


Рис.6. Радіальний профіль відношення концентрацій атомів міді та молібдену в плазмі дуги

Необхідне для розрахунку рівноважного складу досліджуваної плазми відношення концентрацій атомів N_{Cu}/N_{Mo} обчислювалось з радіальних профілів інтенсивностей спектральних ліній міді (CuI 521.8 нм) та молібдену (MoI 603.1 нм) у припущенні рівноважного заселення енерге-

тичних рівнів (рис. 6).

Результати розрахунків представлені на рис. 7 та 8.

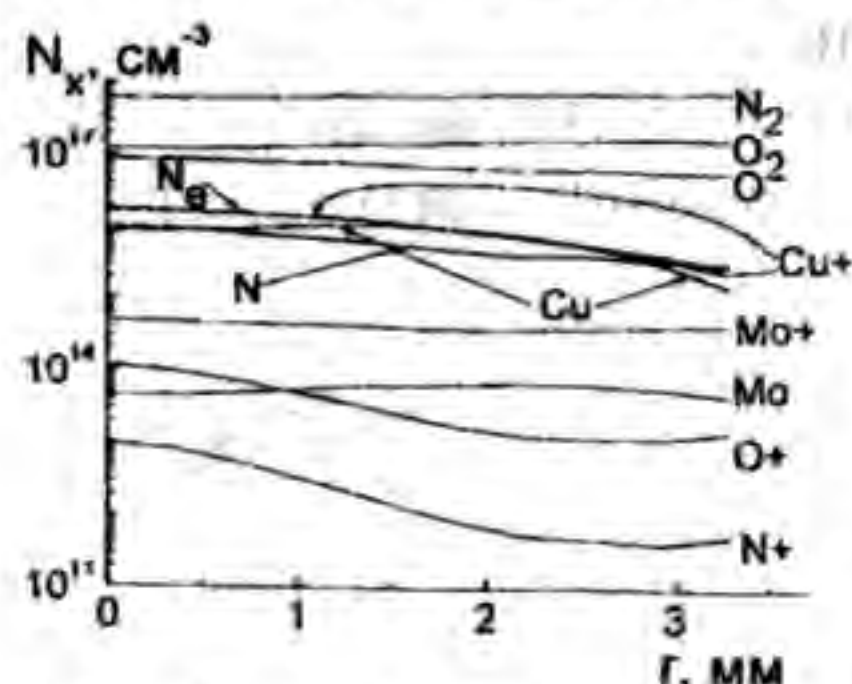


Рис. 7. Радіальні профілі концентрацій частинок N_x у плазмі електродугового розряду між Cu-Mo електродами

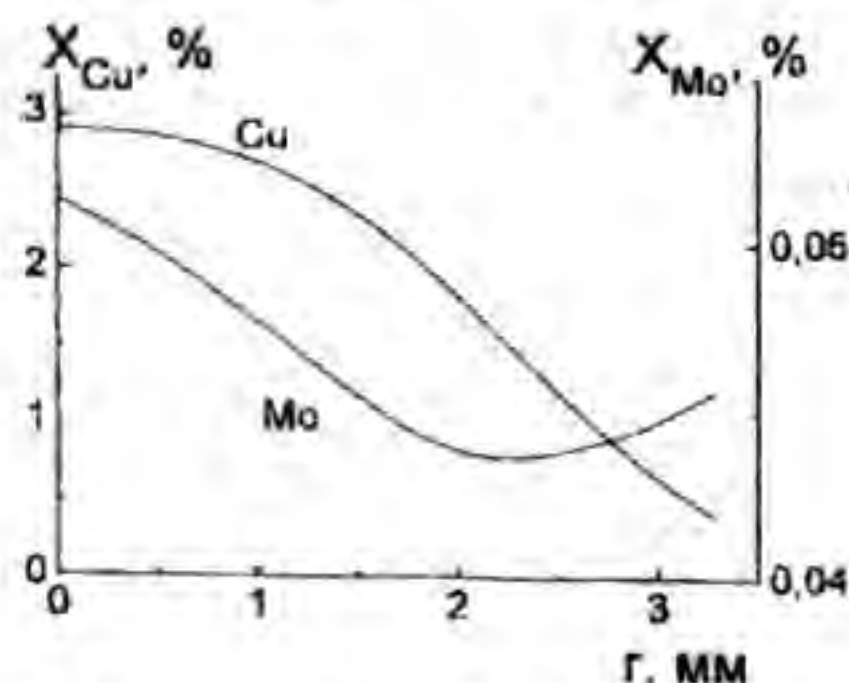


Рис. 8. Радіальні профілі вмісту міді та вольфраму в плазмі електродугового розряду між Cu-Mo електродами

Необхідно зауважити, що при однаковому вмісті металів в електродах, кількість парів міді у розрядному проміжку на два порядки перевищує вміст парів молибдену і на один порядок вміст вольфраму. Оскільки температури плавлення вольфраму та молибдену становлять, відповідно, 3380 та 2625 °C, можна було б сподіватись, що вміст вольфраму повинен бути меншим у порівнянні з молибденом. Відомо також, що при температурі приблизно 4800 °C тиск насичених парів вольфраму над нагрітою поверхню становить 100 мм.рт.ст., у той час, як тиск насичених парів молибдену – 760 мм.рт.ст [4]. Спостережувана в експерименті зворотна ситуація може бути зумовлена, на нашу думку, станом модифікованих розрядом поверхонь електродів. Для остаточного з'ясування такої поведінки металевих домішок у електродуговій плазмі необхідні додаткові металографічні дослідження вторинної структури на поверхні електродів.

Література

1. Veklich A.N., Osidach V.Ye. Spectroscopy of electric discharge plasma in metal vapours // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Physics (11).-2005.-№2.-P.229-231.
2. Konjevic R., Konjevic N. Stark broadening and shift of neutral copper spectral lines // Fizika.-1986.-V.18,-№4.-P.324-335.
3. Веклич А.М., Осідач В.Є. Визначення електронної концентрації в плазмі електродугового розряду // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки.-2004.-№2.-С.428-435.
4. Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат.-1976.-1008с.

Надійшла до редакції 25.11.2006

УДК 519.9

Артур І. Бенілов¹,
Валерій А. Скрищевський

**Удосконалення
вимірювання часу життя
люмінесценції методом**

Робота описує та порівнює різні методи вимірювання часу життя люмінесценції. Розглянуто часові та частотні методи оцінки часу життя. Запропоновано деякі модифікації класичних підходів до вимірювання. Модифіковані методи було вдало застосовано для виміру часу життя S-смуги спектру люмінесценції порушеного кремнію. Запропоновані схеми вимірювання спаду люмінесценції дозволяють створити чутливу та недорогу вимірювальну систему для вивчення кінетики люмінесценції нанокристалічних напівпровідників, що мають широкий динамічний діапазон часу життя люмінесценції.

Ключові слова: TCSPC, люмінесценція, час життя.

Arthur I. Benilov¹,
Valeri A. Skryshevsky

**Improvement over the
luminescence lifetime measurement
technique**

This work describes and compares different methods of photoluminescence lifetime or decay time estimation. Time domain and frequency domain methods of lifetime estimation are examined. Several adjustments to the classical measurement approaches are proposed. The modified methods were successfully implemented for porous silicon photoluminescence (PI) slow-band lifetime measurement. The proposed modified schemes of photoluminescence decay time measurement allow constructing of sensitive and low-cost measurement systems to study the PL kinetics of nanocrystalline semiconductors having wide dynamic range of PL lifetime.

Key Words: TCSPC, luminescence lifetime.

¹ E-mail: arthur@univ.kiev.ua

1. Introduction

Photoluminescence (PL) is a fundamental process in which a chemical compound absorbs a photon, thus transitioning to a higher electronic energy state, and then radiates a photon back out, returning to a lower energy state. PL is defined like an excess over heat radiation. This excess radiation has a finite duration, which significantly exceeds the period of light oscillations. This definition distinguishes luminescence from equilibrium heat radiation and from any other types of nonequilibrium radiations, which are practically noninertial (its duration comes to the period of light oscillations, i.e. 10^{-15} seconds). For the luminescence process the acts of absorption and radiation are divided by intermediate processes, that's why the radiation can exist for a long time after the excitation passed. The time of post-radiation can vary in wide range. For instance, fluorescence occurs during excitation, i.e. in nanosecond time range, while phosphorescence can last for hours or even days. Fast and slow

components of luminescence often exist simultaneously, for organic molecules and nanocrystalline semiconductors, for example. That's why the important guidance task is the accurate measurement of luminescence quantum efficiency and kinetics of such substances [1].

In present work we are focused on several techniques of PL lifetime estimation which allow constructing a sensing system with both PL intensity and lifetime detection. As an example, a porous silicon PL S-band was taken as an object of investigation.

2. Time domain measurement

The straight-forward approach of PL lifetime estimation is time domain measurement. After a fluorescent material excitation by a short-time pulse a photoluminescence response is detected during several close timestamps. Assuming the excitation pulse being a $\delta(t)$ -function, the luminescence response can be considered as pulse response of luminescent material. In this case the luminescence response read out can be written as a convolution of a real excitation signal with a pulse response function:

$$S(t) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t-t') \cdot I(t') dt' \quad (1)$$

Where $E(t)$ is an excitation pulse function, $I(t)$ is a luminescent material pulse response function as a convolution kernel, $S(t)$ – photoluminescence signal detected.

2.1. Time correlated single photon counting

The time correlated single photon counting (TCSPC) [2] is known to be most accurate and sensitive technique of luminescence decay estimation. It allows PL response signal sampling even in picoseconds scale but takes too much time of integration to be implemented in real-time measurement systems. The TCSPC is based on single photon capturing after the excitation pulse passed and measuring the time between the excitation pulse and photon appearance. As far as the probability of photon capturing at time t is directly related with photoluminescence intensity in this time $S(t)$, the perfect reconstruction of photoluminescence emitting signal is possible by gathering of statistics on emitted photons captured. The figure 1 depicts the basic TCSPC implementation scheme. The 'start' signal triggers excitation source and also launches high-frequency oscillator for time measurement. The oscillator is stopped by 'photon captured' signal. Thus, the number of oscillations can be directly converted to the time passed between 'start' and 'stop' signal by using, for example, a simple counter.

Concerning the PSi S-band decay the PCSPC can be implemented as well. The only problem is that it takes too much time for decay curve reconstruction. For example, the total PL extinction time of PSi S-band is near $200\ \mu\text{s}$ for room temperatures and can reach to several ms at low temperatures [3]. So the excitation pulses repetition rate can not exceed the value of several kHz (5 kHz for $200\ \mu\text{s}$ decay). For the precise lifetime estimation we should gather the statistics on several millions photons captured that leads to several tens minutes of integration to obtain the value of luminescence decay lifetime. This limitation definitely does not allow building a real-time sensing system which tends to monitor relatively fast processes causing luminescence decay time changes.

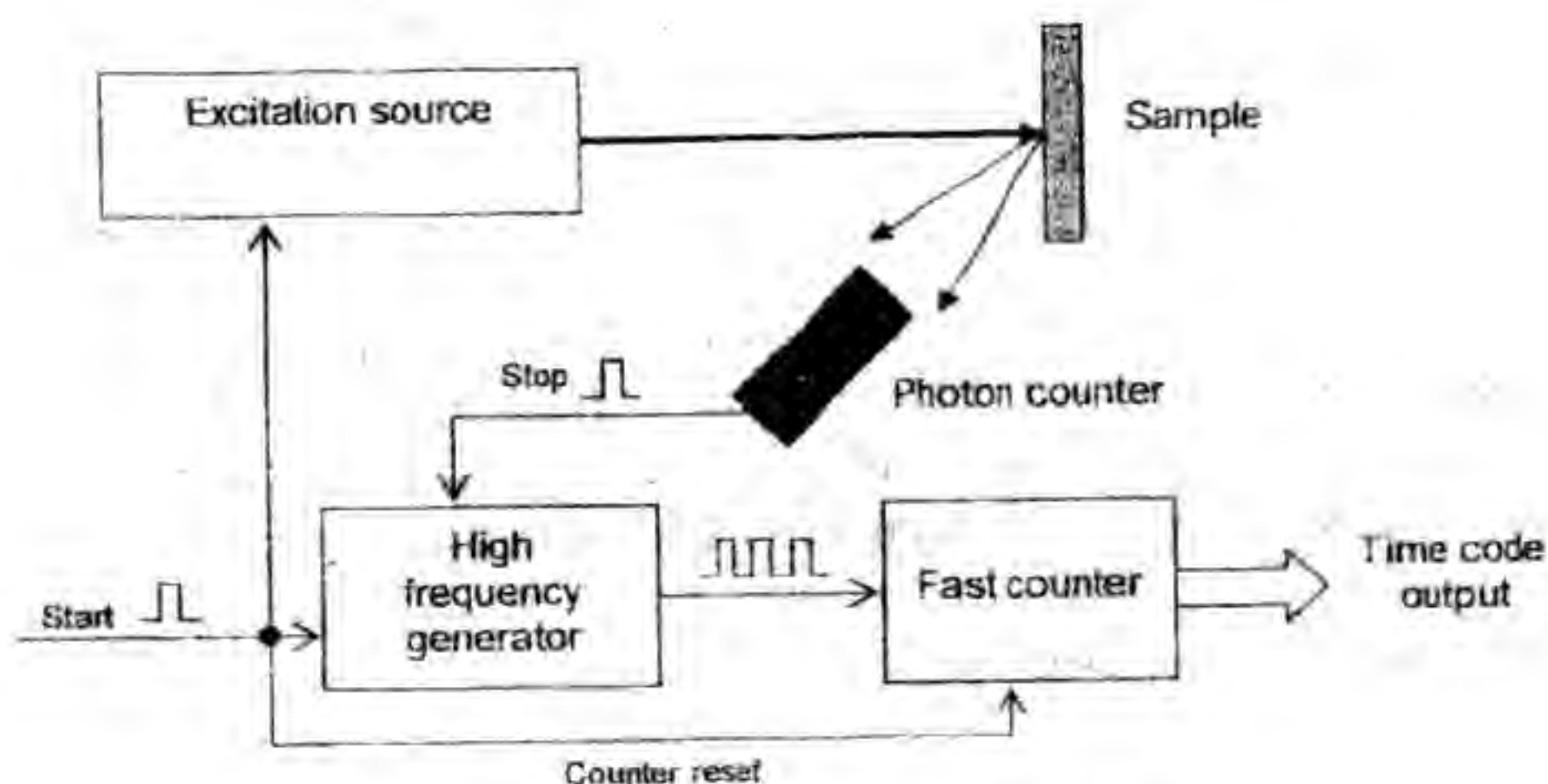


Figure 1. TCSPC implementation scheme

A slight modification of TCSPC technique can be proposed that allows bypassing the limitation of such a long integration time.

2.2. Multiple photons counting

In TCSPC we do not actually count photons, but pulses coming from the high frequency oscillator. The photon detected cause the oscillator to stop and the counter holds the number of time slices Δt passed between the start pulse and photon detection.

The first assumption we can claim is that one, that there is no reason to stop photon counting after the first photon capturing is detected. In this case we should really count photons coming from the sample. This allows capture all photons coming from the excited sample and thus obtain a reliable decay curve with less excitation pulses repetitions. In such a manner, the lifetime estimation for long decay time luminescent materials can be reduced to the value of minutes. The modified scheme is presented on figure 2.

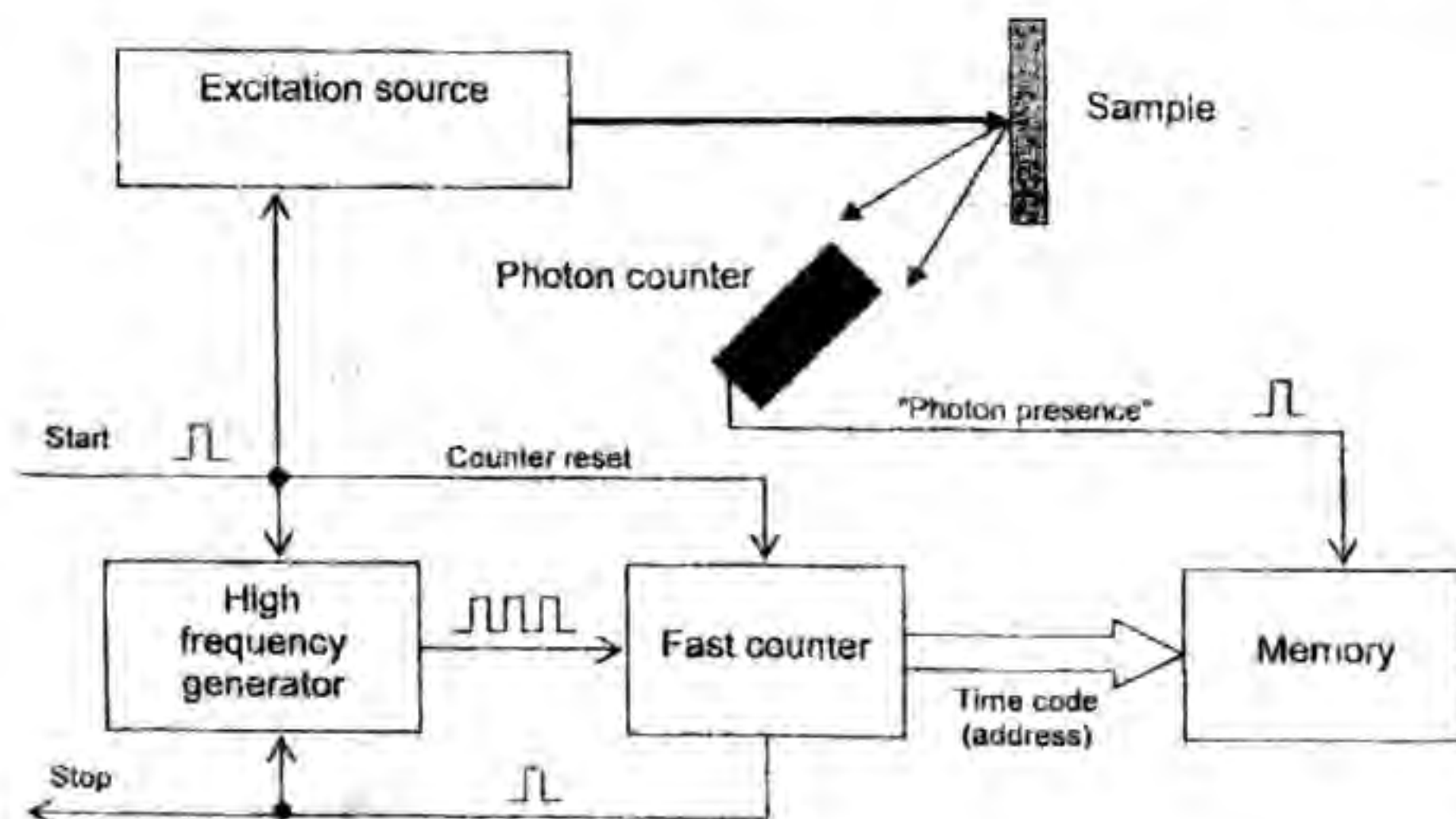


Figure 2. Multiple photons counting implementation scheme

For the scheme presented, after a single excitation pulse passed and counting is finished, the memory will hold a set of logical values, each element of which will answer the question whether the photon was detected during corresponding time slice or not. Figure 3 represents the content of the memory after a single excitation. Obviously, integration over a several excitations allows reconstructing a PL decay waveform.

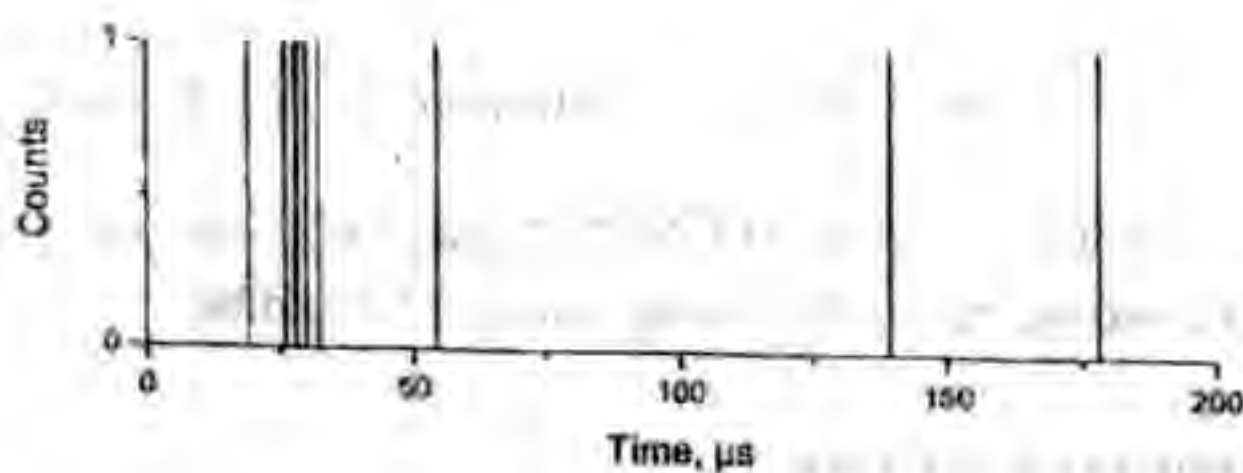


Figure 3. Photons detected after a single excitation pulse (9 photons detected within 200 μ s)

It's clear that the scheme represented on figure 2 can achieve the reliable decay waveform reconstruction much faster as far as it count all photons came after the excitation pulse but not the only first one like in TCSPC technique. However the high frequency counting is still required. This forces to use a high frequency generator and counter to count the memory address as well as a roomy and very fast memory bank. Decreasing the counting frequency will finally lead to the situation when during a single time slice we will receive two or more pulses from photon counter. If several photons pulses will be counted as a single one, it will not be possible to reconstruct the PL decay signal waveform,

and the estimated lifetime value will be rather far from the real one. So, using a separate counter for photon pulses can be proposed to solve this problem. The modified scheme of multiple photons counter is presented on figure 4.

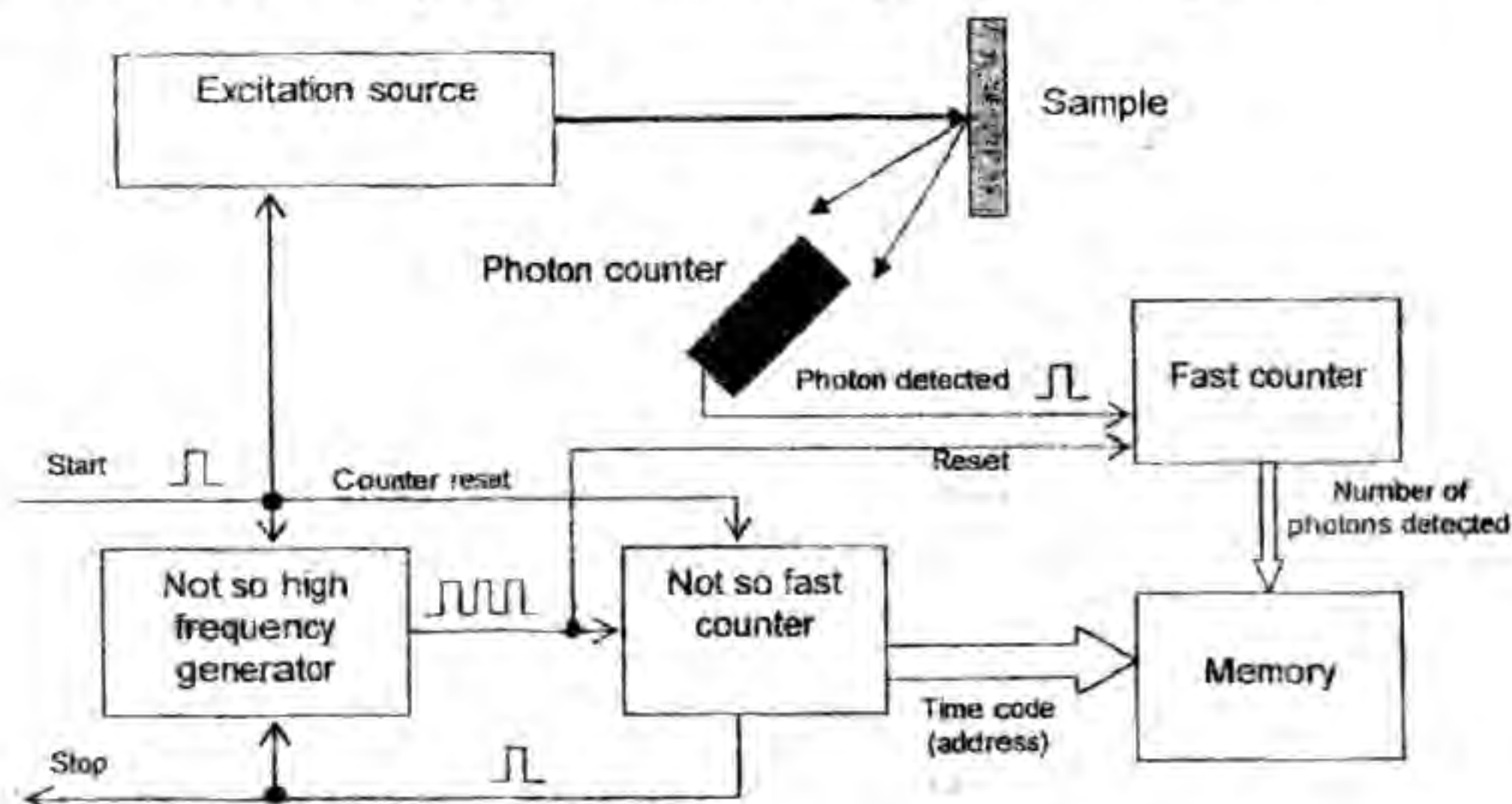


Figure 4. Multiple photons counting with a wide time slot

The scheme represented on figure 4 works very well for PSi luminescence detection as far as it is rather durable process. For the microseconds decay scale there is no need to perform the counting with very short (ns) time slots as for fast decay fluorophores, so even a microsecond time slice is quite enough. With such a wide time slot, the situation with several photons detected during a single time slot becomes very probable. The figure 5 represents the memory content after a single excitation pulse passed and further counting with 200 ns time slice. As one can see, even the situation with 4 photons came during these 200 ns is quite possible for high PL intensities.

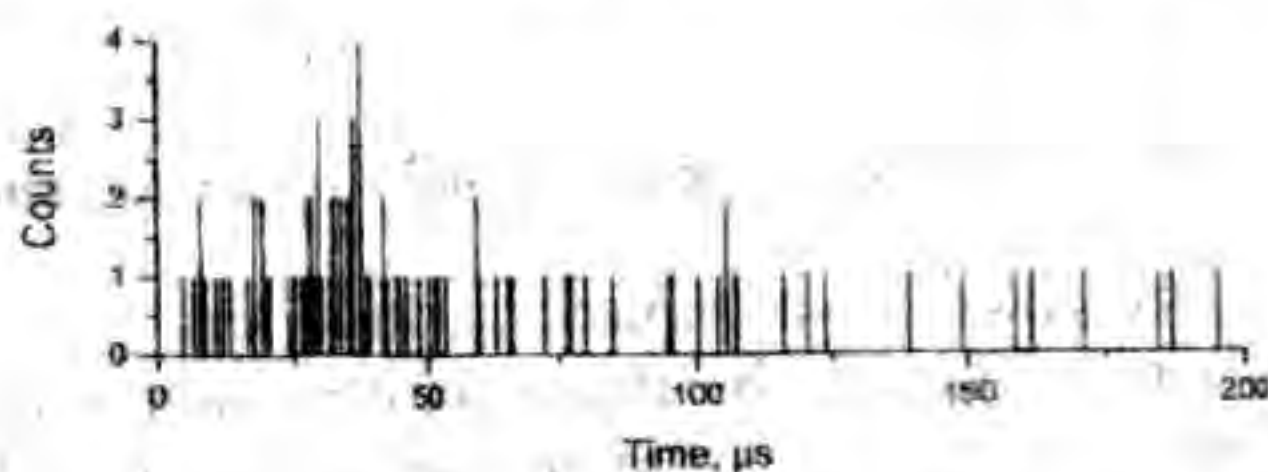


Figure 5. Photons detected after a single excitation pulse, 200 ns time slot used.

The PL decay estimation techniques based on photon counting allows near perfect decay waveform reconstruction. In this case the difference between the measured decay curve and the real one can only be caused by a non-ideal (not a $\delta(t)$ -function) excitation pulse (formula 1). But knowing the shape of the excitation pulse $E(t)$, the inverse deconvolution can be performed to obtain the

real decay waveform. The measurement scheme proposed like that on the figure 4 permits to obtain the decay curve of PL signal in several seconds. This is quite acceptable for PL monitoring of fast processes and constructing of real-time measurement system.

2.3. Analog detection of photoluminescence

Photon counting is a very sensible method of PL signal detection. However it works well only for rather low intensities. High PL intensity will cause a large quantity of photons being captured by photomultiplier detector which will not be passed by the photon counter discriminator [4]. This will cause the effect of decreasing of signal obtained while increasing of the actual PL intensity. Additional optical filters can be used to suppress high PL signal coming to the photon detector. The other way is to use not so sensitive detectors as photon counters to fetch the PL signal.

The PL feedback of several materials usually is rather intense that allows using less accurate detectors like simple photomultiplier tubes with analog output or fast photodiodes. In this case an efficient PL decay signal can be obtained even with a single excitation pulse. The figure 6 represents a PL decay measurement implementation using an analog detector.

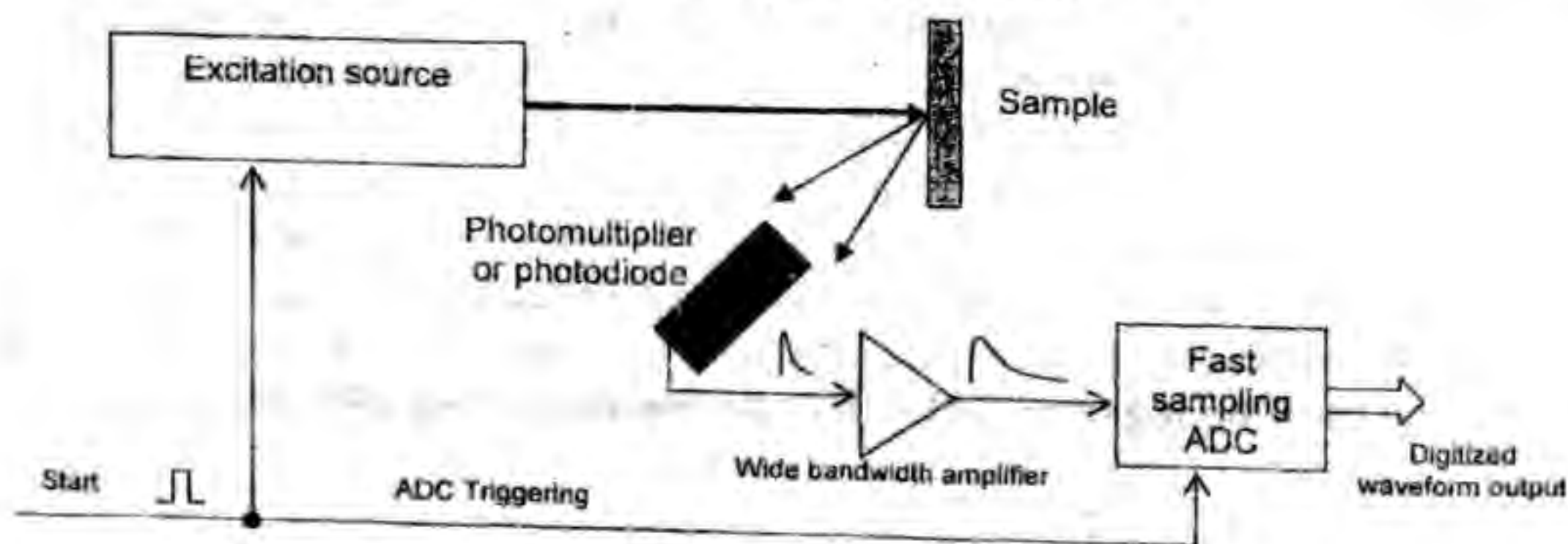


Figure 6. PL decay measurement with analog detector

For the presented measurement method the perfect decay waveform reconstruction is possible only by deconvolution of the output signal with an amplifier and excitation source pulse response functions. It should be noticed that the influence of analog part of this detection scheme can change the decay waveform dramatically, so for the precise lifetime estimation the further deconvolution operation is required. To make a deconvolution operation possible an amplifier with a wide bandwidth (several hundreds MHz for microsecond decay detection) should be used as well as a fast sampling ADC (with 1 MHz sample rate and higher, depending on PL decay time).

We can avoid using high frequency devices by passing from the time domain to the frequency domain measurement.

3. Frequency domain measurement

One can consider a luminescent sample as a system which takes an excitation signal on input and produces a PL response signal on output. By passing a $\delta(t)$ -function to the input of this system we will get a pulse response (i.e. a PL decay signal) on the output. In this case the luminescent sample behavior is described by the pulse response function defined in the time domain. But the same behavior can be described by the system's frequency response in the frequency domain. A frequency response is related with a pulse response by the Fourier transformation:

$$I(\omega) = \int_0^{\infty} I(t) \cdot e^{j\omega t} dt \quad (2)$$

Where $I(t)$ is a system pulse response, $I(\omega)$ is a system frequency response, $j = \sqrt{-1}$. Assume that PL decay can be well described by a single exponential decay (in general case this is not true, for example, PSi samples often manifest multiexponential PL decay [5]):

$$I(t) = I_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3)$$

In this case $I(\omega)$ can be calculated as following:

$$I(\omega) = \int_0^{\infty} I_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot e^{j\omega t} dt = \frac{I_0}{\frac{1}{\tau} - j\omega} \quad (4)$$

The further transformation and normalizing condition $I(\omega = 0) = 1$ will give:

$$|I(\omega)| = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2 \omega^2}}, \quad \phi(\omega) = \arctan(\frac{1}{\tau\omega}) \quad (5)$$

Where $|I(\omega)|$ is a frequency response amplitude, $\phi(\omega)$ is its corresponding phase. Functions $|I(\omega)|$ and $\phi(\omega)$ define the frequency characteristics of the luminescent system. The dependence of $|I(\omega)|$ for different values of PL lifetime τ is represented on the figure 7.

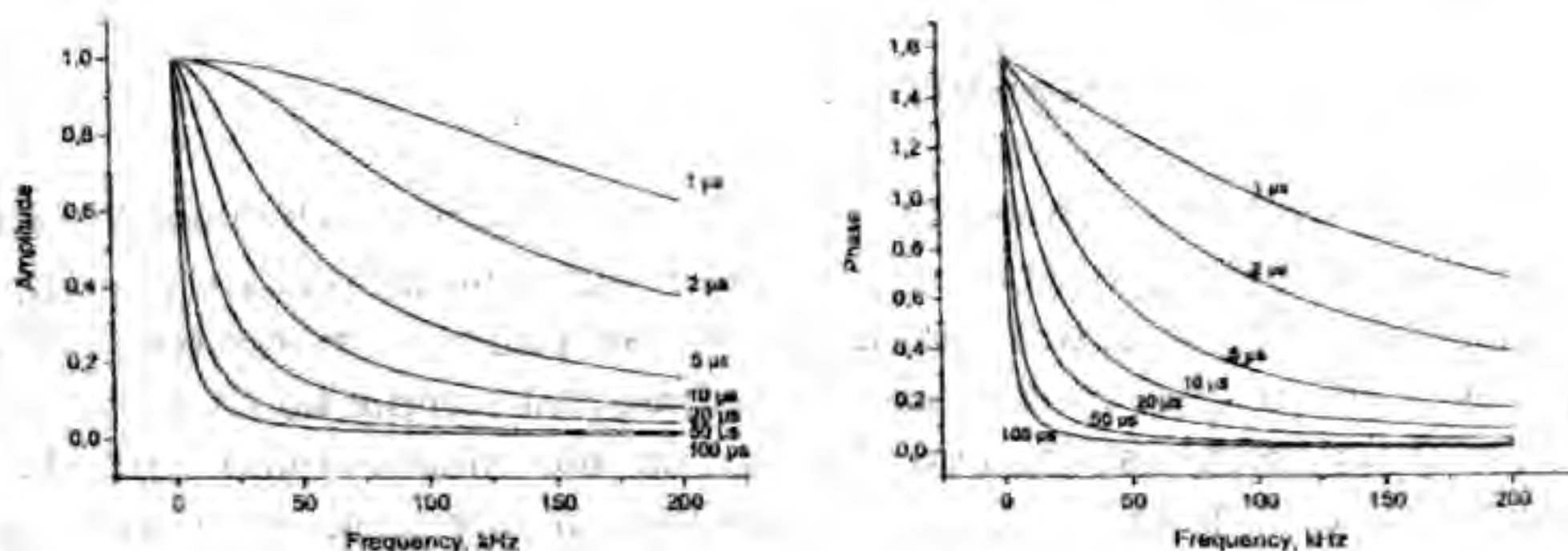


Figure 7. Frequency response amplitude (left) and phase (right) calculated for different PL decay lifetimes

The curve $|I(\omega)|$ can easily be obtained experimentally by modulating the PL excitation light source. The time domain PL decay $I(t)$ can further be calculated as an inverse Fourier transformation of $|I(\omega)|$. In the particular case of porous silicon S-band decay which is rather slow (several tens microseconds), the excitation modulation frequencies can be limited by several hundreds of kHz. With such low modulation frequencies a simple electrically modulated blue LED can be used as the PL excitation source. The implementation of the frequency domain PL decay measurement scheme is presented on the figure 8. This method is very sensitive with a high SNR. The PL decay can be easily obtained even in the condition of background illumination, as far as selective amplifier is used to pass the modulated signal only.

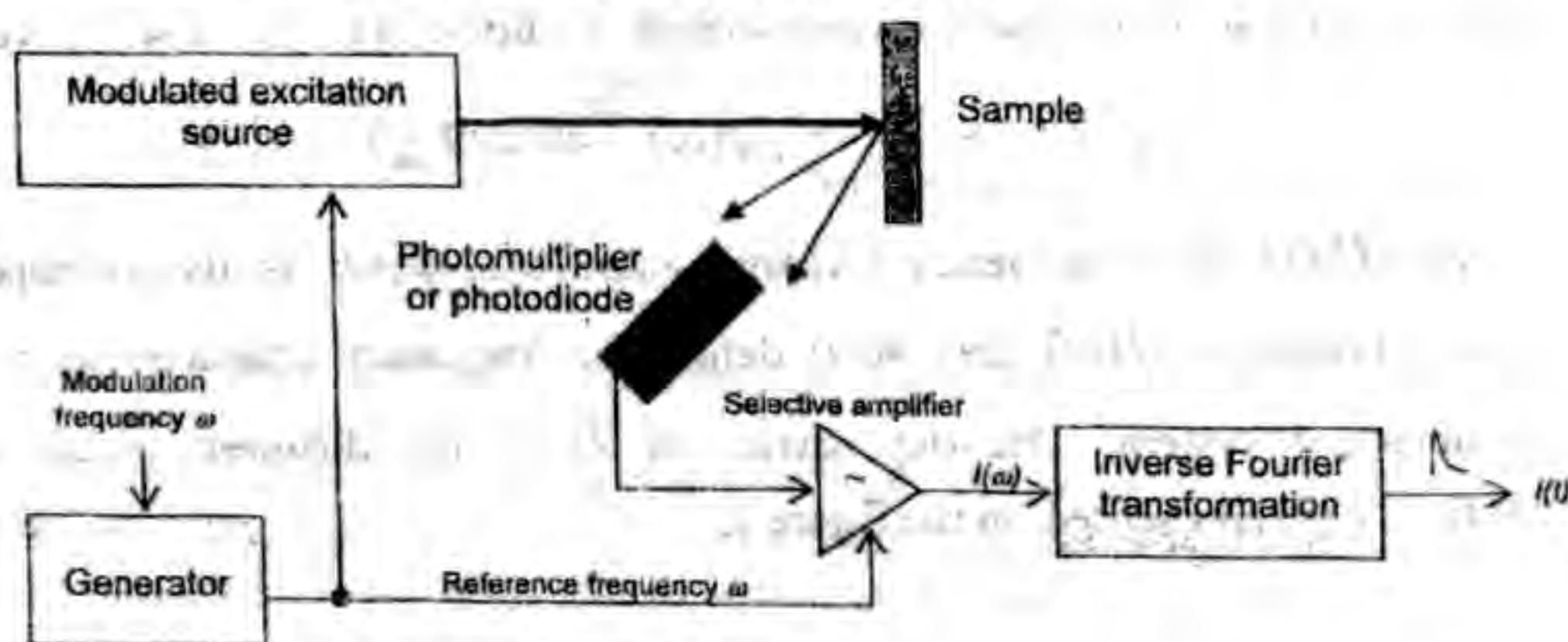


Figure 8. Frequency domain PL decay measurement technique scheme

The frequency domain PL decay measurement scheme implemented allows theoretically perfect decay waveform reconstruction. This can be accomplished with a wide frequency range data gathering to perform the inverse Fourier transformation as accurate as possible. On practice the perfect PL decay curve reconstruction is not required to estimate the decay lifetime. Several

frequencies will be quite enough to make a decision. The figure 9 presents the amplitude of an experimental porous silicon sample PL frequency response measured using six modulation frequencies.

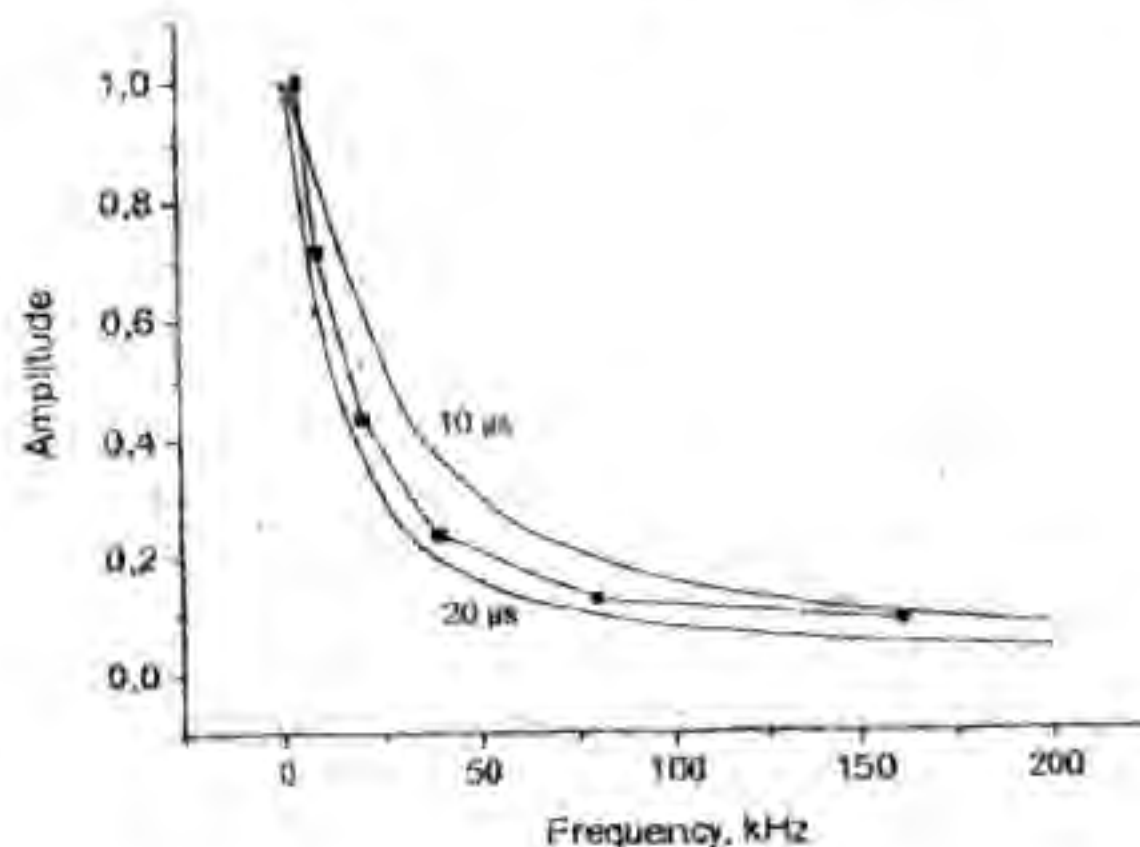


Figure 9. Porous silicon sample PL decay ($\tau \approx 15 \mu\text{s}$) measured in frequency domain (line with markers) between two theoretically calculated curves for $\tau = 10 \mu\text{s}$ and $\tau = 20 \mu\text{s}$

The value of lifetime can be well estimated by the experimental data fitting according to the formula 5. On the par with amplitude measurement, which is dependent on PL lifetime τ as well as PL intensity I_0 (if we do not perform normalization) the phase measurement can be as well performed. As one can see the phase is dependent only on decay lifetime τ .

4. Conclusion

The TCSPC method is a very powerful technique of PL decay waveform estimation. However it is not quite acceptable for real-time PL measurement systems that require wide dynamic range (in the sense of PL intensity and decay time) and fast data estimation. Several modifications over classical TCSPC technique are proposed to implement photon counting to obtain slow (nanosecond-microsecond scale) PL decay curves during a reasonable time of measurement. Frequency domain measurement proposed seems to be more preferable in those cases when PL decay waveform is not needed (but just a decay time value).

All the PL decay measurement methods described were tested on porous silicon samples to measure its S-band decay. The advantages and drawbacks of each method we tried to summarize in the following table, which tends to help to choose the best technique in final measuring system realization.

Measurement technique	Complexity of realization	Time performance	PL intensity dynamic range	Perfect decay signal reconstruction
<i>Time correlated single photon counting</i>	complex	very slow	low intensities, narrow dynamic range	possible
<i>Multiple photons counting</i>	complex	slow	low intensities, narrow dynamic range	possible
<i>Multiple photons counting with a wide time slot</i>	medium complexity	slow	low intensities, narrow dynamic range	possible
<i>PL analog detection</i>	simple	very fast	high intensities, wide dynamic range	with deconvolution
<i>Frequency domain measurement</i>	medium complexity	fast	low and high intensities, wide dynamic range	with inverse Fourier transformation

Table 1. PL decay methods characteristics comparison

As one can see, the photon counting based methods have rather low performance but they are indispensable for measuring low PL intensities. The analog detection method as well as frequency domain one is very fast and well applicable in real-time measurement systems but can't work with low PL intensities. The combination of several methods described can also be implemented in final measurement system to cover wide intensity ranges and decay times.

5. REFERENCES

1. Donald A. McQuarrie, John D. Simon, Physical Chemistry, a molecular approach, University Science Books, 1997.
2. D. V. O'Connor, D. Phillips, Time Correlated Single Photon Counting, Academic Press, London, 1984
3. Z. Lukasiak, P. Dalasinski, and W. Bala, Kinetics of photoluminescence of porous silicon studied by photo-luminescence excitation spectroscopy and time-resolved spectroscopy, Opto-electronics review 11(2), pp. 113-117, 2003
4. Photomultiplier tubes handbook by Hamamatsu Photonics, 1994
5. X. Zianni, A. G. Nassiopoulou, Multi-component behavior of the photoluminescence lifetime in porous Si, phys. stat. sol. (a), vol. 197, issue 2, pp. 311-315, 2003

Надійшла до редакції xx.xx.2006

УДК 621.272.832.01

Юрій О. Гайдай, Володимир С. Сидоренко, Олег В. Сінкевич¹

Методи розрахунку задач ближньопольової НВЧ мікроскопії

Представлено огляд основних чисельних методів що найчастіше використовуються для вирішення задач прикладної електродинаміки. На прикладі ближньопольової мікроскопії розглянуто їх особливості переваги та недоліки.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, ближньопольовий НВЧ мікроскоп.

¹ e-mail: osinkevich@ua.ru

Yuriy O. Gayday, Volodymyr V. Sidorenko, Oleg V. Sinkevich¹

Calculation methods of near-field microwave microscopy problems

Main concepts of some computer modeling methods are reviewed. Using near-field microwave microscopy as a sample we discuss some features of these methods, their advantages and disadvantages.

Key Words: computer modeling, near-field microwave microscopy.

Ближньопольова мікрохвильова мікроскопія [1,2] відкрила нові експериментальні можливості для дослідження діелектриків. Спектр об'єктів, що досліджуються за допомогою ближньопольової мікроскопії постійно розширюється: від діелектричних плівок та нових матеріалів до надпровідників.

Принцип роботи мікрохвильових ближньопольових мікроскопів заснований на зміні параметрів зонда мікроскопа при внесенні в його ближнє поле об'єкта дослідження. Для теоретичного опису цього явища застосовують, як правило, теорію збурень. Вона дозволяє отримати зв'язок між зміною параметрів резонатора та матеріальними параметрами об'єкта:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = - \frac{\int_V (\vec{E}_0^* \Delta\epsilon \vec{E} + \vec{H}_0^* \Delta\mu \vec{H}) dV}{\int_V (\epsilon_0 \vec{E}_0^* \vec{E}_0 + \mu_0 \vec{H}_0^* \vec{H}_0) dV} = - \frac{\int_V (\vec{E}_0^* \Delta\epsilon \vec{E} + \vec{H}_0^* \Delta\mu \vec{H}) dV}{4W_0}, \quad (1)$$

де $W = \frac{1}{4} (\int_V \epsilon_0 \vec{E}_0^* \vec{E}_0 dV + \int_V \mu_0 \vec{H}_0^* \vec{H}_0 dV)$ – енергія, що запасена в незбуреному резонаторі, $\vec{E}_0, \vec{H}_0$ – незбурені поля, $\vec{E}$ та $\vec{H}$ – поля відповідної збуреної задачі.

Враховуючи те, що розміри зонда і об'єкта набагато менші, ніж робоча довжина хвилі, застосовується квазістатичне наближення. Крім того, на кінчику голки зонда $\lambda/4$ резонатора має місце максимум електричного і мінімум магнітного поля, тому магнітні властивості зразка практично не впливають на зміну параметрів зонда. Таким чином, достатньо розрахувати електростатичне поле, що створюється зондом у зразку. Це і буде поле

збуреної задачі в (1). Аналогічно розраховується і поле незбуреної задачі, а $\vec{H}$ та $\vec{H}_0$ вважаються такими, що дорівнюють нулю.

Навіть з урахуванням наведених спрощень, аналітичні методи є малоефективними для відповідних розрахунків і дозволяють отримати прийнятні результати лише в небагатьох випадках [3].

Описані далі методи застосовуються для вирішення широкого класу задач. Наприклад, методи граничних та кінцевих елементів широко застосовуються в акустиці, гідродинаміці та навіть при розрахунку будівельних конструкцій. У роботі пропонується огляд цих методик саме з точки зору розрахунку задач ближньопольової мікроскопії.

В кінцево-різницевому методі (FD) використовується дискретне представлення рівняння Лапласа $\Delta\varphi = 0$ і відповідних граничних умов. Для тривимірного випадку:

$$\frac{\varphi_{i-1,j,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i+1,j,k}}{h^2} + \frac{\varphi_{i,j-1,k} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j+1,k}}{h^2} + \frac{\varphi_{i,j,k-1} - 2\varphi_{i,j,k} + \varphi_{i,j,k+1}}{h^2} = 0,$$

де h – крок сітки. Записавши дане рівняння для кожного вузла сітки та використавши метод релаксації для вирішення отриманої системи рівнянь, можна побачити, що ітераційна процедура знаходження розв'язку зводиться до усереднення потенціалу по сусідніх точках.

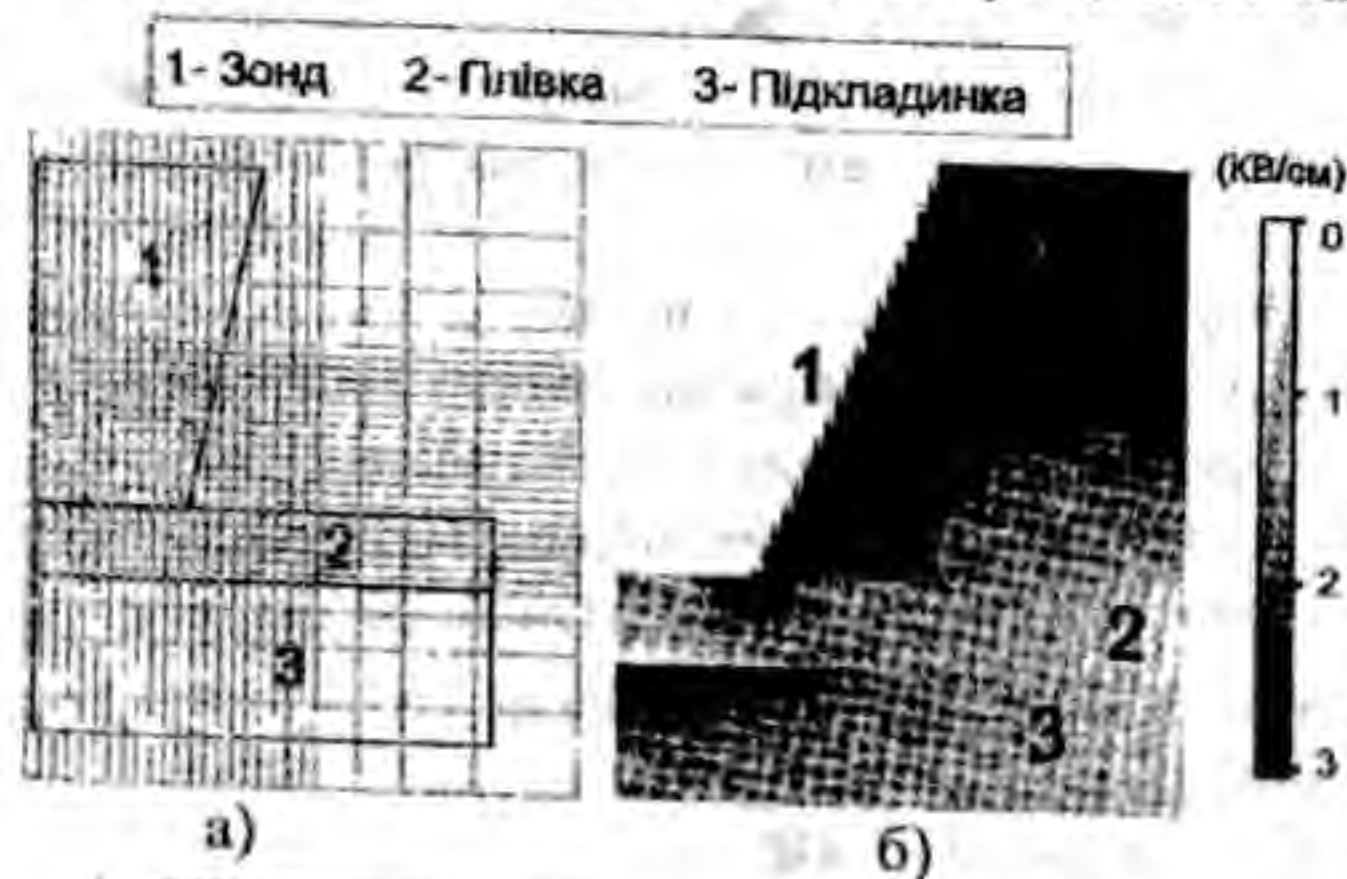


Рис. 1. а) Нерівномірна FD сітка для осесиметричної моделі б) розподіл амплітуди електричного поля.



Рис. 2. а) FE сітка для осесиметричної моделі б) розподіл амплітуди електричного поля.

Оскільки на границі області потенціал, як правило, вважають таким, що дорівнює нулю, то границя є фактично екрануючою поверхнею. Щоб позбавитись негативного впливу такої "екрануючої поверхні", її часто віддаляють від області, що розраховується, використанням змінного кроку сітки. Для випадку нерівномірної сітки (Рис.1) дискретне рівняння Лапласа матиме наступний вигляд:

$$\frac{(\varphi_{i-1,j,k} - \varphi_{i,j,k})h_{i+1} - (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i+1,j,k})h_i}{h_i^2 h_{i+1}} + \frac{(\varphi_{i,j-1,k} - \varphi_{i,j,k})h_{j+1} - (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j+1,k})h_j}{h_j^2 h_{j+1}} + \\ + \frac{(\varphi_{i,j,k-1} - \varphi_{i,j,k})h_{k+1} - (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j,k+1})h_k}{h_k^2 h_{k+1}} = 0;$$

Існують також інші кінцево-різницеві представлення рівняння Лапласа, які в деяких випадках забезпечують кращу точність розрахунків.

Метод кінцевих елементів (ФЕ) використовує розбиття області, що розраховується, на тетраедри, всередині яких потенціал змінюється лінійно. Вершини тетраедра (трикутника у двовимірному випадку) (Рис. 2) є вузлами розрахункової сітки. Принцип дії методу полягає у мінімізації електростатичної енергії елемента сітки.

Сумарна енергія тетраедрів, що оточують n -тий вузол:

$$W = \sum_{i=1}^M W^i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \varepsilon_i \int \left[\left(\frac{dV_i(x,y,z)}{dx} \right)^2 + \left(\frac{dV_i(x,y,z)}{dy} \right)^2 + \left(\frac{dV_i(x,y,z)}{dz} \right)^2 \right] dv, \quad (3)$$

де $V_i(x,y,z)$ – потенціал в i -тому субдомени, ε_i – його діелектрична проникність. Тоді потенціал n -того вузла знаходиться з умови $\frac{dW}{dV_n} = 0$. (4)

V_n (потенціал у вузлі) входить до (3), оскільки потенціал усередині тетраедра $V_i(x,y,z) = a'_i + a'_1 x + a'_2 y + a'_3 z$, а коефіцієнти a'_j можна виразити через V_n . Записавши таким чином рівняння для кожного вузла сітки, отримаємо систему з N невідомими (де N – кількість вузлів сітки). Враховуючи специфічний вигляд матриці цієї системи, її вирішують, як правило, ітераційними методами. Як і в кінцево-різницевому методі, для того, щоб позбавитись впливу границь області, їх віддаляють на значну відстань.

Окремою проблемою в ФЕ методі є задача триангуляції – геометричне розбиття однорідних областей задачі на трикутні субдомени, тобто генерація сітки для тої чи іншої моделі. Існує багато алгоритмів для вирішення цієї задачі: sweep-line метод, двохкроковий метод та інші.

Перевагою методу граничних елементів (БЕМ) є зменшення розмірності задачі (оскільки дискретизації підлягають лише границі об'єктів) (Рис.3). Крім того, використання методу граничних елементів не викликає проблем при вирішенні зовнішніх задач.

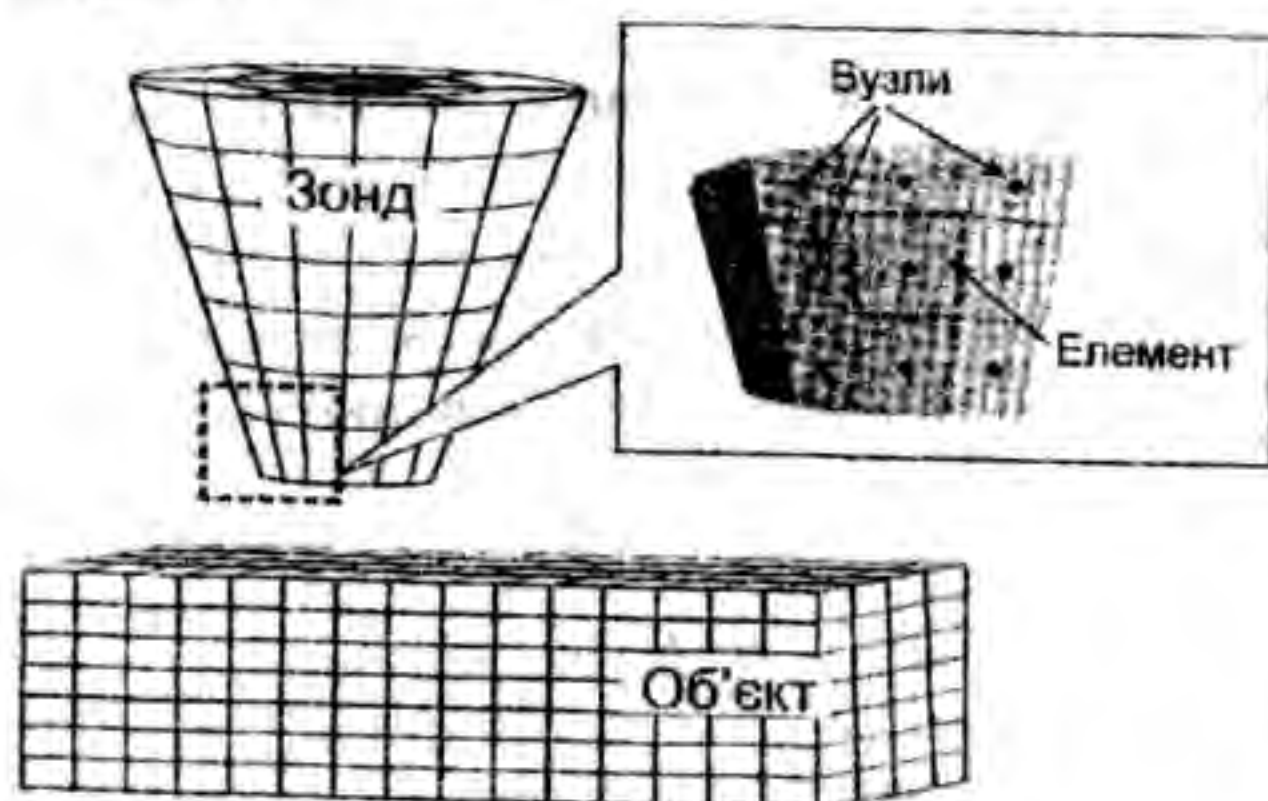


Рис. 3. ВЕМ сітка на прикладі задачі ближньопольової мікроскопії.



Рис. 4. Потенціал електричного поля зонда при наявності діелектрика. ВЕ метод.

Як показано на Рис.3, границі об'єктів та границі між діелектриками з різним ϵ розбиваються на елементи. В кожному елементі виділяється вузлова точка, і для кожного елемента записується рівняння, що зв'язує значення потенціалу і його нормальних похідних у кожному вузлі. Після накладання граничних умов отримується система лінійних алгебраїчних рівнянь, розв'язавши яку можна отримати невідомі значення V_i та $\frac{dV_i}{dn}$.

Знаючи розподіл цих величин по границях, можна за допомогою чисельного інтегрування розрахувати потенціал у будь-якій точці.

В загальному випадку реалізація методу граничних елементів є досить складною. Більш детально ознайомитись з усіма особливостями методу можна в [5].

Кінцево-різницевий метод в часовій області (FDTD) набув поширення лише недавно, оскільки він є найбільш вимогливим до обчислювальних ресурсів. Однак, за рахунок безпосереднього використання рівнянь Максвелла, він дозволяє вирішувати широкий спектр електродинамічних задач. Для зменшення кількості розрахункових точок сітки для електричного та магнітного полів зміщені по відношенню один до одного в часі та просторі на половину кроку дискретизації по кожній із змінних. Кінцево-різницеві рівняння дозволяють визначити електричні і магнітні поля в даний момент часу при відомих їх значеннях у попередній момент часу, і при заданих початкових умовах обчислювальна процедура розгортає розв'язок у часі від початку відліку із заданим кроком. Найпростіша реалізація методу FDTD передбачає використання еквідистантної ортогональної сітки (Рис.5), проте існує можливість підвищення ефективності методу за рахунок застосування нерівномірної та/або неортогональних сіток.

На відміну від раніше описаних методів, при застосуванні FDTD відповідає необхідність використовувати теорію збурень. Частотні характеристики об'єкта дослідження (в нашому випадку – ближньопольового зонда) можуть бути отримані за допомогою дискретного перетворення Фур'є або шляхом задання квазі-гармонійного джерела і виконання розрахунків до виходу на встановлений режим (усі частоти, крім резонансних, згаснуть).

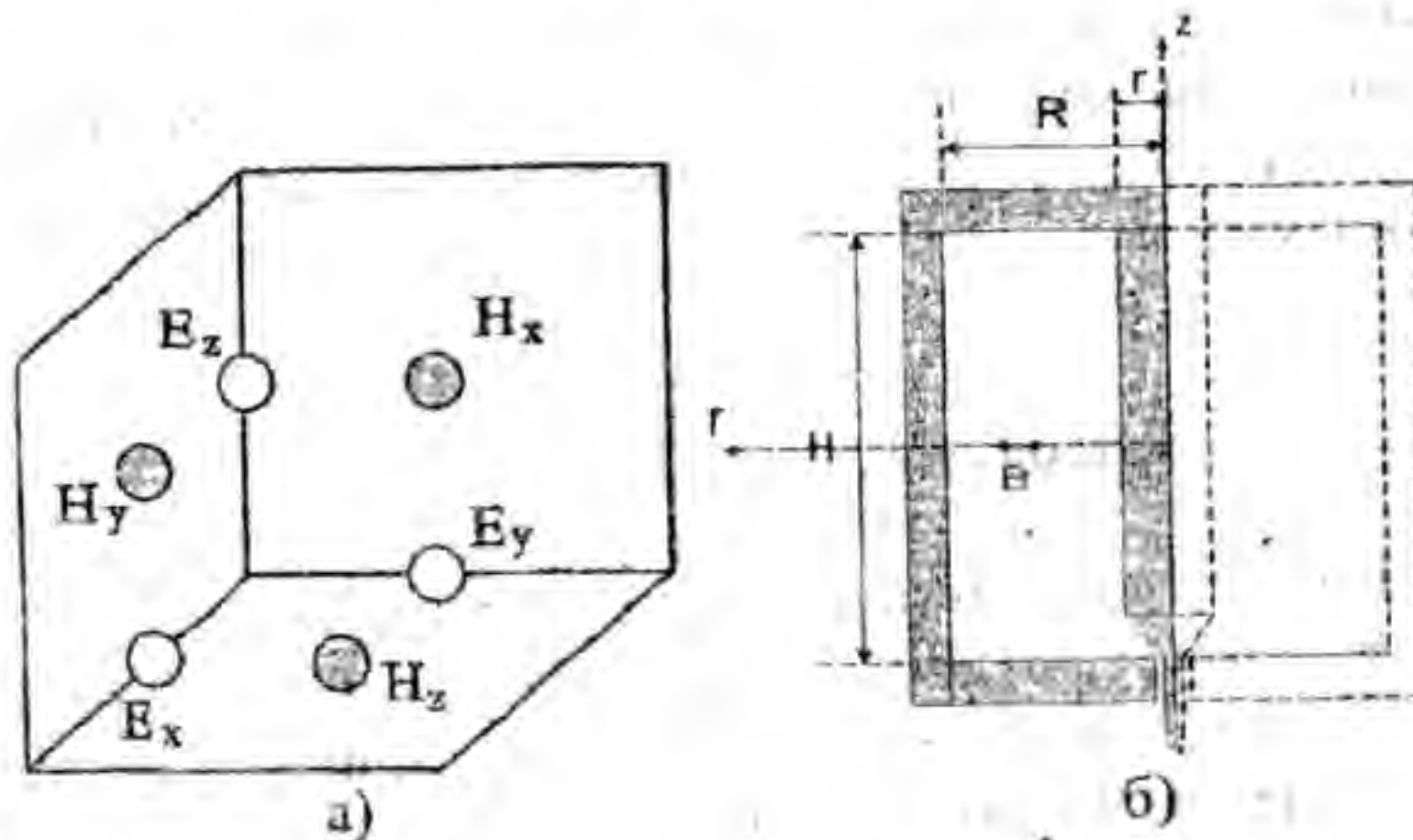


Рис.5. а) Сітка FDTD методу б) Розрахункова модель ближньопольового зонда.

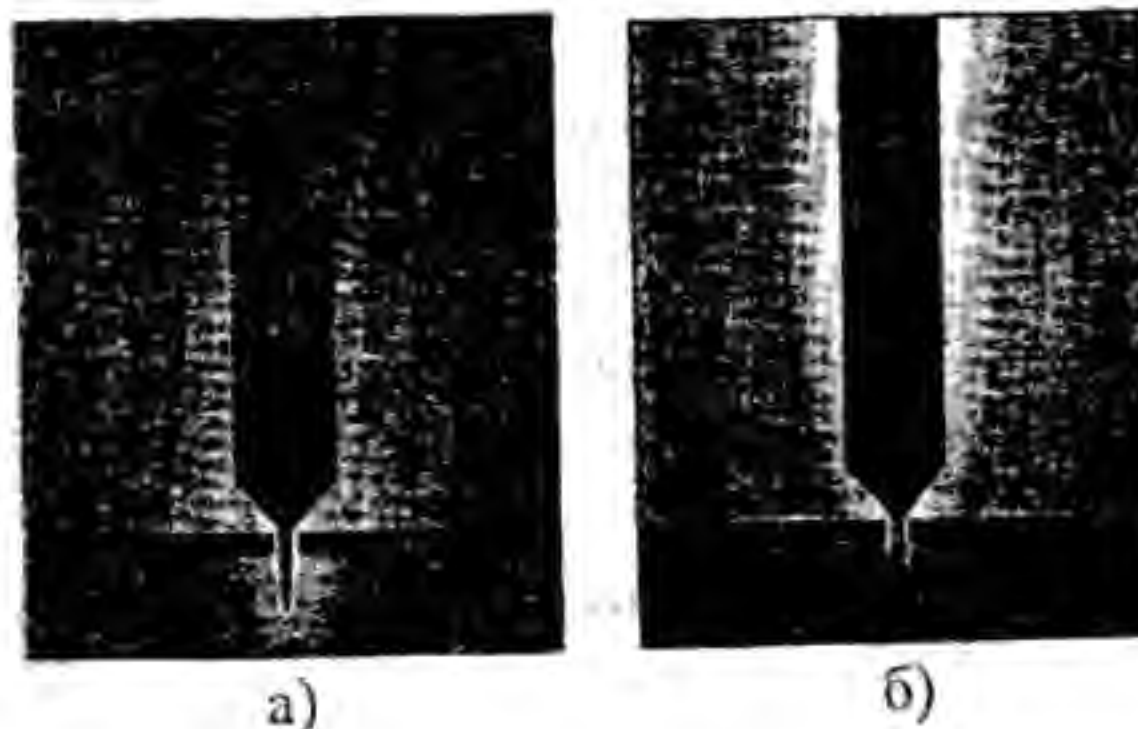


Рис.6. Амплітуда електричного а) та магнітного б) полів. FDTD метод.

Всі вищеописані методи все частіше застосовуються в задачах прикладної електродинаміки. Кожен з них має як свої переваги так і недоліки. Наприклад, використання FDTD методу практично не потребує ніяких наближень, оскільки він базується на рівняннях Максвелла. BEM, FD та FE методи принципово теж можливо використовувати для розрахунку нестационарних задач, увівши додатково дискретизацію по часу. Однак FDTD є більш пристосованим для таких розрахунків.

Використання методу граничних елементів не потребує застосування додаткових методик для вирішення зовнішніх задач, однак у деяких випадках цей метод може давати “зашумлені” поля в приграничних областях. Крім того, матриця системи рівнянь методу є повністю заповненою, що ускладнює розв’язок для великої кількості вузлів.

Кінцево-різницевий метод та метод кінцевих елементів є найбільш простими в реалізації і найбільш часто зустрічаються в літературі. Однак, вони потребують використання специфічної дискретизації при вирішенні зовнішніх задач.

Існує багато пакетів прикладних програм, які базуються на вищепри-
саних методах, наприклад QuickField (FEM метод), COULOMB (BEM ме-
тод), FIDELITY (FDTD). Існує також багато безкоштовних бібліотек для
різних мов програмування, що реалізують той чи інший алгоритм чисель-
ного моделювання. Однак, для ефективного використання відповідного
програмного забезпечення необхідно розуміти основні принципи методів
комп'ютерної електродинаміки.

Література.

1. C.Gao, X.-D. Xiang. Quantitative microwave near-field microscopy of di-
electric properties // Rev. Sci. Instrum. – 1998. – Vol. 69, No. 11 – P. 3846-3851
2. В.С.Сидоренко, Ю.О.Гайдай, О.В.Сінькевич, С.В.Жила. Пристрій для
ближньопольової мікроскопії діелектричних об'єктів // Державний
департамент інтелектуальної власності, Бюллетень №10, 15.10.2003 р.
Патент за заявкою №2002119038
3. J. H. Lee, S. Hyun, and K. Char. Quantitative analysis of scanning microwave
microscopy of dielectric thin film by finite element calculation // Rev. Sci. In-
strum. – 2001. – Vol. 72, No. 2. – P. 1425-1434
4. S.R. Knutson, M.D. Abdalla, R.M. Pixton. PC-based electrostatic field calcu-
lation techniques // May 1991, 12th Annual Ideas in Science and Electronics
Exposition/Symposium
5. <http://www.boundary-element-method.com> - boundary elements method web-
site

Надійшла до редакції 29.11.2006

УДК 535.5:621.029.7

Валерій І. Григорук, Володи-
мир М. Огенко, Людмила С.
Волковинська¹, Ольга В.
Голдун, Олександр М. Коло-
мієць

Синтез вуглецевих нано- структур з використанням властивостей ближнього оптичного поля

Запропоновано отримання вугле-
цевих наноструктур методом ближ-
ньопольового оптичного хімічного
осадження з газової фази молекул
тетрахлористого вуглецю CCl_4 . В
даному випадку процес фотодисоціації
може відбуватися при нерезонансних
умовах завдяки властивостям взаємодії
випромінювання і речовини в області
ближнього поля. Були отримані вуглецеві
наноструктури розмірами до 100 нм.
Особливістю даного методу є те, що він
дає можливість працювати з різними
довжинами хвиль у різних газових
середовищах для осадження різно-
манітних нанорозмірних матеріалів.

Ключові слова: хімічна
фотодисоціація, оптичне ближнє поле,
наноструктури.

¹E-mail: vls@univ.kiev.ua

Вступ

Оптика ближнього поля є одним з найбільш актуальних напрямів
сучасних фізичних досліджень. Властивості ближнього оптичного поля
використовується у нанотехнологіях, оптичній мікроскопії високої
роздільної здатності, при надщільному записі інформації, маніпулюванні
атомів тощо [1]. Разом з тим відомо, що ближнє оптичне поле не
підкоряється деяким фізичним принципам класичної оптики. В даній роботі
досліджені властивості ближнього поля при фотохімічних реакціях синтезу
наноструктур.

В.І. Григорук, В.М. Огенко,
Л.С. Волковинська, О.В. Голдун,
О.М. Коломієць, 2006

Valerii I. Grygoruk, Volodymyr M.
Ogenko, Liudmyla S. Volkovynska¹,
Olga V. Holdun, Oleksandr M.
Kolomiyets

Synthesis of carbon nano-structures using inherent proper-ties of the optical near-field

Synthesis of carbon nanostructures
using near-field chemical vapor deposition
of gas-phase carbon tetrachloride CCl_4
was proposed. In this case, photo-
dissociation can take place under
nonresonant conditions due to inherent
properties of optical near field. Carbon
structures less than 100 nm were obtain.
This technique makes it possible to use
various light and gas sources to deposit a
variety of nanometric materials.

Key Words: chemical photo-
dissociation, optical near field, nano-
structures.

Звичайний процес оптичного хімічного осадження з газової фази складається з двох процесів: фотодисоціації і адсорбції. Як правило, для фотодисоціації молекул випромінювання дальнього поля має бути резонансним до молекулярних коливань газу, щоб збудити молекули з нижнього на верхній електронний рівень. Принцип Франка-Кондона стверджує, що така резонансна взаємодія є необхідною. Далі збуджені молекули релаксують до рівня дисоціації, і вже продисоційовані атоми адсорбуються на поверхні підкладки. Для ближньопольового оптичного осадження з газової фази процес фотодисоціації може відбуватись при нерезонансних умовах. Така фотохімічна реакція є одним з рідкісних явищ і відрізняється тим, що ближнє поле має різкий просторовий градієнт. Можливість нерезонансної деструкції хімічних зв'язків молекул за допомогою малопотужного оптичного ближнього поля описана авторами [2]. Як джерело ближнього поля використовувався волоконний нанозонд, який знаходився в газовому середовищі метал-органічної сполуки і підсвічувався лазером з квантом енергії, який менший за енергію дисоціації молекул. На відстані десятків нанометрів від зонда знаходилась сапфірова підкладка. Саме на цій підкладці було отримано металічні квантові точки внаслідок деструкції молекул метал-органічної сполуки.

На відміну від експерименту [2], в якому наноструктури утворювались на підкладці, метою даної роботи було дослідження процесу нерезонансної фотодисоціації і осадження наноструктур на самому волоконному зонді. Оскільки поблизу поверхні зонду неоднорідність поля набагато більша, ніж на відстанях порядку десятків нанометрів, то слід очікувати, що ефективність безпосереднього осадження на джерело оптичного ближнього поля буде набагато вищою.

Постановка експерименту

Основним елементом експериментальної установки є оптичний волоконний зонд. Зонди виготовляються або методом механічного витягування оптичного волокна при контрольованому нагріванні і витягуванні, або методом хімічного витравлення волокна [3]. Основною перевагою хімічно витравлених зондів є те, що серцевина волокна доходить до вістря зонда. Це зумовлене тим, що травлення серцевини з кварцу з доміпками GeO_2 відбувається повільніше, ніж травлення оболонки з чистого кварцу. В механічно витягнутому волокні серцевина доволі швидко перестає утримувати випромінювання в центрі волокна, і воно поширюється в зовнішньому хвилеводі; це зумовлює перекачку оптичного випромінювання у вищі моди. В зонді на основі хімічного витравлення цей недолік відсутній. Збереження серцевини у волокні при виготовленні голки сприяє також кращій концентрації оптичного випромінювання в області звуження волокна [4]. В результаті зонди,

виготовлені методом хімічного витравлення, мають коефіцієнт проходження випромінювання через зонд $10^{-2} - 10^{-4}$, що на 2-3 порядки більше, ніж при виготовленні методом механічного витягування.

З вищенаведених міркувань, для створення волоконної наноголки використано метод хімічного витравлення у водневому розчині плавикової кислоти. Основним недоліком хімічно витравлених голок є низька якість поверхні. Для запобігання цьому перед витравленням захисне покриття з оптичного волокна не знімалось, і саме витравлення голки відбувалось у трубці, що призвело до виникнення конвекційних потоків кислоти всередині трубки і дозволило отримати наноголки з рівною поверхнею. Сам травниковий розчин містить водневий розчин плавикової кислоти, який покритий шаром розчинника, що не взаємодіє з кислотою. В області границі розділу рідин на поверхні волокна утворюється меніск, висота якого змінюється при зміні діаметра волокна в процесі травлення. При цьому на границі розділу двох рідин на волокні формується конус, як показано на рис.1. Підбираючи розчинники з різними параметрами, можна сформувати конус з потрібним кутом звуження.

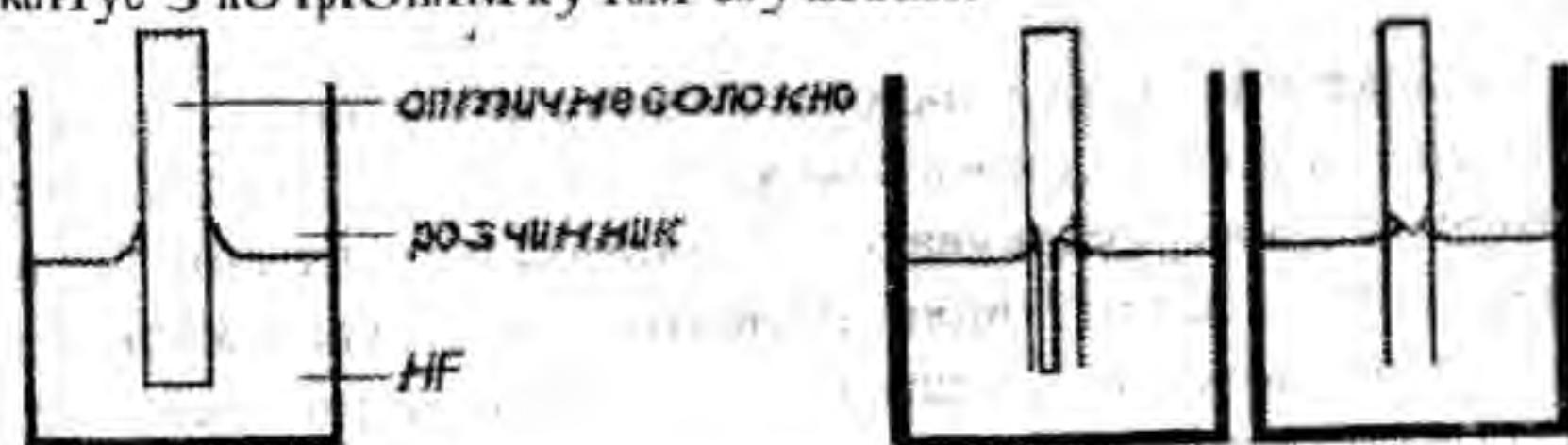


Рис.1. Механізм витравлення наноголки з оптичного волокна.

Дослідження характеристик наноголок (рис.2) проводилось на скануючому електронному мікроскопі. Типові розміри нанозондів, коливались від 100 до 300 нм.



Рис.2. РЕМ зображення волоконної наноголки.

На рис.3 показана схема експериментальної установки для ближньопольового оптичного хімічного осадження з газової фази молекул тетрахлористого вуглецю CCl_4 . Дослідження проводились з волоконною наноголкою, яка не була покрита металом. Відповідно, волоконний зонд виступав одночасно і джерелом ближнього оптичного поля, і підкладкою для осадження вуглецевих наноструктур.

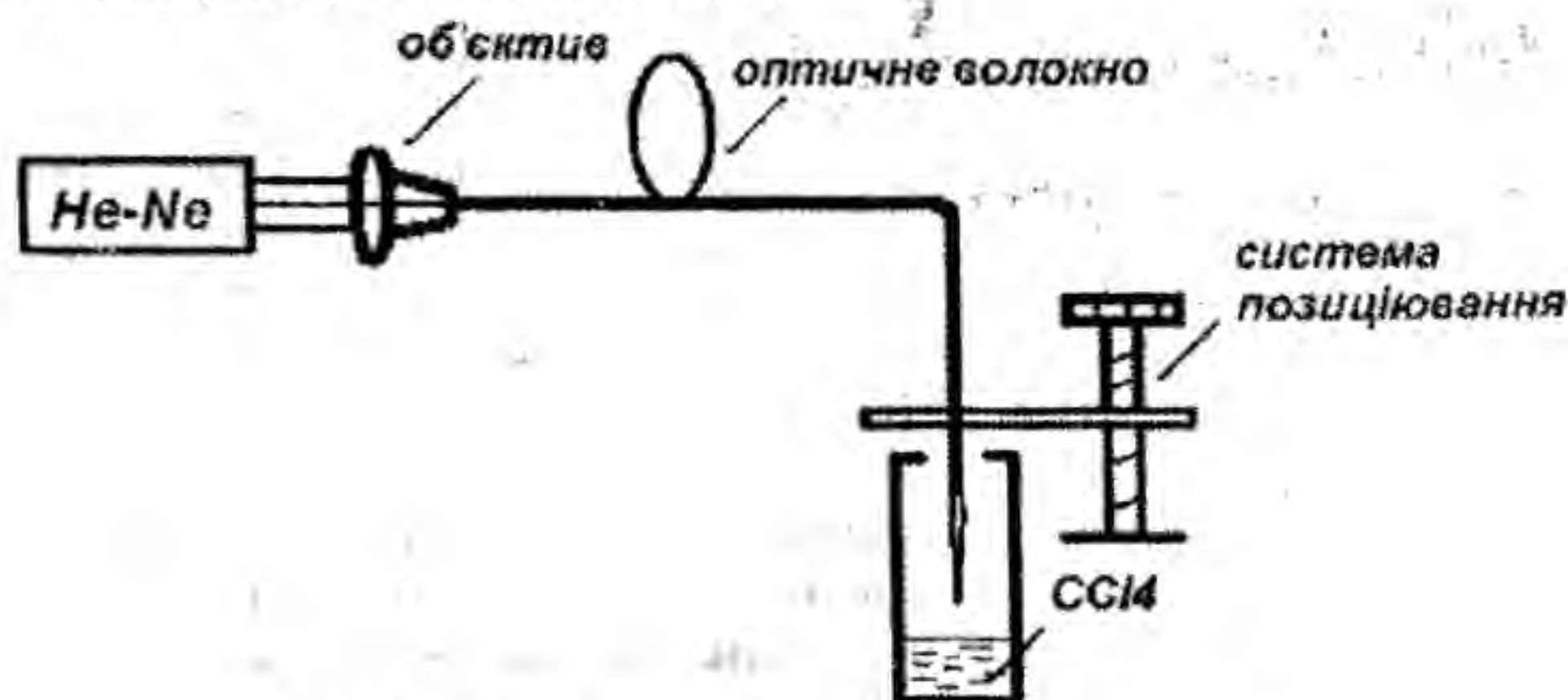
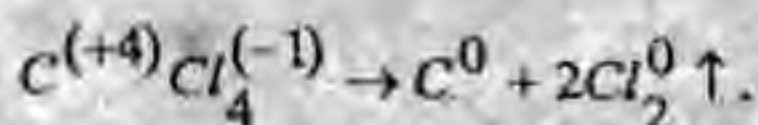


Рис.3. Схема експериментальної установки.

Як джерело нерезонансного випромінювання використовувався He-Ne лазер з робочою довжиною хвилі $\lambda=633$ нм і потужністю 1 мВт. В експериментах використовувалось одномодове оптичне волокно, радіус серцевини 8 мкм, один кінець волокна приєднувався до He-Ne лазера. Другий кінець волокна, а саме витравлена наноголка, підвішувався в посудині з тетрахлористим вуглецем так, щоб осадження структур відбувалось у газовій фазі. Вибір речовини тетрахлориду вуглецю пояснюється тим, що ця речовина не має резонансних смуг поглинання в робочій області He-Ne лазера. Крім того, вона зручна в користуванні, і з неї отримується атомарно чистий вуглець, при цьому всі інші сполуки вилітають (хлор створює летючі з'єднання). За розрахунками, енергія дисоціації CCl_4 дорівнює 3,03 еВ, а енергія фотону - 1,96 еВ. Очікувана реакція, яка відбувається при розірванні зв'язків, має вигляд:



Осадження відбувалось протягом різного часу: від 5 до 20 хв. Потім зонд виймався і для спостереження результатів експерименту поміщався у растровий електронний мікроскоп. Зображення, отримані на електронному мікроскопі показали, що на зонді утворилися масиви наноструктур (рис.4). Флуоресцентна рентгенівська спектроскопія

підтвердила, що отримані наноструктури є вуглецем. Було проведено ряд експериментів для підтвердження можливості малопотужної нерезонансної деструкції молекул CCl_4 і адсорбції вуглецю на волоконну голку.

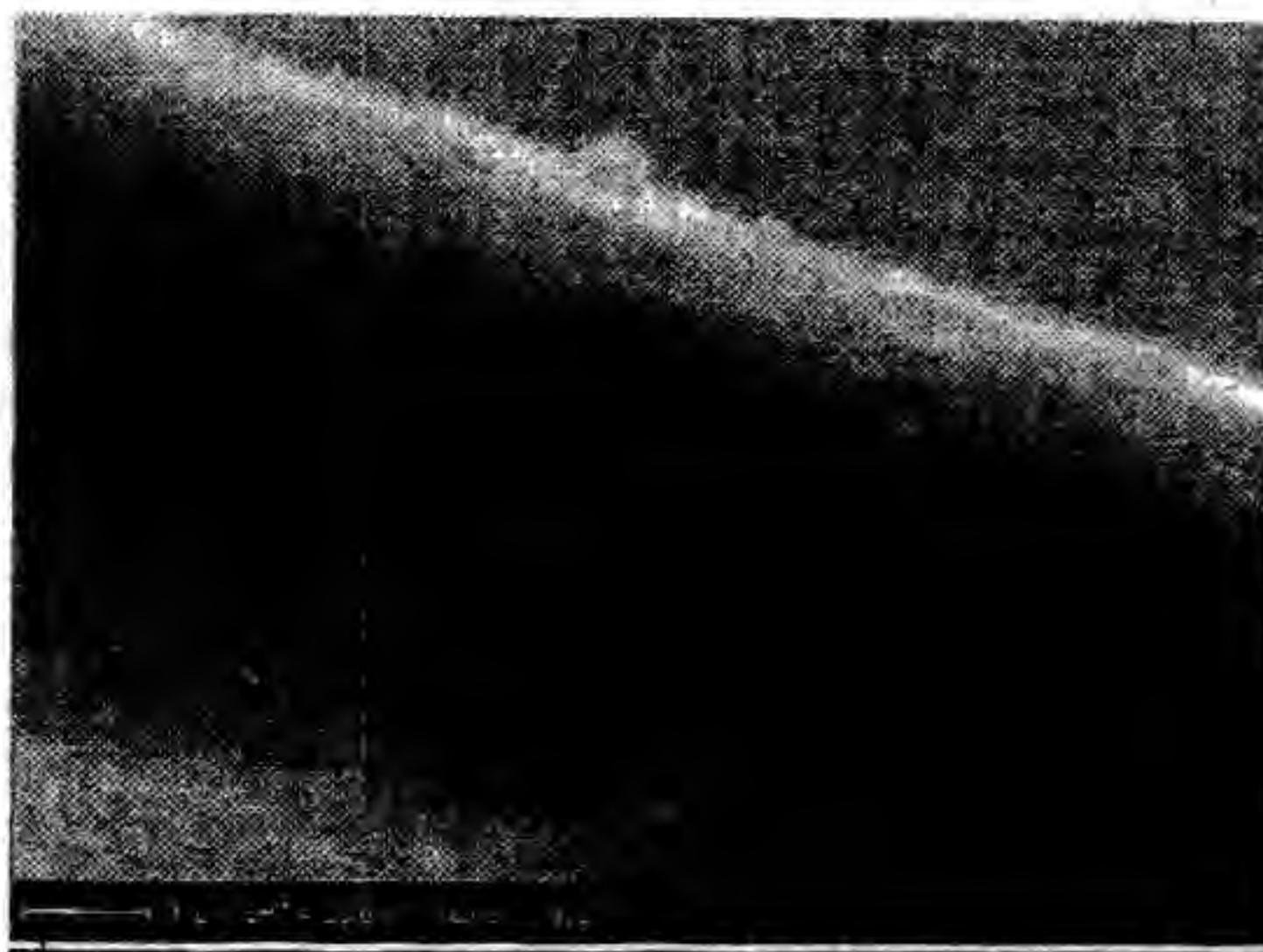


Рис.4. РЕМ зображення голки з осадженими на ній вуглецевими наноструктурами.

Оскільки CCl_4 не має смуг проглинання в робочій області He-Ne лазера, то фотодисоціація молекул резонансним шляхом неможлива, окрім того густина оптичної потужності менша за 10 кВт/см^2 , що вказує на неможливість багатофотонного поглинання.

Отже, підтверджена можливість нерезонансної деструкції молекул і показана дієвість цього методу отримання наноструктур. Регулювати розміри осаджуваних структур можна, змінюючи час опромінення і довжину хвилі лазера.

На сьогоднішній день теорія процесу ближньопольового оптичного хімічного осадження з газової фази знаходиться в стадії розробки [5].

Для пояснення результату можна запропонувати наступний механізм. Ближнє оптичне поле є сильно просторово неоднорідним і змінним у часі. Воно наводить у молекулі, яка знаходиться в зоні ближнього поля, змінний в часі дипольний момент. Цей дипольний момент не встигає релаксувати за час зміни поля і, таким чином, постійно збільшується, поки не руйнується молекула. Тобто, можна вважати, що ближнє оптичне поле збуджує вібраційні коливання молекули, амплітуда

яких зростає з часом, поки не досягне критичного значення, при якому відбувається дисоціація молекули.

Висновки

В даній роботі апробована методика створення масивів вуглецевих наноструктур шляхом нерезонансної фотодисоціації тетрахлориду вуглецю з газової фази за допомогою ближнього оптичного поля. Особливістю даного методу є можливість контролю осадження і висока ефективність у порівнянні з існуючими. Оскільки використовується ефект нерезонансної фотодисоціації, то з'являється можливість працювати з широким діапазоном довжин хвиль і різноманітними речовинами, застосування яких раніше було неможливим для традиційного оптичного хімічного осадження з газової фази.

Перелік посилань

1. M. Ohtsu, K. Kobayashi, S. Sangu Nanophotonics: design, fabrication, and operation of nanometric devices using optical near fields//IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics, vol. 8, 2002, pp. 839-862.
2. T. Kawazoe, Y. Yamamoto, M. Ohtsu "Fabrication of a nanometric Zn dot by nonresonant near-field optical chemical-vapor deposition//Appl. Phys. Lett., vol.79, 2001, pp.1184-1186.
3. D.R. Turner US Patent No. 4, 469, 554.
4. A. Sayah, C. Philipona, P. Lambelet Fiber tips for scanning near-field optical microscopy fabricated by normal and reverse etching//Ultramicroscopy, vol.71, 1998, pp. 59-63.
5. K.Kobayashi, T. Kawazoe Characteristic mechanism of molecular dissociation and nanofabrication using optical near fields//Proc. Third IEEE Conference on Nanotechnology. - 2004.

Надійшла до редакції 24.11.2006

УДК 621.272.832.01; 539.737.3

Олександр М. Іванюта,
Максим І. Курочка,
Олександр В. Прокопенко,
Віталій І. Толкачов,
Олена С. Юдіна

Вплив зовнішнього магнітного поля на ВАХ високотемпературного джозефсонівського контакту

Отримано пряме експериментальне підтвердження зміни критичної густини струму за рахунок зовнішнього магнітного поля. Показано, що керуючи полярністю та амплітудою струму, що протікає крізь контакт, можна підвищити критичну густину струму. Вивчено вплив захопленого магнітного поля на властивості джозефсонівського контакту.

Ключові слова: резонатор поверхневої хвилі, критична густина струму, магнітне поле.

E-mail: iva@univ.kiev.ua

Одним з фундаментальних проявів стану надпровідності є ефект повного або часткового виштовхування слабкого магнітного поля з об'єму надпровідного зразка (ефект Мейснера-Оксенфельда). За рахунок цього ефекту магнітне поле проникає в надпровідник лише на достатньо малу глибину, а індукція B та густина струму j спадають експоненціально (або близько до цього закону) при проникненні в середину надпровідника. Наприклад, якщо надпровідник займає півпростір $x \geq 0$, то типова залежність індукції та густини струму від координати x має вигляд [1]:

$$B(x) = B(0)\exp(-x/\lambda_L), \quad j(x) = j(0)\exp(-x/\lambda_L), \quad (1)$$

де $\lambda_L = \sqrt{m_e c^2 / 4\pi n_s e^2}$ – лондонівська глибина проникнення, m_e , e – маса і заряд електрона, c – швидкість світла в вакуумі, n_s – густина “надпровідних” електронів, що утворюють куперівські пари.

Oleksandr M. Ivanyuta,
Maxim I. Kurochka,
Oleksandr V. Prokopenko,
Vitaliy I. Tolkachev,
Olena S. Yudina

Action of external magnetic field on the current-voltage characteristic of HTS Josephson junction

Direct experimental confirmation of reduction of critical current density is got due to the own magnetic field, that it is resulted by a current flowing in the contact. Managing direction and amplitude of current it was possible to compensate own magnetic field. Influence of the taken magnetic field at the Josephson junction is examined.

Key Words: surface wave resonator, Josephson junctions array, critical current density, magnetic field.

Експериментальні дані для глибини проникнення $\lambda(T)$ від температури T добре узгоджуються з феноменологічним виразом [1]:

$$\lambda(T) = \lambda_L(0) \left(1 - T^4/T_c^4\right)^{-1/2}, \quad (2)$$

де T_c – критична температура. Для високотемпературних надпровідників (ВТНП) типове значення $\lambda_L(0) \sim 10^{-7}$ м.

Таким чином, струми в надпровіднику фактично існують лише в тонкому приповерхневому шарі надпровідника товщиною $\sim \lambda_L$, а наведене ними магнітне поле компенсує всередині надпровідника зовнішнє магнітне поле. Φ з зовні зразка магнітне поле відповідно складається із зовнішнього магнітного поля і поля, що утворюється при протіканні крізь надпровідник поверхневих струмів. Тому метою роботи було дослідити особливості впливу зовнішнього магнітного поля на властивості інтегрованого плівкового джозефсонівського контакту

Інша ситуація виникає, коли як об'єкт дослідження виступає тонка надпровідна плівка. Для плівок характерною обставиною є співрозмірність товщини плівки з глибиною проникнення, отже, область, в яку проникає магнітне поле, може займати практично весь об'єм плівки. Крім того, порівняно з об'ємними надпровідними зразками в плівках суттєво збільшується кількість дефектів на одиницю об'єму. Тому для забезпечення в плівці енергетично вигіднішого та стійкого стану потрібні більші магнітні поля. Це добре описується за допомогою нелокальної теорії А. Піпарда, що успішно пояснила перевищення отриманої в експерименті глибини проникнення $\lambda(T)$ від величини, розрахованої за формулою (2) (Рис. 1), і неекспоненційний характер зміни магнітної

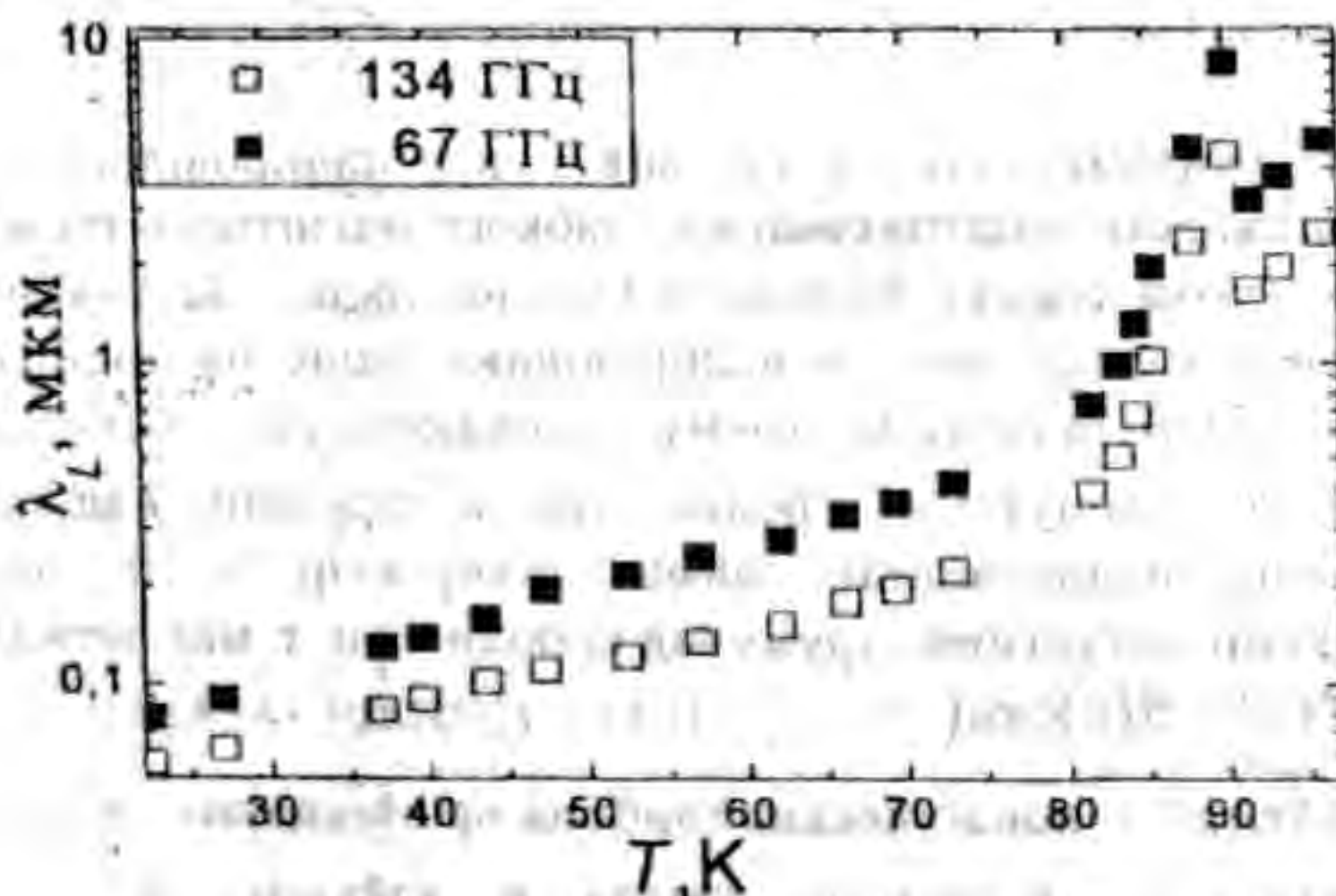


Рис. 1. Температурні залежності глибини проникнення $\lambda(T)$ на частотах 67 ГГц та 134 ГГц для YBCO плівки, напорошеної на фіанітову підкладку.

індукції $B(x)$ в залежності від глибини проникнення x в надпровідний зразок [2, 3]. Наприклад, на частоті 134 ГГц в області азотних температур величина $\lambda(T)$ для ВТНП плівки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) досягала $\sim 0,2$ мкм. При $T \rightarrow T_c$ товщина плівки та глибина проникнення поля є зрівняними величинами, за рахунок чого магнітне поле може проникати в підкладку плівки. При цьому електродинамічний відгук ВТНП зразка на зовнішній НВЧ сигнал залежить від властивостей як самої ВТНП плівки, так і від властивостей її підкладки [3].

Якщо в ВТНП плівці створені джозефсонівські контакти (ДК), то магнітне поле, що проникає в плівку погіршує їх електродинамічні властивості. Відомо, що густина надпровідного струму, що протікає крізь ДК в простішому випадку (магнітне поле H перпендикулярне до площини контакту, струм через контакт протікає вздовж осі x) описується виразом [4]

$$j(z) = j_c \sin[\varphi_0 - 2\pi\Phi(z)/\Phi_0], \quad (3)$$

де φ_0 – різниця фаз хвильових функцій по обидва береги контакту, $\Phi(z)$ – величина магнітного потоку в точці з координатою z , Φ_0 – квант магнітного потоку. Наприклад, для випадку $\varphi_0 = \pi/2$, $\Phi(z) = z\Phi_0$ з (3) будемо мати розподіл струму, схематично зображений на рис. 2 [4].

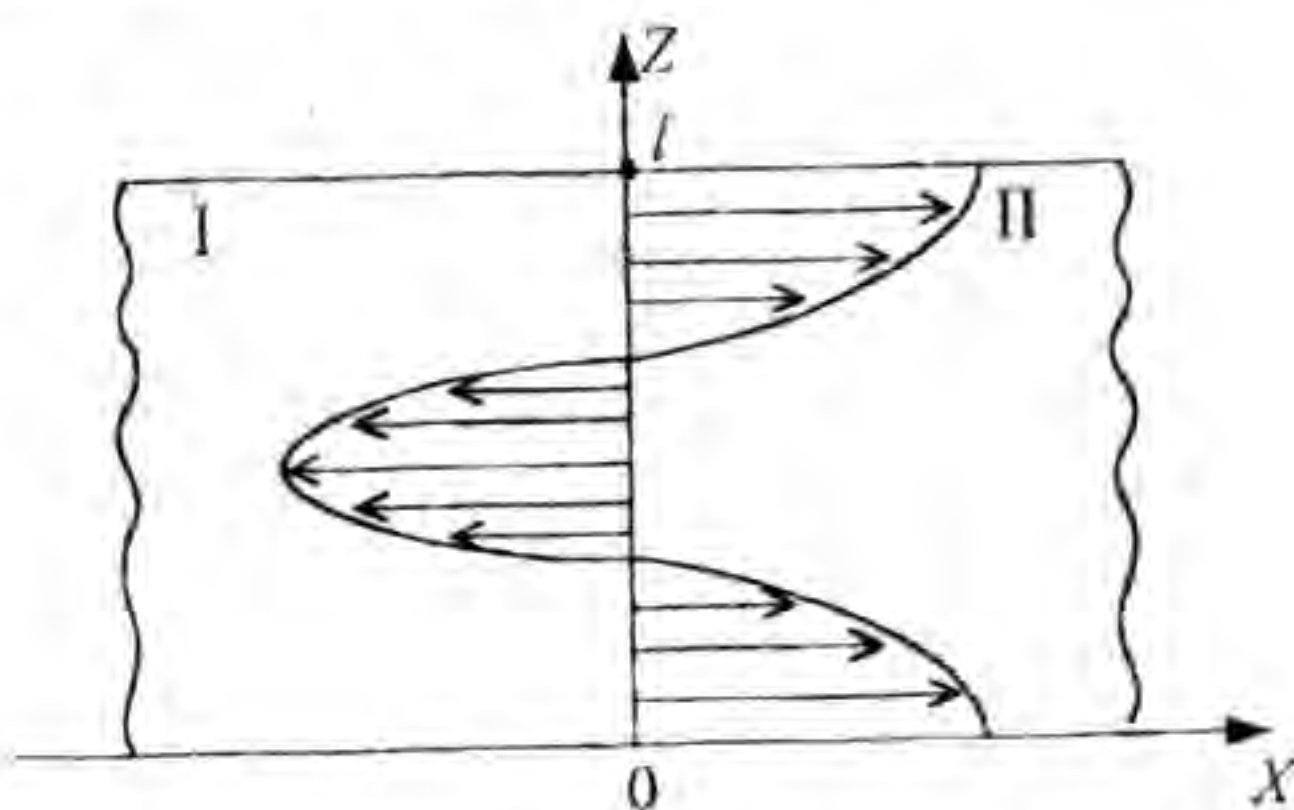


Рис. 2. Напрямок струму (показано стрілками) між надпровідниками I та II, що утворюють ДК, в присутності в області контакту магнітного потоку $\Phi = \Phi_0$. Довжина стрілок пропорційна густині струму $j(z)$.

За рахунок впливу магнітного поля максимальний надструм $I_{\max}$, що протікає крізь ДК, починає суттєво залежати від магнітного поля H , причому ця залежність має типовий вигляд $I_{\max} = I_c y^{-1} \sin y$, де $y = \pi\Phi/\Phi_0$, $\Phi = Hl(d + 2\lambda_J)$, d – тунельний проміжок між берегами ДК

Проникнення магнітного поля в ДК відбувається, за законом подібним до (1), в який замість λ_L входить джозефсонівська глибина проникнення $\lambda_J = \sqrt{c\Phi_0 / 8\pi^2 j_c d}$ [2]. Для реальних ДК джозефсонівська глибина проникнення $\lambda_J \sim 10^{-4}$ м, в той час як розміри контакту $\sim 10^{-6}$ м, $d \sim 10^{-7}$ м; це означає, що властивості ДК суттєво залежать від параметрів магнітного поля, в якому знаходиться контакт. І, таким чином, постає питання про можливі шляхи усунення цих полів, які зменшують максимальний надструм, що може протікати крізь ДК, а також призводять до появи різноманітних паразитних нелінійних ефектів.

Для виготовлення ВТНП плівки з одним ДК використовувалась бікристалічна підкладка з ітрію, стабілізованого оксидом цирконію (фіаніт), кут разорієнтування осей кристалічних ґраток був 24° . ВТНП плівку YBCO було напилено на підкладку термічним методом, і додатково, в одному циклі (*in situ*), був напилений шар золота, для того щоб зробити малий контактний опір між шарами золота і YBCO (опір $\sim 10^{-8}$ Ом $\times$ см²). Була отримана YBCO плівка з параметрами: критична температура $T_c = 86.6$ К, густина критичного струму при температурі $T = 77$ К досягала $j_c = 2.7$ мА/см². Товщина плівки змінювалась від 200 нм до 300 нм, а шунтуючого шару золота змінювалась від 100 нм до 300 нм. ДК виготовлявся методами фотолітографії, іонно-променевого травлення (ion beam etching – IBE.).

В роботах [5, 6] було показано, що за допомогою магнітних екранів можна збільшити надпровідний струм, що протікає в ВТНП ДК у кілька разів та усунути паразитні нелінійні ефекти, які виникають внаслідок захоплення магнітного потоку. Також було визначено оптимальне значення коефіцієнту екранування магнітних екранів для отримання максимальних за амплітудою надпровідних струмів у бікристалічних ВТНП ДК відносно рівня впливу магнітного поля Землі та магнітних полів техногенного походження. Недоліком методу екранування за допомогою магнітних екранів є значне збільшення масогабаритів експериментальної установки.

Тому нами було запропоновано наступний метод зменшення зовнішніх магнітних полів. Цей метод полягає в пропусканні крізь ДК постійного струму такої амплітуди і полярності, щоб магнітне поле цього струму компенсувало зовнішнє магнітне поле, що проникає в ДК при температурі $T > T_c$. Тоді після охолодження, при $T < T_c$, ДК буде знаходитись у нульовому (дуже малому) полі, що може бути поміченим при дослідженні його вольт-амперних характеристик (ВАХ).

Експериментальні вимірювання впливу власного та захопленого магнітних полів на ВАХ ДК у 3-см та 8-мм діапазонах довжин хвиль проводилися в широкому діапазоні температур від 16 К до 300 К, а

використанням автономної мікрокриогенної системи замкненого циклу, яка була побудована на базі промислової установки MCSMP-100A-3,2/20 [7]. В процесі досліджень було використано декілька вимірювальних секцій. Діапазон регулювання температури фланця азотного рівня був 77 ± 300 К, а на водневому фланці температура могла змінюватися в межах $15 \div 77$ К. Виміри проводилися за умов високого вакууму, при залишковому тиску не більше ніж 10^{-6} мм рт. ст. Точність вимірювань температури була $\sim 10^{-3}$ К. Термостабілізація була не гірше $\pm 10^{-3}$ К.

Вольт-амперні характеристики (ВАХ) та значення критичного струму зразків суттєво змінюються, якщо при його охолодженні нижче температури переходу T_c , по ньому протікає струм. При цьому відбувається асиметризація ВАХ (Рис. 3). Цей ефект може бути поясненим захопленням зразком абрикосовських вихорів внаслідок неповного ефекту Мейснера-Оксенфельда. В цьому випадку залежність критичного струму ДК від зовнішнього поля вже не описується функцією від середньої магнітної індукції B_s в ДК, а сама залежність стає локальною для кожної точки всередині зразка. Як видно з рис. 3, отримана ВАХ для одного ДК може бути описана кривою з характерною дзеркальною симетрією (в першому наближенні). Цей ефект може бути поясненим тим, що захоплений магнітний потік не суттєво впливає на величину критичного струму I_c . Зсув ВАХ, в свою чергу, відповідає напрямку магнітного поля, що створює струм, який протікає крізь ДК.

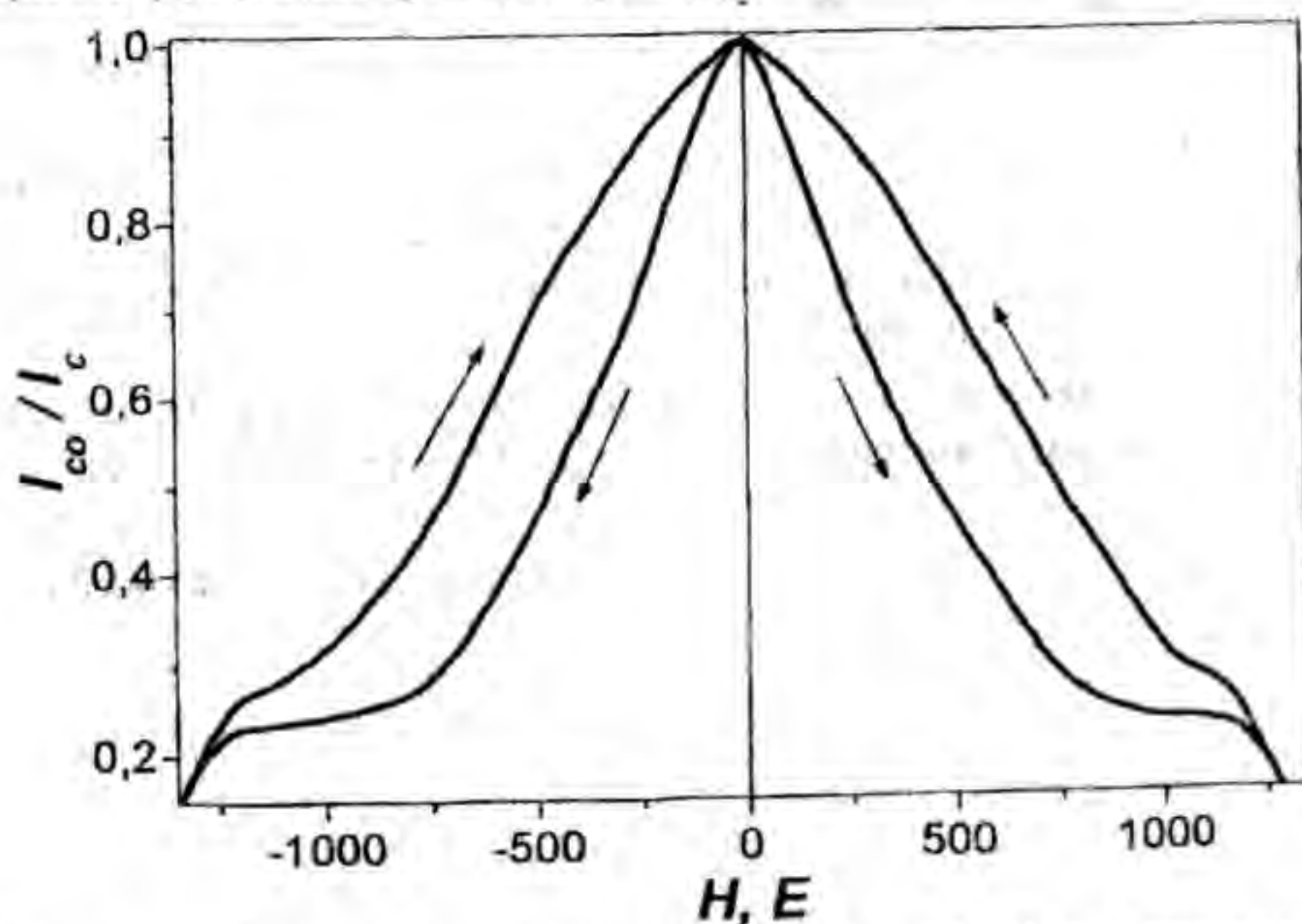


Рис. 2. Залежність відношення критичних струмів I_{c0}/I_c від ортогонального магнітного поля при температурі $T = 77$ К, де I_c - при наявності поля; I_{c0} при відсутності поля.

Таким чином, було показано, що за допомогою запропонованого методу "екранування" можливо збільшити ефективний критичний струм, що протікає крізь ДК при заданому зовнішньому постійному магнітному полі. Недоліком даного методу є прояв асиметризації ВАХ ДК, яка, тим не менш, у першому наближенні залишається дзеркально симетричною. Зсув ВАХ відбувається в область полів, які відповідають протіканню постійного струму крізь ДК з інверсною полярністю.

Література

1. Кухаркин Е.С. Электрофизика информационных систем. – М.: Высшая школа, 2001. – 671 с.
2. Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников. – М.: МЦНМО, 2000. – 402 с.
3. Іванюта О.М. Лінійний ланцюжок джозефсонівських контактів у резонаторі поверхневої хвилі // Дис. канд. фіз.-мат. наук. / 01.04.03. – К.: Київський нац. ун-т ім. Т. Шевченка, – 2003. – 163 с.
4. Мелков Г.А. Кріогенна електроніка. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2003. – 87 с.
5. Гордійчук І.Л., Іванюта О.М., Коломоєць М.С., Курочка М.І., Прокопенко О.В., Ракша В.М. Вплив зовнішніх магнітних полів на ВАХ високотемпературних джозефсонівських контактів // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки. – 2004. – № 3. – С. 324-329.
6. Ivanyuta O.M., Prokopenko O.V., Kishenko Ya.I., Raksha V.M., Klushin A.M. The Effect of the External Magnetic Field on the Current-Voltage Characteristic of HTS Josephson Junction Arrays // Journal of Low Temperature Physics. – 2005. – Vol. 139, № 1/2. – P. 97-102.
7. Техническое описание и инструкция по эксплуатации автономной микрокриогенной системы замкнутого цикла MCSMP-100A-3,2/20.

Надійшла до редакції 25.11.2006

УДК 535.2:621.373.8

Олександр Ю. Кременецький*,
Анатолій І. Іванісік**

Енергетично-частотні характеристики випромінювання, зумовленого перехідним ефектом у самофокусуєчих середовищах

Наведені нові експериментальні дані стосовно енергетично-частотних характеристик випромінювання, зумовленого перехідним ефектом у самофокусуєчих середовищах. Спектральні компоненти, які виникають у результаті перехідного ефекту, зміщені на 150 см^{-1} у стоксову область відносно частоти стимулюючого випромінювання і мають енергію $10^{-7}-10^{-4}$ Дж у кюветах з толуолом довжиною до 40 см. Експериментальні дані підтверджують теоретичні розрахунки.

Ключові слова: самофокусування, фазова саомодуляція, керрівська рідина, перехідний ефект.

Oleksandr Yu. Kremenetskiy*,
Anatolii. I. Ivanisik**

Energy and frequency characteristics of radiation arisen under the transition effect in self-focusing environments

New experimental results that concern energy and frequency characteristics of radiation arisen under the transition effect in self-focusing environment are given. The spectral components generated as result of the transition effect have the Stokes shift up to 150 cm^{-1} relatively to the frequency of stimulation radiation and have energy $10^{-7}-10^{-4}\text{ J}$ in the cells with the length that not exceed 40 cm. Experimental results coincide with theoretical calculations.

Key words: self-focusing, self-phase modulation, Kerr-liquid, transition effect.

E-mail: * preforg@bigmir.net, ** aivan@uninet.kiev.ua

Вступ

Перехідний ефект, який виникає внаслідок фазової саомодуляції (ФСМ) лазерних імпульсів при самофокусуванні (СФ) у керрівських рідинах, частково досліджувався теоретично та експериментально в [1-5]. Важливість питання обумовлена необхідністю подальшого розвитку наукових засад нелінійної оптики та квантової електроніки, перспективами практичного використання ФСМ і СФ для удосконалення існуючих і створення нових технологій та приладів (наприклад, принципово нових джерел фазомодульованих надкоротких моноімпульсів когерентного випромінювання або послідовності таких імпульсів) і тим, що в типових умовах у керрівських рідинах СФ визначає поріг та суттєво впливає на ефективність інших нелінійно-оптичних процесів.

Метою даної роботи є розширення експериментальних даних стосовно перехідного ефекту в самофокусуєчих середовищах та встановлення рівня їх узгодженості з існуючими теоретичними

уявленнями. Увага зосереджувалася на вивченні частотно-енергетичних характеристик спектрів випромінювання, зумовленого перехідним ефектом, та їх взаємозв'язку з довжиною самофокусуєного середовища.

Експериментальні умови та установка

Для дослідження перехідного ефекту при ФСМ використовувався рубіновий лазер (рис. 1) із пасивною модуляцією добротності, який випромінював імпульси на довжині хвилі $\lambda_0=0,6943$ мкм із максимальною енергією 0,55 Дж та тривалістю 30 нс на половинному рівні інтенсивності. Випромінювання лазера ослаблювалося абсорбційними фільтрами та спрямовувалося в кювету з толуолом (на відстані ~ 1 м від лазера), комбінації яких забезпечували довжину самофокусуєного середовища: $L=12,5$ см; 25 см; 30,5 см; 40 см. Вихідна межа кювети без збільшення проектувалася лінзою з фокусною віддаллю 10 см на вхідну щілину спектрографа. У фокусі проєктуєної лінзи перпендикулярно оптичній осі та щілині спектрографа розташовувався екран у вигляді смужки шириною 2,5 мм. Екран поглинав надто інтенсивне осьове випромінювання в межах кутів ± 40 кут. хв., яке могло б зруйнувати матрицю цифрового фестоапарата. Спектри фотографувалися з поверхні розсіювального скла, розташованого в касетній частині спектрографа. Ширина вхідної щілини спектрографа становила 100 мкм, що обмежувало спектральну роздільність до 0,13 нм. Використання розсіювального скла обумовлювало обмеження $\sim 0,2$ нм. Цей же фактор призводив до просторової роздільності ~ 150 мкм.

Типовий зареєстрований спектр наведений на рис. 2. У спектрі спостерігається лазерна компонента (праворуч) та перша антистоксова

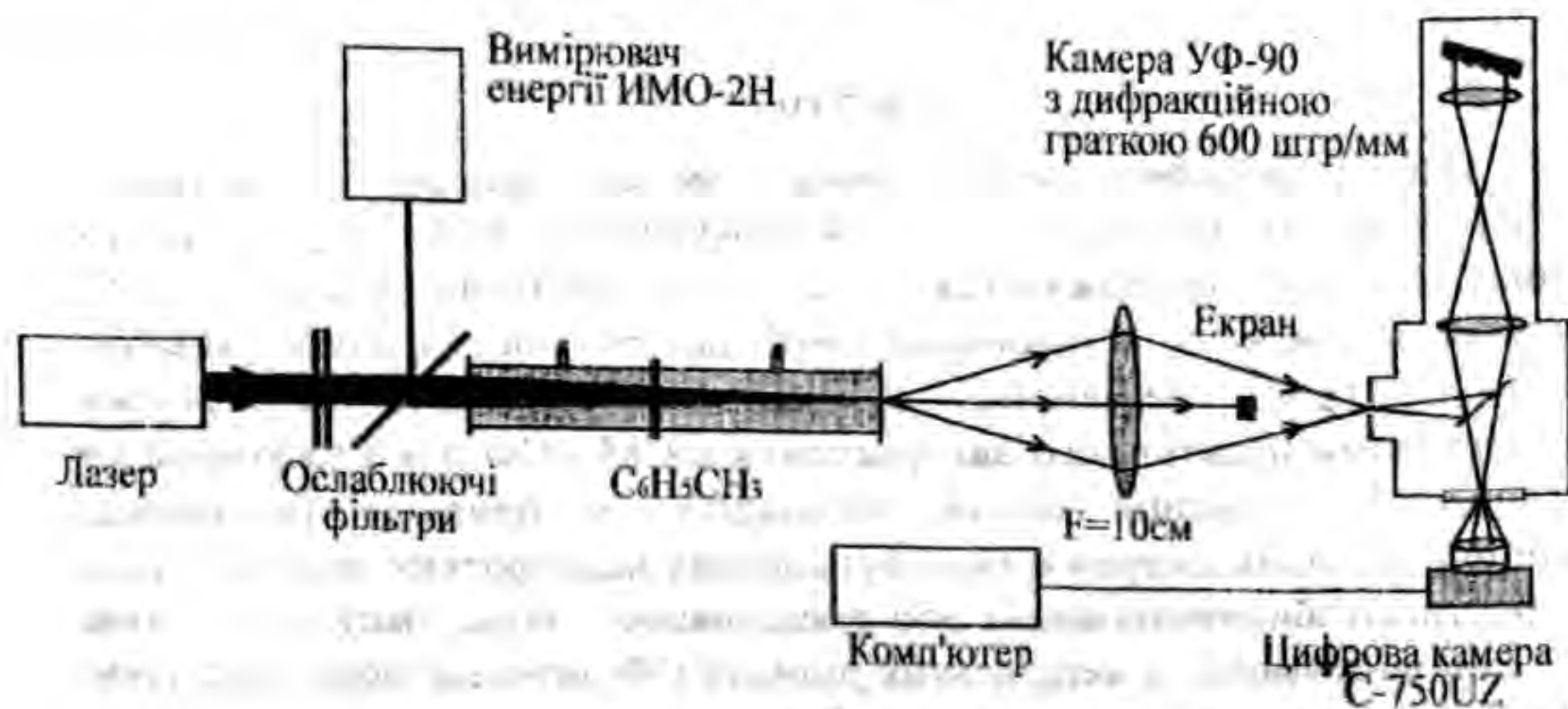


Рис. 1. Схема експериментальної установки.



Рис. 2. Спектр випромінювання.

компонента вимушеного комбінаційного розсіювання (ліворуч). Відстань між компонентами становить 1004 см^{-1} . У лазерній компоненті виявляються спектральні розширення в декількох областях. Ці спектральні розширення зумовлені перехідним ефектом, який супроводжує дрібномасштабне СФ.

Теоретичні засади

Основними енергетично-частотними характеристиками випромінювання, зумовленого перехідним ефектом, є максимальне зміщення миттєвої частоти лазерного пучка [3]:

$$\Delta \nu_{\max} \approx \frac{k_0}{2\pi c} \gamma \tilde{P} \nu_f, \quad (1)$$

а також, повна енергія перехідного випромінювання [3]:

$$W_{\text{пер}} \approx P \frac{\ell}{\nu_f} = P_{\text{cr}} \tilde{P} \frac{\ell}{\nu_f}, \quad (2)$$

де c – швидкість світла; $k_0 = 2\pi / \lambda_0$; P – миттєва потужність лазерного імпульсу; $\tilde{P} = P / P_{\text{cr}}$ – приведена миттєва потужність; P_{cr} – критична потужність СФ; ℓ – конфокальний параметр фокальної області; $\gamma \equiv (1,22 \lambda_0 / a_f)^2 / 16 n_0$; a_f – радіус фокальної області; n_0 – показник заломлення середовища; ν_f – швидкість фокальної області.

Спектральну густину енергії випромінювання, яке виникає внаслідок перехідного ефекту, можна оцінити, виходячи зі співвідношення:

$$W_{\text{пер}}^{\nu} = \frac{W_{\text{пер}}}{\Delta \nu_{\max}}. \quad (3)$$

Підстановка (1) та (2) в (3) веде до виразу:

$$W_{\text{пер}}^{\nu} = \frac{2\pi c P_{\text{cr}} \ell}{k_0 \gamma \nu_f^2}. \quad (4)$$

Важливою характеристикою, з точки зору порівняння теоретичних та експериментальних даних, є добуток енергії (2) на максимальне зміщення частоти (1):

$$W_{\text{пер}} \Delta \nu_{\text{max}} = \frac{k_0 \gamma \ell}{2\pi c} P_{\text{cr}} \tilde{P}^2. \quad (5)$$

Для виконання обчислень за формулами (1), (2), (4) та (5) необхідно $\tilde{P}$, ℓ , ν_f розрахувати для моменту часу, коли фокальна область розташована на межі середовища. Враховуючи гаусоподібну форму імпульсу лазера: $\tilde{P}(t) = \tilde{P}_0 \exp(-t^2 / \tau^2)$, для ν_f отримані результати, які наведені на рис. 3. Ці та подальші розрахунки виконані для параметрів: $\tau = 2$ нс, $a_0 = 113$ мкм; $a_f = 5$ мкм; $n_0 = 1,49$; $\lambda_0 = 0,69$ мкм; $P_{\text{cr}} = 25$ кВт.

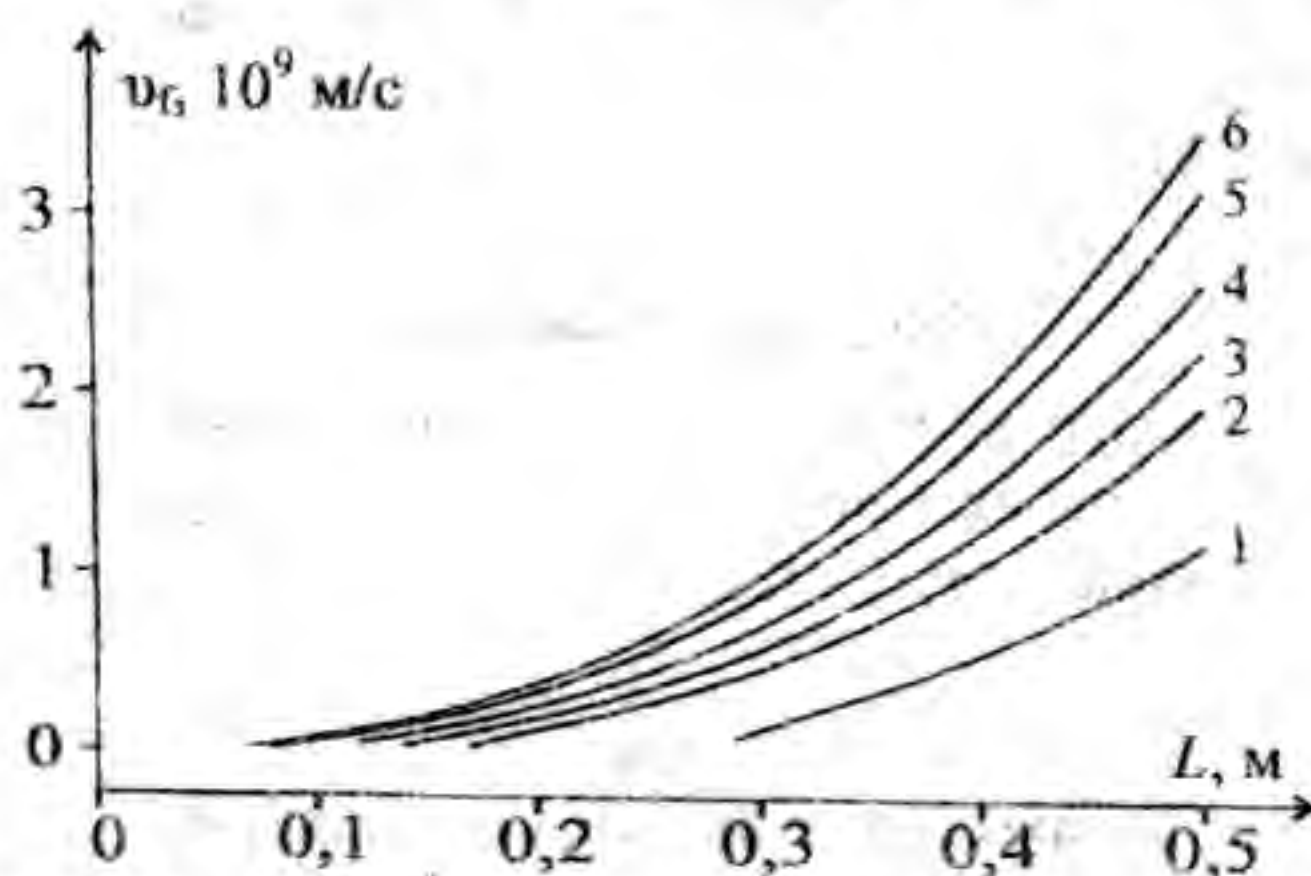


Рис. 3. Залежність швидкості ν_f фокальної області на виході кювети від її довжини L для різних приведених миттєвих потужностей $\tilde{P}_0$: 1 – 1,26; 2 – 1,59; 3 – 1,81; 4 – 2,17; 5 – 2,9; 6 – 3,6.

Швидкість фокальної області зростає зі збільшенням довжини середовища та зі збільшенням максимальної миттєвої потужності $\tilde{P}_0$.

Результати експериментальних досліджень

На рис. 4 подана теоретична залежність (1) максимального зміщення $\Delta \nu_{\text{max}}$ миттєвої частоти лазерного випромінювання від довжини L середовища для різних приведених миттєвих потужностях $\tilde{P}_0$ лазера. Точками на рис. 4 нанесені експериментальні дані з похибками вимірів. Величина зміщення миттєвої частоти збільшується зі збільшенням L та $\tilde{P}_0$, оскільки при збільшенні цих параметрів зростає ν_f .

Теоретична залежність (2) повної енергії перехідного випромінювання $W_{\text{пер}}$ від L для різних $\tilde{P}_0$ наведена на рис. 5 у логарифмічному масштабі. Величина повної енергії випромінювання, яке виникає при перехідному ефекті, зменшується зі збільшенням L та $\tilde{P}_0$, що

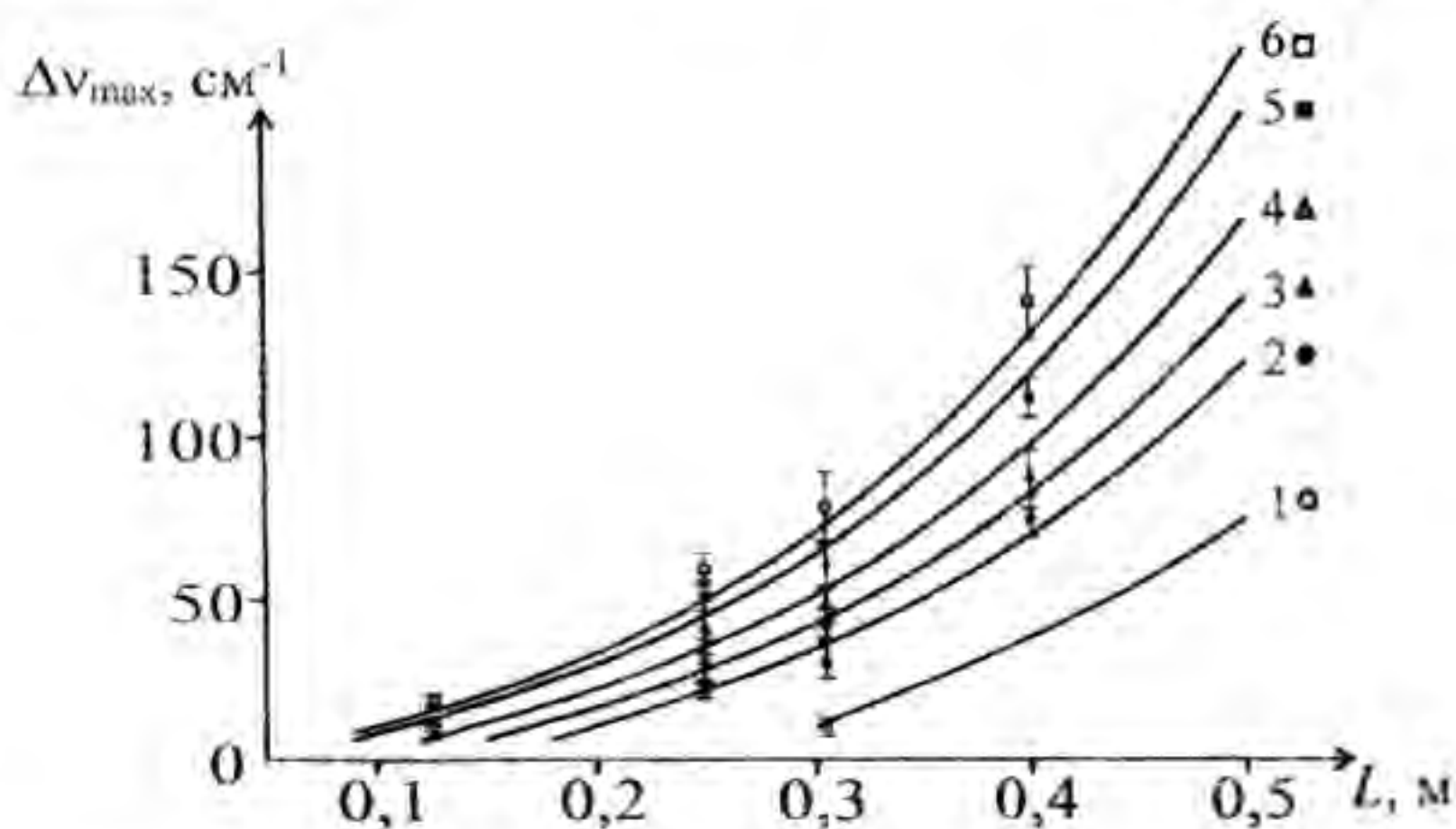


Рис. 4. Теоретичні і експериментальні залежності зміщення частоти $\Delta\nu_{\max}$ від довжини L кювети для різних приведених миттєвих потужностей $\bar{P}_0$: 1 – 1,26; 2 – 1,59; 3 – 1,81; 4 – 2,17; 5 – 2,9; 6 – 3,6.

обумовлене, насамперед, зростанням швидкості фокальної області.

Сума величин сигналів із кожного елемента зображення спектра випромінювання, яке виникає внаслідок перехідного ефекту, пропорційна енергії цього випромінювання. Відповідна обробка спектрів дала змогу порівняти функціональні залежності теоретичних і експериментальних даних.

На рис. 6 наведена теоретична залежність енергії перехідного випромінювання від L для приведеної миттєвої потужності $\bar{P}_0 = 3,6$ та експериментальні дані, які були отримані за тих же умов.

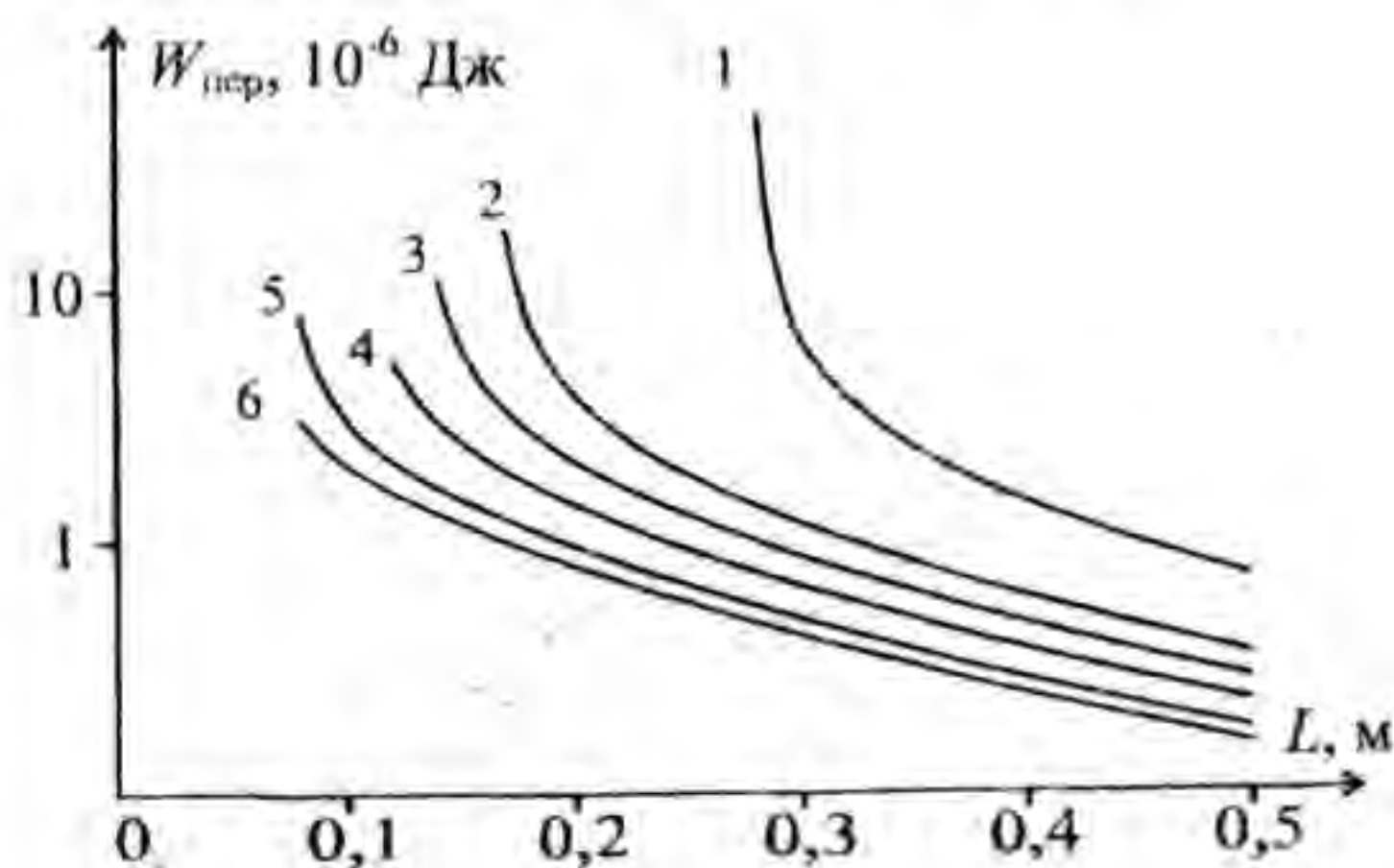
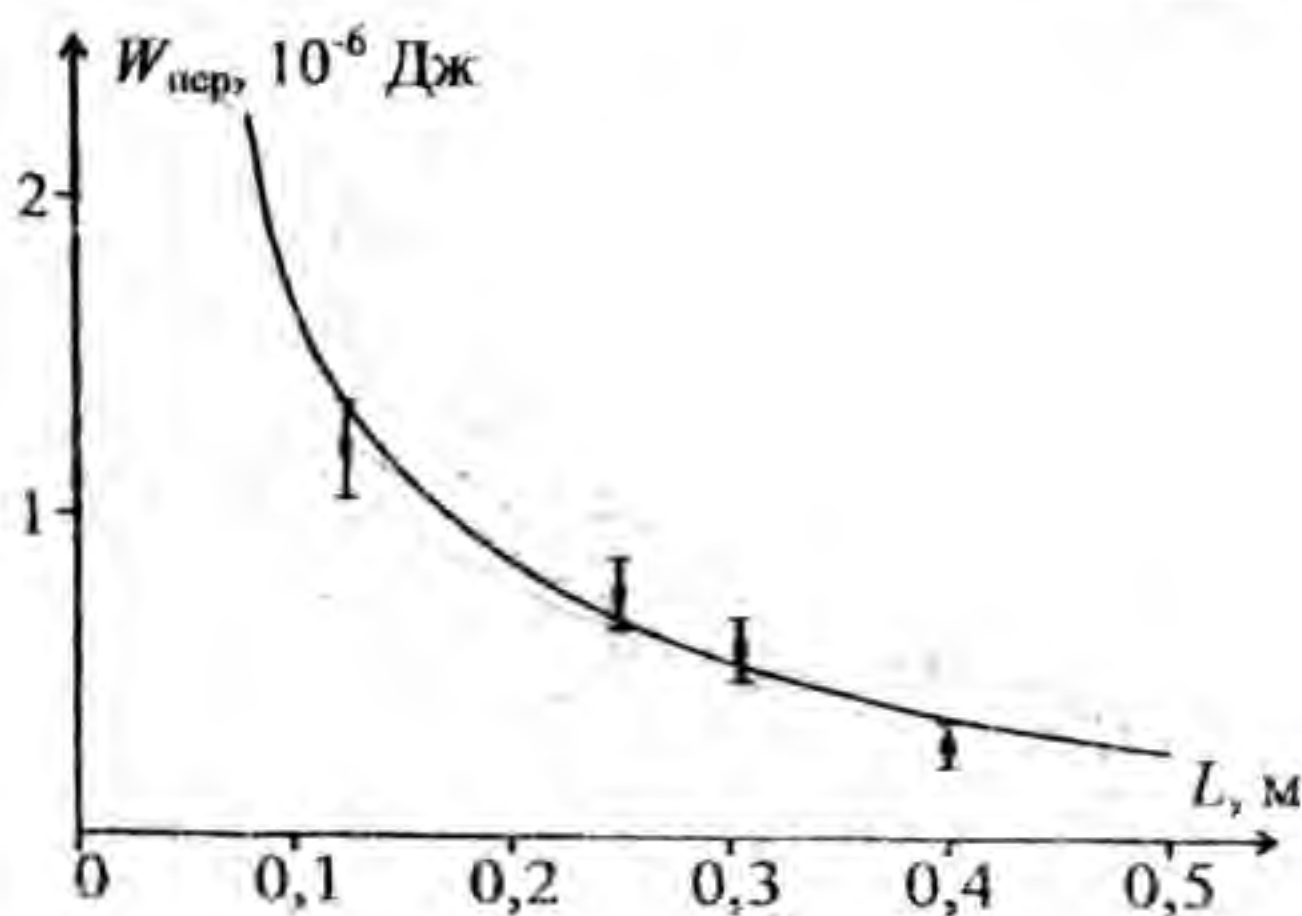


Рис. 5. Залежність енергії випромінювання $W_{\text{пер}}$ від довжини кювети L для різних приведених миттєвих потужностей $\bar{P}_0$: 1 – 1,26; 2 – 1,59; 3 – 1,81; 4 – 2,17; 5 – 2,9; 6 – 3,6.



На рис. 7 подана теоретична залежність (4) густини спектральної енергії $W_{\text{пер}}^v$ від L для різних $\tilde{P}_0$ (у логарифмічному масштабі). Величина $W_{\text{пер}}^v$ зменшується зі збільшенням L та $\tilde{P}_0$, оскільки зростає ν_f при збільшенні цих параметрів. Спектральна густина енергії $W_{\text{пер}}^v$ змінюється швидше ніж повна енергія $W_{\text{пер}}$, внаслідок квадратичної залежності від ν_f .

На рис. 8 наведена теоретична залежність $W_{\text{пер}}^v$ для $\tilde{P}_0 = 3,6$ та експериментальні дані, отримані за тих же умов, що і теоретична крива.

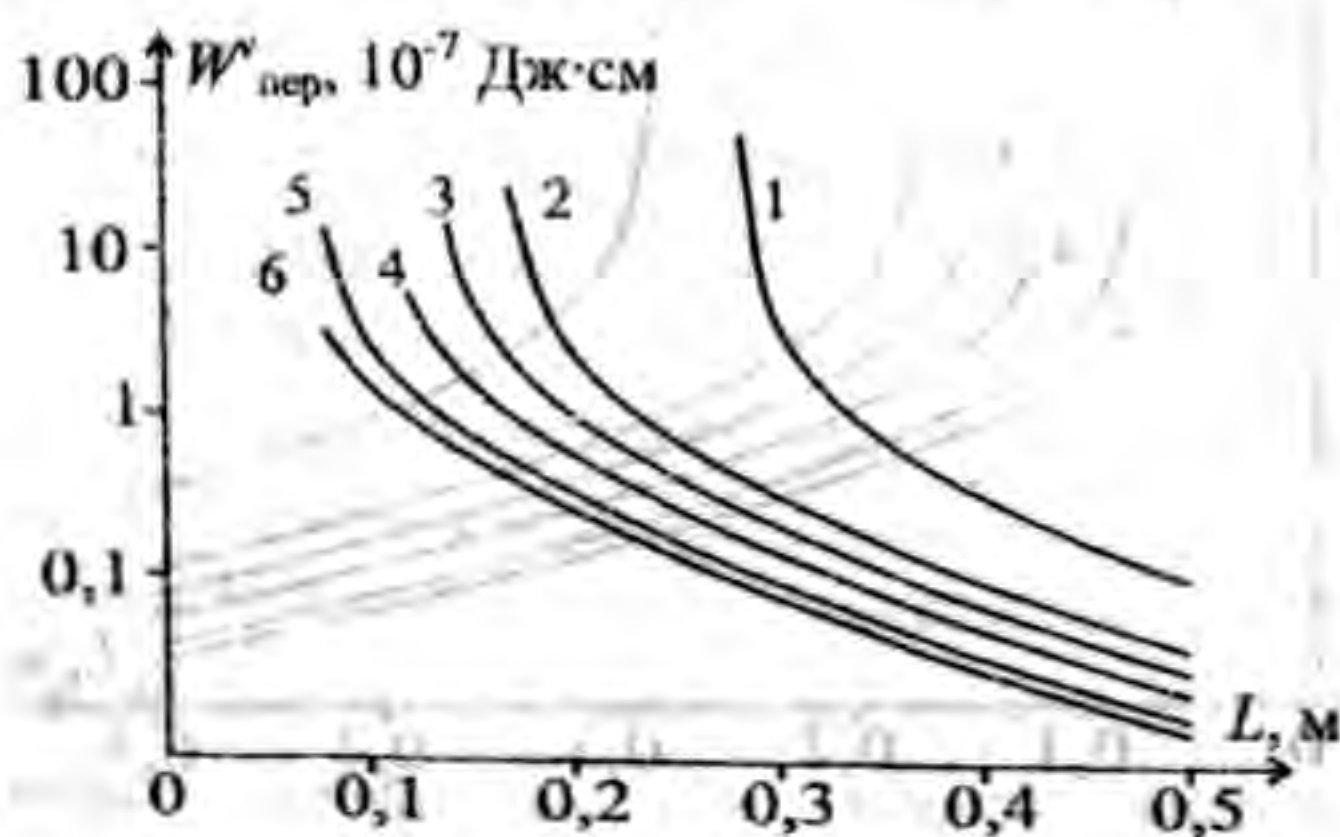


Рис. 7. Залежність спектральної густини енергії $W_{\text{пер}}^v$ від довжини кювети L для різних приведених миттєвих потужностей $\tilde{P}_0$:
1 – 1,26; 2 – 1,59; 3 – 1,81; 4 – 2,17; 5 – 2,9; 6 – 3,6.

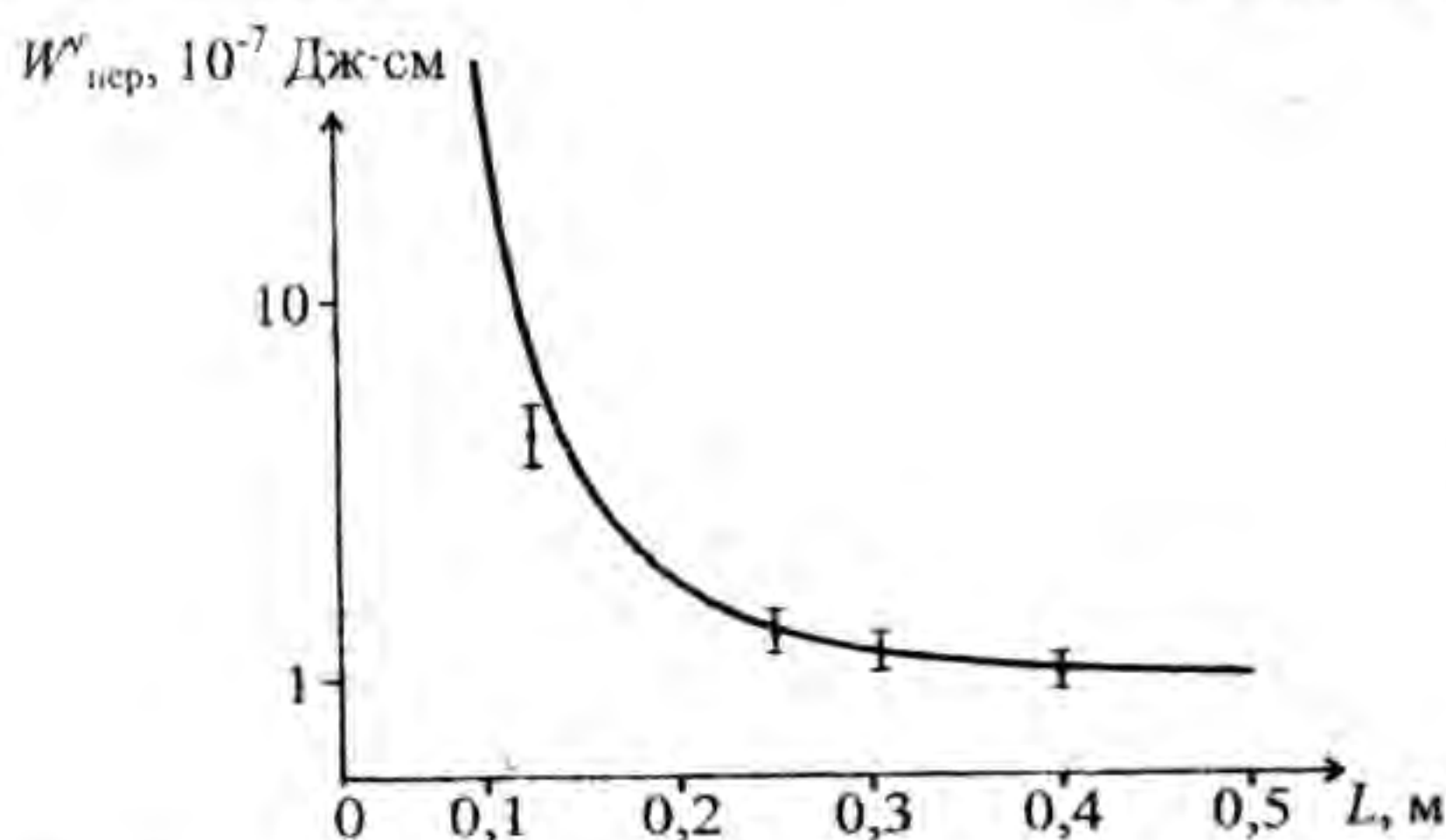


Рис. 8. Порівняння теоретичної та експериментальної залежності густини енергії $W_{\text{пер}}^v$ від довжини кювети L для $\tilde{P}_0 = 3,6$.

Аналіз формули (5) показує, що добуток $W_{\text{пер}}\Delta v_{\text{max}}$ не залежить від v_f . Виявляється, що

$$W_{\text{пер}}\Delta v_{\text{max}} \sim L(a_f/a_0)^{\mu/4}\tilde{P}^2, \quad (6)$$

де величина параметра μ визначена в [4]. Залежність $W_{\text{пер}}\Delta v_{\text{max}}$ від L є близька до лінійної, оскільки множник $(a_f/a_0)^{\mu/4}\tilde{P}^2$ у (6) майже не змінюється зі збільшенням L . Графік теоретичної залежності (5) з нанесеними експериментальними точками зображений на рис. 9.

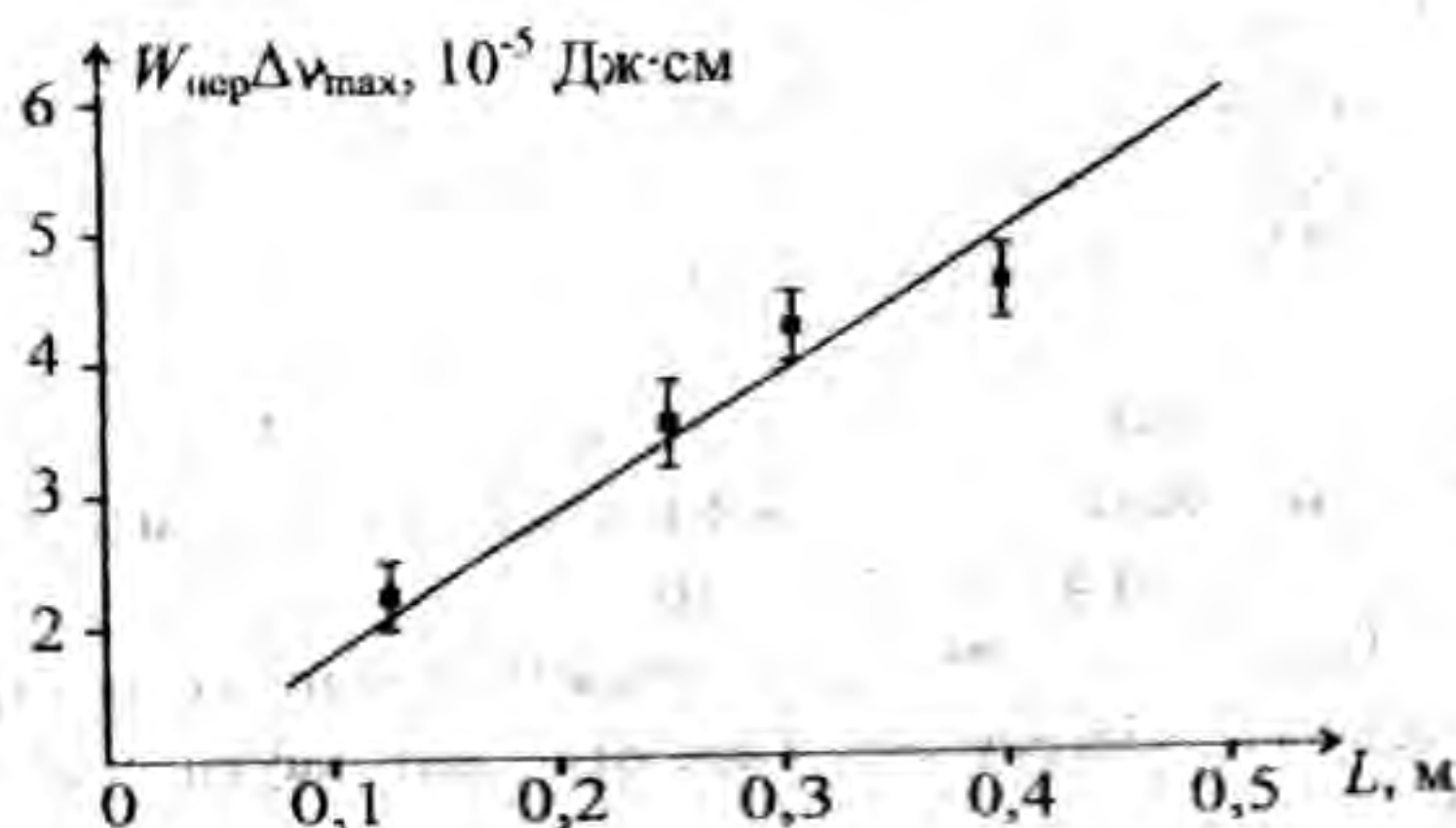


Рис. 9. Порівняння теоретичних та експериментальних даних для залежності величини $W_{\text{пер}}\Delta v_{\text{max}}$ від довжини L кювети.

Висновки

На основі експериментальних досліджень залежності величини спектральних розширень лазерного випромінювання, які виникають внаслідок перехідного ефекту, від довжини кювети для заданих миттєвих потужностей імпульсу встановлено, що величина спектральних розширень досягає $\sim 150 \text{ см}^{-1}$ у довгих кюветах. Ці дані задовільно узгоджуються з теоретичними розрахунками.

Експериментальні дані та теоретичні розрахунки доводять, що повна енергія "перехідного випромінювання" може становити $\sim 10^{-5}$ Дж. З'ясована залежність величини повної енергії "перехідного випромінювання" від довжини кювети для заданих приведених миттєвих потужностей.

Спектральна густина енергії "перехідного випромінювання" швидко зменшується зі зростанням довжини кювети, як і передбачається розробленою теорією явища.

Визначальною величиною для частотних та енергетичних характеристик "перехідного випромінювання" є швидкість фокальної області.

Експериментально встановлено, що добуток енергії "перехідного випромінювання" на величину спектрального розширення пропорційний довжині кювети. Це переконливо доводить достовірність фізичної моделі явища.

Література

1. Шен И. Р. Принципы нелинейной оптики: Пер. с англ. Под ред Ахманова С. А. – М. 1989. – 560с.
2. Ахманов С. А., Выслоух В. А., Чиркин А. С. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. – М.: Наука, 1988.
3. Dudka S. O., Ivanisik A. I., Konopatskiy A. V., Korotkov P. A. Transition Effect at the Medium-Vacuum Interface under the Self-phase Modulation of a Light Pulse // Ukrainian Journal of Physics. – 2006. – V.51, N 2. – P. 140 - 146.
4. Дудка С. О., Іванісік А. І., Коротков П. А. Аналог перехідного випромінювання в оптиці // Вісник Київського університету. Сер: фіз.-мат. науки. – 2003. – В.4. – С.324 - 330.
5. Дудка С. О., Іванісік А. І. Фазова модуляція в шаруватих структурах // Вісник Київського університету. Сер: фіз.-мат. науки. – 2004. – В.4. – С.318 - 324.

Надійшла до редакції 25.11.2006

УДК 537.534

Сергій М. Левитський

**Спрощений метод одержання
«закона 3/2» для струму у вакуум-
ному діоді**

Пропонується спрощений метод для одержання приблизного виразу електронного струму у вакуумному діоді без розв'язання системи рівнянь руху, неперервності та Пуассона. Хід розв'язку дозволяє студентам краще зрозуміти фізичну сутність розглядуваних процесів.

Ключові слова: вакуумний діод, електронний струм, просторовий заряд.

E-mail: oles@univ.kiev.ua.

Sergey M. Levitsky

**A simplified method of reception of
the «3/2 - law» for the current in a
vacuum diode**

A simple method for the reception of a approximated expression of the electron current in a vacuum diode is proposed, without the solution of a system of the motion, continuity and Poisson equations. This method gives the possibility for the students to better understand the physical essence of the considered processes.

Key Words: vacuum diode, electron current, space charge.

У більшості навчальних підручників і посібників з фізичної електроніки задача про величину струму у вакуумному діоді розглядається методом, викладеним у роботах Ленгмюра ще на початку минулого століття [1]. Цей метод полягає у сумісному розв'язанні системи диференціальних рівнянь у частинних похідних – рівнянь руху, неперервності і Пуассона. Окрім істотної математичної складності цей шлях має ще й той недолік, що в ньому втрачається в значній мірі фізична сутність розглядуваного процесу.

Нами пропонується як методичний засіб викладання цього питання спрощений шлях наближеного знаходження закону 3/2 для плоского вакуумного діода – питання, яке розглядається у будь-яких університетських курсах з загальної фізики або фізичної електроніки [2].

Розгляд ведеться на моделі діода зображений на рис.1. Один з його електродів (якому надано нульовий потенціал) – катод – має нескінченно велику емісійну здатність. Другий його електрод, до якого прикладений позитивний потенціал U_a – анод. Міжелектродна відстань дорівнює d , площа поверхні діода – S .

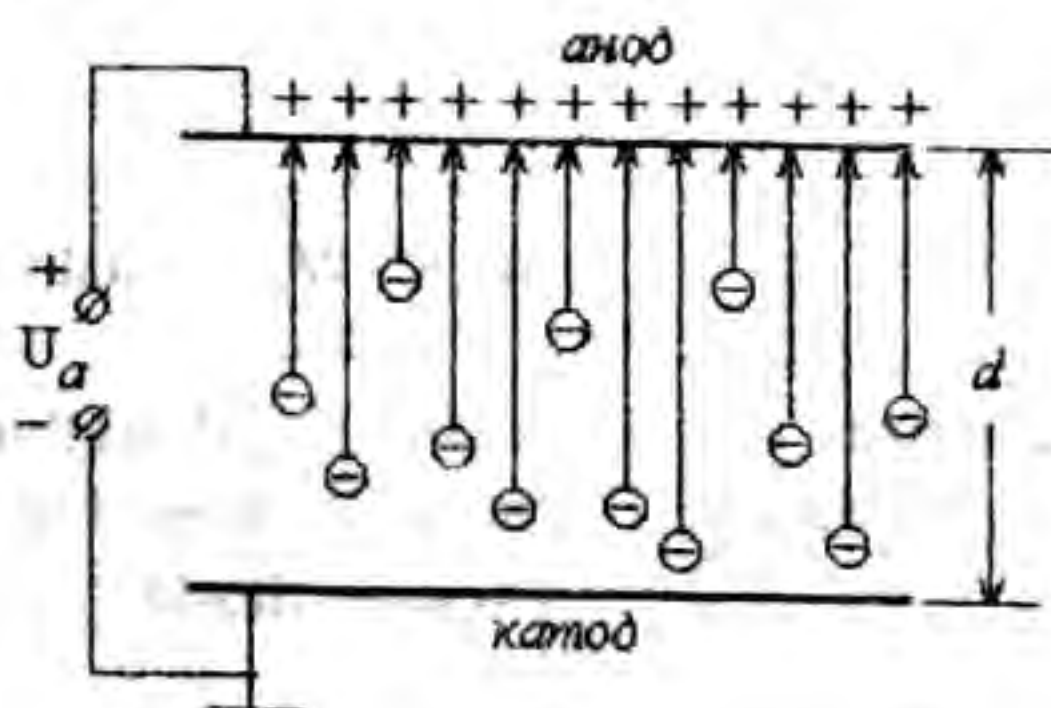


Рис. 1.

Розглянемо спочатку випадок, коли струм з катода ще не пішов. За рахунок прикладеного потенціалу U_a на аноді утворюється позитивний поверхневий заряд $q = CU_a$, де $C = \frac{\epsilon_0 S}{d}$ - ємність між анодом і катодом. Коли починається емісія, міжелектродний проміжок заповнюється електронним просторовим зарядом q^* саме таким, щоб скомпенсувати позитивний поверхневий заряд q на аноді. Якщо б просторовий заряд q^* був би більшим від q , то поле на поверхні катода стало б негативним, емісія припинилася б і просторовий заряд зник. Якщо ж просторовий заряд менший від q , то поле на поверхні катода було б прискорюючим і при необмеженій емісійній здатності останнього густина емітованого струму і просторовий заряд у міжелектродному проміжку стали б нескінченно великими. Отже єдиним непротивірним варіантом є припущення, що існуючий в об'ємі діоду просторовий заряд забезпечує саме нульове електричне поле у поверхні катода, а загальний просторовий заряд у міжелектродному проміжку q^* дорівнює q .

Визначимо q^* через середнє значення просторового заряду у міжелектродному проміжку $q^* = \rho_{cp} S d$ де $\rho_{cp} = \frac{J}{v_{cp}}$; J - густина струму у діоді, v_{cp} - середня швидкість електронів на шляху від катода до анода. Будемо вважати, що рух електронів під дією потенціалу U_a є рівномірно-прискореним:

$$v_{cp} = \frac{v_a}{2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2eU_a}{m}}$$

(це припущення є наближенням, бо в дійсності з причини наявності просторового заряду напруженість електричного поля є неоднорідною вздовж вісі z). Прирівнюючи q^* і q , одержимо

$$j = \frac{\epsilon_0}{2} \sqrt{\frac{2e}{m}} U_a^{3/2} \frac{1}{d^2}$$

Це і є густина емісійного струму, котра буде відбиратися від катода анодним потенціалом U_a - ані більша, ані менша.

Одержаний результат є наближенням зважаючи на неточність, що була припущена при визначенні v_{cp} . Точний розрахунок, одержуваний шляхом сумісного розв'язування рівняння руху електронів, рівняння неперервності струму і рівняння Пуасона, дають результат відмінний від одержаного нами лише числовим коефіцієнтом: 4/9 замість 1/2.

Причиною цьому є те, що електрони своїм просторовим зарядом знижують розподіл потенціалу у міжелектродному проміжку. На відміну від лінійного розподілу потенціалу $U(x)$ (який і був закладений у розглянуту вище модель) дійсний розподіл потенціалу визначається

параболічним законом $U(x) \cong Ax^{\frac{4}{3}}$. Саме це призводить до того, що середня швидкість електронів буде трохи меншою від $v_a/2$ і викликає зазначену вище відмінність у одержаному коефіцієнті.

Наведений розрахунок ясно показує, що першопричиною обмеження величини анодного струму є інерція електронів. Дійсно, якби маса електронів була безмежно малою, вони б пролітали через міжелектродний проміжок миттєво, не утворюючи там просторового заряду. Звідси ж випливає, що якби катод емітував не електрони, а важкі іони з масою $M \gg m$, то при всіх інших рівних умовах струм таких іонів був би у $\sqrt{M/m}$ разів менший від електронного.

1. Langmuir I. Phys. Rev. 2, 4550 (1913).

2. Левитський С.М. Фізична електроніка. ВПЦ «Київський Університет» 2005 154с.

Надійшла до редколегії 15.12.2006 р.

УДК 621.315.592

Сергій В. Лисоченко, Вічеслав О.
Безякін, Юрій С. Жарких, Олег В.
Третяк

**Автоматизована установка
безконтактного контролю якості
технологічних обробок
напівпровідникових пластин**

Описані автоматизована установка для безконтактного контролю результатів технологічних обробок напівпровідникових пластин і фізичні основи її функціонування. Можливості установки базуються на вимірюваннях зарядового стану поверхні методом контактної різниці потенціалів і дозволяють вимірювати величину дифузійної довжини неосновних носіїв заряду. На прикладі пластин кремнію, що пройшли технологічні етапи виробництва сонячних елементів, показані основні можливості установки і подані результати досліджень, що характеризують якість технологічних обробок.

Ключові слова: напівпровідникові пластини, безконтактні методи досліджень поверхні, контактна різниця потенціалів, дифузійна довжина.

Sergiy V. Lysochenko, Vicheslav O.
Bezyakin, Yuriy S. Zharkikh, Oleg
V. Tretyak

**Contactless control automatic
instrument of the technological
processing semiconductor plates
quality**

The automatic instrument for contactless testing of the technological processing results of the semiconductor plates and physical base of its functioning was described. The possibilities of the instrument are based on the measurements of surface semiconductor charge characteristics by the contact potential difference method and allow to measure the diffusion length value of the minority charged carriers. On the example of silicon plates, which were subjected to technological processes of solar element fabrication, the instrument principal possibilities and the studies results, characterizing the technological processing quality were shown.

Key Words: semiconductor plates, contactless methods of surface studies, contact difference of potentials, diffusion length.

E-mail: lys@mail.univ.kiev.ua

I. Вступ

Контроль стану напівпровідникових пластин і результатів їх фізико-хімічних обробок є важливим на всіх етапах виробництва планарних електронних приладів і може визначати якість кінцевої продукції. У зв'язку з цим особливої ваги набувають швидкісні і неруйнуючі методи контролю, які можуть включатися в ланцюжки зворотного зв'язку управління технологічними операціями і оперативно впливати на їх хід. Поставленим вимогам, у значній мірі, відповідає безконтактний метод Кельвіна вимірювання контактної різниці потенціалів (КРП). За

© С.В. Лисоченко, В.О. Безякін,

Ю.С. Жарких, О. В. Третяк, 2006

притаманних йому властивостей, а саме: високої інформативності, відсутності контактів до зразка, оперативності і можливості автоматизації вимірювань для контролю великих партій напівпровідникових пластин, він є унікальним і переважає інші методи [1-3]. Особливо швидкі і комерційно вагомі результати може дати впровадження установок, створених на основі методу Кельвіна, у бурхливо зростаюче виробництво сонячних елементів (СЕ). Причинами цього є часта зміна використовуваних марок кремнію, що вимагає оперативної корекції технології виробництва, а також використання пластин з сильно розвиненою поверхнею після операції різки. Останнє призводить до накопичення заряду в поверхневих станах. Використання скануючої методики Кельвіна дозволяє характеризувати зарядовий стан поверхні і розраховувати визначальні для коефіцієнту корисної дії СЕ рекомбінаційні характеристики матеріалу. В поданій роботі розглянуто принципи побудови і функціонування дослідницької автоматизованої установки для контролю методом КРП якості технологічних обробок кремнієвих пластин. Для ілюстрації її можливостей подано ряд експериментальних даних, отриманих при дослідженні пластин кремнію, що використовуються при виробництві СЕ.

2. Фізичні основи роботи установки

2.1. Контактна різниця потенціалів.

КРП V_k в системі метал-напівпровідник обумовлена різницею термоелектронних робіт виходу металу Φ_m і напівпровідника Φ_s і за визначенням $eV_k = \Phi_m - \Phi_s$. Величини робіт виходу залежать від енергії спорідненості до електрона χ і положення рівня Фермі F . В металі рівень Фермі практично співпадає з максимальною енергією електронів зони провідності і дуже слабо залежить від температури. В напівпровіднику положення рівня Фермі визначається температурою T і концентрацією електронів n , що є дуже чутливою до величини поверхневого потенціалу ϕ_s . Наявність межі кристала, домішок, забруднень і електричних зарядів на поверхні напівпровідника різного походження може призводити до вигину зон і відповідних змін ϕ_s і Φ_s , оскільки χ_s залежить тільки від структури кристала. Тому величина V_k є параметром, що характеризує стан поверхні напівпровідника.

2.2. Метод Кельвіна.

Принцип вимірювання V_k за методом Кельвіна ілюстровано рис. 1. На відстані b від досліджуваного напівпровідника розміщується пластинка з хімічно інертного металу (пробний електрод). Пластинка приводиться в зворотно-поступальний рух у напрямку нормальному поверхні, і разом з напівпровідником вони утворюють динамічний конденсатор ємністю $C(t)$. Між обкладками конденсатора існує різниця потенціалів. Її повна величина

складається з суми V_k , а з також усіх внутрішніх (що можуть існувати в напівпровіднику) і зовнішніх різниць потенціалів у колі динамічного конденсатора. Сумарна дія двох останніх чинників позначена на рис. 1 як V_{ad} . Зміни ємності динамічного конденсатора викликають зміни заряду на його обкладках і через резистор R протікає струм $i(t)$. Викликане струмом падіння напруги на резисторі R пропорційно V_k і може бути виміряно вольтметром. Для випадків, коли R є входним опором амперметра чи величина R є набагато меншою за величину імпедансу $C(t)$ на частоті Ω коливань пробного електрода, величина $i(t) = (V_k + V_{ad})dC(t)/dt$.

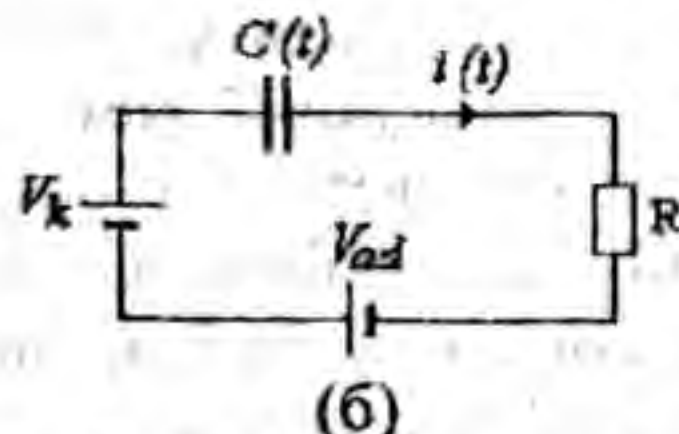


Рис. 1. Схема розташування зразка і пробного електрода при вимірюваннях за методом Кельвіна (а) і еквівалентна схема кола динамічного конденсатора (б).

Величина струму $i(t)$, а отже точність і чутливість методу збільшуються зі збільшенням площі пробного електрода, амплітуди коливань Ω і зі зменшенням відстані b . Для дослідження невеликих ділянок поверхні з різними значеннями КРП, необхідне застосування пробного електрода невеликого діаметра. Його розміри обмежується механічними властивостями матеріалу і чутливістю підсилювача.

3. Експериментальна установка

3.1. Блок-схема і робота установки.

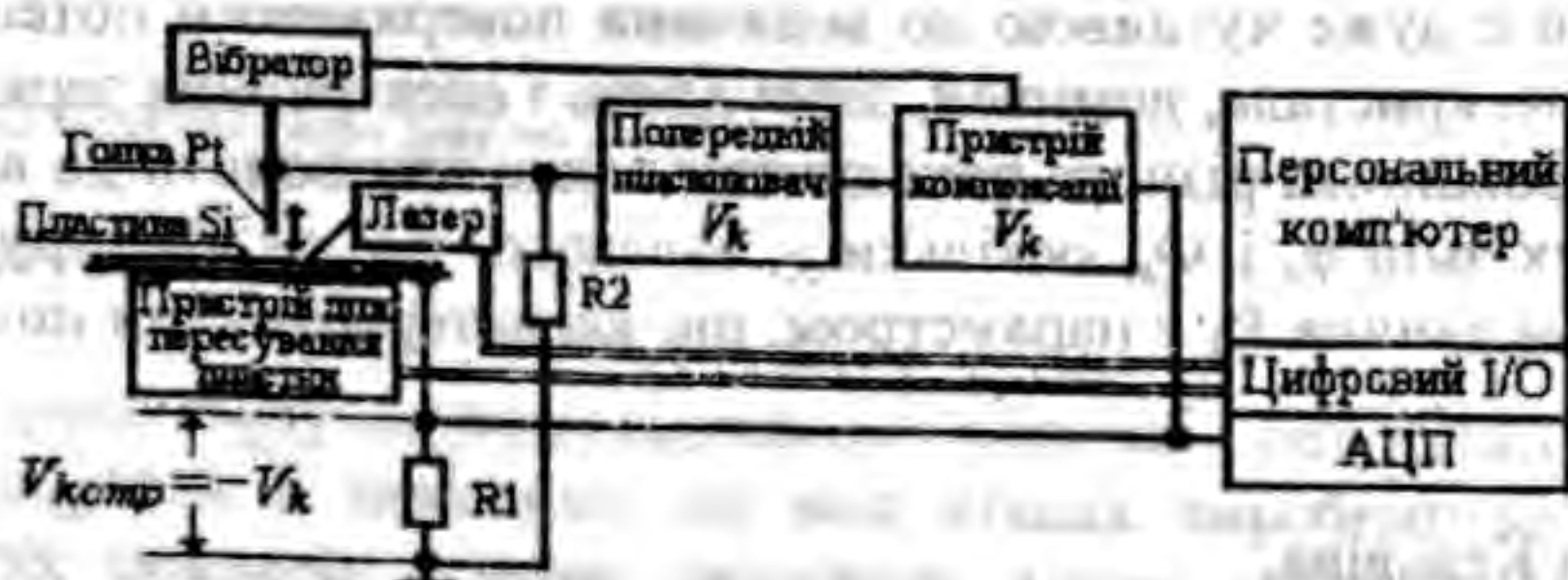


Рис. 2. Блок-схема установки.

Блок-схема установки представлена на рис. 2. Виміри здійснювались за компенсаційним методом. Платинова голка діаметром 0,4мм (пробний електрод) приводилась у рух відносно поверхні кремнієвої пластини за

допомогою вібратора, працюючого на частоті $\Omega \approx 429 \text{ Гц}$. Сигнал пропорційний V_k підсилювався попереднім підсилювачем. Надалі він поступав на пристрій компенсації, вихідний сигнал якого $V_{comp} = -V_k$ через коло зворотного зв'язку подавався на резистор R_1 і компенсував V_k у колі динамічного конденсатора (рис. 1б). Одночасно напруга $V_{comp} = -V_k$ подавалась на плату аналого-цифрового перетворювача (АЦП) і записувалась у пам'ять персонального комп'ютера (ПК). Додатково попередній підсилювач і пристрій компенсації разом з вібратором утворювали коло зворотного зв'язку по високій частоті $f = 465 \text{ кГц}$, частиною якого був проміжок голка-пластина. За допомогою цього кола автоматично відслідковувалась задана відстань b від голки до пластини. Для пересування пластини була використана доопрацьована зондова установка „Зонд А1”. Керування зондовою установкою здійснювалось цифровим сигналом (подвійні лінії на рис. 2) з плати цифрового вводу-виводу ПК. Напівпровідниковий лазер, що випромінював світло з довжиною хвилі $\lambda = 0,63 \text{ мкм}$, разом з оптичною системою утворював світлову смужку на поверхні пластини кремнію. Ввімкнення лазера здійснювалось програмно з ПК.

3.2. Програмне забезпечення і інтерфейс користувача.

Програмне забезпечення установки розроблено з використанням алгоритмічної мови програмування C++ і працює під оболонкою „Windows”. Воно забезпечувало синхронізовану роботу виконуючих і вимірювальних пристроїв установки та проведення обчислень. Інтерактивний інтерфейс користувача виконано з урахуванням основних вимог стандартів фірми „Microsoft”. Він є інтуїтивним і зручним у користуванні. Наведемо основні можливості інтерфейсу, що надаються користувачу при проведенні досліджень:

1. Запам'ятовування даних і відкриття файлів даних експериментів, проведених раніше.
2. Встановлення режимів проведення експерименту (послідовність пересування пластини, вимірів і ввімкнення освітлення). Налаштування експерименту (затримки ввімкнення лазера, крокових двигунів, величина і кількість кроків пересування пластини).
3. Ручне керування кроковим двигуном і лазером.
4. Побудова залежності $V_k(x)$ в реальному часі в процесі вимірювань.
5. Розрахунок дифузійної довжини l_d і часу життя τ_n .
6. Створення і друк заключного звіту.

4. Основні види досліджень, виконані на установці

В роботі досліджувалися пластини монокристалічного р-кремнію, легованого бором. Площина пластин була нормальна кристалографічному

напрямку [100], а їх розмір становив 100 на 100 мм. Пластини вирізались зі зливків кремнію питомого опору $\rho=(0,8-2)\text{Ом}\cdot\text{см}$ методом швидкісної різки дротом. Надалі пластини проходили стандартні технологічні операції, що виконуються при створенні СЕ з р-п переходом.

4.1. Вимірювання величини КРП і гетерогенності її розподілу вздовж поверхні.

В роботі [4] було встановлено зв'язок між зарядовим станом поверхні відмитих пластин кремнію, призначених для виробництва СЕ і висотою рельєфа, що утворюється на них після технологічної операції текстурування. Після розрізання зливків пластини відмивались під дією ультразвуку у знежирювачах двох видів. Незалежно від величини ρ , пластини після відмивок утворили дві групи з негативним і позитивним знаками V_k . Відповідні залежності $V_k(x)$ показані на рис. 3а. Позитивним значенням V_k відповідав знежирювач типу І, а негативним V_k знежирювач типу ІІ. На рис. 3б показана залежність $V_k(x)$ в області межі дії цих знежирювачів ($x\approx 20\text{мм}$) для однієї з досліджуваних пластин. В цьому випадку кожна половинка пластини відмивалась окремо.

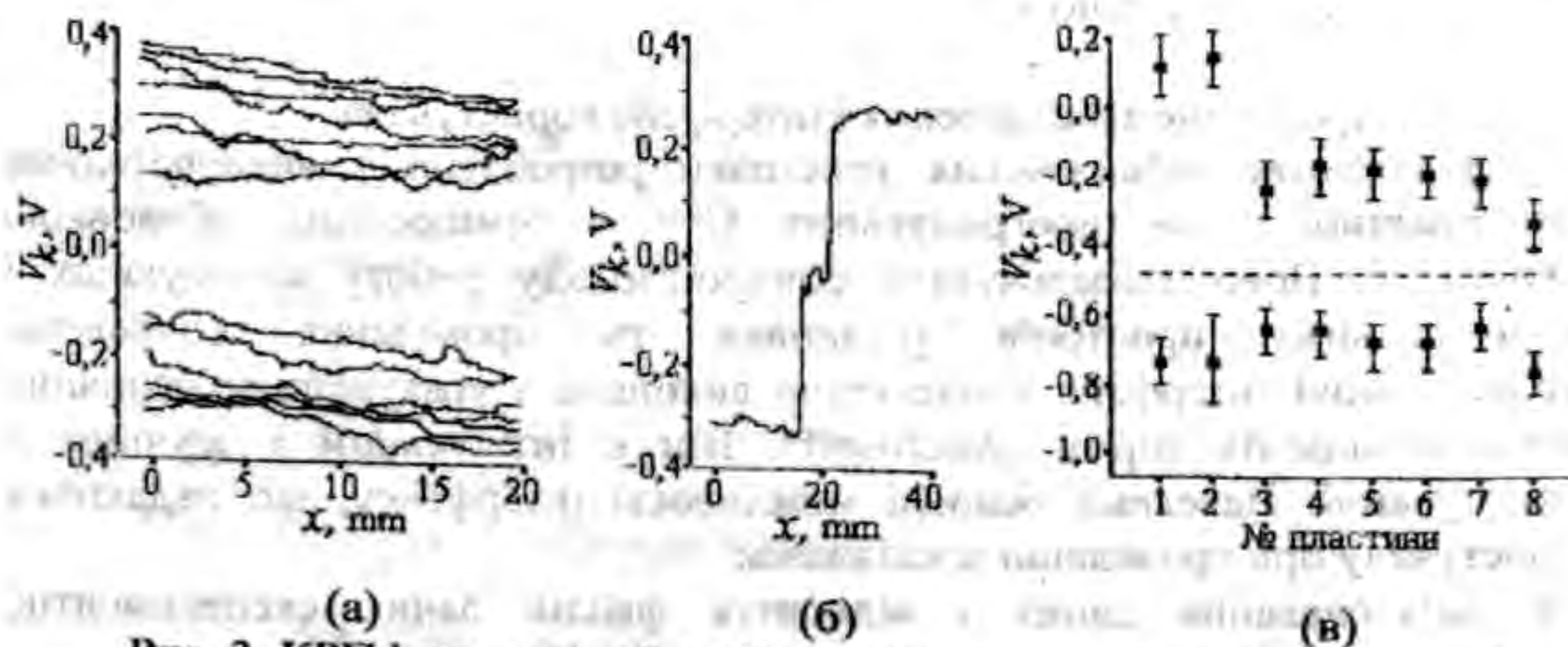


Рис. 3. КРП і гетерогенність її розподілу вздовж поверхні кремнієвих пластин. Відмивка у двох типах знежирювачів (а) і (б). Обробка в травнику СР-4 (в). Розкид значень V_k у межах однієї пластини показано вертикальними лініями.

Після проведення операції текстурування, пластини досліджувались на електронному мікроскопі. Дослідження показали чітку кореляцію між знаком вимірюваної КРП і висотою пірамідок травлення. Позитивним значенням V_k відповідала середня висота рельєфу h , що дорівнювала (6-8)мкм. Пластини з негативним V_k мали $h\approx(3-4)\text{мкм}$.

При зміні режимів відмивок (час, температура) величина V_k набувала проміжні значення, що знаходились у межах $\pm 0,1\text{В}$. Таким значенням V_k відповідала середня висота рельєфу h в порівнянні з наведеними вище.

Різниця у величині V_k пояснюється появою додаткового заряду на поверхні кремнію при технологічних відмивках у знежирювачах різного складу. Цей заряд накопичується на пластинах зі значною товщиною порушеного шару і відповідно значно більш розвинутою поверхнею в порівнянні з відполірованими пластинами. Під час операції утворення текстури в селективному травнику, поверхневий заряд впливає на процес анодного розчинення кремнію і відповідно на отриманий рельєф. Таким чином, вимірювання V_k дозволяють не тільки визначати зарядовий стан поверхні, а й спрогнозувати результати подальших технологічних обробок і цілеспрямовано впливати на їх результати.

На рис. 3в показана залежність $V_k(x)$ на пластинах кремнію після розрізання і відмивки в деіонізованій воді (верхні точки, що відділені горизонтальною пунктирною лінією) і після кислотної поліровки в травнику CP-4, і відмивки (нижні точки). Як видно з рисунка, під дією травника поверхня заряджається, і різко змінюється величина V_k . Ці зміни V_k відбуваються аналогічно до показаних на рис. 3а і рис. 3б під дією знежирювачів, оскільки товщина шару, знятого поліруючим травником, є набагато меншою за товщину порушеного шару, в розвинутій поверхні якого акумулюється заряд. Обробка в травнику пластин з повністю знятим порушеним шаром не призводила до значних змін V_k .

Пластини за №1-2 і №3-8 мали різну концентрацію електронейтральної домішки вуглецю ($N_c=3 \cdot 10^{16}$ і $N_c=(2,7-2,9) \cdot 10^{17}$) та різний час життя неосновних носіїв заряду ($\tau_n=40-70$ мкс і $\tau_n=10-40$ мкс відповідно). Як видно з рис. 3в, ці дві групи пластин мали значну різницю в величині V_k виміряної до обробки в CP-4. Після обробки в травнику ця різниця була нівельована, і всі пластини мали приблизно одне й те саме значення КРП. Причиною цього була адсорбція заряджених іонів розвинутою поверхнею кремнію.

Важливим показником якості пластин напівпровідника і проведених технологічних операцій є гетерогенність розподілу V_k по поверхні. Її величину можна оцінювати візуально за набором відсканованих залежностей $V_k(x)$ (див. рис. 3) або після проведення необхідних розрахунків і побудови гістограм. Гетерогенність зарядового стану поверхні свідчить про її забрудненість або низьку якість кремнію. В більшості випадків на чистій свіжовідмитій поверхні кремнію розподіл КРП вздовж поверхні змінюється мало.

В ряді випадків неомогенності поверхні є електрично нейтральними і не виявляють себе в змінах V_k . Це може бути за наявності острівців надтонкого окису, дефектів, що виникають при розрізанні зливків, неоднорідності складу кремнію, тощо. Виявлення таких плям методом КРП можливе за умови декорування поверхні зарядженими іонами в тліючому розряді, електроліті чи під дією ультрафіолетового опромінення.

В цьому разі посилюється контрастність утворень різної природи на поверхні кремнію, і виявляються нові, раніше непомічені.

При витримці, поверхня пластин взаємодіє з оточуючим середовищем, і потенціальний рельєф поверхні змінюється. Цей процес для різних видів обробок протікає по різному і характеризується часом, починаючи від декількох хвилин. Ця обставина повинна бути врахована і контроль зарядового стану пластин бажано здійснювати безпосередньо після проведення технологічних операцій.

4.2 Дослідження КРП при дії світла.

Вимірювання V_k на пластинах кремнію при освітленні зразка дозволяє збільшити об'єм інформації, що характеризує якість пластин і їх технологічних обробок, а також контролювати параметри СЕ на прикінцевих стадіях виробництва.

4.2.1. Визначення дифузійної довжини неосновних носіїв заряду.

В основу визначення дифузійної довжини неосновних носіїв заряду l_d покладено спосіб [5]. У пропонованому способі l_d розраховується за змінами величини V_k , пов'язаної з просторовим розподілом генерованих світлом носіїв у неосвітленій частині зразка.

Основним наслідком освітлення напівпровідника квантами з енергією більшою за ширину забороненої зони є генерація нерівноважних носіїв заряду. Внаслідок дифузії концентрація нерівноважних електронів Δn і дірок Δp спадає в неосвітленій частині зразка. У випадку освітлення зразка світлом, що поглинається в тонкому приповерхневому шарі, точковою світловою плямою або кільцем достатньо великого діаметру геометрію задачі можна вважати одномірною. Розв'язок основного рівняння неперервності для цього випадку виражається формулою [6]:

$$\Delta n(x) = \Delta n(0) \exp(-x/l_d), \quad (1)$$

де $l_d = \sqrt{D_n \tau_n}$ - дифузійна довжина, D_n - коефіцієнт дифузії, τ_n - час життя, x - координата.

Визначивши на експерименті розподіл величини Δn вздовж напрямку дифузії x і виходячи з рівняння (1), можна за нахилом графіка

$$\ln \Delta n(x) = \text{const} - x/l_d \quad (2)$$

знайти величину дифузійної довжини l_d .

У випадку наявності поверхневого вигину зон, наслідком дії світла на напівпровідник є виникнення поверхневої фото-електрорушійної сили (ФЕРС) V_f . З'являється додаткова різниця потенціалів між поверхнею і об'ємом, а поверхневий потенціал ϕ_s змінюється на величину $V_f = \Delta \phi_s$. Якщо освітлюється тільки частина поверхні напівпровідника, то внаслідок дифузійного зміщення носіїв від межі світло-тінь поверхневий потенціал $\phi_s = \phi_s(x)$ і відповідно $V_f = V_f(x)$.

При невеликих рівнях збудження в напівпровіднику р-типу, хід квазірівня Фермі для дірок F_p буде приблизно співпадати з рівнем Фермі F в рівноважному стані, а хід квазірівня $F_n(x)$ в області, що прилягає до межі світло-тінь, буде визначатися ходом $\varphi_s(x)$ і $F_n(x) \approx F + e\varphi_s(x)$, де e – заряд електрона. Тому для невідродженого газу концентрація електронів:

$$n = n_0 + \Delta n = N_c \exp(F_n - E_c / kT) = N_c \exp(F - E_c / kT) \exp(e\varphi_s / kT) = n_0 \exp(e\varphi_s / kT) \quad (3)$$

де n_0 – концентрація електронів в рівновазі, N_c – ефективна густина станів в зоні провідності.

Віднявши від обох частин (3) n_0 , отримаємо співвідношення для розподілу нерівноважних електронів вздовж поверхні зразка:

$$\Delta n = n_0 [\exp(e\varphi_s / kT) - 1] \quad (4)$$

Об'єднуючи (4) з (2), знаходимо зв'язок між змінами поверхневого потенціалу, викликаного дифузійною електронів в область тіні і величиною поверхневого потенціалу:

$$\ln[\exp(e\varphi_s / kT) - 1] = \text{const} - x / l_d \quad (5)$$

Знаючи величину l_d , можна визначити час життя τ_n . Для цього величину рухливості електронів μ_n необхідно знати з незалежних вимірювань.

Формули (1) і (5) отримані за умови нехтування процесами дрейфу носіїв у електричному полі. За наявності електричного поля E на дифузійну носіїв накладається дрейф. Розрізняють довжини l_{d1} і l_{d2} відповідно для випадків відсутності або наявності тягнучого чи гальмуючого поля. Для одновимірного випадку розв'язання рівняння неперервності [7]:

$$\Delta n(x) = C_1 \exp(-x / l_{d1}), \quad l_{d1} = \frac{2l_d^2}{\sqrt{l_E^2 + 4l_d^2} + l_E} \quad (6)$$

$$\Delta n(x) = C_2 \exp(-x / l_{d2}), \quad l_{d2} = \frac{2l_d^2}{\sqrt{l_E^2 + 4l_d^2} - l_E} \quad (7)$$

$$l_E = \tau_n \mu_n E \quad (8)$$

де C_1, C_2 – константи, D_n – коефіцієнт дифузії, μ_n – рухливість носіїв заряду.

При визначенні l_d за способом [5] на носії заряду діє електричне поле обумовлене наявністю V_f . Тому при визначенні дифузійної довжини з співвідношення (5) отримана величина l_d буде рівною довжинам l_{d1} чи l_{d2} . Знаючи $V_f(x)$ можна врахувати вплив дрейфу і за формулами (6)–(8) розрахувати величину l_d . Оскільки електричне поле не є постійною величиною, то в розрахунок вводиться усереднена величина електричного поля $\bar{E}$.

4.2.2. Експериментальні результати.

На рис. 4а показано типові залежності $V_k(x)$ в темноті (крива 1) і при освітленні смужкою світла з великим радіусом кривизни (крива 2). Такі

експериментальні дані були характерними для добре відмитих пластин після операції текстурування чи зняття порушеного шару і дозволяли визначати величини I_d і τ_n . Зауважимо, що неякісно відмиті пластини, або такі, що довгий час перебували під впливом оточуючого повітря, характеризувались набагато більш негомogenous потенціальним рельєфом поверхні в порівнянні з показаним на рис. 4а. У цьому випадку розрахунки на основі таких експериментальних даних були утруднені. Придатність даних для подальшої комп'ютерної обробки обмежувалась мінімальним значенням поверхневої ФЕРС $V_f \sim 0,02V$. За менших значень V_f розрахунок дифузійної довжини I_d і часу життя τ_n був неможливим або виконувався з великою похибкою.

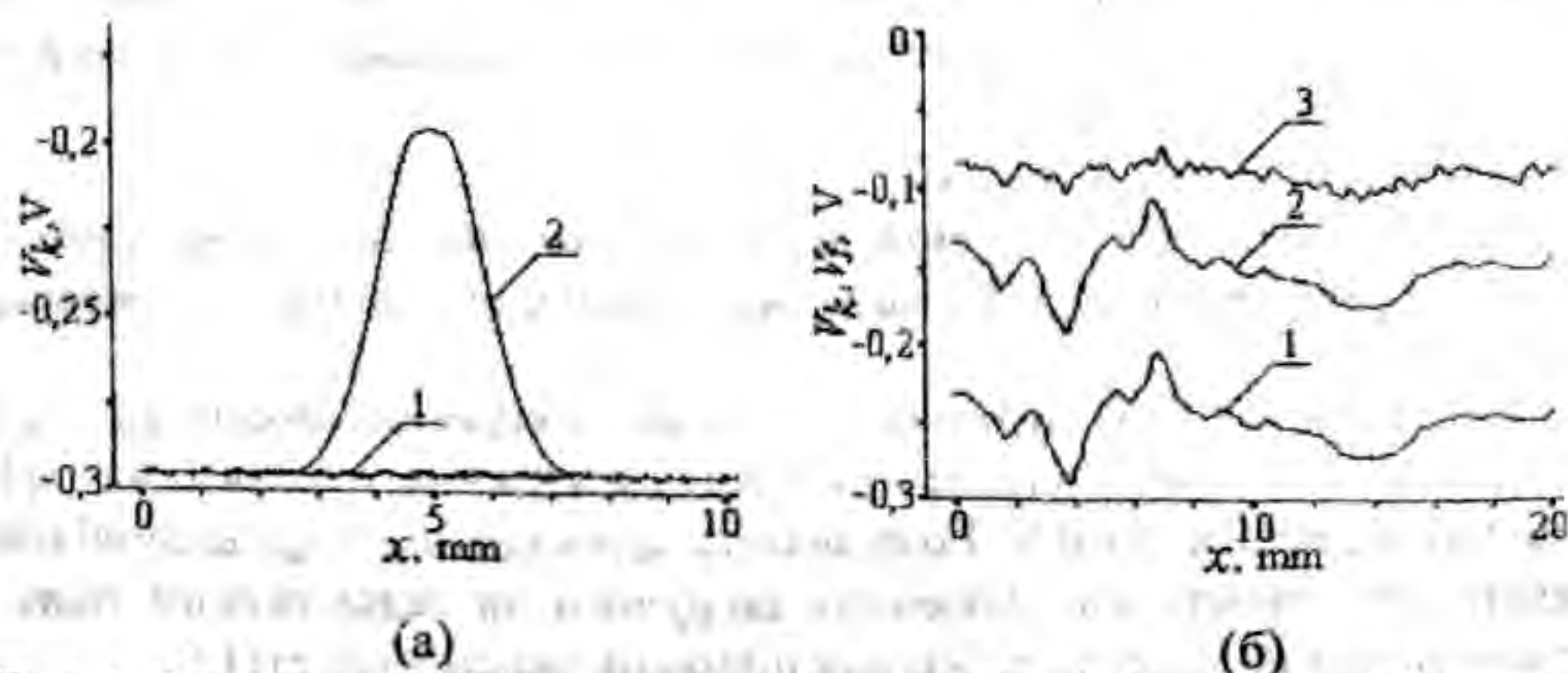


Рис.4. Залежності $V_k(x)$ в темноті (криві 1) і при освітленні (криві 2). Крива 3 залежність $V_f(x)$. (а) при освітленні смужкою світла текстурованої пластини і (б) при рівномірному освітленні текстурованого зразка після проведення операції дифузії фосфору.

Для контролю операції дифузії фосфору досліджувався розподіл $V_k(x)$ і $V_f(x)$ при рівномірному освітленні пластини розсіяним сонячним світлом. На рис. 4б показано типові залежності $V_k(x)$ в темноті (крива 1), на світлі (крива 2) і залежність $V_f(x)$ (крива 3), що була розрахована як різниця кривих 1 і 2. У даному випадку $V_f(x)$ є алгебраїчною сумою ФЕРС СЕ на р-п переході і поверхневої ФЕРС. За високого ступеня легування п області і невеликих рівнях збудження поверхнева ФЕРС є незначною в порівнянні з ФЕРС СЕ. Тому величина $V_f(x)$ близька до величини електрорушійної сили холостого ходу СЕ, а розкид значень $V_f(x)$ вздовж поверхні відображає гетерогенність властивостей р-п переходу, яка є наслідком неоднорідності вихідного кремнію і особливостей подальших технологічних обробок пластин. Аналогічні залежності V_k і $V_f(x)$ були отримані на таких самих пластинах, вкритих пасивуючим шаром фосфоросилікатного скла, а також після проведення операції металізації.

Такі вимірювання можуть бути використані для контролю на прикінцевих стадіях виробництва, а також для вихідного контролю.

Висновки

Розроблена і створена автоматизована установка безконтактного контролю поверхні напівпровідників методом КРП.

Показано, що установка дає можливість досліджувати зарядовий стан, забрудненість і ступінь гетерогенності поверхні напівпровідника. При наявності змін КРП під дією світла можливе визначення дифузійної довжини і часу життя неосновних носіїв заряду, а також електрорушійної сили р-п переходу СЕ.

Розроблені установка і методики досліджень поверхні можуть бути використані для створення аналогічної промислової установки і використовуватися для підвищення якості післяопераційного контролю при виробництві СЕ та інших напівпровідникових приладів.

Література

1. Жарких Ю.С., Евдокимов А.Д., Полтавцев Ю.Г. Об использовании метода КРП для исследования поверхности полупроводника //Электронная техника. Сер. Материалы. - 1983. - Т. 20. Вып. 5. С. 461-469.
2. Kronik L., Shapira Y. Surface photovoltage phenomena: theory, experiment, and applications // Surface Science Reports. - 1999. - 37. С. 1-206.
3. Schroder D. K. Contactless surface charge semiconductor characterization // Journ. of Materials Science and Engineering. - 2002. - B91-92. С. 196-210.
4. Жарких Ю.С., Лисоченко С.В., Третьак О.В., Новіков С.С. Контроль стану поверхні кремнієвих пластин після хімічних обробок //Нові технології. - 2004. - №1-2 (4-5). С. 18-20.
5. Жарких Ю.С., Лисоченко С.В., Третьак О.В., Новіков С.С. Спосіб визначення довжини дифузійного зміщення неосновних носіїв заряду в напівпровідниках Деклараційний патент на винахід від 15.06.2004 // Бюлетень. - 2004. - №6.
6. Измерение параметров полупроводниковых материалов. //Ковтонюк Н.Ф., Концевой Ю.А. -М.: Металлургия, 1970. - 432с.
7. Практикум по полупроводникам и полупроводниковым приборам. //Под ред. Шалимовой К.В. -М.: Высшая школа, 1968. - 464с.

Надійшла до редакції 31.08.06

УДК 519.9

Володимир В. Малюта, В'ячеслав В.
Обуховський

Volodymyr V. Malyuta, Vyacheslav V.
Obukhovsky

**Розповсюдження поляризаційного
імпульса в сегнетоелектриках.**

**Spreading of repolarization pulse in
ferroelectrics.**

Розглянуто хвища нелінійної динаміки процесів переполаризації в сегнетоелектриках. Запропоновано відповідну модель. Теорію застосовано для розгляду розповсюдження імпульсу в одновимірній системі (струні). Показано, що в межах запропонованої моделі нелінійної взаємодії, розповсюдження початково зосередженого імпульсу має тенденцію до солітоно-подібної поведінки.

Ключові слова: солітон
сегнетоелектрик, поляризація.

In this article the phenomenon of non-linear dynamics in ferroelectrics was studied and corresponding model was proposed. The theory was applied to the investigation of pulse spreading in one-dimensional system (string). Within frame of proposed model, it was shown that spreading of pulse which was initially concentrated has tendency to soliton-like behavior.

Key words: Soliton, Ferroelectrics,
polarization.

¹ E-mail: vvo@univ.kiev.ua

² E-mail: wowa@univ.kiev.ua

1. Модель.

Для вивчення динаміки поляризації в сегнетоелектриках доцільно розглянути найпростішу модель середовища. Наприклад, одновимірний ланцюг частинок двох сортів, як показано на Рис. 1 (чорні і білі частинки представляють різні підґратки). Локальна поляризація в середовищі визначається різницею амплітуд зміщень від положення рівноваги сусідніх частинок. Головна мета нашої роботи полягає в моделюванні процесів розповсюдження збурень у системі з нелінійними зв'язками.

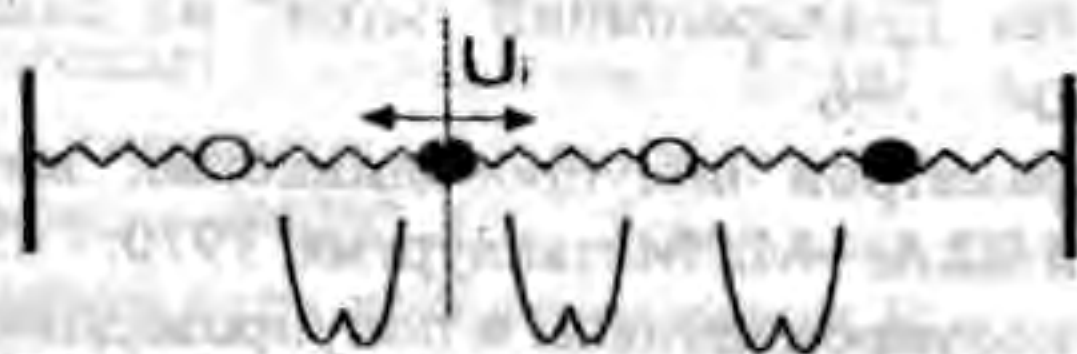


Рис. 1 Модель одновимірної струни з двома підґратками. (Насправді кількість частинок у струні дуже велика)

Ці зв'язки в одновимірній системі можна описати за допомогою потенційної енергії такого типу:

$$V = a_{i,j} \cdot (u_i - u_j)^2 + b_{i,j} \cdot (u_i - u_j)^4, \quad \text{де } a < 0, \quad b > 0. \quad (1)$$

Тут враховано нелінійність взаємодії з точністю до кубічних членів. Цю апроксимацію було застосовано Ландау і Гінзбургом [1] для пояснення процесів, що пов'язані з виникненням поляризації в сегнетоелектриках. Використовуючи (1), знайдемо функцію Лагранжа:

$$L = \sum_i \frac{\mu \cdot \dot{u}_i^2}{2} - \sum_i [a_{i,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1})^2 + b_{i,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1})^4 + a_{i,i+1} \cdot (u_i - u_{i+1})^2 + b_{i,i+1} \cdot (u_i - u_{i+1})^4] \quad (2)$$

і з неї отримуємо рівняння руху:

$$\mu \cdot \ddot{u}_i + \gamma \cdot \dot{u}_i + a_{i,i+1} \cdot (u_i - u_{i+1}) + b_{i,i+1} \cdot (u_i - u_{i+1})^3 + a_{i,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1}) + b_{i,i-1} \cdot (u_i - u_{i-1})^3 = 0. \quad (3)$$

Тут μ - ефективна маса, γ - коефіцієнт втрат, $a_{i,i+1}$ і $b_{i,i+1}$ - коефіцієнти, що характеризують взаємодію між атомами. При написанні функції Лагранжа бралася до уваги тільки взаємодія між найближчими сусідами.

Після отримання рівняння, що описує динаміку ланцюга, складеного з відокремлених частинок, можна зробити перехід до неперервної нелінійної струни шляхом спрямування відстаней між частинками до нуля. При цьому вводяться такі параметри як густина ланцюга та нелінійний коефіцієнт натягу. Сили, що діють між різними частинками вважаються однаковими. При здійсненні переходу використовуються такі співвідношення:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x^2 = (u_i - u_{i+1}) + (u_i - u_{i-1}), \\ \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^3 \right) \right] \cdot \Delta x^4 = (u_i - u_{i+1})^3 + (u_i - u_{i-1})^3. \end{cases} \quad (4)$$

Застосувавши граничний перехід (4) у рівнянні (3), отримуємо диференціальне рівняння для динаміки неперервної нелінійної струни:

$$\mu \cdot \ddot{u}_i + \gamma \cdot \dot{u}_i + a' \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \left[1 + b' \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] = 0. \quad (5)$$

Тут коефіцієнти a', b' - це перенормовані коефіцієнти a, b . Рівняння (5) є занадто складним для застосування аналітичних методів, тому динаміка такої системи обраховувалась чисельно.

Для обчислення слід задати ще граничні умови

$$u_0(t) = u_n(t) = 0 \quad (6)$$

(n - загальна кількість частинок в струні. Вважається, що $n \gg 1$). Крім того, припускається існування в початковий момент $t=0$ зосередженого збурення на струні. Для спрощення розподіл густини цього збурення брався у гаусовій формі.

$$u_i(t=0) = U \cdot \exp(-\beta \cdot i). \quad (7)$$

Коефіцієнт β вибирався достатньо великим, таким чином, щоб в межах точності обчислень не було б суперечності між (6) та (7).

2. Результати і висновки.

Результати проведених чисельних розрахунків показують, що нелінійна струна, яка описується рівнянням (5), демонструє своєрідну поведінку.

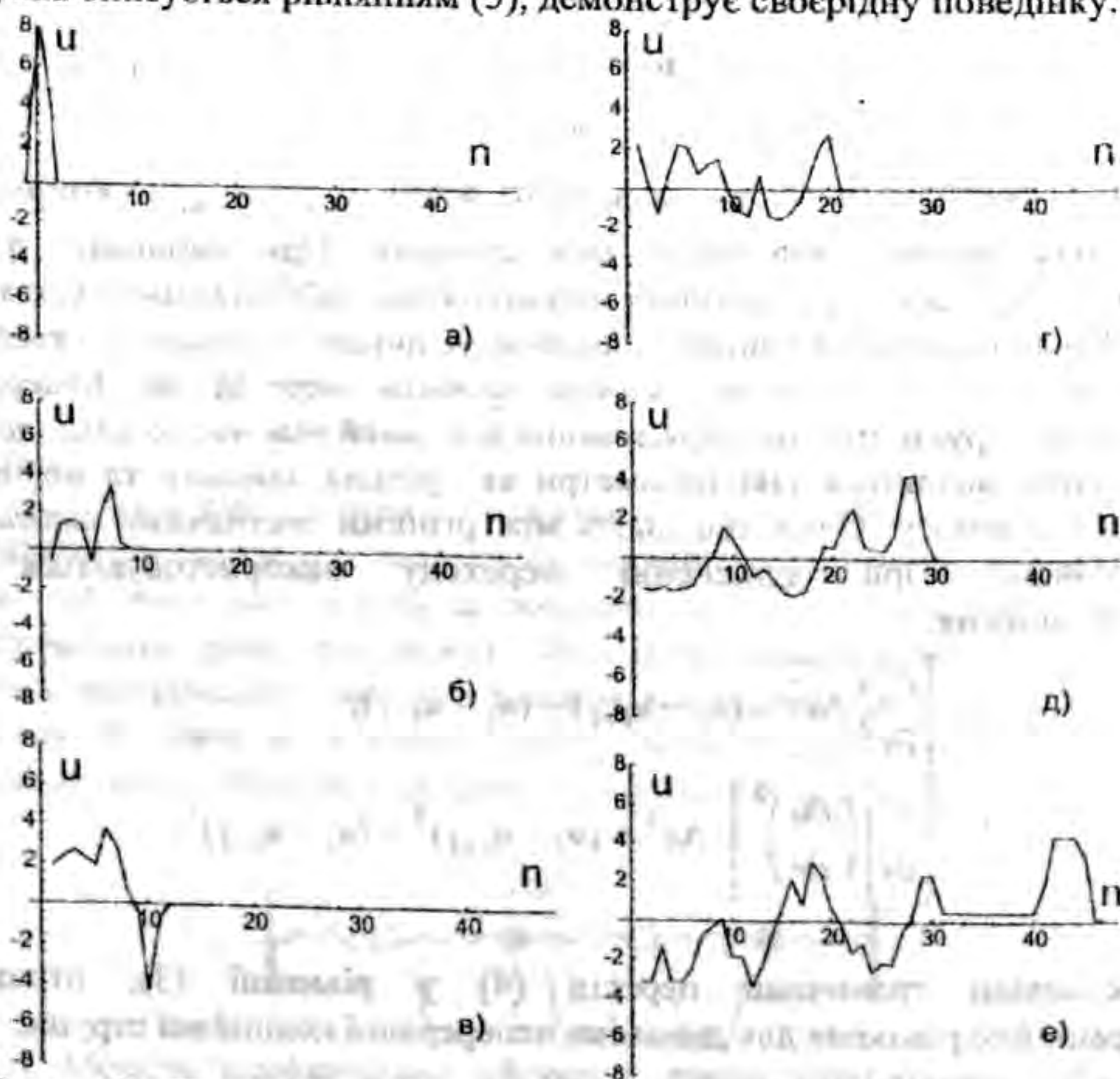


Рис. 2 Просторовий розподіл амплітуди імпульсу, що розповсюджується вздовж струни в різні моменти часу: а) $t=0$; б) $t=2$; в) $t=4$; г) $t=8$; д) $t=16$; е) $t=20$. Вздовж осі абсцис відкладено порядковий номер частинок на струні. Результат

отримано для таких параметрів моделі: $a = -1$, $b = 1$, $\gamma = 0.01$, $U = 10$.

З початкового збурення, що мало гаусів розподіл, поступово утворюється імпульс, що рухається вздовж нелінійної струни, демонструючи солітоно-подібну поведінку (Рис. 2). Тому динаміку розвитку імпульсу доцільно розбити на два етапа: 1) зародження імпульсу з початкового збурення (Рис. 2а, б, в, г) та 2) безпосередній рух солітоно-подібного імпульсу (Рис. 2д, е).

Як видно із Рис.3, після закінчення формування імпульс рухається з постійною швидкістю та з (майже) беззмінним профілем. Ознакою цього є те, що його рух в координатах (t, z) відбувається по прямій та зі сталою амплітудою u (стрілка 1). За цим, схожим на солітон, імпульсом рухається набір інших імпульсів з меншими швидкостями та зі змінним профілем (див. Рис. 3. Найбільш виражені вторинні імпульси, позначені стрілками 2, 3).

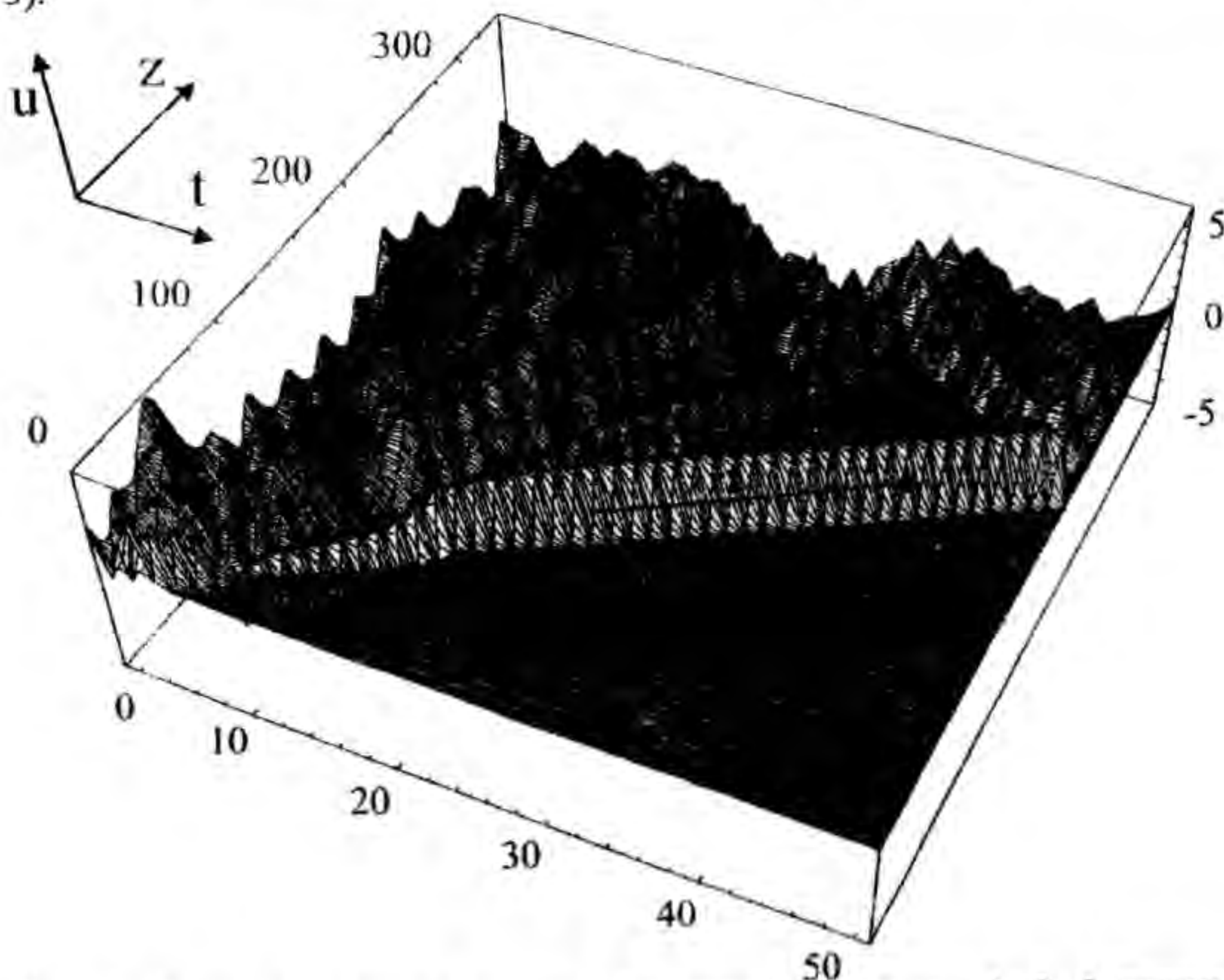


Рис. 3. Розповсюдження солітона по струні (стрілками 1, 2, 3 вказано напрямки руху імпульсів у системі).

Таким чином, з отриманих результатів випливає, що динаміка розвитку системи з одним зосередженим (початковим) імпульсом може бути описана як поступове формування деякого набору імпульсів, рух яких рознесений в просторі. Але солітоно-подібною поведінкою характеризується лише імпульс, що першим утворився з початкового збурення.

Література:

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.. Статистическая физика. - М. 1964
2. Струков Б. А. Леванюк А. П. Физические основы сегнетоэлектрического явления в кристаллах. М.: Наука; 1995. 301 р.
3. Сидоркин А. С Доменная структура и процессы переключения в сегнетоэлектриках *Soros Educational Journal*; 1999.
4. Лем Д.Л. Введение в теорию солитонов. М.: Мир, 1983. 294 р.

Надійшла до редакції: 23.11.06

УДК 621.385.833

Микола Г. Находкін
Микола І. Федорченко¹

Формування інтерфейсу Sb/Ge(111)

За допомогою методів УФЕС, ОЕС та ДПЕ досліджені електронні властивості кристалічної Ge(111)c-2x8 та розупорядкованої іонами Ar^+ a-Ge(111) поверхонь, а також інтерфейсів на них з атомами Sb в діапазоні температур 20-400 C. Встановлено складний характер зміни загибу зон та роботи виходу в залежності від ступеня покриття поверхонь атомами Sb та температури прогріву інтерфейсів. Запропонована модель, що пояснює експериментальні дані.

Ключові слова: a-Ge(111), Ge(111)c-2x8, Sb, інтерфейс Sb, робота виходу, загиб зон.

¹ E-mail: mif@univ.kiev.ua

Вступ

Моношарові покриття атомів Sb на поверхнях Ge і Si є технологічно важливими, бо вони застосовуються для виготовлення дельта-легованих структур – дуже тонких двовимірних шарів донорів в об'ємі напівпровідників [1]. Проміжні шари атомів Sb з успіхом застосовуються і як сурфактанти для покращення умов епітаксiального росту Si/Ge гетероструктур [2-3]. Удосконалення знань про фізико-хімічні процеси хемосорбції елементів V та III груп має також дуже важливе значення для оптимізації епітаксії $A_{III}B_V$ напівпровідників на Si і Ge.

Незважаючи на те, що адсорбція Sb на впорядкованих поверхнях Ge(111) досить широко описана в літературі [4-5], залишаються питання, відповіді на які потребують додаткових досліджень. Зокрема, не з'ясовані особливості формування інтерфейсу Sb/Ge на поверхнях Ge із різним ступенем упорядкування. Наскільки нам відомо, ще не досліджувалися зміни роботи виходу при формуванні та наступному прогріві інтерфейсу Sb/Ge(111), що зможе дати додаткову інформацію про його особливості. Метою цієї роботи було за допомогою методів електронної спектроскопії дослідити електронні властивості розупорядкованої бомбардуванням іона-

Mykola G. Nakhodkin
Mykola I. Fedorchenko¹

The Sb/Ge(111) interface formation

The electronic properties of crystal Ge(111) c-2x8 and disordered by Ar ions a-Ge(111) surfaces, and interfaces on them with Sb atoms in a range of temperatures of 20-400 C are investigated. Complex character of band bending changes and work function depending on a degree of surface covering of Sb atoms and temperatures of interfaces warming up are determined. The model which explains experimental data is proposed.

Keywords: a-Ge(111), Ge(111)c-2x8, Sb, interface, work function, band-bending.

ми Ag^+ а-Ge(111) та кристалічної Ge(111)c-2x8) поверхонь та їхні зміни, що відбуваються при формуванні інтерфейсів Sb/a-Ge(111) і Sb/Ge(111)c-2x8).

Методика експерименту

Дослідження проводились у надвисоковакуумній камері з базовим тиском $\sim 2 \cdot 10^{-10}$ тор. Вона була оснащена методиками Оже-електронної спектроскопії (ОЕС), дифракції повільних електронів (ДПЕ) та ультрафіолетової фотоелектронної спектроскопії (УФЕС). УФЕС дозволяла отримувати фотоелектронні спектри (ФЕС), збуджені квантами з енергією $h\nu = 7,7$ і $10,8$ еВ. У камері містилась іонна гармата для очищення та розупорядкування (аморфізації) досліджуваної поверхні Ge іонами Ag та система для контрольованого нанесення на її поверхню шарів Sb заданої товщини *in situ*. За допомогою ОЕС визначався елементний склад поверхні та механізм плівкоутворення шарів атомів Sb на Ge. ДПЕ дозволяла слідкувати за зміною кристалографічної структури поверхонь, що вивчалися. ФЕС давали інформацію про електронну структуру валентної зони, роботу виходу та величини загину зон у приповерхневій області зразків.

Зразки Ge(111) вирізались із пластини нелегованого германію (n-типу, $\rho = 16 \text{ Ом}\cdot\text{см}$). Після попередньої обробки (промивка в перекису водню та в деіонізованій воді) зразок очищався за допомогою декількох циклів бомбардування іонами Ag та наступного прогріву при $T=700^\circ\text{C}$. Вибраний стандартний метод очистки зразків дозволяв отримувати кристалічні поверхні зразків Ge(111) без ознак домішок у спектрах ОЕС та з контрастними картинками ДПЕ, що відповідали надструктурі c-2x8.

Потік парів Sb генерувався джерелом Кнудсена, а θ_{Sb} - ступінь покриття поверхні атомами Sb визначався проградуйованими кварцовими терезами. Швидкість нанесення Sb вибиралася такою, що дорівнювала 0,03 моносарів (МШ) за хвилину. Робота виходу (ϕ) визначалась, як і в статтях [6, 7], за допомогою співвідношення $\phi = h\nu - (E_F - E_{\text{min}})$, де E_F - енергія рівня Фермі, а E_{min} - максимальна енергія фотоелектронів, яка знаходилась із положення низькоенергетичного краю ФЕС при $h\nu = 7,7 \text{ еВ}$. Зміна положення спектральних особливостей фотоелектронних піків sp^3 гібридизованих електронів Ge ФЕС, вимірюваних при $h\nu = 10,2 \text{ еВ}$, дозволяла оцінювати зміни загину зон (ΔY_z). Похибка при вимірюванні ϕ та ΔY_z становила $\pm 0,01 \text{ еВ}$.

Результати та інтерпретація експериментів

На рис. 1 і 2 (криві а) наведені ФЕС від аморфізованої іонами Ag поверхні а-Ge(111) при двох енергіях квантів відповідно. Вони монотонні з пологим максимумом при $E - E_F \approx -1,2 \text{ еВ}$. Робота виходу (ϕ) становить $\phi \approx 4,85 \text{ еВ}$. При прогріві поверхня а-Ge(111) упорядковується. Вже після 2-х хвилинного прогріву при $T \approx 200^\circ\text{C}$ на картині ДПЕ з'являються розмиті дифракційні рефлекси, притаманні структурі c(2x8), що свідчить про част-

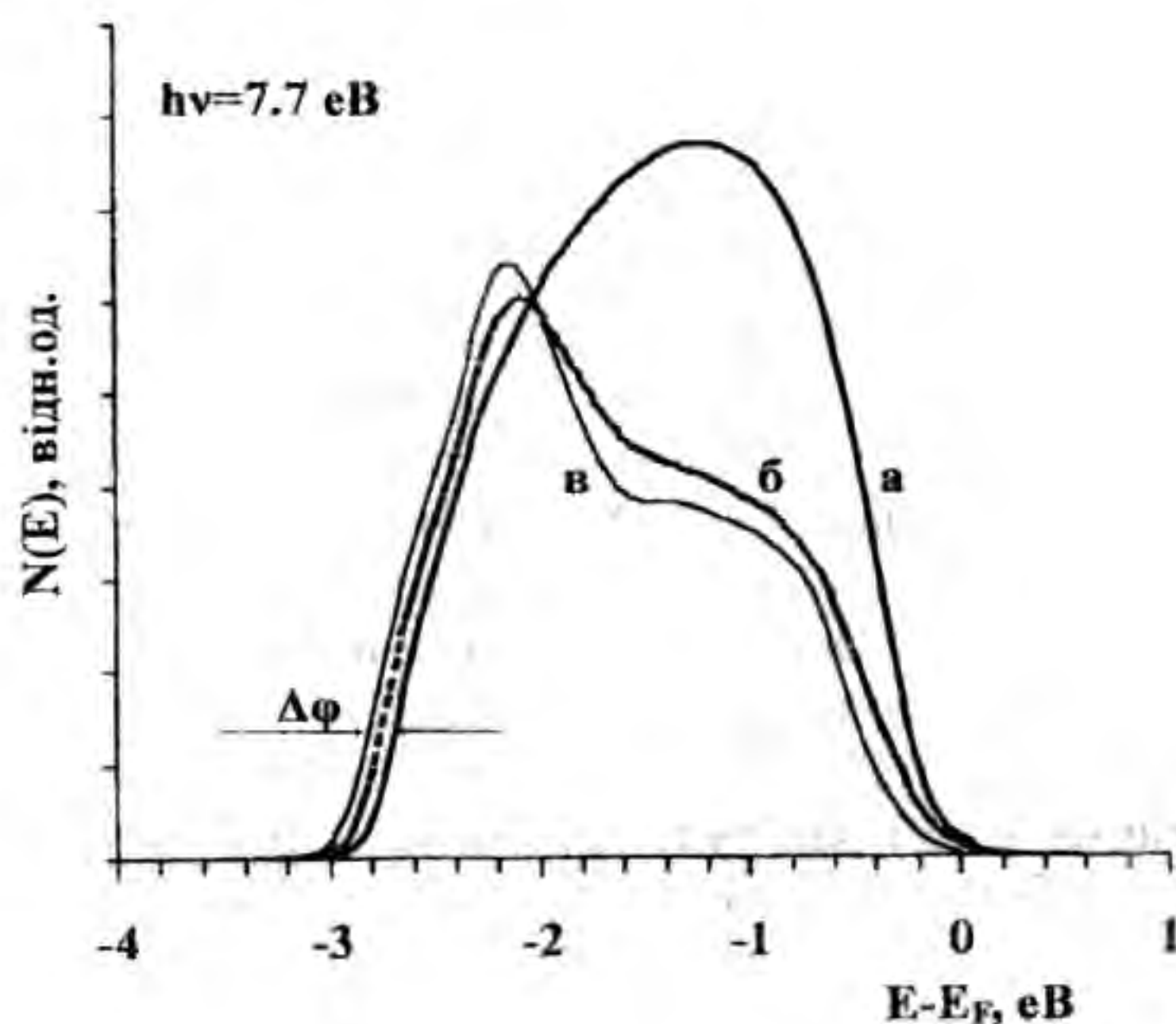


Рис.1. Трансформація ФЕС ($h\nu=7.7\text{eV}$) а-Ge(111) при її прогріві і переході від аморфної фази до кристалічної: а– а-Ge(111), б–проміжний ступінь упорядкування (прогрів до 200С), в–Ge(111)-с(2х8) (прогрів до 400С).

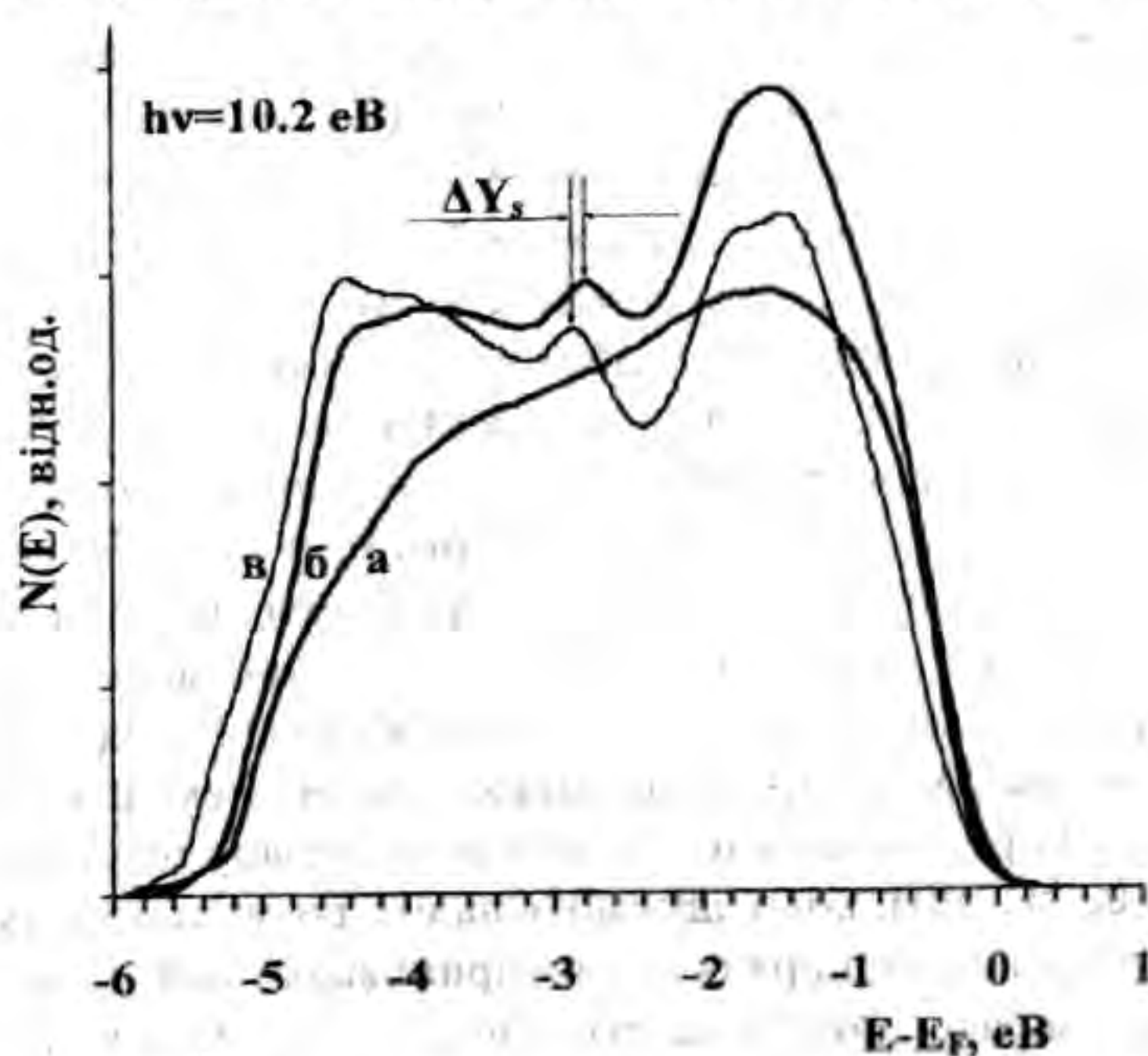


Рис.2. Трансформація ФЕС ($h\nu=10.2\text{eV}$) а-Ge(111) при її прогріві і переході від аморфної фази до кристалічної: а– а-Ge(111), б–проміжний ступінь упорядкування (прогрів до 200С), в–Ge(111)-с(2х8) (прогрів до 400С).

кове упорядкування поверхні. Одночасно спостерігаються такі зміни вигляду ФЕС (криві б рис.1 і 2): по-перше, формуються піки, пов'язані з появою гібридизованих електронних станів sp^3 , притаманних кристалічній поверхні, по-друге, змінюється кількість фотоелектронів, які збуджуються із станів біля рівня Фермі, що свідчить про зміну густини станів при кристалізації [8], і, по-третє, зсувається низькоенергетичний край ФЕС у напрямку від рівня Фермі, що свідчить про зменшення ϕ . Після 10-ти хвилинного прогріву зразка при $T \approx 400^\circ\text{C}$ дифракційна картина ДПЕ і ФЕС наближаються до відповідних картини ДПЕ і вигляду ФЕС, притаманних кристалічній поверхні Ge(111) c(2x8), а ϕ зменшується до $\phi \approx 4,7$ еВ. Це значення ϕ дещо відрізняється від значення $\phi = 4,6$ еВ, виміряного методом Кельвіна в роботі [9] для поверхні p-типу Ge(111) c(2x8), але збігається із значенням 4,7 еВ, яке було визначено за допомогою ФЕС для зразка Ge n-типу в роботі [7]. Аналіз ФЕС поверхні a-Ge(111) показує, що вона емітує значну кількість фотоелектронів з енергіями $E - E_F \rightarrow 0$. Цей факт дозволяє стверджувати, що стеля валентної зони у приповерхневій області розупорядкованого зразка розташована біля рівня Фермі, тобто зони загнути вгору на $Y_s \approx +0,3\text{eV}$ (майже на половину ширини забороненої зони). При частковому впорядкуванні поверхні a-Ge(111), коли з'являються ознаки надструктури 2x8 у картині ДПЕ, суттєво змінюється загальний вигляд ФЕС, й з'являються особливості ФЕС, пов'язані із гібридизованими станами sp^3 , спостерігаються також незначні зміни ϕ . Враховуючи, що при цьому не спостерігається змін відстані між стелею валентної зони і рівнем Фермі, припускаємо, що $\Delta\phi$ зв'язана із зміною електронної спорідненості зразка ($\Delta\chi$). Подальше зменшення ϕ на $\Delta\phi \approx 0,1\text{eV}$ при повному впорядкуванні поверхні Ge(111) c(2x8) обумовлене зміною загиначу зон у приповерхневій області. Про це свідчить однакової величини зсув низькоенергетичного краю ФЕС і положення піку sp^3 електронів (пік на рис. 2 при $E - E_F \approx -2,7$ еВ) у напрямку від рівня Фермі. Припустивши, що стеля валентної зони Ge(111) c(2x8) відділена від рівня Фермі на $\approx 0,15$ еВ, вважаємо, що зони приповерхневої області у цьому зразку загнути вгору на $\Delta\phi = +0,15$ еВ.

Напилення Sb на поверхню Ge(111) c(2x8) суттєво змінює атомну будову й електронні властивості інтерфейсу Sb/Ge(111) c(2x8). Насамперед, зменшується контрастність та інтенсивність рефлексів картини ДПЕ, що вказує на розупорядкування приповерхневого шару інтерфейсу Sb/Ge(111) c(2x8). При $\theta_{Sb} \approx 2\text{МШ}$, коли зникають навіть розмиті рефлекси ДПЕ, тобто відбувається повне розупорядкування приповерхневої області.

На рис.3 наведені ФЕС поверхні Ge(111) c(2x8) ($h\nu = 7,7\text{eV}$) при напиленні на неї атомів Sb при кімнатній температурі та після наступних прогрівів. Видно, що при $\theta_{Sb} = 9\text{ МШ}$ відбувається формування ФЕС аморфної плівки Sb (рис.3.б) з широким пологим максимумом при $E - E_F \approx -1,3$ еВ. При цьому ϕ зменшується на $\Delta\phi \approx 0,2\text{eV}$ і становить $\approx 4,5\text{eV}$, що збігається

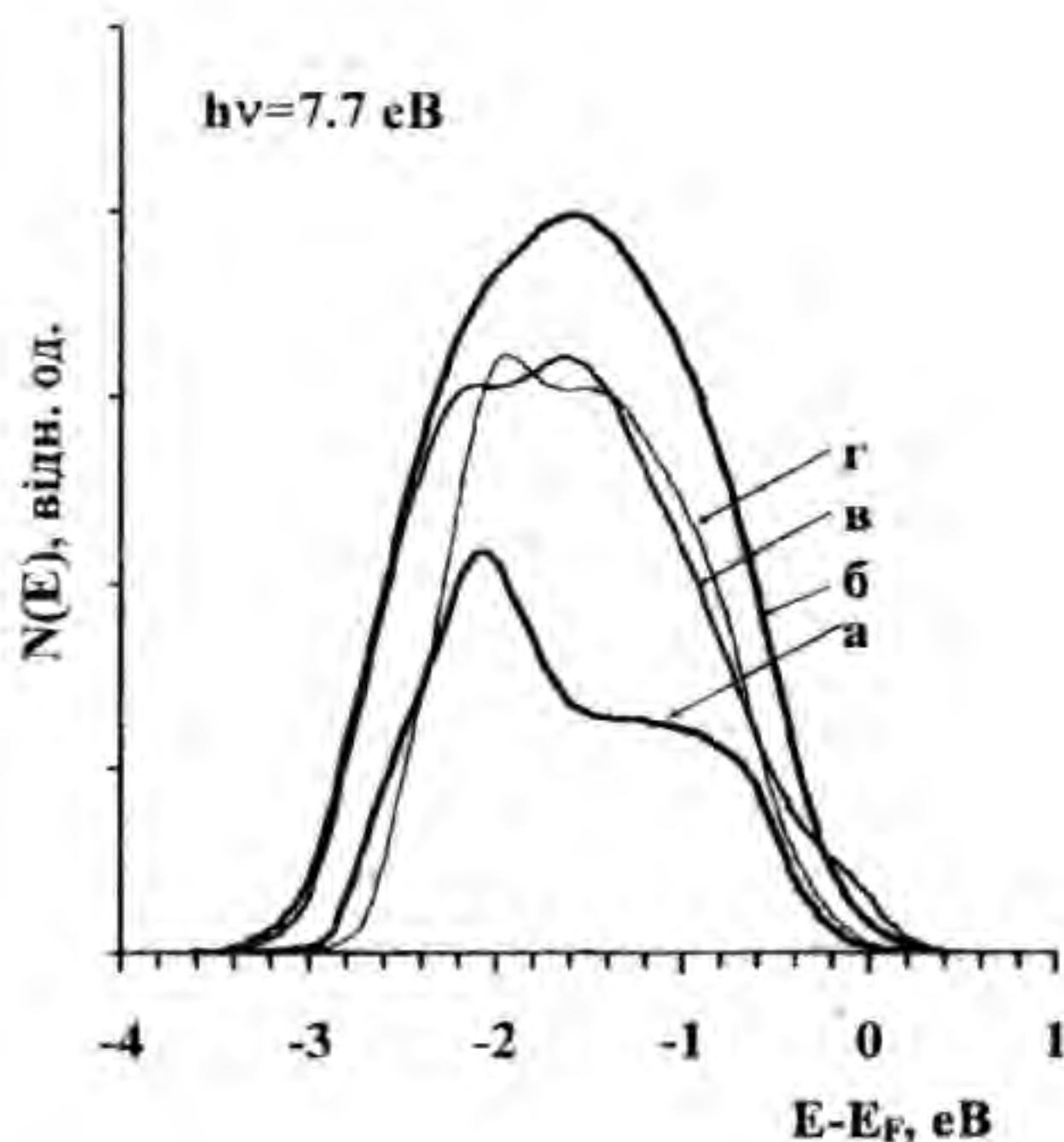


Рис. 3. Фотоелектронні спектри ($h\nu = 7.7$ eV) системи Sb/Ge(111)2x8: а- Ge(111)2x8 ($\Theta_{\text{Sb}} = 0$ МШ); б- ($\Theta_{\text{Sb}} = 9$ МШ); в- прогрів до 150 С системи з $\Theta_{\text{Sb}} = 9$ МШ; г- прогрів до 350 С системи з $\Theta_{\text{Sb}} = 9$ МШ.

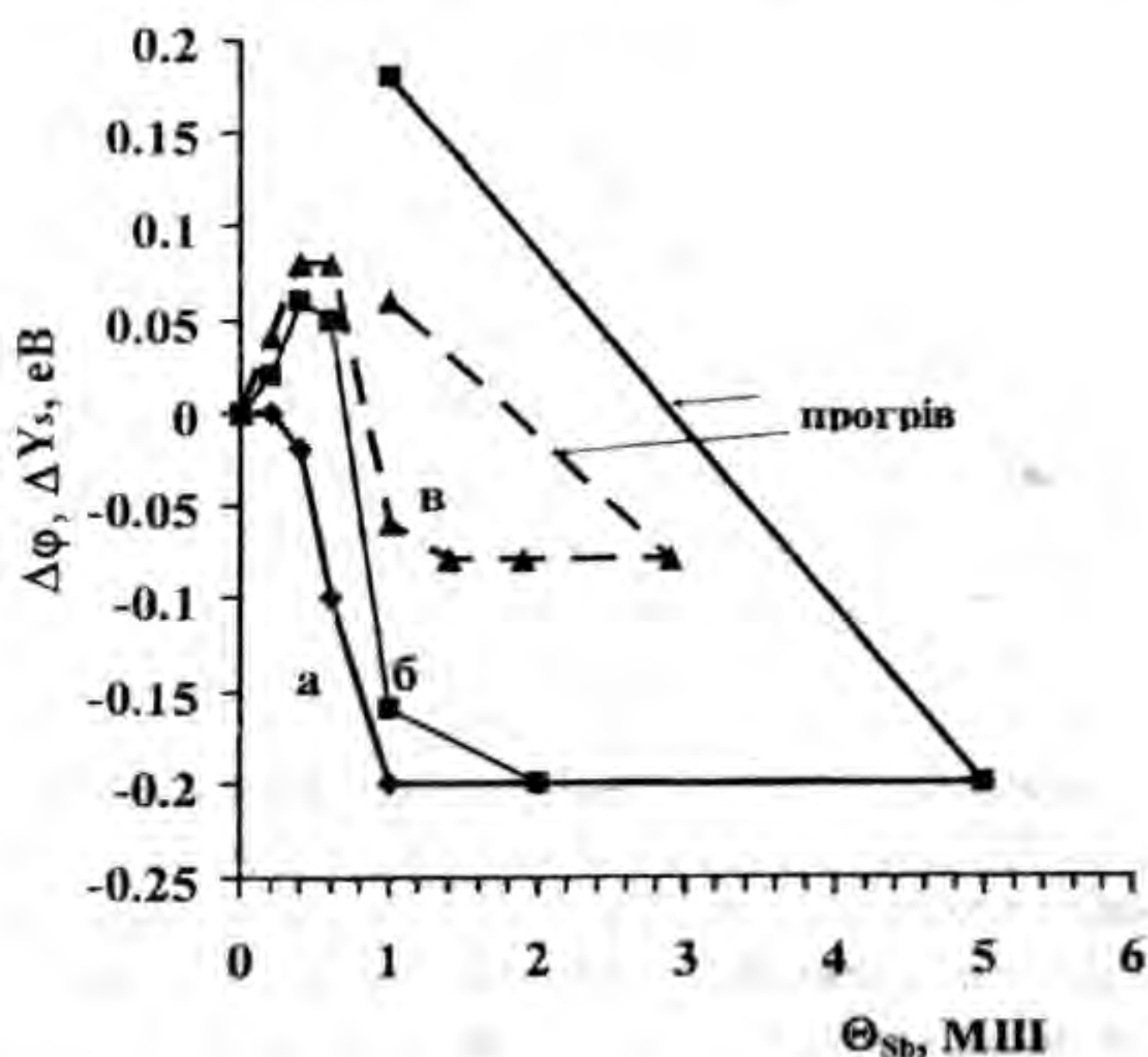


Рис. 4. Зміна роботи виходу та загину зон системи Sb/Ge(111) в залежності від ступеня покриття Sb та прогріву: а- $\Delta\phi$ для а-Ge(111), б- $\Delta\phi$ для Ge(111)-c(2x8), в- ΔY_s для Ge(111)-c(2x8).

з величиною ϕ для плівок Sb, напилених в умовах надвисокого вакууму [10]. Аналогічні ФЕС від напилених плівок Sb при кімнатній температурі ми отримували і на інших підкладках [11]. Після 2-х хвилинного прогріву цієї системи при $T \approx 150^\circ\text{C}$ з'являються нові особливості ФЕС, зокрема, збільшується густина станів біля рівня Фермі. При цьому незмінність інтенсивності MNN Оже-лінії Sb вказує на практичну незмінність кількості атомів Sb на поверхні Ge. Збільшення густини станів біля рівня Фермі і поява додаткових максимумів ФЕС вказують на початок кристалізації розупорядкованої плівки Sb [12,13], але низькоенергетичний край ФЕС не змінює свого положення, тобто ϕ поверхні залишається майже незмінною. Після подальшого 2-х хвилинного прогріву системи при $T \approx 350^\circ\text{C}$ відбуваються такі метаморфози: по-перше, зменшується інтенсивність MNN Оже-лінії Sb, що вказує на зменшення θ_{Sb} до ≈ 1 МШ, по-друге, низькоенергетичний край ФЕС наближається до рівня Фермі на $\approx 0,38$ еВ, що відповідає зменшенню ϕ на цю величину, й, по-третє, формується чітка картина ДПЕ з надструктурою 2×1 .

На рис. 4 наведені залежності змін ϕ та Y_s від θ_{Sb} для двох поверхонь: аморфізованої a-Ge(111) та впорядкованої Ge(111) c(2x8) відповідно. На розупорядкованій поверхні a-Ge(111) відбувається монотонне зменшення ϕ при $0 \leq \theta_{\text{Sb}} \leq 1$ МШ, яке припиняється при $\theta_{\text{Sb}} \geq 1$ і становить $\Delta\phi \approx -0,2$ еВ. На впорядкованій поверхні Ge(111) c(2x8) ϕ спочатку при $0 \leq \theta_{\text{Sb}} < 0,5$ МШ збільшується на $\Delta\phi \approx +0,07$ еВ, проходить через максимум, а далі зменшується, досягаючи при $\theta_{\text{Sb}} \approx 2$ МШ значення, такого як і на поверхні a-Ge(111) при даному θ_{Sb} .

Прогрів обох інтерфейсів по різному збільшує їх ϕ на $\Delta\phi \approx +0,38$ еВ. Так, після двоххвилинного прогріву інтерфейсу Sb/Ge(111) c(2x8) при $T \approx 250^\circ\text{C}$, коли θ_{Sb} зменшується до ≈ 1 МШ (за даними ОЕС) й з'являються різкі та контрастні рефлекси картини ДПЕ 2×1 , ϕ збільшується на $\Delta\phi \approx +0,38$ еВ. Такий прогрів інтерфейсу Sb/a-Ge(111) також зменшує θ_{Sb} до ≈ 1 МШ, але його ϕ збільшується тільки на $\Delta\phi \approx +0,05$ еВ і не з'являється будь-яких рефлексів ДПЕ. Подальше збільшення ϕ інтерфейсу Sb/a-Ge(111) має місце при більших температурах ($T \approx 400^\circ\text{C}$), коли починається впорядкування його приповерхневої області, і на картині ДПЕ з'являється надструктура 2×1 . Кінцеві значення ϕ обох інтерфейсів після 5-ти хвилинного прогріву до температури 400°C приблизно однакові і становлять $\phi \approx 4,88$ еВ. Подібність залежностей $\Delta Y_s(\theta_{\text{Sb}})$ та $\Delta\phi(\theta_{\text{Sb}})$ (рис. 4) для обох інтерфейсів дозволяє стверджувати, що зміна $\phi(\theta_{\text{Sb}})$ визначається, переважно, зміною $Y_s(\theta_{\text{Sb}})$.

Повторне напилення додаткового моношарового покриття Sb на такий інтерфейс зменшує контрастність картини ДПЕ 2×1 , що свідчить про аморфізацію приповерхневого шару, та зменшує Y_s на $\approx 0,15$ еВ і ϕ на $\approx 0,4$ еВ. Прогрів такої системи до $T \approx 300^\circ\text{C}$ призводить до: десорбції додатково

напиленого шару Sb, різкого збільшення контрасту картини ДПЕ 2×1 , збільшення Y_s на $\Delta Y_s \approx +0,15 \text{ eV}$ і ϕ на $\approx +0,4 \text{ eV}$, тобто до відтворення попереднього стану інтерфейсу до напилення Sb.

Для встановлення зв'язку між експериментальними даними для ϕ і Y_s , поверхонь інтерфейсів, що досліджувалися, і їхньою структурою скористаємося схематичною діаграмою зонної структури, наведеної на рис.5. Величина $(E_C - E_F)$ залежить від ступеня легування зразка. Y_s визначається структурою та густиною поверхневих електронних станів, χ відрізняється від величини електронної спорідненості χ ідеального зразка на величину $\Delta\chi_d$, обумовлену перерозподілом електронної густини між верхніми шарами атомів Ge.

Спочатку за допомогою робочої гіпотези розглянемо зміни, що відбуваються під час розупорядкування поверхні Ge. Згідно цієї гіпотези іони Ag, що розупорядковують приповерхневий шар Ge, генерують значну кількість поверхневих станів акцепторного типу, внаслідок чого відбувається загин зон ($\Delta Y_s \approx +0,3 \text{ eV}$), і стеля валентної зони наближаються до рівня Фермі. При впорядкуванні, яке стимулюється прогрівом, внаслідок часткового відновлення густини станів, притаманних кристалічному Ge, загин зон зменшується (зони розгинаються) і становить $Y_s \approx +0,15 \text{ eV}$. Значення загину зон угору на $Y_s \approx +0,15 \text{ eV}$ для поверхні Ge(111) $c(2 \times 8)$ співпадає з літературними даними [9].

Адсорбція атомів Sb на розупорядкованій поверхні a-Ge(111) не змінює ступеня розупорядкування вже розупорядкованого приповерхневого шару інтерфейсу Sb/a-Ge(111), але змінює перерозподіл зарядів унаслідок хімічного зв'язку між атомами Sb і Ge у відповідності зі значеннями їх електровід'ємності [14]. Внаслідок переходу електронної густини від атомів Sb до атомів Ge зменшується робота виходу системи і при $\theta_{\text{Sb}} \geq 1 \text{ MIII}$ вона становить $\phi \approx 4,5 \text{ eV}$, що відповідає ϕ плівки Sb [10,15].

На відміну від інтерфейсу Sb/a-Ge(111) у формуванні ϕ інтерфейсів Sb/Ge(111) $c(2 \times 8)$, крім перерозподілу зарядів між атомами Sb та Ge, грає суттєву роль перерозподіл електронної густини між атомами приповерхневих шарів Ge внаслідок зміни їх структури. Адсорбція атомів Sb на поверхні кристалічного германію в діапазоні $\theta_{\text{Sb}} \leq 0,5 \text{ MIII}$ може призводити до вбудовування атомів Sb в упорядковану структуру атомів Ge, що може викликати збільшення густини поверхневих електронних станів та перерозподіл електронної густини між атомами приповерхневих шарів Ge. Це призводить до збільшення величини загину зон угору, до збільшення $\Delta\chi_d$ і, відповідно, до збільшення ϕ . Але адсорбція Sb поступово аморфізує приповерхневий шар інтерфейсу Sb/Ge(111) $c(2 \times 8)$, і при $\theta_{\text{Sb}} \geq 0,5 \text{ MIII}$ відбувається фазовий перехід від кристалічного до аморфного стану, який супроводжується зменшенням густини власних поверхневих станів та перероз-

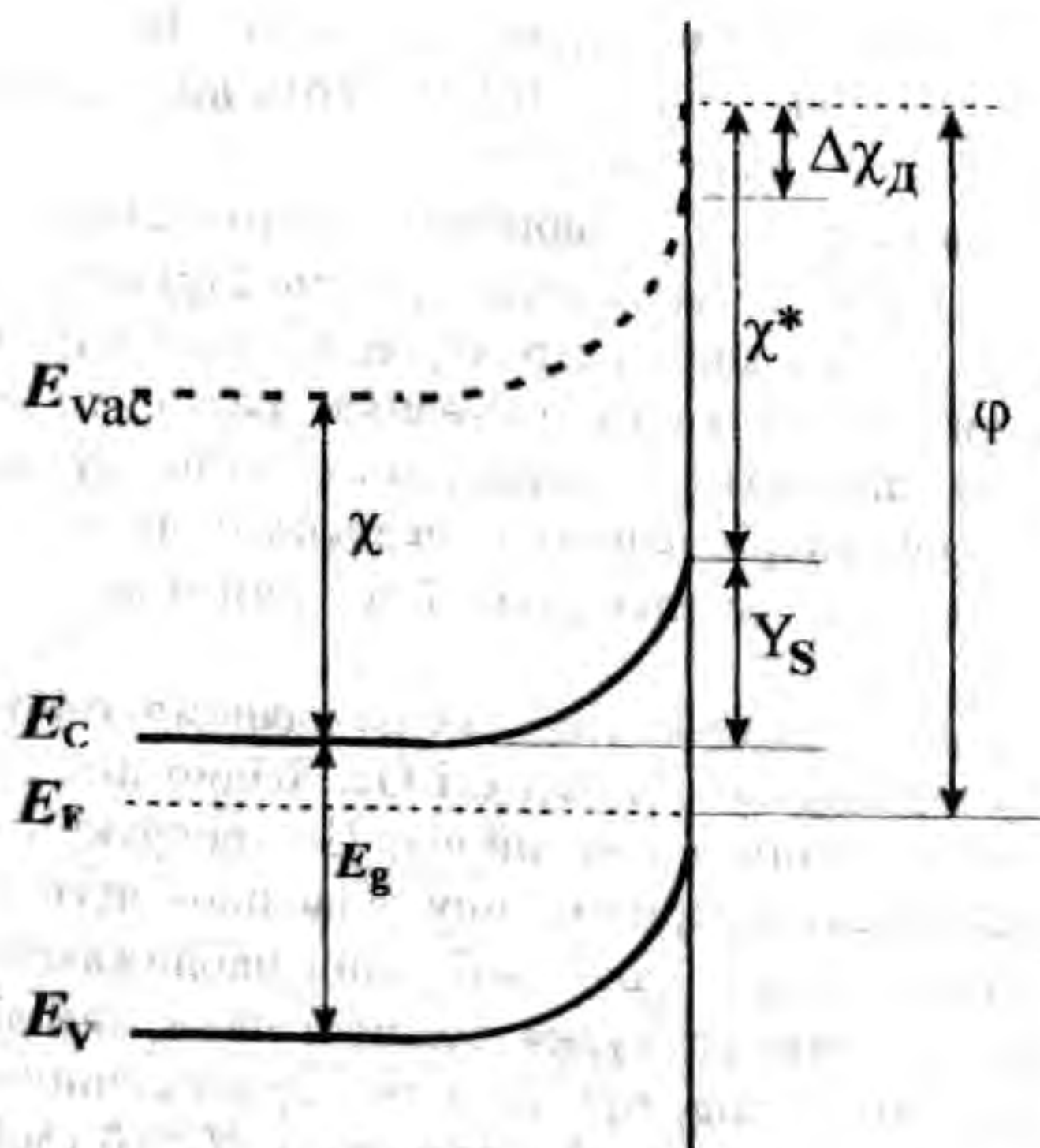


Рис. 5. Схематична діаграма структури енергетичних зон напівпровідника p-типу

поділом електронної густини між атомами приповерхневих шарів інтерфейсу. Це призводить до зменшення величини загибу зон угору, до зменшення $\Delta\chi_d$ та, відповідно, до зменшення ϕ . Для $\theta_{Sb} \geq 2 \text{ МШ}$ ϕ встановлюється на рівні 4,5 еВ. Прогрів інтерфейсів з $\theta_{Sb} \geq 1 \text{ МШ}$, при яких відбувається часткова десорбція атомів Sb (до $\theta_{Sb} \leq 1 \text{ МШ}$), призводить до упорядкування приповерхневого шару і утворення поверхні з новою надструктурою 2×1 та $\phi \approx 4,88 \text{ еВ}$. Поверхня з цією надструктурою має свій характерний спектр поверхневих електронних станів, існування яких призводить до загибу зон угору. Крім того, може мати місце перерозподіл електронної густини між верхніми шарами атомів інтерфейсу, що призводить до збільшення $\Delta\chi_d$.

Додаткове нанесення атомів Sb на інтерфейс Sb/Ge(111) (2×1), коли $\theta_{Sb} \geq 1 \text{ МШ}$, знову аморфізує приповерхневу область й відновлює електронні властивості, притаманні інтерфейсу Sb/Ge із значним θ_{Sb} . Зменшується загин зон угору, а ϕ зменшується до значення, характерного для об'ємного Sb. Різке збільшення ϕ ($\Delta\phi \approx +0,38 \text{ еВ}$) після двохвилинного прогріву такого інтерфейсу до $T \approx 350^\circ \text{C}$ і відновлення упорядкованої структури поверхні з надструктурою 2×1 супроводжується повторним збільшенням величини загибу зон угору. Воно може бути обумовлене перебудовою приповерхневого шару інтерфейсу за участю вбудованих у поверхню Ge атомів Sb, під

час якої утворюються нові інтерфейсні стани акцепторного типу, які стимулюють збільшення загину зон угору і збільшення $\Delta\chi_d$.

Відтворюваність властивостей інтерфейсу Sb/Ge(111) (2x1) при повторних нанесеннях шарів Sb та прогрівах дозволяє також припустити, що додаткове легування приповерхневого шару атомами Sb, якщо й має місце при прогрівах зразків, то не суттєво впливає на перерозподіл електронної густини і загин зон у приповерхневій області інтерфейсів. Для перевірки цієї гіпотези потрібні додаткові дослідження.

Висновки

1. Електронні властивості поверхні Ge(111) c(2x8) залежать від ступеня її розупорядкування іонами Ag. Розупорядкування змінює електронну структуру валентної зони, збільшує ефективну електронну спорідненість, кількість електронних станів біля рівня Фермі, загин зон угору і зростання роботи виходу на $\Delta\phi=+0,15\text{eV}$.

2. Адсорбція атомів Sb на розупорядкованій і кристалічній поверхнях Ge по-різному впливає на їхні електронні властивості. На початкових стадіях адсорбції атомів Sb на Ge(111) c(2x8), коли $\theta_{\text{Sb}} \leq 0,5\text{ML}$, зростання загину зон і роботи виходу викликаються зміною спектра та густини поверхневих станів. Наступне різке зменшення загину зон, коли $0,5 \leq \theta_{\text{Sb}} \leq 2\text{ML}$, викликається фазовим переходом приповерхневої області інтерфейсу у розупорядкований аморфізований стан, який супроводжується зміною густини і розподілу поверхневих станів.

3. На розупорядкованій поверхні a-Ge(111) адсорбція атомів Sb при кімнатній температурі формує розупорядковані приповерхневі шари інтерфейсів, робота виходу яких, найбільш імовірно, обумовлена перерозподілом електронної густини між верхнім шаром атомів Sb та нижнім шаром атомів Ge у відповідності зі значеннями їхньої електронегативності.

4. При прогрівах розупорядкованих інтерфейсів Sb/Ge(111) c(2x8), крім часткової десорбції атомів Sb та кристалізації приповерхневого шару, може відбуватися вбудовування атомів Sb у приповерхневу область Ge, що також може змінювати густину поверхневих станів інтерфейсів. Для остаточного з'ясування ролі вбудованих атомів Sb необхідні додаткові дослідження.

Робота виконувалась за бюджетного фінансування та часткового фінансування Міносвіти та науки України грант M/226-2004.

Література

1. Aart A. van Gorkum, Kiyokazu Nakagawa and Yasuhiro Shiraki. Controlled Atomic Layer Doping and ALD MOSFET Fabrication in Si //Jpn. J. Appl. Phys. 1987.-V. 26.- P.L1933-L1936.

2. A. Antons, Y. Cao, B. Voigtländer, K. Schroeder, R. Berger and S. Blügel. Strain-induced surface structures on Sb-covered Ge(111). Epitaxial Ge films on Si(111):Sb// *Europhys. Lett.* 2003, V.62, N4.-P.547-553.
3. Th. Schmidt, R. Kröger, T. Clausen, and J. Falta, A. Janzen, M. Kammler, P. Kury, P. Zahl, and M. Horn-von Hoegen. Surfactant-mediated epitaxy of Ge on Si(111): Beyond the surface // *Appl. Phys. Lett.* 2005.-V.86.- P.1119-1126.
4. T. Kendelewicz J. C. Woicik K. E. Miyano S. A. Yoshikawa, P. Pianetta, W.E. Spicer. Structural study of monolayers of Sb on Ge(111) with different surface reconstructions // *J. Vac. Sci. & Technol. A: Vacuum, Surfaces, and Films* 1994.-V.12, N4.- P.1843-1847.
5. Cao Yi-Gang, Jiao Zheng-Kuan, A. Antons, K. Schroeder and S. Blügel. Stable Structure of the Sb Monolayer on a Strained Ge(111) Substrat // *Chinese Phys. Lett.* 2002,- V.19.-P.259-261.
6. М.Г. Находкін, М.І. Федорченко. Залежність роботи виходу поверхні Si(001) від ступені покриття її вісмутом // *Вісник Київського університету, серія фіз. мат. наук*, 2004.-вип. 4.-С.373-378.
7. T. Murotani, K. Fujiwara, M. Nishijima. Photemission measurements of surface states for cleaved and annealed Ge(111) surfaces // *Phys. Rev B.* -1975, -V.12, N6.-P.2424-2426.
8. Т. Мотт и Э. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах, т.1 и 2, - М.: Мир, 1982, -С. 658.
9. G.W. Gobeli, F.G. Allen. Photoelectric properties and work function on cleaved germanium surfaces // *Surf. Sci.* 1964.-V.2.-P. 402-408.
10. Д.А. Городецкий, Ю.П. Мельник, Д.П. Проскурин, В.А. Усенко. Структура и электронные свойства пленок сурьмы на Mo(110) // *Физика твердого тела*, 2004.-Т.46, вып. 10.-С.1873-1880.
11. М.Г. Находкін, М.І. Федорченко. Адсорбция Sb на Si (200) 2×1 Si(111) 7×7 // *Вісник Київського університету, серія фіз. мат. наук*, 2005.-вип. 4.- С.294-303.
12. E. Taft, L. Apker. Fermi Level in Amorphous Antimony Films // *Phys. Rev.* 1954.-V.96, N6,-P.1496-1497.
13. K.S. An, C.C. Hwang, Y.K. Kim, E.S. Cho, C.-Y. Park, A. Kakizaki. Epitaxial growth of Sb thin film and chemical reaction of Sb-induced surface reconstruction on Si(113) 3×2 // *Surf. Sci.* -2001.-V.492, P.L705-L710.
14. А. Оллед, Е.В. Рохов. Взаимосвязь электроотрицательности и строения элементов // *Ж. Неорганической Химии.* -1958.-Т.5, №6.-С.264-272.
15. L. Apker, E. Taft, and J. Dickey. Some Semimetallic Characteristics of the Photoelectric Emission from As, Sb, and Bi // *Phys. Rev.* 1949.-V.76, N2.- P.270-272.

Надійшла до редакції 03.11.2006

УДК 519.9

Вячеслав В. Обуховський¹,
Вікторія В. Попова²

Vyacheslav V. Obukhovskiy¹,
Viktorya V. Popova²

Вплив молекулярної взаємодії на процеси нелінійної дифузії

Influence of molecular interaction on processes of nonlinear diffusion

Застосовано теорію нелінійної дифузії для опису процесів переносу в сумішах типу „речовина – розчинник”. На основі п’ятикомпонентної моделі теоретично знайдено залежність узагальненого коефіцієнта дифузії від концентрації розчиненої речовини.

Ключові слова: дифузія, відносний об’єм, комплексоутворення.

The theory of nonlinear diffusion is applied for the description of processes of transfer in mixes such as “substance – solvent”. On the basis of five-componental model it is theoretically found dependence of the generalized coefficient of diffusion on concentration of the dissolved substance.

Key Words: diffusion, volume fraction, complexation.

¹ E-mail: vvo@univ.kiev.ua

² E-mail: vika_p_06@mail.ru

1. Вступ.

Потік рідини зазвичай описується стандартним дифузійним рівнянням (законом Фіка):

$$\mathbf{j}_M = -D_F \nabla M, \quad (1)$$

який виконується лише при малих концентраціях. Тут $M, \mathbf{j}_M$ – концентрація і потік речовини відповідно; $D_F = \text{const}$ – коефіцієнт дифузії. Однак, експериментальні дані [1-2] свідчать, що, насправді, навіть у бінарних розчинах коефіцієнт D_F залежить від концентрації розчиненої речовини. Також закон Фіка, як правило, не працює для суміші більше ніж двох рідин та систем зі змінним об’ємом.

В основу теорії нелінійної дифузії покладено модель обміну позиціями в рідині, в рамках якої дифузія описується законом збереження (рівняння неперервності)

$$\partial M_m / \partial t + \text{div} \mathbf{j}_m = S_m \quad (2)$$

та потоком нелінійної дифузії [4-5]

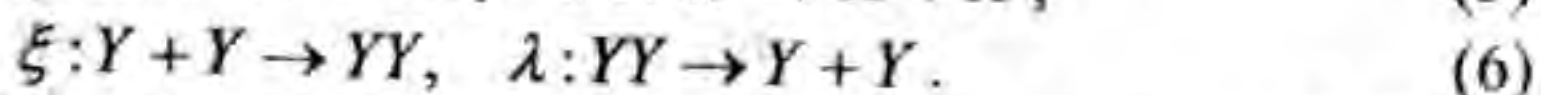
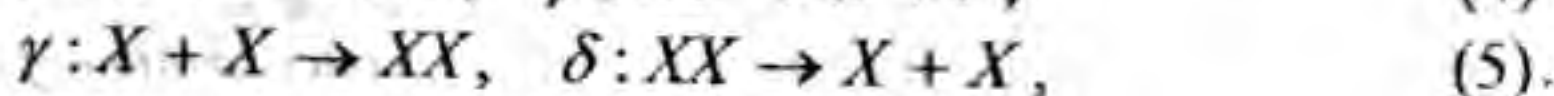
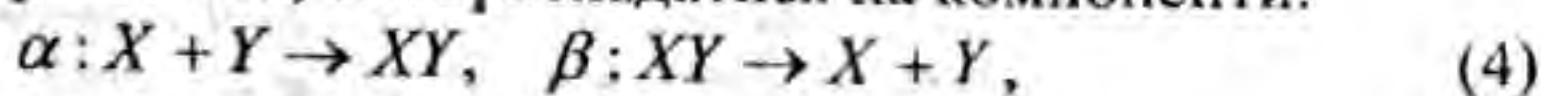
$$\mathbf{j}_m = \sum_n d_{mn} [M_m \nabla M_n - M_n \nabla M_m]. \quad (3)$$

Вище використовуються наступні позначення: індексами m, n нумерують компоненти рідкої суміші, M_m – об’ємна частка компоненти m ; $\mathbf{j}_m$ – потік об’єму відповідної речовини, S_m – функція джерел (стоків), які залежать від процесів народження (зникнення) молекул сорту m , d_{mn} –

коефіцієнти взаємодифузії. Метою нашої роботи є застосування теорії нелінійної дифузії [4,5] для моделювання процесів переносу в простих реакційно-активних сумішах.

2. Теоретична модель.

Відомо, що при розчиненні однієї речовини в іншій утворюються молекулярні комплекси, які виникають за рахунок міжмолекулярної взаємодії. Нами розглянуто суміш двох рідких речовин X та Y, врахування взаємодії між молекулами яких буде проводитися в рамках наступної моделі: X та Y рухаються, в основному, незалежно, але є відмінними від нуля ймовірності утворення димерів XX, YY та комплексів XY. Такі сполуки можуть як утворюватися, так і розпадатися на компоненти:



(Вище введено позначення α, γ, ξ - ймовірності утворення, а β, δ, λ - ймовірності розпаду відповідних комплексів.) У рамках цих уявлень дана суміш є п'ятикомпонентною.

Ілюстративно модель такої дифузії представлено на рис. 1, рух частинок направлений у бік меншої концентрації.



Рис. 1 Модель дифузії в бінарній рідкій суміші.

Закон збереження об'єму в кожен момент часу для нашої системи:

$$\sum_{i=1}^5 M_i = 1, \quad (7)$$

так як усадкою або набряканням у даному випадку можна знехтувати.

Застосовуємо рівняння (2), (3), (7) для нашої системи, виражаючи всі відносні об'єми через об'єм розчиненої речовини M_1 , остаточно потоки

об'ємів компонент суміші, що містять у своєму складі молекули X матимуть такий вигляд:

$$\begin{cases} \dot{J}_1 = -[A + BM_1^2]\nabla M_1, \\ \dot{J}_2 = -[C + DM_1 + EM_1^2]\nabla M_1, \\ \dot{J}_3 = -[F + GM_1 + HM_1^2 + JM_1^3]\nabla M_1. \end{cases} \quad (8)$$

Сумарний потік молекул речовини X знаходимо наступним чином:

$$\dot{J}_{total} = \dot{J}_1 + \eta \dot{J}_3 + \dot{J}_4 \quad (9)$$

($\eta = \Delta V_X / (\Delta V_X + \Delta V_Y)$) - відношення молекулярних об'ємів).

Підставляючи потоки (8) в (9), маємо залежність сумарного потоку від миттєвого значення відносного об'єму речовини X M_1 :

$$\dot{J}_{total} = -D_{eff}(M_1)\nabla M_1, \quad (10)$$

де введено позначення:

$$D_{eff}(M_1) = [D_0 + D_1 M_1 + D_2 M_1^2 + D_3 M_1^3], \quad (11)$$

або для зручності перепишемо у вигляді:

$$D_{eff}(M_1)/D_0 = [1 + A_1 M_1 + A_2 M_1^2 + A_3 M_1^3], \quad (12)$$

де D_0, A_1, A_2, A_3 - константи системи, M_1 - відносний об'єм речовини.

3. Залежність відносних об'ємів компонент суміші від початкового значення відносного об'єму внесеної в розчинник речовини.

Вважаємо початковим моментом $t=0$ внесення речовини у розчинник. Зрозуміло, що до даного моменту комплексоутворень ще не було. Отже, початкові умови мають вигляд:

$$M_1^0, M_2^0 \neq 0, M_3^0, M_4^0, M_5^0 = 0. \quad (13)$$

Закон збереження об'єму має вигляд:

$$M_1^0 + M_2^0 = 1, (t=0). \quad (14)$$

Знаючи молекулярні об'єми ΔV_i усіх речовин та імовірності утворення (розпаду) речовин, що беруть участь у реакціях, можна визначити загальну кількість речовин X, Y, XY, XX та YY у всіх компонентах ($\alpha_i = \alpha \Delta V_i / \Delta V, \beta_i = \beta \Delta V_i / \Delta V$):

$$\begin{cases} M_1 = M_1^0 - M_1^0 M_2^0 - \beta_1 M_3^0 - \gamma (M_1^0)^2 + \delta M_4^0, \\ M_2 = M_2^0 - \alpha_2 M_1^0 M_2^0 + \beta_2 M_3^0 - \xi (M_2^0)^2 + \lambda M_5^0, \\ M_3 = M_3^0 + \alpha_3 M_1^0 M_2^0 - \beta_3 M_3^0, \\ M_4 = M_4^0 + \gamma (M_1^0)^2 - \delta M_4^0, \\ M_5 = M_5^0 + \xi (M_2^0)^2 - \lambda M_5^0. \end{cases} \quad (15)$$

Використовуючи закон збереження (14) та початкові умови (13), перепишемо систему (15) в залежності лише від M_1^0 :

$$M_1 = (1 - \alpha_1)M_1^0 - (\gamma - \alpha_1)(M_1^0)^2, \quad (16)$$

$$M_2 = (1 - \xi) + (\alpha_2 - \xi)M_1^0 + (\alpha_2 - \xi)(M_1^0)^2, \quad (17)$$

$$M_3 = \alpha_3 M_1^0 - \alpha_3 (M_1^0)^2, \quad (18)$$

$$M_4 = \gamma (M_1^0)^2, \quad (19)$$

$$M_5 = \xi (1 - M_1^0)^2. \quad (20)$$

Графічні залежності відносного об'єму компонент розчину від початкового об'єму розчиненої речовини представлені на рис. 2.

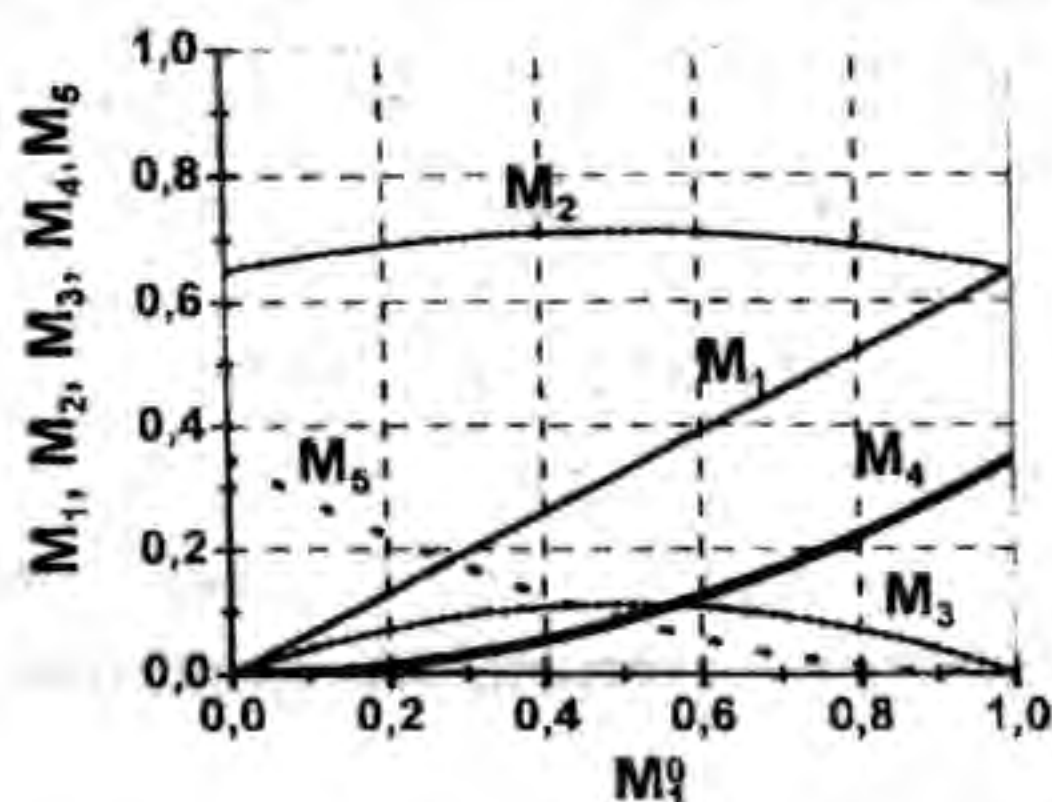


Рис. 2 Залежність відносних об'ємів компонент суміші від початкового об'єму розчиненої речовини для $\alpha = 0.45$, $\eta = 0.77$, $\gamma = 0.35$, $\xi = 0.35$.

В даному випадку закон збереження об'єму, що має вигляд

$$M_1 + M_2 + M_3 + M_4 + M_5 = 1, \quad (21)$$

виконується.

Таким чином, у рамках нашої моделі, знаючи початкову концентрацію розчиненої речовини, можна оцінити парціальні відносні об'єми компонент суміші.

4. Аналіз моделі та обговорення результатів.

Варіюючи коефіцієнти в (12), можна отримати різні форми кривої залежності коефіцієнта дифузії від відносного об'єму розчиненої речовини (рис.3).

Отриманий результат має структуру, схожу на виведену в [6] емпіричну залежність, що може свідчити на користь використаних вище модельних уявлень про дифузію в рідких сумішах.

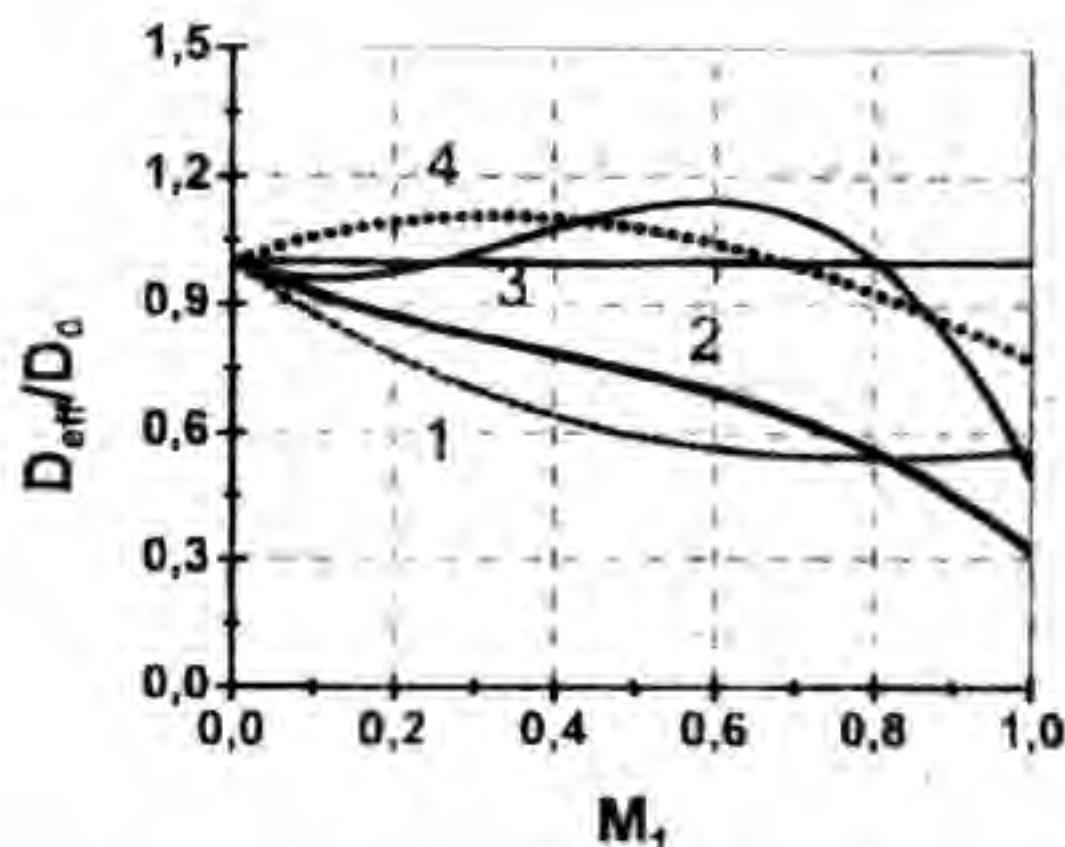


Рис.3. Теоретично можливі типи кривих залежності коефіцієнта дифузії для різних наборів коефіцієнтів системи
(1: $A_1 = -1.3, A_2 = 1.1, A_3 = -2.4$; 2: $A_1 = -0.8, A_2 = 1, A_3 = -0.95$; 3: $A_1 = -0.7, A_2 = 3.6, A_3 = -3.4$; 4: $A_1 = 0.7, A_2 = -1.2, A_3 = 0.3$.)

Нами було апроксимовано залежність коефіцієнта дифузії для випадку „оцтова кислота – вода” [7] за допомогою виразу (12) (рис.4).

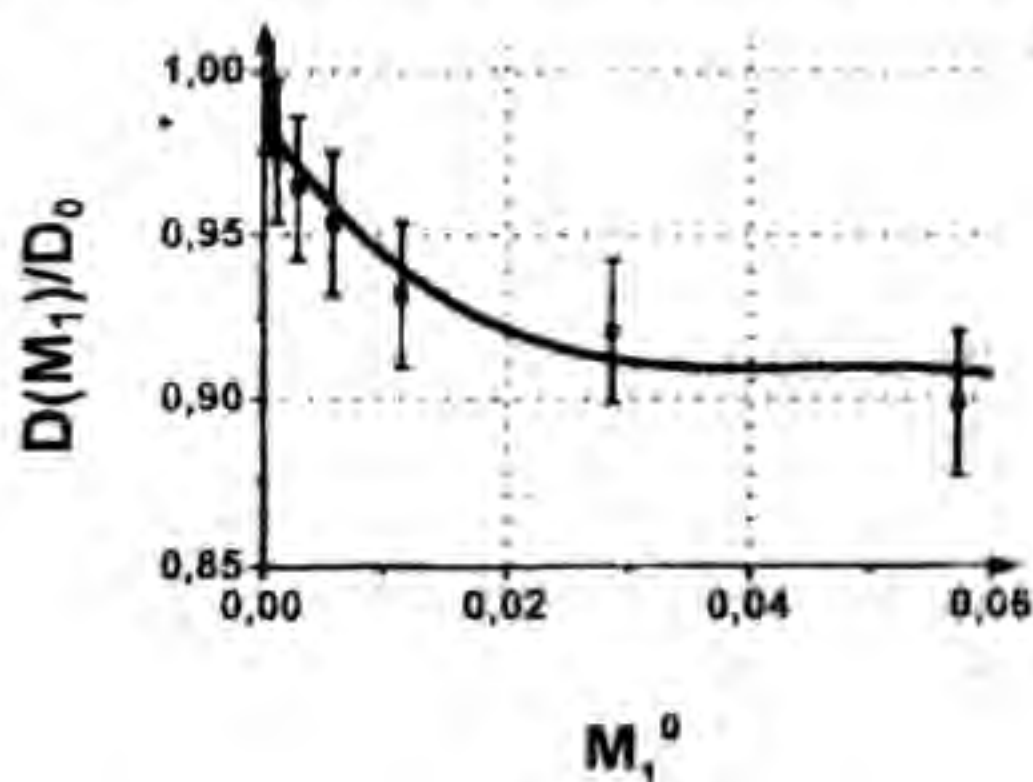


Рис.4. Залежність коефіцієнта дифузії від відносного об'єму для оцтової кислоти для набору коефіцієнтів системи $A_1 = -5, A_2 = 120, A_3 = -850$ (Середньоквадратичне відхилення апроксимації складає 0.04).

Таким чином, можна прийти до висновку, що порівнюючи експериментальні дані залежності коефіцієнта дифузії від початкової концентрації розчиненої речовини з теоретичними формулами, можна знайти коефіцієнти A_i , які несуть інформацію про процеси комплексоутворення в бінарній системі.

Зауважимо, що в реальних розчинах можуть утворюватися комплекси й інших типів (наприклад, тримерів XXX), а також можуть спостерігатися явища усадки чи набрякання сумішей, врахування яких може бути зроблено в межах розвинутої методики.

5. Висновки.

Теорія нелінійної дифузії може бути застосована для опису процесів переносу в сумішах типу „речовина - розчинник”. На прикладі п'ятикомпонентної моделі (X, Y, XY, XX, YY) теоретично знайдено залежність узагальненого коефіцієнта дифузії від концентрації розчиненої речовини.

Порівнюючи експериментальні дані залежності коефіцієнта дифузії від початкової концентрації розчиненої речовини з теоретичними формулами, можна знайти коефіцієнти A_j , які несуть інформацію про процеси комплексоутворення в бінарній системі.

Теорія може бути узагальнена на випадок урахування комплексів більш складних типів (наприклад, тримерів XXX), характерних для реальних розчинів, а також явища усадки чи набрякання сумішей.

Література:

1. A. Vergara, L. Paduano, R. Sartorio. // Journal of Physical Chemistry. – 105-№2 – P. 328-334, (2001).
2. J.M. Karter, G.D. Phillies. // Journal of Physical Chemistry. – 89– P.5118, (1985).
3. Гюльназаров Э.С., Обуховский В.В., Смирнова Т.Н. К вопросу о теории голографической записи на фотополимеризующемся материале. // Оптика и спектроскопия. - 1990 - 69, №1 - с.178-182.
4. Обуховский В.В., Смирнова Т.Н. Модель процесса голографической записи на фотополимеризующихся композитах. // Оптика и спектроскопия. - 1993 - 74, №4 - с.778-785.
5. J.M. Karter, G.D. Phillies. // Journal of Physical Chemistry. - 1985 - vol. 89 - p.5118.
6. Техническая энциклопедия. Справочник физических, химических и технологических величин. – М. 1931, – том 7.

Надійшла до редакції 24.11.2006

УДК 539.2:53.05:[546.11-123:546.289]:620.193.199

Анатолій В. Ткаченко,
Ольга Ю. Ананьїна,
Олександр С. Яновський

**Теоретичне дослідження
корозійної дії атомарного водню
на моногідридній поверхні
Ge(100)-(2×1)**

В роботі представлені результати квантово-хімічного моделювання процесів взаємодії атомарного водню з моногідридними поверхнями Ge(100). Показано, що при взаємодії моногідридної поверхні Ge(100) з атомарним воднем можливе утворення летючих гідридів германію. Розраховано енергетичні характеристики можливих фізичних і хімічних процесів в системі "кластер - водень".

Ключові слова: кластер, МЗДП, MNDO, водень, моногідридна поверхня Ge(100).

[†]E-mail: avt@mail.zp.ua

Anatolij V. Tkachenko,
Olga Y. Ananyina,
Oleksandr S. Yanovsky

**Theoretical study of corrosion
effect of atomic hydrogen on the
monohydride Ge(100)-(2×1)
surface**

The results of quantum-chemical simulation of hydrogen interaction with monohydride Ge (100) surfaces are presented in this work. The possibility of volatile germanium hydrides formation during such an interaction is demonstrated. Energy characteristics for possible physical and chemical processes in "cluster - hydrogen" system are calculated.

Key Words: cluster, MNDO, dihydride surface, monodihydride surface.

Атомарний водень, з одного боку, це найпростіший адсорбат, з другого, водень присутній в численних технологічних процесах сучасної електроніки: газофазному осадженні, епітаксії, тощо. Відомо, що взаємодія поверхонь Si та Ge із атомарним воднем призводить до утворення на ній моно- і дигідридних станів [1-3]. У моногідридному стані водень насичує зв'язок димерного атома поверхні. Дигідридні стани утворюються при насиченні воднем двох зв'язків атомів поверхні, поверхневі димери при цьому руйнуються. При взаємодії германію з атомарним воднем однією з можливих реакцій є утворення летючих гідридів, про що свідчать експериментальні дані [4]. Однак, до кінця не зрозумілим залишається механізм взаємодії поверхонь Ge(100) з атомами газової фази (H, OH, O), що передують утворенню германідів.

За даними роботи [5], при адсорбції атомарного водню на чистій поверхні Ge(100) енергія активації складає 0.2 еВ; наявність цього пояснюється необхідністю руйнування слабого π -зв'язку між атомами поверхневих димерів германію. Розраховані значення енергій активації адсорбції для утворення дигідридних станів з моногідридних становить

$E_a=1.8$ eV для поверхні Ge(100), що пов'язано з витратами на руйнування димерного зв'язку і зміну положення поверхневих атомів.

Згідно експериментальних даних [6], дигідридні стани на чистій упорядкованій поверхні Ge(100) (на відміну від Si(100)) не утворюються. Стани GeH_2 виникають тільки після попереднього дефектоутворення, наприклад, за допомогою іонного опромінення. Так, у спектрах ТД водню з упорядкованих поверхонь Ge(100), витриманих у водні, спостерігається тільки один пік В, наявність якого свідчить про десорбцію водню із моногідридних станів. Пік А, який свідчить про десорбцію із дигідридних станів, з'являється тільки після попереднього дефектоутворення. Розрахунки взаємодії атомарного водню з моногідридними станами на поверхні Ge(100) указують на те, що утворення дигідридної фази на впорядкованих поверхнях Ge(100)-(2×1) ускладнено, на відміну від поверхонь Si(100)-(2×1) [7]. Для поверхні Ge(100) значення енергії активації десорбції ($E_d=0.6$ eV) молекули водню при зв'язуванні одного з адсорбованих на поверхні атомів Н з атомом Н газової фази є значно меншим за значення енергії активації, необхідної для утворення дигідриду ($E_a=1.8$ eV).

Метою роботи є дослідження механізмів взаємодії поверхонь Ge(100) з атомарним воднем, оцінка енергій активації можливих реакцій у системі „атомарний водень – поверхня” і моделювання корозійної дії атомарного водню на поверхні Ge(100)-(2×1).

При проведенні досліджень був використаний напівемпіричний метод квантово-хімічного моделювання МЗДП (модифікована зневага диференціальним перекриттям, MNDO), в основі якого лежить розв'язання рівняння Шредингера для кластера в наближенні Хартрі-Фока. Цей метод орієнтований на коректне відтворення електронних, енергетичних характеристик і геометричних параметрів молекул (кластерів). У порівнянні з методами *ab initio*, напівемпіричний метод MNDO більш швидкий і може бути застосований до більших за кількістю атомів систем. Завдяки параметризації, для деяких класів сполук саме цей метод дає більш точні результати.

Характеристикою чистої впорядкованої поверхні Ge(100)-2×1 є ряди асиметричних димерів (рис.1.) [3, 8]. Поверхня Ge(100)-2×1 моделювалася за допомогою кластера Ge_{63} . Розрахунки оптимізованої геометрії поверхні проводилися при мінімумі повної енергії кластера.

Значення енергії активації адсорбції E_a та теплоти адсорбції q (енергії зв'язку водень-поверхня) визначалися з розрахунків залежності повної енергії системи „кластер-водень” від відстані між атомом водню та атомом поверхні (координати реакції).

Таблиця 1. Геометричні і електронні характеристики поверхні Ge(100)-2×1 у стані, показаному на рис. 2а

N	Q_N , e	P_{NN}	M	P_{MM}	Q_M , e	P_{NM}	R_{NM} , Å	E ЛО, eV	s-склад. ЛО _N , %	s-склад. ЛО _M , %
1	+0.35	3.89	3	3.9	+0.33	0.98	2.49	-11.35	40.35	28.46
			2	3.93	+0.16	0.99	2.48	-11.43	41.35	28.39
			H2	0.93	-0.26	0.92	1.49	-13.1	32.82	100
2	+0.16	3.93	1	3.89	+0.35	0.99	2.48	-11.43	28.39	41.35
			4	3.9	+0.4	0.98	2.47	-11.24	25.59	27.69
			6	3.86	+0.46	0.97	2.49	-11.36	28.96	29.69
			H1	0.94	-0.24	0.92	1.49	-13.21	24.23	100
3	+0.33	3.90	1	3.9	+0.35	0.98	2.49	-11.35	28.46	40.35
			9	3.91	+0.02	0.98	2.45	-11.12	24.11	25.53
			13	3.36	-1.40	0.88	2.40	-11.20	21.88	20.94
			17	3.87	-0.31	0.98	2.49	-11.36	33.65	27.65
6	+0.46	3.86	2	3.93	+0.16	0.97	2.49	-11.36	29.69	28.96
			8	3.91	+0.17	0.99	2.48	-11.26	28.48	27.69
			14	3.13	-1.66	0.83	2.39	-11.49	23.06	22.07
			16	3.86	-0.37	0.98	2.49	-11.37	31.54	26.83
7	-0.31	3.87	5	3.51	+1.21	0.94	2.45	-11.59	24.99	37.8
			8	3.90	+0.17	0.99	2.51	-10.86	24.49	26.52
			H5	0.97	-0.18	0.96	1.5	-12.99	23.38	100
			11	3.44	+1.33	0.90	2.46	-11.37	25.05	38.85
8	+0.17	3.90	7	3.87	-0.31	0.99	2.51	-10.86	26.52	24.49
			6	3.86	+0.46	0.99	2.48	-11.26	27.69	28.48
			H6	0.93	-0.25	0.93	1.49	-13.17	24.29	100
			12	3.5	+1.21	0.93	2.52	-11.50	29.94	40.72
5	+1.21	3.51	14	3.13	-1.66	0.77	2.39	-11.56	32.5	19.86
			18	3.74	-0.68	0.91	2.43	-11.67	38.28	24.35
			H7	0.85	-0.38	0.78	1.48	-14.17	25.01	100
			7	3.87	-0.31	0.94	2.45	-11.59	37.8	24.99
4	+0.4	3.9	2	3.9	+0.4	0.98	2.47	-11.24	27.69	25.59
			10	3.91	+0.04	0.99	2.47	-11.21	28.19	26.65
			15	3.86	-0.37	0.98	2.44	-11.46	31.72	26.07
			13	3.36	-1.40	0.88	2.41	-11.24	22.99	20.99

Таблиця 2. Таблиця 1. Геометричні і електронні характеристики поверхні Ge(100)-2×1 у стані, показаному на рис. 2в

N	Q_N, e	P_{NN}	M	P_{MM}	Q_M, e	P_{NM}	R_{NM}, A	Е ЛО, еВ	s- склад. ЛО _N , %	s- склад. ЛО _M , %
1	+1.54	3.29	2	3.78	-0.54	0.80	2.47	-11.28	42,77	23,65
			H2	0.84	-0.40	0.81	1.48	-13.49	34,82	100
			H8	0.84	-0.40	0.81	1.48	-13.48	34,66	100
			H9	0.84	-0.40	0.81	1.47	-13.45	34,0	100
2	-0.54	3.78	1	3.29	+1.54	0.85	2.47	-11.28	23,65	42,77
			4	3.73	+0.83	0.94	2.46	-11.37	24,39	31,38
			6	3.72	+0.84	0.94	2.46	-11.38	24,25	31,38
			H1	0.97	-0.17	0.96	1.50	-13.23	28,54	100
4	+0.83	3.73	2	3.78	-0.54	0.94	2.46	-11.37	31,38	24,39
			13	3,03	-1,77	0,78	2,39	-11,55	27,03	21,25
			15	3,81	-0,53	0,95	2,47	-11,40	32,76	25,63
			10	3,91	-0,02	0,98	2,48	-11,36	32,1	26,98
6	+0.84	3.72	2	3.78	-0.54	0.94	2.46	-11.38	31,38	24,25
			8	3.9	-0.02	0.97	2.48	-11.36	32,17	21,91
			16	3,81	-0,54	0,94	2,47	-11,42	32,98	25,55
			14	3,03	-1,77	0,79	2,39	-11,57	27,17	21,60
3	+1.25	3.48	10	3,88	-0,25	0,94	2,45	-11,48	37,25	25,16
			13	3,03	-1,77	0,74	2,39	-11,47	32,40	18,59
			17	3,73	-0,72	0,90	2,45	-11,63	39,39	24,85
			H10	0,86	-0,37	0,84	1,47	-13,72	26,61	100
5	+1,24	3,48	14	3,03	-1,77	0,73	2,39	-11,43	32,30	18,40
			7	3,89	-0,22	0,94	2,46	-11,47	38,19	25,45
			18	3,73	-0,71	0,89	2,44	-11,57	38,67	24,46
			H7	0,86	-0,37	0,84	1,47	-13,66	26,42	100

Позначення в таблицях 1, 2: N, M – номер атома в кластері; Q_N, Q_M – заряд на атомі; P_{NN}, P_{MM} – валентність; R_{NM} – міжатомна відстань; P_{NM} – порядок зв'язку, Е_{ЛО} – енергія локалізованої орбіталі.

Таким чином, за результатами квантово-хімічного моделювання показано, що взаємодія атомарного водню з моногідридними поверхнями, які моделювалися кластером Ge₆₃, може призводити до утворення летючих германів. Значення енергій активації етапів взаємодії, які призводять до корозійної дії атомарного водню на поверхні Ge(100), склали близько 0.8-1.0 еВ. Таким чином, за оцінками енергій активації процесів, корозійна дія

водню може конкурувати з реакціями десорбції молекулярного водню з поверхні германію. Отже, на нашу думку, корозійна дія атомарного водню можлива, наприклад, при витримці поверхні Ge(100)-2×1 в середовищі з високою концентрацією атомарного водню або при взаємодії її з атомами Н, що мають значну кінетичну енергію.

Література

1. Аппельбаум Дж., Хамман Д. Хемосорбция на поверхности полупроводников // Теория хемосорбции / Под ред. Дж. Смита. – М.: Мир, 1983. – С. 60-101.
2. Papagno L., Shen X.Y., Anderson J., Schirripa Spagnolo G., Lapeyre G.J. Hydrogen adsorption on Ge(100) studied by high - resolution energy - loss spectroscopy // Phys. Rev. B. - 1986., - Vol. 34, № 10. - P. 7180–7191.
3. Schaefer J.A. Hydrogen interaction with semiconductor surfaces // Surface Sci. – 1986. - Vol.178, № 1-3. - P. 90-100.
4. Ромашин С.Н., Седов А.В., Касаткин Э.В. Самоорганизация при осаждении пленок полупроводников в среде атомарного водорода, Журнал технической физики. - 2004. - том 74, вып. 8.
5. Ананьїна О.Ю. Квантово-хімічне моделювання процесів взаємодії водню, силану, атомів та іонів фосфору і бору з упорядкованими та дефектними поверхнями Si(100) і Ge(100), автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук, Ужгород, 2006. С.20.
6. Яновский А.С., Герчиков М.Ю., Панеш А.М. Адсорбционные свойства кремния и германия после ионного облучения // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1989. - №8. - С. 5-16.
7. Ананьїна О.Ю., Яновський О.С., Котляров А.П. Моделювання взаємодії атомарного водню з вакансійним дефектом на поверхні Ge(100) // Фізика і хімія твердого тіла. - 2003. - №4. - С. 638-642.
8. Ананьїна О., Бабко С., Яновський О. Моделювання поверхонь Ge(100) і Si(100) за допомогою кластерів// Вісник Львівського університету. Серія фізична.- 2006.- №39, с.10-16.

Надійшла до редколегії 20.11.06 р.

УДК 533.9

Віталій В. Юхименко, Валерій Я.
Черняк¹, Вадим В. Наумов², Ірина
В. Присяжневич, Ян Д. Скалній³,
Стефан Матейчик, Мартін Сабо

Оптичні дослідження розрядної плазми в повітряному каналі з водяною стінкою

Проведені оптичні дослідження
плазмово-рідинної системи на базі
електричного розряду в газовому каналі
з водяною стінкою для різних діаметрів
газового каналу. Визначені енергетичні
характеристики даного типу розряду.
Отримані значення температур
заселення вказують на неізотермічність
плазми в газовому каналі з водяною
стінкою.

Ключові слова: розряд, газовий
канал, температура.

Vitaliy V. Yukhymenko, Valeriy Ya.
Chernyak¹, Vadim V. Naumov²,
Iryna V. Prysiashnevych, Jan D.
Skalny³, Stefan Matejcik, Martin
Sabo

Optical researches of discharge plasma in air channel with water wall

Optical studies of the plasma-liquid
system based on the electrical discharge in
the gas channel with a water wall were
carried out for different diameters of gas
channel. Energy characteristics of the
investigated discharge were determined.
The population temperatures were
calculated and non-isothermal character of
the air plasma in the gas channel with a
water wall was shown.

Key Words: discharge, gas channel,
temperature.

¹ E-mail: chern@univ.kiev.ua

² E-mail: naumov@ifph.kiev.ua

³ E-mail: Jan.Skalny@uibk.ac.at

Introduction

Among electrical discharges, which are used in plasma-liquid systems, the special attention is given to discharges at atmospheric pressure with large ratio of the surface of plasma-liquid contact to the plasma volume: diaphragm [1], capillary [2], corona [3] etc. The electrical discharge in gas channel with a liquid wall is the least investigated among them. The principal discrepancy of this discharge from other discharge types mentioned above is the possibility of external control of plasma-created gas compound, which specifies its large potential opportunities in plasmachemical applications [4]. But plasma properties of this discharge have been not well studied until now.

Results of spectroscopic researches of the discharge in air channel with water wall are represented in this work. Parameters of the plasma of this discharge were investigated and possibility of its controlling by changing external parameter of the discharge (discharge current I_d) was studied.

Experimental set-up

Research of discharge plasma in the gas channel with water wall was carried out in the reactor, which is shown on Fig.1. It consists of quartz cylinder 1 with diameter 50 mm and length 170 mm. Top and bottom of the cylinder were hermetically sealed by duralumin flanges 2, in which the system of electrodes was built in. Cylindrical metal electrodes 3 were placed inside glass tubes 4. Two different geometries were investigated. Electrodes of 6-mm diameter and of 25-mm length inside glass tube of 7-mm inner diameter were used (geometry 1). Electrodes of 3-mm diameter and of 40-mm length inside glass tube, which was narrowed on the end and its outlet was of 4-mm diameter, were used (geometry 2). Flows of air directed into these glass tubes along to the top and to the bottom electrodes were colliding and forming stable gas channel, which connects two electrodes. The distance between electrodes was 10 mm. Air flow rate was controlled by rotameter.

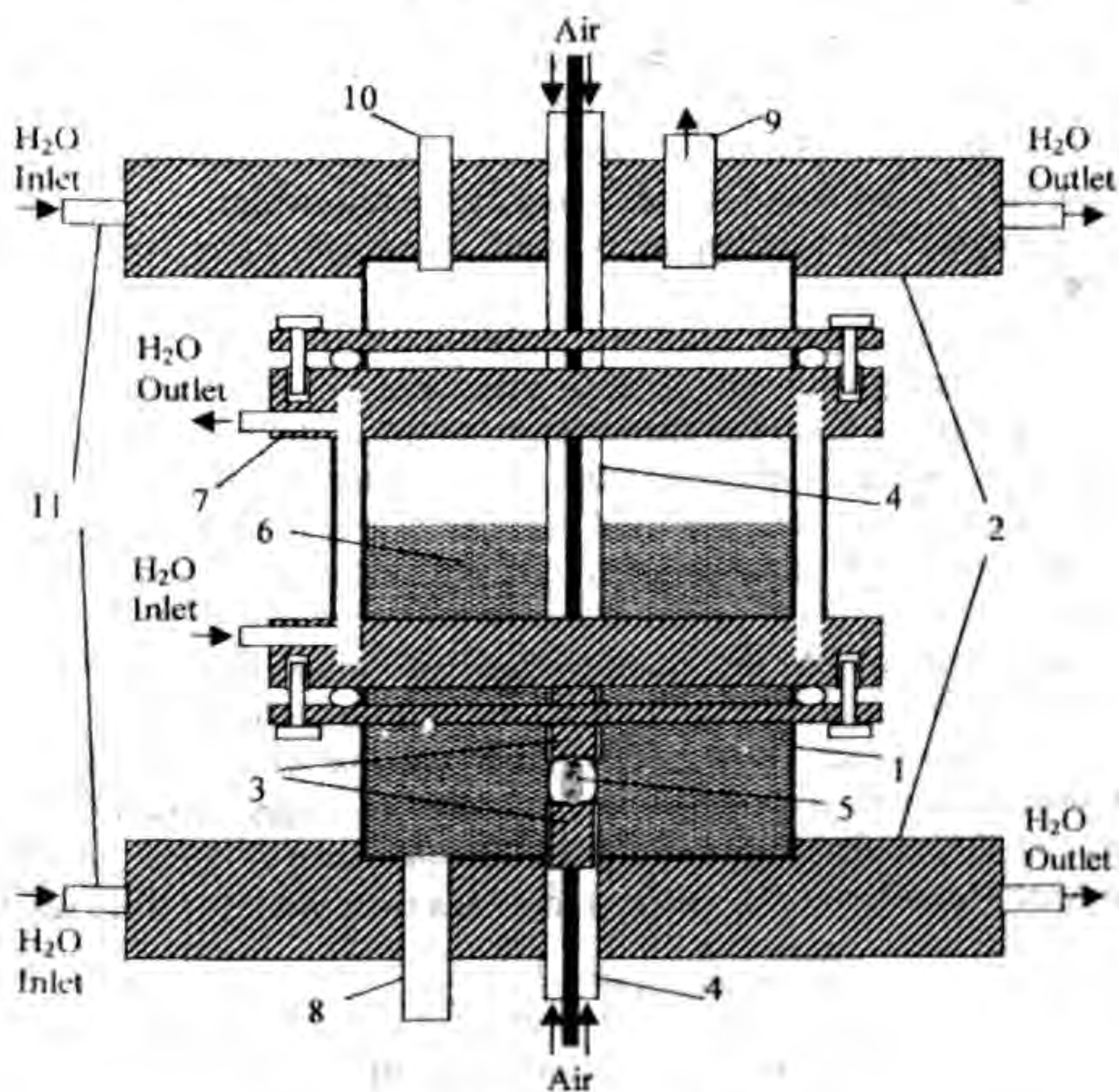


Fig. 1 Experimental setup.

The liquid 6 was input to the reactor through the tube 8 built into the bottom flange. The level of liquid was kept constant by using the system of communicating vessels. Pressure inside the reactor and communicating vessels was maintained constant by means of tube 10 built in top flange. Tube 9 built into the top flange was used for outputting gaseous products produced during the plasma treatment of solution.

DC source was used to supply the discharge 5, which burns inside gas channel with water wall. The intensive heat release occurs during discharge burning and leads to the rapid heating of the liquid and walls of the reactor. Therefore the water-cooling system was used. Cold water permanently flows through the casing 7, which covered the quartz cylinder, and cools walls of the reactor. Flanges were cooled by water-cooling system 11.

Methods for determining temperatures of population distributions

Temperature, which corresponds to the electronic population distribution T_e (electronic temperature), was determined from Boltzmann plot by using relative intensities of following emission lines: copper (electrode material) Cu ($\lambda=465,1$; $\lambda=510,5$; $\lambda=515,3$; $\lambda=521,8$; $\lambda=578,2$ nm); hydrogen H_α , H_β , H_γ ($\lambda=656,3$, $\lambda=486,1$, $\lambda=434,05$ nm); oxygen OI ($\lambda=777,1$; $\lambda=844,6$; $\lambda=926,6$ nm) [5]. Choosing of these lines is conditioned by the following:

1. Firstly, there is no overlapping of these lines with other spectral lines and bands;
2. The energy differences between upper excited levels of these spectral transitions are high enough to reduce inaccuracy in temperature calculations.

It was shown that the dependence of logarithm from populations on energies of the excited levels has linear character for plasma of the discharge in air channel with water wall for used regimes of the discharge. It indicates the equilibrium population distribution of the excited electronic levels of Cu, O and H atoms.

Determination of the temperature of vibration levels population distribution T_v (vibration temperature) based on measuring relative intensities of spectral emission bands. This method supposed that vibration temperatures of the ground state and electronic excited states are very closed. To calculate vibration levels population of the upper electronic state $C^3\Pi_u$ of the 2nd positive system of N_2 (transition $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) formulas from work [6] were used:

$$\ln N_{C'} \approx \ln C + \ln \left(\frac{I_{C'B'}}{g_{C'B'} \nu_{C'B'}^4} \right) \quad (1)$$

Where C – is a constant, $\nu_{C'B'}$ – frequency of the transition $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$, $I_{C'B'}$ – intensity of spectral band of corresponding transition, $g_{C'B'}$ – Frank-Condon factor of corresponding transition, $N_{C'}$ – population of the upper excited level.

The Boltzmann character of vibration levels population distribution was shown for spectral bands (0,0), (1,4), (0,2), (1,3), (2,4) of the 2^+ system of the N_2 . The vibration temperature T_v^* was determined from Boltzmann plot.

Results and Discussion

Researches of the discharge plasma in the gas channel with water wall were carried out for the airflow rate $G=110 \text{ cm}^3/\text{s}$ and discharge current (I_d), which was changed from 80 up to 400 mA.

Current-voltage characteristics ($I-V$) of the discharge in air channel with water wall obtained for both diameters of gas channel are shown on Fig.2.

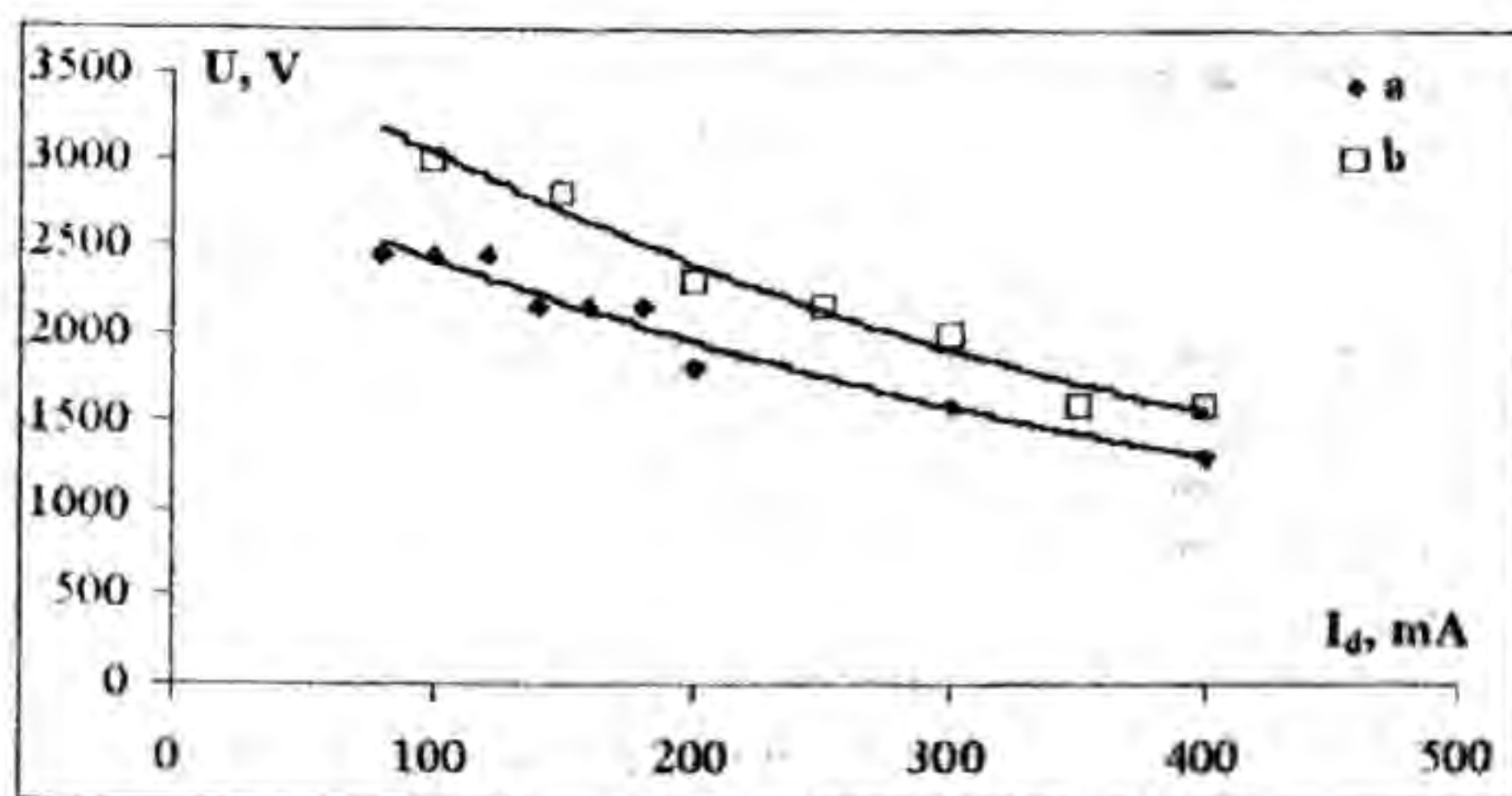


Fig. 2 Current-voltage characteristic of the discharge in air channel with water wall: a – geometry 1; b – geometry 2.

Obtained $I-V$ curves have decreasing character. Its behavior is similar to the current-voltage characteristic of arc discharge. From Fig.2 can be seen that voltage of the discharge is higher in the case of geometry 2 than in case of geometry 1 under same values of discharge current. It can be explained by increasing of energy and mass exchange between plasma and liquid.

Emission spectra of plasma were obtained by spectrometer SL-40 in the range of 200-1100 nm with spectral resolution $\sim 0,75 \text{ nm}$. The typical emission spectrum of the discharge plasma in the air channel with a water wall is represented on Fig. 3.

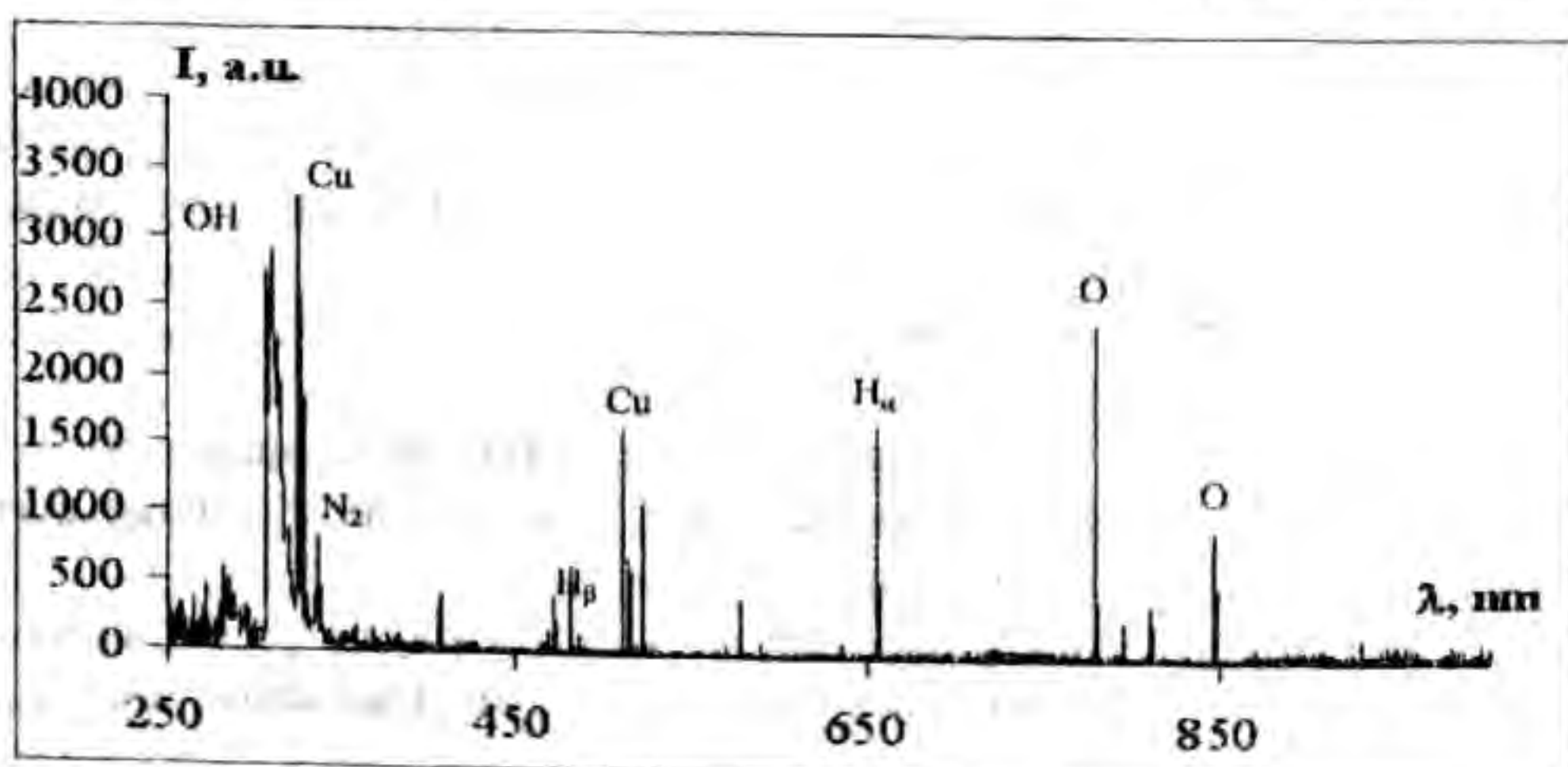


Fig.2 Typical emission spectrum of the air plasma in the gas channel with water wall. $G=110 \text{ cm}^3/\text{s}$, $I_d=100 \text{ mA}$, $n=600 \text{ ms}$.

As can be seen from Fig.3 the emission spectrum of plasma is multi-component. UV system of hydroxyl OH ($A^2\Sigma-X^2\Pi$: (0-0) 306.4-308.9 nm), 2⁺-system of nitrogen N₂ ($C^3\Pi_u-B^3\Pi_g$: (0-0) 337.1(0-1) 357.7, (0-2) 380.5, (1-0) 316.0 nm etc.), atomic lines of hydrogen H_α (656.3 nm), H_β (486.1 nm), H_γ (434.05 nm), oxygen OI (777.1, 844.6, 926.6 nm) and copper Cu (324.75; 327.4; 465.1; 510.5; 515.3; 521.8; 578.2 nm) are observed in spectra [7].

Increasing of the discharge current leads to the intensity increasing of all plasma components and is accompanied by intensity redistribution in spectra. The intensity of the OH band has been increased while the copper lines become less intensive. Such behaviour of the OH band intensity can be due to the pressure increasing of the saturated water vapour in plasma-created gas resulted from the current increasing.

Dependencies of spectral line (Cu, O, H_α) and molecular band (N₂) intensities on discharge current I_d for both diameters of the gas channel are represented on Fig. 4.

From Fig.4 is seen that spectral lines intensity increases with increasing I_d . It was noticed that intensity of spectral lines of blowing gas (O) and of water vapors (O, H) increases more rapidly than intensity of Cu lines (electrode material) and of N₂ band. The intensity of plasma components is much higher for geometry 2 (Fig.4b) than for geometry 1 (Fig.4a).

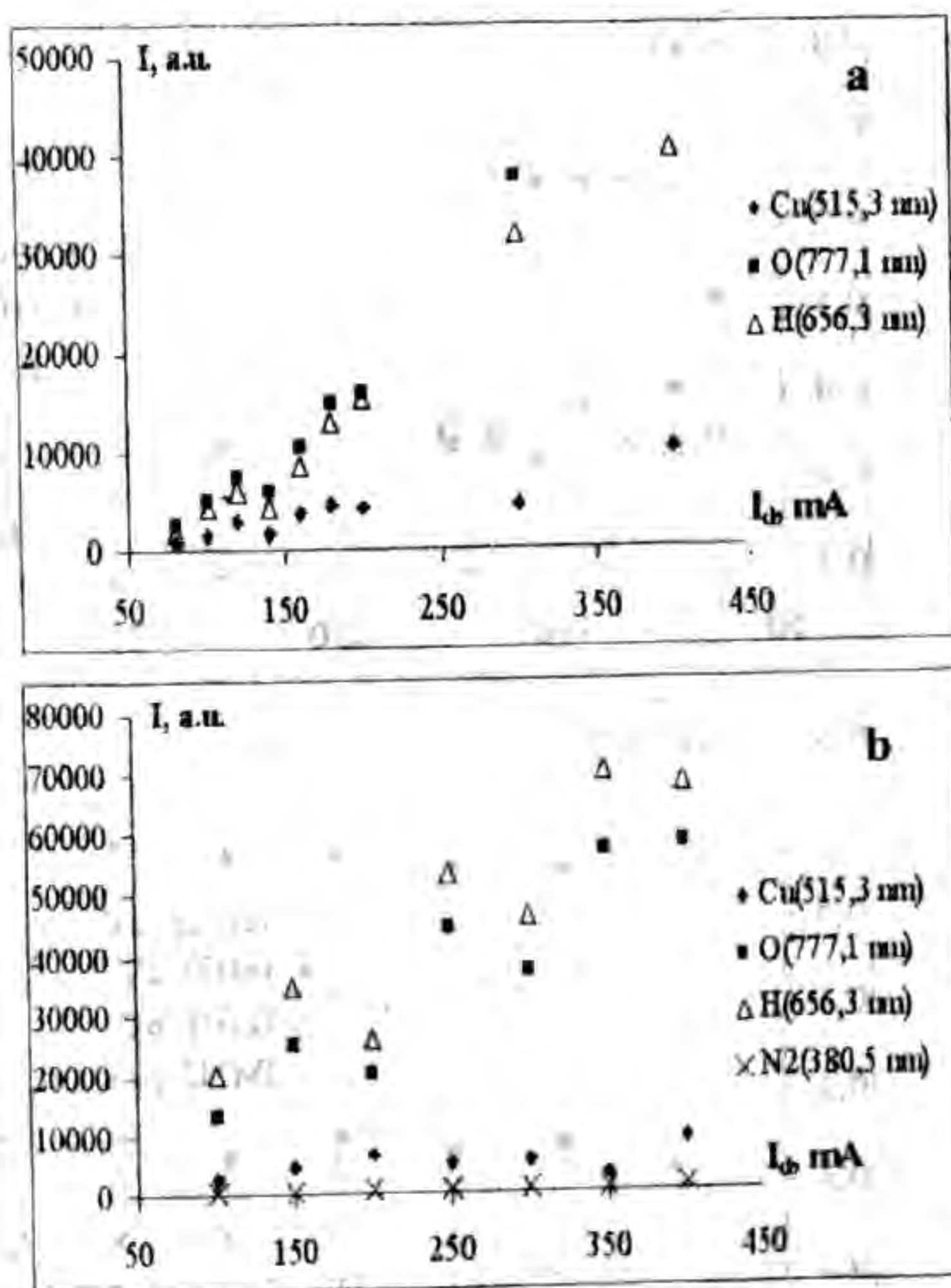


Fig. 4 Dependence of spectral lines intensity of Cu, O, H atoms and molecular band (N₂) intensity on discharge current I_d for plasma discharge in the gas channel with water wall: a – geometry 1, b – geometry 2.

Distributions of electronic temperatures T_e of Cu, O, H atoms and vibration temperature T_v of N₂ molecule for different discharge currents are represented on Fig. 5. It can be seen that obtained temperatures practically don't depend on discharge current and on diameter of the gas channel.

It was noticed that T_e of O and H atoms are almost in twice less than T_e of Cu (material of electrodes), and have almost similarly distribution for different discharge currents. From Fig. 5(b) can be seen that T_v value is slightly lower than T_e . It indicates the non-isothermal character of plasma in air channel with a water wall. One of reason of higher temperature T_e of Cu atoms (in comparison with T_e of O and H atoms) could be additional mechanism of excited electron levels population due to the recombination of Cu ions.

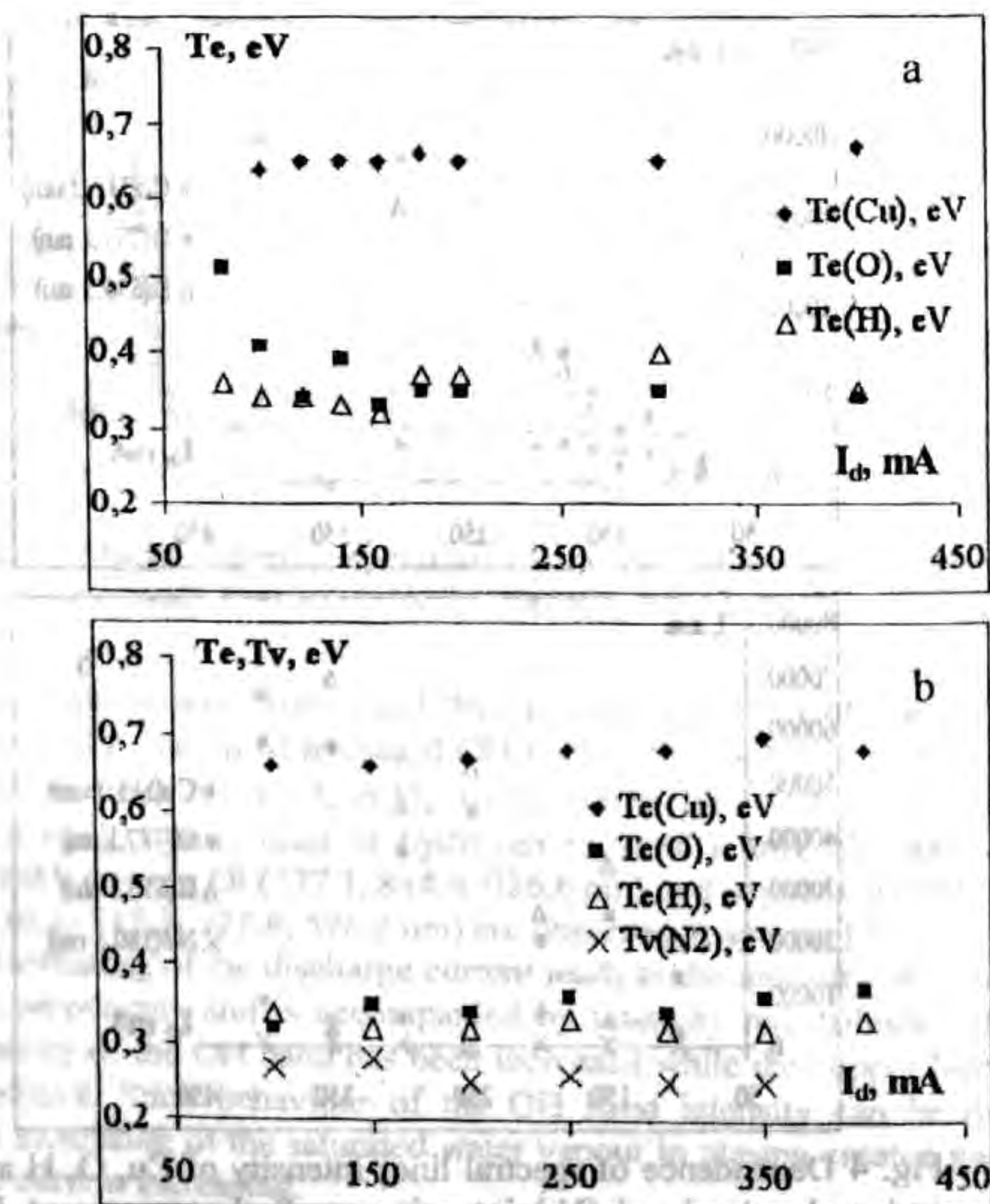


Fig.5. Distributions of electronic temperatures of Cu, O, H atoms and vibration temperature of N_2 molecule for different discharge current I_d and different diameters of the gas channel: a – geometry 1; b – geometry 2.

Conclusions

1. The optical researches of plasma of the electrical discharge in the air gas channel with a water wall were carried out. It was shown that basic components of emission spectrum of plasma of such discharge correspond to compounds of the air, which forms the gas channel, and of liquid, in which the this channel occurs.
2. It was shown that obtained T_e values of O and H atoms differ from T_e of Cu (material of electrodes) and the behaviour of its distribution is similar. It was

supposed that temperature discrepancy deals with additional mechanisms of excited electron levels population due to the recombination of Cu ions.

3. It was concluded that of plasma in air channel with a water wall is strongly non-equilibrium.

Acknowledgement

This work was partially supported by the Ministry of Education and Science of Ukraine Grant №M/176-2006 (Ukrainian-Slovak project), Taras Shevchenko Kyiv National University Grant and by the Program of scientific co-operation between Polish Academy of Science and Ukrainian Academy of Science.

References

1. Strojko I.K., Maximov A.I. Processes of solutions sterilisation under action decaying and low-voltage diaphragm discharges// Proc. 3rd Intern. Symp. on Theor. and Appl. Plasma Chemistry (ISTAPC-2002). Plyos. Russia. – 2002. – 2. – p. 342-345. (in Russian).
2. Bruggeman P., Leys C., Vierendeels J. Progress in the experimental study of DC electrical breakdown in bubbles// Elec. Proc. Of The second Intern. Workshop Nonequilibrium Processes in Combustion and Plasma Based Technologies. Minsk. Belarus. – August 26 – 31. – 2006. – 3p.
3. Hoebe W.F.L.M Pulsed corona – induced degradation of organic materials in water. – Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven, 2000, 164 p.
4. Veremii Yu.P., Chernyak V.Ya., Trokhymchuk A.K., Kondratyuk Ya.V., Zrazhevskij V.A. Physicochemical properties of a plasma-liquid system with an electric discharge in a gas channel with a liquid wall// Ukr. J. Phys. – 2006. – V.51. – № 8. – p. 769 – 774.
5. Nagibin I., Prokof'ev V. Spectral devices and spectroscopy techniques. – Leningrad, Ed. "Mashinostroenie", 1967, 324 p. (pp. 229-237) (In Russian).
6. Gaysin F., Son E. Electrophysical processes in discharges with solid and liquid electrodes. – Sverdlovs: Ed. Uralskiy University, 1989, 432 p. (pp. 394-399) (In Russian).
7. Pears R.W.B. and Gaydon A. G. The identification of molecular spectra. – N.Y.: Chapman and Hall, 1976.

Received 01.12.2006

1. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
2. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
3. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
4. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
5. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
6. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
7. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
8. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
9. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).
10. V. A. Rykova, *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 100 (1967).

1. The identification of molecular species - atomic absorption spectroscopy (AAS) and infrared spectroscopy (IR) were carried out. The identification of molecular species of plasma of each discharge was carried out by IR, which forms the gas channel, and AAS.

СУЧАСНА ФІЗИКА

ΑΓΙΟΓΡΑΦΙΑ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

ΕΚΔΟΣΗ ΤΗΣ ΕΚΚΛΗΣΙΑΣ ΤΗΣ ΕΛΛΑΔΟΣ

УДК 532.536

Альошин О.Д., проф., д. ф.-м. н.

Розрахунки критичних температур малих обмежених систем

На основі кореляційної функції Орнштейна-Церніке і масштабних рівнянь флуктуаційної теорії фазових переходів знайдені рівняння зсувів критичних температур малих обмежених систем. Отримані результати узгоджуються з існуючими експериментальними даними.

Ключові слова: критична температура, обмежені системи

O.D. Alekhin, Prof., Dr. Sc.

Critical temperature calculations of small confined systems

The equation of the critical temperature shifts has been obtained for the small confined systems on the basis of Ornstein-Cernike correlation function and scale equations of fluctuation theory of phase transitions. The results are in a good agreement with known experimental data

Key Words: critical temperature, confined systems

E-mail: alekhin@mail.univ.kiev.ua

Стримкий розвиток в останні часи сучасних нанотехнологій викликав значний науковий інтерес до вивчення властивостей малих обмежених систем поблизу критичної точки (КТ). Для таких систем розміром $L \approx R_c$ М. Фішером [1,2] запропоновано рівняння радіуса кореляції R_c у вигляді

$$R_c = L f_{R_c}(x, y) = L f_{R_c}(atL^{1/\nu}, b\Delta\mu L^{1/\xi}) \quad (1)$$

Тут f_{R_c} – масштабна функція змінних x і y ; $t = (T - T_c)/T_c$; $\Delta\mu = (\mu - \mu_c)/\mu_c$; T_c , μ_c – критичні значення температури і хімічного потенціалу; ν і ξ – критичні показники радіуса кореляції [3]. В загальному вигляді при $L \rightarrow R_c$ вид функції f_{R_c} – не визначений. Але у випадку $L \rightarrow \infty$ рівняння (1) переходить у рівняння флуктуаційної теорії фазових переходів ФТФП [3]. Для обмежених систем ($L \rightarrow R_c \sim t^{-\nu}$, $L \rightarrow R_c \sim \Delta\mu^{-\xi}$) виходячи з (1) [1,2] знаходимо, що $\Delta\mu \sim L^{-1/\xi}$ і $t \sim L^{-1/\nu}$.

Ці співвідношення прогнозують залежність величин критичних параметрів обмежених систем від їх лінійних розмірів: $\delta t_c(L) = (T_c(\infty) - T_c(L))/T_c(\infty) \sim L^{-1/\nu}$, $\delta \mu_c(L) = (\mu_c(\infty) - \mu_c(L))/(\mu_c(\infty) - \mu_c(L)) \sim L^{-1/\xi}$.

Спроби теоретичних розрахунків величин зсувів $\delta t_c(L)$ були проведені в роботах [4,5] на основі виду бінарної кореляційної функції Орнштейна-Церніке (ОЦ) $g(r) = A/r \exp(-r/R)$ ($\eta=0$, $\nu=1/2$), який слідує з

класичної теорії критичних явищ Ландау [6]. Покладаючи однак, що при $\eta=0$ величина $\nu=0,63 > 1/2$, в [4,5] запропоновано наступне співвідношення для величини зсуву критичної температури речовини у випадку тонкої плівки товщиною L

$$\delta t_k(L) = \left(\frac{\rho \sigma_0}{L} \right)^{1/\nu}, \quad \nu=0,63. \quad (2)$$

Водночас для одержання цього результату в [4,5] завчасно покладалось також, що величина радіуса кореляції поблизу нової критичної температури $T_k(L)$ визначається рівністю $R_{cl}=L/\pi$, ($\pi=3,14$).

Однак, розрахунки, проведені в даній роботі на основі методу [5] показали, що величина зсуву $\delta t_k(L)$ має якісно інший вигляд ніж (2), а саме

$$\delta t_k(L) = \frac{t^{1-2\nu}}{2\nu} \left(\frac{\pi \xi_0}{L} \right)^2 \sim \frac{t^{1-2\nu}}{L^2}. \quad (3)$$

Якщо в цьому співвідношенні згідно [5] покласти, що $\nu=0,63 > 1/2$ ($(1-2\nu)<0$), то при $t \rightarrow 0$, $\delta t_k(L) \rightarrow \infty$. Цей результат, а також залежність $\delta t_k(L) \sim 1/L^2$ повністю протирічить висновкам М. Фішера [1,2] (1).

Якщо ж дотримуватись загальновідомої точки зору, що кореляційна функція ОЦ справедлива лише у випадку класичної теорії критичних явищ [6], (тобто $\eta=0$ і $\nu=1/2$), тоді співвідношення (3) просто набуває вигляду (2), в якому замість величини індексу $\nu=0,63$ треба використовувати класичне значення $\nu=1/2$ [6].

Цей результат свідчить про те, що розраховані величини зсувів $\delta t_k(L)$, проведені в [5], справедливі лише в рамках класичної теорії Ландау [6].

Впродовж цих досліджень в роботах [7] виходячи з масштабних рівнянь радіуса кореляції обмежених систем [8], одержане на основі ФТФП [3] було знайдено рівняння зсуву критичних температур у вигляді

$$\delta t_k(L) = 0,8 \left(\frac{2\xi_0}{L} \right)^{1/\nu} \quad (4)$$

Надалі розраховані за формулами (2), (4) величини зсуву критичних температур були співставлені з результатами експериментальних досліджень теплоємності поблизу λ -точки рідкого гелію ^4He в малих обмежених системах різної геометрії [9]. В якості величини амплітуди ξ_0 в даній роботі було використано значення $\xi_0=0,36$ нм, яке згідно [10] відповідає напрямку критичної ізохори.

Результати проведених розрахунків за формулами (2),(4) наведені в табл. 1.

Табл. 1. Зсув положення температурного максимуму теплоємності для тонких шарів річкового гелію [5,9].

Товщина плівки L , нм	Зсув $\delta t_k(L)$, експеримент	Розрахунки $\delta t_k(L)$ за формулою (2)	Розрахунки $\delta t_k(L)$ за формулою (4)
48,3	0,00094	0,0015	0,0037
107,4	0,00029	0,0005	0,0011
211,3	1,27E-04	0,0002	0,0004
318,9	5,30E-05	9E-05	0,0002
503,9	2,92E-05	5E-05	0,0001
691,8	1,81E-05	3E-05	7E-05

Як бачимо, теоретичні розрахунки зсуву критичних температур, проведені за формулою (4), за порядком величини близькі до експериментальних даних, представлених в [5,9].

Розрахунки величин $\delta t_k(L)$, проведені за формулою (2), суттєво (в 3÷5 разів) відрізняються від експериментальних даних, що на наш погляд пов'язано з невідповідністю застосування кореляційної функції ОЦ до аналізу малих обмежених систем поблизу КТ.

1. M.E. Fisher, M.N. Barber. // Phys. Rev. Lett. 1972. – 28 – 1516.
2. K. Binder // Annu. Rev. Phys. Chem. – 1992. – Vol. 43 - P. 33-59.
3. Патанинський А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 2-е изд., перераб. 1982. – 382 с.
4. Чалий К.А. Автореферат дис. канд. физ.-мат. наук. Специфика критических явлений в малых объемах жидкостей. 1996.
5. Чалий К.О. Рівноважні та нерівноважні властивості мезомасштабних рідинних систем в критичній області. Автореферат дис. докт. фіз.-мат. наук. Київ 2006.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. 3-е изд., доп. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
7. Альохін О.Д. // Вісник Київського університету. Серія фіз.-мат. науки. № 1, (2006).
8. Альохін О.Д. // Вісник київського університету серія: фізико-математичні науки 2006, 3
9. S. Mehta, M.O. Kimball, F.M. Gasparini. Superfluid Transition of ^4He for two-dimensional crossover, Heat Capacity and Finite-Size Scaling // J. Low Temp. Phys. 114, 467 (1999).
10. A. Singsaas and G. Alhars // Phys. Rev. 1984., B. 30. P. 5103.

Надійшла до редколегії 10.11.2006

УДК 539.17

Олег А. Безшийко,
Лариса О. Голінка-Безшийко,
Ігор М. Каденко

Розрахунок множинності нейтронів для уламків поділу з використанням коду Empire II

Дослідження залежностей множинностей нейтронів від мас і зарядів уламків поділу є важливими як для розуміння механізмів процесу поділу, так і для вирішення ряду прикладних задач.

Ми використали програмний пакет Empire II для обчислення множинностей нейтронів в залежності від різних характеристик структури ядра, механізму реакції поділу та особливостей дезбудження уламків поділу.

Ключові слова: Empire II, уламки поділу, множинність нейтронів.

Oleg A. Bezshyyko,
Larisa O. Golinka-Bezshyyko,
Igor M. Kadenko

Calculation of Neutron Multiplicity for Fission Fragments Using Code Empire II

Study of neutron multiplicity as a function of mass and charge of the fission fragments is important for investigation of the fission process mechanism and useful for some other applications.

We used code Empire II to calculate neutron multiplicities depending on various characteristics of nuclear structure, fission process and de-excitation of the fission fragments

Key Words: Empire II, fission fragments, neutron multiplicity.

Дослідження таких характеристик процесу поділу, як середня кількість миттєвих нейтронів на один акт поділу та функція розподілу множинності нейтронів можуть надати важливу інформацію для розуміння базових механізмів процесу поділу. Також такі дослідження є корисними в прикладному аспекті – для розрахунків у фізиці реакторів, неруйнівному аналізі ядерних матеріалів, при активному та пасивному детектуванні спеціальних ядерних матеріалів в рамках діяльності щодо контролю за нерозповсюдженням ядерної зброї [1]. Залежність множинності нейтронів від різних параметрів може бути джерелом корисної інформації як про процеси поділу, так і про механізми дезбудження первинних уламків поділу. Кількість нейтронів, що вилітають в результаті одного акту поділу, залежить від масового числа та заряду початкового ядра та уламків поділу, повної енергії збудження уламків поділу, розподілу цієї енергії між уламками, кутових моментів початкових уламків поділу до вильоту нейтронів.

Широкий розподіл за масами та зарядами пар уламків поділу, експериментальні труднощі прямого вимірювання енергії збудження та кутових моментів первинних уламків – всі ці фактори суттєво

ускладнюють як експериментальне, так і теоретичне вивчення множинностей нейтронів. Тому в більшості випадків розглядають, як правило, тільки усереднені величини вище згаданих параметрів.

Основний внесок у множинність нейтронів зобумовлений емісією нейтронів з уламків поділу вже після завершення процесу поділу. Розглядалися різні теоретичні підходи для опису емісії нейтронів в процесі поділу [2] – Лос-Аламоська модель, Дрезденський підхід, підхід на основі статистичної моделі Хаузера-Фешбаха та інші модельні дослідження з детальним розрахунком розпаду збудженого уламку з урахуванням особливостей розпаду, в тому числі послідовного випромінювання нейтронів та конкуренції з гамма-каналом (емісію гамма-квантів). Використання модельного підходу Хаузера-Фешбаха розглядається як найбільш прийнятне і оптимальне з точки зору прецизійності результатів, часових витрат при розрахунках, можливості коректного врахування кутових моментів, отримання енергетичних спектрів та множинностей нейтронів. Суттєва перевага такого детального підходу – незалежний підрахунок характеристик для кожного уламка поділу із усієї достатньо великої кількості пар уламків, що можуть утворитися в одному акті поділу. Тобто, можливо врахування не тільки усереднених інтегральних величин, а і отримання диференціальних величин для різних характеристик процесу поділу. В Лос-Аламоській національній лабораторії розвивається підхід з використанням методу Монте Карло для розрахунку послідовного вильоту нейтронів та гамма-квантів при розпаді уламка поділу [3].

Експериментальна інформація про диференціальні характеристики для пар уламків поділу не дуже репрезентативна на сьогодні, але за останні роки було отримано ряд цікавих експериментальних даних по множинностям нейтронів для визначених пар уламків поділу [4-6]. Така інформація може бути вельми корисною для експериментального визначення деяких важливих характеристик процесу поділу, як повна енергія збудження уламків і вихід первинних уламків поділу (ще до вильоту з них нейтронів).

Відповідно до існуючих експериментальних даних [4] можна побудувати систему рівнянь для кожного значення в таблиці 1 роботи [4]:

$$P_{A1_f, A2_f}^{\text{exp}} = \sum_{k=1}^N \sum_{i=A1_f}^{A-A2_f} Y_{i, (A-i)}^k \cdot P_{i, (A-i)}^{A-i-A2_f} \cdot P_{i, (A-i)}^{i-A1_f},$$

де: $P_{A1_f, A2_f}^{\text{exp}}$ – відносна експериментальна імовірність утворення в результаті поділу визначеної пари уламків з масовими числами $A1_f$ для першого уламка та $A2_f$ для другого уламка, A – масове число ядра, що

ділиться (в даному випадку ^{252}Cf); $\sum_{k=1}^N Y_{i,(A-i)}^k$ - відносний вихід пари первинних уламків (до вильоту нейтронів) з масовими числами i для першого уламка (перший нижній індекс) та $A-i$ другого уламка (другий нижній індекс); $Pj_{i,(A-i)}^{A-i-A2_f}$ - відносна імовірність вильоту нейтронів в кількості $A-i-A2_f$ (верхній індекс) для першого уламка (i , барій (Ba) для випадку даних з роботи [4]) пари уламків $i, (A-i)$ (нижній індекс); $Pi_{i,(A-i)}^{i-A1_f}$ - відносна імовірність вильоту нейтронів у кількості $i-A1_f$ (верхній індекс) для другого уламка (j , молибден (Mo) для випадку даних з роботи [4]) пари уламків $i, (A-i)$ (нижній індекс). При цьому робиться припущення, що виліт нейтронів з уламків є незалежним один від одного. $Y_{i,(A-i)}^k$ - диференційний відносний вихід пари уламків для визначеного біна k повної енергії збудження (Рис. 1), N - кількість бінів.

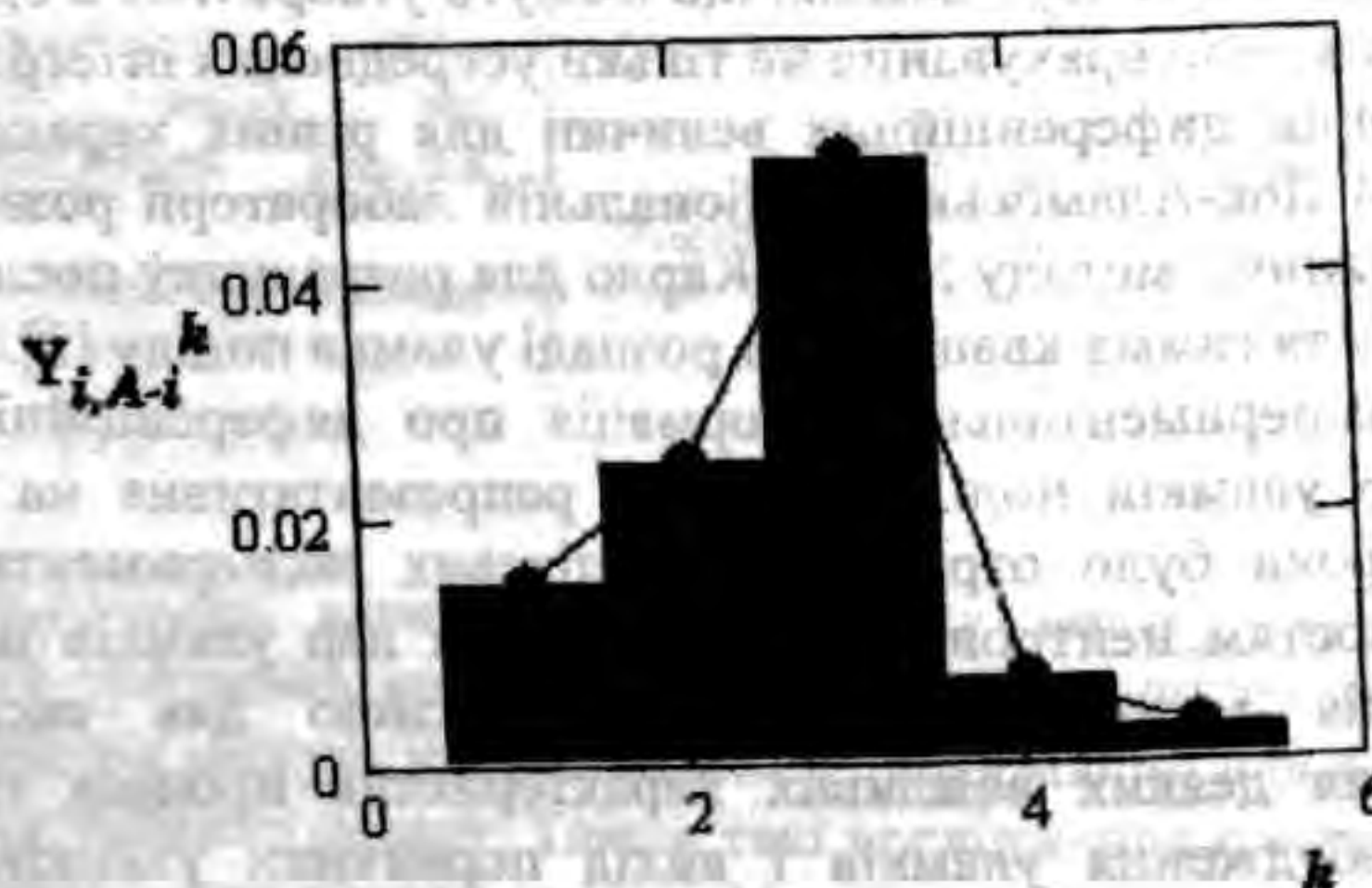


Рис. 1. Відносний вихід пари уламків поділу в залежності від повної енергії збудження уламків (k - індекс енергії збудження)

Якщо припустити, що для пар з близькими масовими числами вигляд розподілу виходу пар уламків від повної енергії збудження буде однаковим ($P_E^k \cdot Y_{i,(A-i)}^k = Y_{i,(A-i)}^k$) - тоді можна записати систему рівнянь з меншою кількістю невідомих:

$$P_{A1_f, A2_f}^{\text{exp}} = \sum_{k=1}^N P_E^k \sum_{i=A1_f}^{A-A2_f} Y_{i,(A-i)}^k \cdot Pj_{i,(A-i)}^{A-i-A2_f} \cdot Pi_{i,(A-i)}^{i-A1_f}$$

де, $Y_{i,(A-i)} = \sum_{k=1}^N Y_{i,(A-i)}^k$, P_E^k - нормований диференціальний відносний

вихід визначеної пари уламків для біна k повної енергії збудження.

В останньому рівнянні множинності нейтронів для окремих уламків $Pj_{i,(A-i)}^{A-i-A2_f}$ та $Pi_{i,(A-i)}^{i-A1_f}$ можуть бути розраховані з використанням одного із програмних пакетів для розрахунку характеристик ядерних реакцій, що інтенсивно тестовані та визнані науковою спільнотою, $Y_{i,(A-i)}$ та P_E^k - величини, які необхідно визначити, розв'язуючи систему рівнянь.

На сьогодні розроблено цілий ряд потужних і ефективних програмних пакетів для детального моделювання ядерних реакцій. Такі пакети потенційно дозволяють в деталях розраховувати дезбудження первинного уламка поділу з вильотом нейтронів і гамма квантів аж до кінцевого уламка-продукта реакції поділу. Один з таких пакетів, код Emprige II має цілий ряд переваг, оскільки є відкритим для використання та модифікації, та містить реалізовані сучасні модельні підходи при теорії ядерних реакцій [7]. Нами модифіковано цей код і розроблено ряд додаткових програмних модулів для дослідження фотоядерних реакцій, ізомерних відношень, залежностей від кутових моментів та енергії збудження характеристик уламків поділу та інших продуктів реакцій [8,9]. Такі додаткові можливості дозволяють розраховувати кількість нейтронів, що вилітають з первинних уламків поділу в залежності від енергії збудження та кутового моменту цього уламка. Використовуючи розраховані розподіли і середні величини кількості нейтронів, які вилітають з первинних уламків, можна порівняти ці дані з експериментальними даними та оцінити відносні виходи первинних уламків, а також залежності цих виходів від повної енергії збудження.

Нами розраховано відносні ймовірності $Pj_{i,(A-i)}^{A-i-A2_f}$ та $Pi_{i,(A-i)}^{i-A1_f}$ вильоту нейтронів з первинних уламків спонтанного поділу ^{252}Cf . Ці дані можуть бути використані для порівняння з експериментальними даними [4]. Досліджувались такі пари уламків - $^{138}\text{Ba}^{114}\text{Mo}$, $^{139}\text{Ba}^{113}\text{Mo}$, $^{140}\text{Ba}^{112}\text{Mo}$, $^{141}\text{Ba}^{111}\text{Mo}$, $^{142}\text{Ba}^{110}\text{Mo}$, $^{143}\text{Ba}^{109}\text{Mo}$, $^{144}\text{Ba}^{108}\text{Mo}$, $^{145}\text{Ba}^{107}\text{Mo}$, $^{146}\text{Ba}^{106}\text{Mo}$, $^{147}\text{Ba}^{105}\text{Mo}$, $^{148}\text{Ba}^{104}\text{Mo}$, $^{149}\text{Ba}^{103}\text{Mo}$, $^{150}\text{Ba}^{114}\text{Mo}$. Повна енергія збудження варіювалася в діапазоні 25 – 55 MeV. Також приймалося припущення, що легкий та важкий уламок мають однакову початкову температуру, а параметр густини рівнів пропорційний масовому числу ядра. Ці умови призводять до того, що повна енергія збудження розподіляється між уламками пропорційно їх масам. Кутовий момент кожного уламка варіювався в діапазоні 2 – 12 $\hbar$. Вибіркові результати таких розрахунків наведено в графічному вигляді на рис. 2 та рис. 3 та в табличному вигляді в таблиці 1 (тільки для середніх величин).

$$T_{\text{H}} = 40^\circ\text{C} \quad \text{and} \quad T_{\text{L}} = 20^\circ\text{C} \quad \text{for} \quad \text{H}_2\text{O} \quad \text{and} \quad \text{H}_2\text{O} + 0.01\text{M NaCl}$$
[illegible]

1. The first step in the process of the investigation is the identification of the problem. This is done by the investigator who is responsible for the study. The next step is to collect data. This is done by the investigator who is responsible for the study. The next step is to analyze the data. This is done by the investigator who is responsible for the study. The next step is to interpret the data. This is done by the investigator who is responsible for the study. The next step is to report the results. This is done by the investigator who is responsible for the study.

...the ... of ...

1. *Содержание*

Копия: 1 экз. - в Ц.А.С.С.С.Р. (1947 г.)

THE UNIVERSITY OF CHICAGO

10. The Commission has also received information from the Government of the Republic of the Congo that the Government has decided to take measures to ensure the security of the population in the area of the border with the Republic of the Congo.

[Faint, illegible text from bleed-through]

1990-1991

(The following text is mirrored from the reverse side of the page)

(написано хімічною школою) / (написано хімічною школою)

повна середня кількість нейтронів на один акт поділу; σ_1 , σ_2 , σ_{1+2} - стандартні відхилення для величин ν_1 , ν_2 , ν_{1+2} .

Таблиця 1
Приклад розрахованих множинностей нейтронів для спонтанного поділу ^{252}Cf
(спін первинних уламків 4 або 4.5)

E^* , MeV	$^{138}\text{Ba}^{114}\text{Mo}$		$^{139}\text{Ba}^{113}\text{Mo}$		$^{140}\text{Ba}^{112}\text{Mo}$		$^{141}\text{Ba}^{111}\text{Mo}$		$^{142}\text{Ba}^{110}\text{Mo}$	
25	1.00	0.03	1.11	0.31	1.76	0.43	1.92	0.28	1.92	0.27
	1.95	0.22	1.67	0.47	1.65	0.48	1.35	0.48	1.15	0.36
	2.95	0.22	2.78	0.57	3.41	0.64	3.26	0.55	3.07	0.45
27	1.00	0.02	1.50	0.50	1.88	0.33	1.97	0.18	1.97	0.17
	1.98	0.13	1.84	0.37	1.88	0.33	1.70	0.46	1.64	0.48
	2.98	0.14	3.34	0.62	3.76	0.46	3.67	0.49	3.61	0.51
29	1.01	0.08	1.73	0.45	1.94	0.23	1.98	0.13	1.99	0.11
	1.99	0.09	1.93	0.25	1.95	0.22	1.86	0.34	1.85	0.36
	3.00	0.12	3.66	0.51	3.89	0.32	3.85	0.37	3.83	0.38
31	1.23	0.42	1.86	0.35	1.97	0.18	2.04	0.22	2.00	0.07
	2.00	0.09	2.04	0.31	1.98	0.15	1.95	0.22	1.94	0.24
	3.23	0.43	3.90	0.46	3.94	0.23	3.99	0.32	3.93	0.25
33	1.56	0.50	1.92	0.27	1.98	0.13	2.21	0.41	2.18	0.38
	2.08	0.28	2.29	0.47	1.99	0.09	2.00	0.23	1.94	0.24
	3.64	0.57	4.21	0.55	3.97	0.16	4.21	0.47	4.11	0.45
35	1.77	0.42	1.96	0.19	1.99	0.10	2.60	0.49	2.45	0.50
	2.32	0.47	2.49	0.51	2.00	0.06	2.00	0.23	1.97	0.16
	4.08	0.63	4.45	0.54	3.99	0.11	4.60	0.54	4.42	0.52

Таблиця 2. Пояснення до таблиці 1

E^*	$^{138}\text{Ba}^{114}\text{Mo}$	
25	ν_1	σ_1
	ν_2	σ_2
	ν_{1+2}	σ_{1+2}

Аналіз отриманих результатів дозволяє зробити висновок, що залежність від спіну множинності нейтронів носить достатньо плавний характер і на її поведінку суттєво впливає заряд та масове число ядра. Добре видно, що множинність нейтронів первинних уламків збільшується прямо пропорційно надлишку нейтронів в них.

Література

1. S. Lemaire, P. Talou, T. Kawano, M. B. Chadwick, D. G. Madland. Correlated neutron emission in fission // *LANL Theor. Div.: Nuclear Weapons Program Highlights 2004-2005*. 2005. P.146

2. D. G. Madland, in *Theory of Neutron Emission in Fission – Proc. Workshop on Nuclear Reaction Data and Nuclear Reactors, Trieste*. 1998 (World Scientific, Singapore, 1999). P. 46.
3. S. Lemaire, P. Talou, T. Kawano, M. B. Chadwick, D. G. Madland. Monte Carlo approach to sequential neutron emission from fission fragments // *Phys. Rev. C*. V.72. 2005. P.024601.
4. C. Goodin, D. Fong, J. K. Hwang et al. New results for the intensity of bimodal fission in barium channels of the spontaneous fission of ^{252}Cf // *Phys. Rev. C*. V.74. 2006. P. 017309
5. G. M. Ter-Akopian, J. H. Hamilton, Yu. Ts. Oganessian et al. Yields of correlated fragment pairs in spontaneous fission of ^{252}Cf . // *Phys. Rev. C*. V.55. 1997. P. 1146
6. Г.М. Тер-Акопьян, Ю.Ц. Оганесян, В.А. Даниэль и др. Экспериментальные методы исследования спонтанного и низкоэнергетического деления ядер // *ЭЧАЯ*. 1997. Т. 28. Вып. 6. С. 1357-1388.
7. M. Herman, P. Oblozinsky, R. Capote et al. Recent Development of the Nuclear Reaction Model Code Empire // *Proc. of International Conf. on Nuclear Data for Sci. and Technology "ND2004"*. Sept. 26-Oct. 1, 2004. - Santa Fe (USA). - N.-Y., 2005. AIP Conf. Proc. V. 769. P. 1184-1187.
8. О.А. Бесшейко, Р.В. Ермоленко, И.Н. Каденко, В.А. Плойко, В.А. Желтоножский Анализ фотоядерных реакций с применением кода «Empire II» // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2004. Т. 68. №11. С. 1547-1552.
9. О.А. Безшийко, І.М. Вишневський, О.Є. Горда, В.О. Желтоножський, І.М. Каденко, В.М. Мазур, В.А. Плюйко, М.В. Стрільчук. Дослідження середніх кутових моментів первинних продуктів фотоподілу ядер ^{237}Np та ^{238}U // *Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук*. 2004. №2. С. 457-464.

Надійшла до редакції 24.11.2006

Булавін Л.А.,
Якунов А.В.,
Білий М.М.

Bulavin L.A.,
Yakunov A.V.,
Biliy M.M.

Повільні нестационарні явища в люмінесценції водних розчинів органічних барвників.

Slow non-stationary phenomena in luminescence of the organic dye water solutions.

Виявлено нетепловий вплив лазерного випромінювання на водні розчини органічних барвників. Явище не можна пояснити за допомогою простих механізмів конвекції та дифузії. Отримані результати підтверджують існування колективних динамічних станів водного середовища.

The nonthermal influence of the laser radiation on the organic dye water solutions is found. The phenomena can not be explained by means of simple mechanisms of the convection and diffusion. Obtained results confirms the existence of the collective dynamic states of the aqueous medium.

Ключові слова: нестационарні ефекти, люмінесценція, фрактальна структура, локально стійкі стани.

Key words: non-steady effects, luminescence, fractal structure, local-stable states.

ВСТУП

На сьогодні накопичено значний експериментальний матеріал про довготривалі зміни у водних системах, що відбуваються спонтанно чи унаслідок дії слабких факторів. Зокрема, зареєстровано зміну фізичних параметрів води після її витримування у слабкому магнітному полі [1], опромінення хвилями НВЧ [2], контакту з гідрофобною поверхнею [3]. Після вказаної дії вода, незважаючи на тепловий рух молекул, тривалий час зберігає наведені в її стані зміни. Крім того, повідомлялося про повільні, з частотами, меншими за 0.1 Гц, коливання оптичних та спектральних параметрів води: пропускання в ІЧ-області [4], інтенсивності власної люмінесценції [5], інтенсивності квазіпружного розсіяння [6].

Під час спектральних досліджень води та слабких водних розчинів нами спостерігалися повільні нестационарні коливання інтенсивності власної та домішкової фотолюмінесценції (ФЛ) [7]. Висловлювалось припущення, що нестационарний характер цих коливань є результатом лазерного опромінення води. Разом з тим залишається нез'ясованим, чи є така дія нетепловою. Зауважимо, що спеціальні експерименти та модельні розрахунки [4-6] вказують на те, що прямими тепловими ефектами, спричиненими

дією неперервного у часі лазерного випромінювання потужністю до 200 мВт на воду, можна знехтувати. Іншими словами, прямий температурний вплив на інтенсивність люмінесценції (температурне гасіння або розгорання) виключається.

Зрозуміло, що наявність домішок, які присутні є навіть у дистильованій воді, припускає інше пояснення спостережуваних нестационарних явищ. Мова може йти про фотохімічне руйнування домішкового флуорофору, локальний конвективний перенос, дифузію тощо. Виникає необхідність вивчення нестационарностей, зумовлених саме наявністю домішок, здатних до певних фотохімічних перетворень.

Важливим вилається ще один аспект проблеми. Водні розчини відносно великих за розміром молекул часто проявляють незвичайні властивості, зумовлені, як стверджують автори роботи [8], суттєвою неоднорідністю водної матриці. Вивчення проявів таких неоднорідностей, що характеризуються масштабною самоподібністю і складною динамікою, може дати пояснення феномену збереження протягом певного часу наведених в стані води змін структури, які останнім часом жваво обговорюються у зв'язку з проблемою гомеопатії.

Метою даної роботи є вивчення повільних нестационарних явищ, що супроводжують спектрально-люмінесцентні дослідження відносно слабких водних розчинів органічних барвників родаміну 6Ж (Р6Ж) та флуоринурацилу.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

Дослідження проводились на автоматизованому дифракційному спектрометрі ДФС-52. Збудження спектру здійснювалось випромінюванням аргонного лазера на довжині хвилі 488 нм з вихідною потужністю ~200 мВт. Сигнал фотолюмінесценції (ФЛ) реєструвався на довжині хвилі 556 нм. Інші деталі експерименту описані в роботі [7].

Досліди проводилися з використанням стандартних скляних кювет 10x20x50 мм, а також скляних капілярних трубок з внутрішнім діаметром 1 мм. Для того, щоб форма лазерного пучка не спотворювалась меніском, на передній торець капіляра встановлювалась слюдяна пластинка, завтовшки 10 мкм, яка надалі трималась за рахунок поверхневого натягу (рис.1).

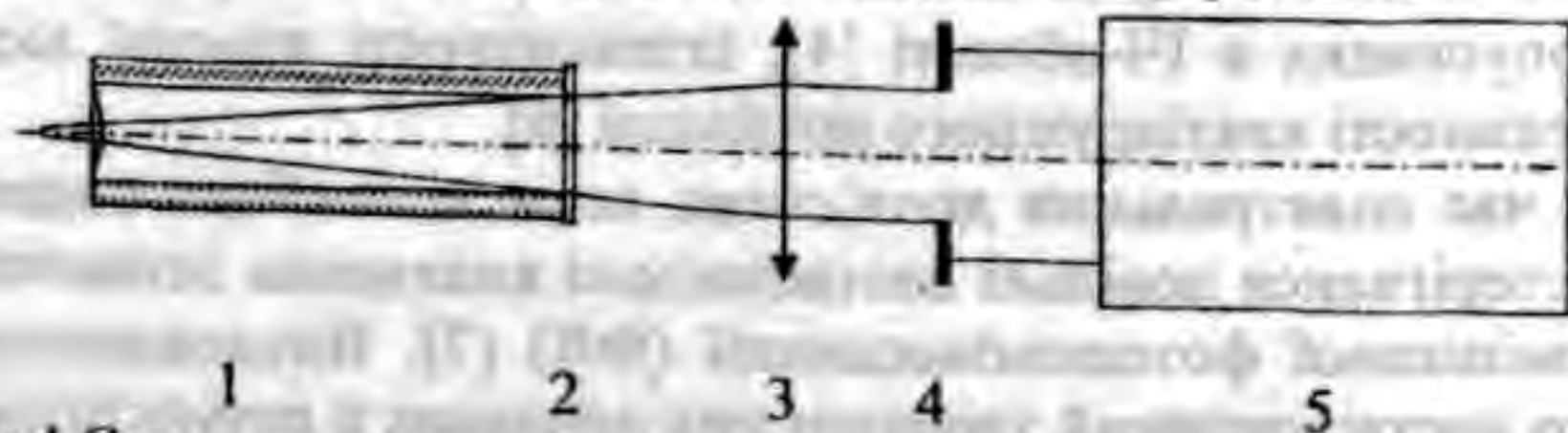


Рис.1 Схема експерименту. 1 - скляний капіляр з розчином барвника, 2 - слюдяна пластинка, 3 - фокусуючий об'єктив, 4 - ірисова діафрагма, 5 - лазер.

Барвники розчиняли у дистильованій воді при кімнатній температурі. В роботі використовувались розчини різних концентрацій, кратних до базової концентрації насиченого розчину C_0 .

Типова часова залежність інтенсивності фотолюмінесценції розчину Р6Ж для дослідів у стандартних кюветах представлено на рис.2, а.

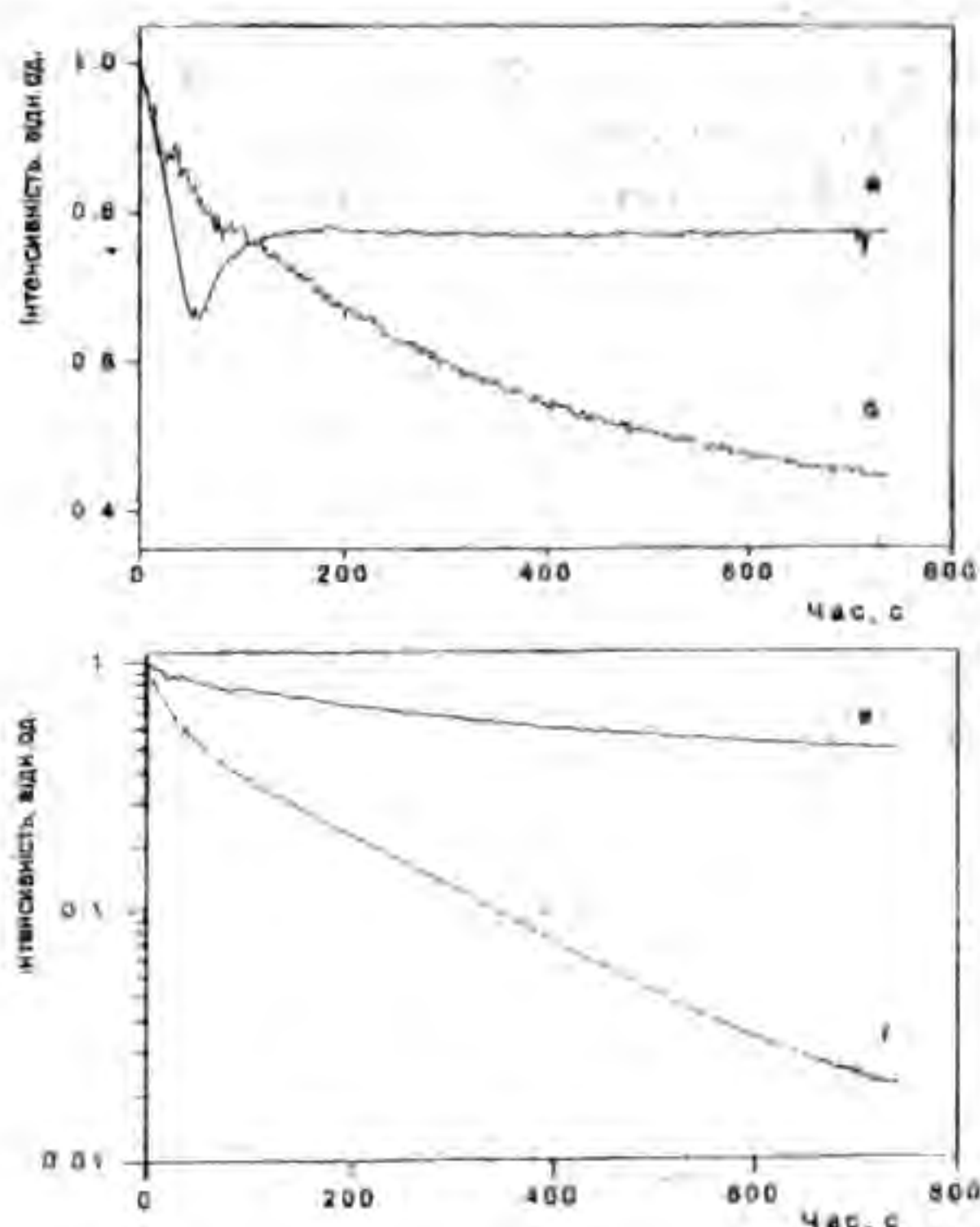


Рис.2 Нормована часова залежність інтенсивності фотолюмінесценції розчину Р6Ж з концентрацією $C = 0.001C_0$ у стандартній кюветі (а) та у капілярі (б). Аналогічна залежність для розчину Р6Ж (в) та флуорин-урацилу (г) в логарифмічній шкалі.

Тут $t = 0$ — момент початку опромінення розчину. Різкий спад кривої на початковій стадії досліду, зазвичай, відносять до фотохімічного розкладання (руйнування) барвника [9]. Подальше зростання і вихід на стаціонарне значення сигналу відбувається завдяки встановленню стаціонарного розподілу температури, який, за рахунок конвекції, сприяє притоку в область опромінення неопромінених лазером молекул барвника. Не можна виключати і внесок у цей процес термодифузії. Таку немонотонну поведінку сигналу люмінесценції в перші кілька десятків секунд після початку можна назвати первинною реакцією. Первинна реакція найбільш яскраво проявляється при концентрації барвника $C_{\text{онт}} \sim 10^{-3} C_0$. При зниженні концентрації з'являються хаотичні коливання, притаманні чистій воді [7].

Зазначимо, що оптимальна концентрація барвника принаймні на порядок менша від тієї, при якій можна очікувати утворення асоційованих комплексів — димерів молекул барвника [9]. На користь того, що в наших дослідженнях відсутні димери, свідчить також дослідження залежності спектрального положення смуги ФЛ від концентрації барвника (рис. 3). Як видно з рисунка, зі збільшенням концентрації відбувається зсув максимуму смуги ФЛ у довгохвильову область, обумовлений внеском випромінювання димерів у загальний спектр люмінесценції. При концентраціях від 0,01 до 0,001 C_0 смуги практично тотожні, що підтверджує відсутність димерів і дає можливість у нашому випадку нехтувати впливом їх утворення та розпаду на загальну динаміку системи. Тому досліджені розчини слід вважати відносно слабкими, на відміну від тих, які досліджувались в роботі [9].

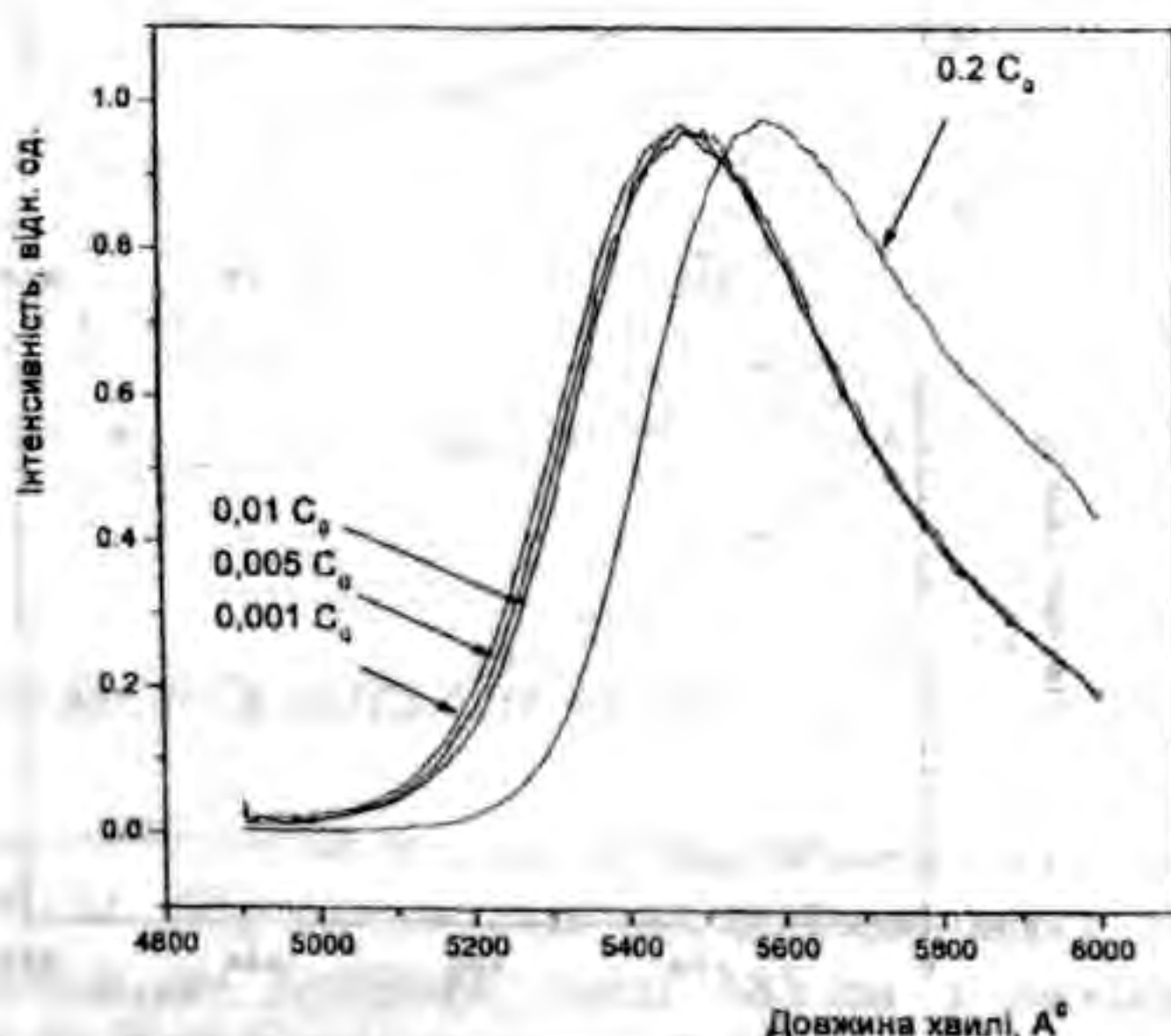


Рис. 3 Нормовані спектри люмінесценції водного розчину РБЖ для різних концентрацій барвника.

З метою виключення механізму конвекційного перемішування, нами були проведені вимірювання люмінесценції розчину оптимальної концентрації у тонкій капілярній трубці. На рис. 2, б зображено залежність відповідного вихідного сигналу від часу, яка свідчить, що система релаксує до рівноважного стану. На рис. 2, в показано ту ж саму залежність у напівлогарифмічному масштабі. Видно, що крива складається з двох ділянок: швидке (надекспоненційне) затухання у перші секунди опромінення і майже експоненційне затухання надалі. Аналогічна поведінка притаманна й іншому барвнику, який має більшу швидкість фотохімічного розпаду — флуорін-урацилу (рис. 2, г). Початковий різкий спад можна пояснити зменшенням інтенсивності ФЛ внаслідок заселення триплетних рівнів молекул барвника, які у нормальних умовах є метастабільними [9]. Експонен-

ційний спад зумовлений фотохімічним розкладом барвника. Незначне відхилення від експоненційного закону спричинене, очевидно, дифузією не опромінених лазером молекул барвника з незасвічених об'ємів капіляра.

Подальші дослідження показали, що первинна реакція розчину барвника на дію лазерного випромінювання не може бути наслідком лише зазначених вище явищ. Зокрема, нами спостерігалась різка зміна параметрів сигналу (зменшення амплітуди або повне зникнення проявів первинної реакції, рис. 4) при спробі повторити запис досліджуваної залежності інтенсивності ФЛ від часу через декілька хвилин на тому самому зразку. Причому кювета залишалась на місці, що забезпечувало проходження лазерного променя точно через той самий об'єм розчину, як і при першому вимірюванні. Час між двома послідовними дослідженнями, у яких спостерігався цей ефект, складав до 1 год.

Зазначене явище прояву первинної реакції розчину під дією лазерного випромінювання це можна пояснити лише фотохімічним розкладом молекул барвника на неактивні складові, оскільки, як зазначалося раніше, конвекція та дифузія за відносно короткий час ($10 \div 100$) с мали б відновити хімічний склад розчину в області опромінення.

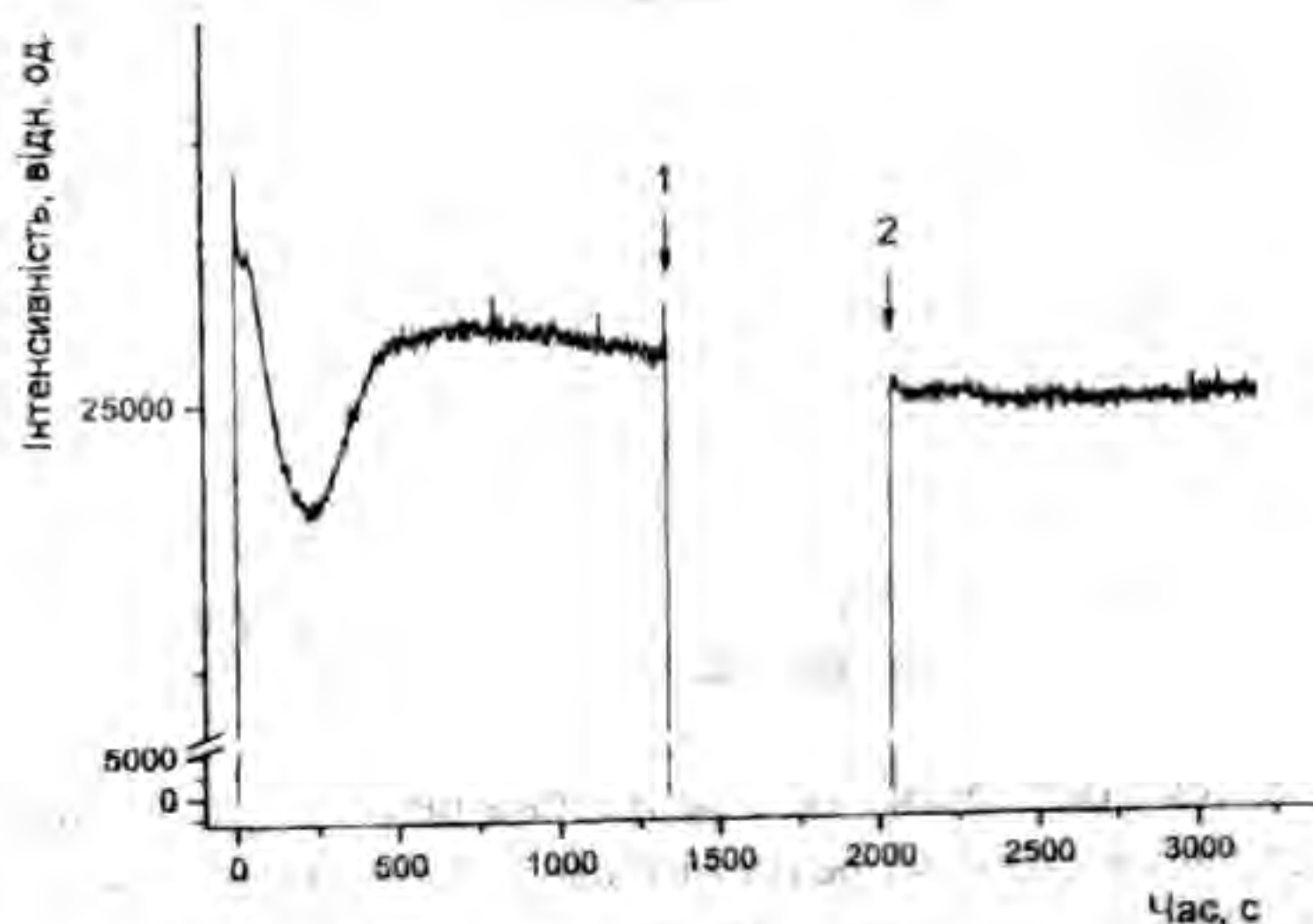


Рис. 4 Залежність від часу інтенсивності люмінесценції розчину Р6Ж. 1 – момент перекриття лазерного променя, 2 – поновлення дії лазерного випромінювання.

При паралельному переміщенні лазерного променя в область не збудженого барвника інтенсивність ФЛ в області первинної реакції одразу поверталась до початкового значення. Така локалізація ефекту лише в області опромінення зумовила його робочу назву — “локальна пам'ять”.

Разом з тим, у багатьох проведених нами дослідках, фіксувався ще один режим поведінки вихідного сигналу, який не відтворювався стовідсотково, але мав характер стійкої тенденції. Крім первинної реакції, що три-

вала кілька десятків секунд, спостерігалася значно повільніша реакція розчину на дію лазера. А саме, інтенсивність люмінесценції повільно, з характерним часом ($10^2 \div 10^3$) с релаксувала до деякого рівноважного значення.

Принципово важливим є те, що така поведінка притаманна усьому об'єму розчину, незалежно від того, чи збуджувався попередньо досліджуваний об'єм, чи ні. На рис. 5 наведено динаміку сигналу, який реєструвався послідовно у часі для двох точок кювети (точки 1 і 2), рознесених щонайменше на 5 мм. Як видно з рисунку, характер коливань інтенсивності ФЛ не залежить від області збудження.

Аналогічні результати були отримані і для флуорин-урацилу (рис. 6). З рисунку видно, що незалежно від сорту барвника, динамічні криві, отримані для різних точок кювети “зшиваються” з точністю до спотворень, які вносяться первинною реакцією.

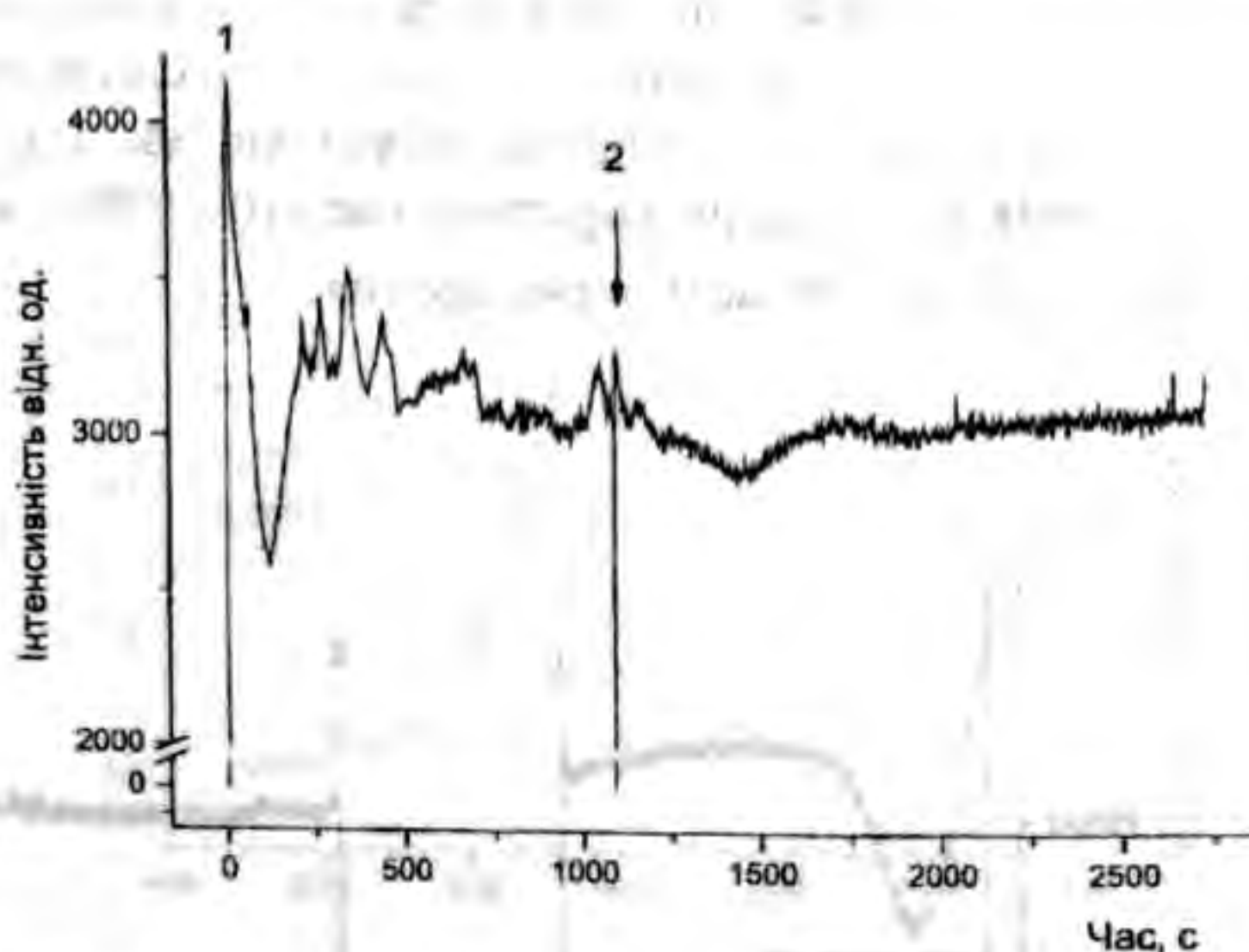


Рис. 5 Залежність від часу інтенсивності люмінесценції розчину РБЖ. Стрілкою показано момент початку реєстрації сигналу з іншої ділянки зразка.

Ми також дослідили, чи є зазначена реакція релаксаційного типу (незалежно від точки впливу) результатом постійної дії лазерного випромінювання, чи відбувається самостійно в той час, коли лазерне випромінювання грає лише роль пускового механізму.

Сигнали, зафіксовані під час тимчасового перекриття лазерного променя, свідчать на користь концепції пускового механізму (рис. 7), а відповідна особливість поведінки водного розчину, дістала робочу назву “глобальної пам’яті”.

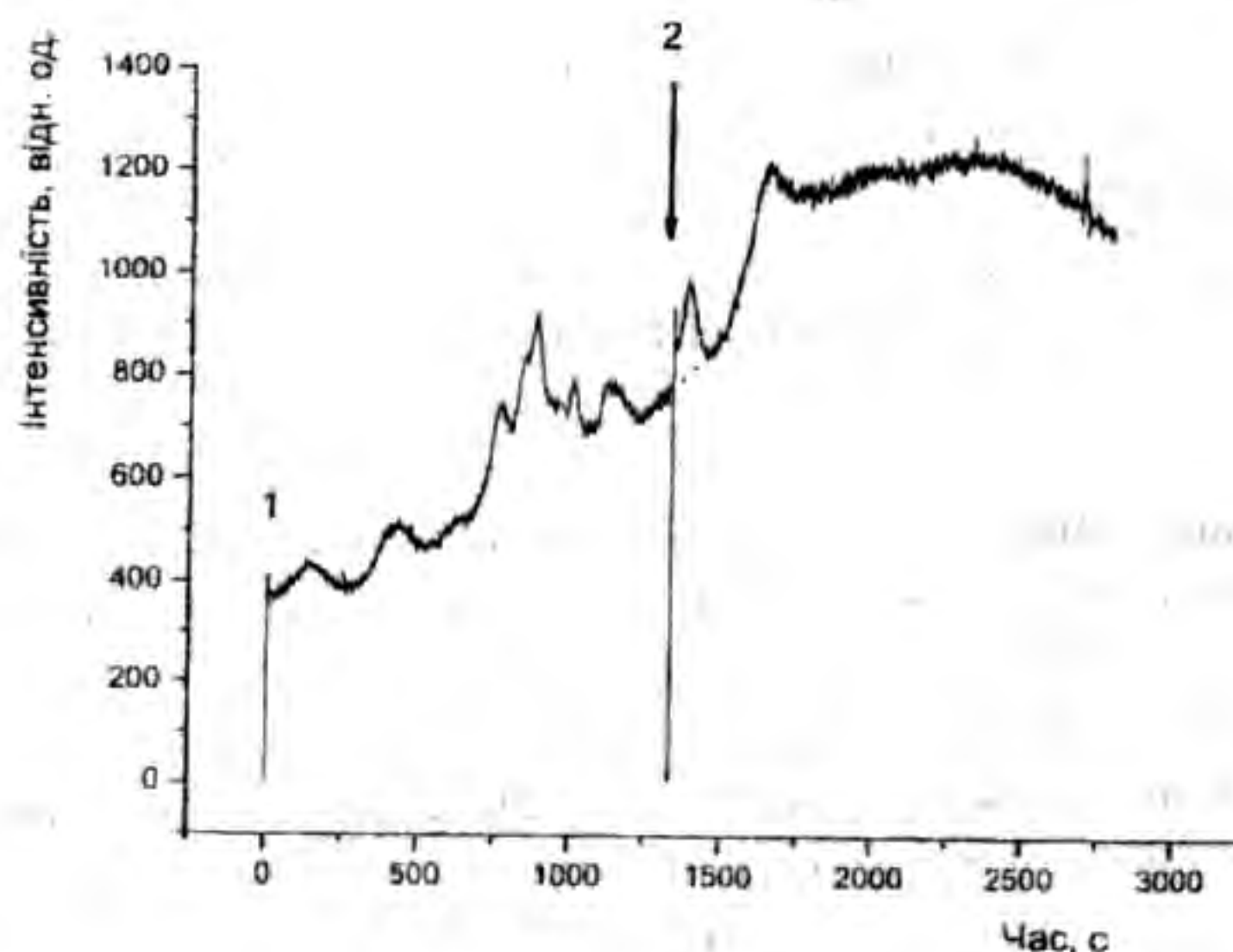


Рис.6 Залежність від часу інтенсивності люмінесценції розчину флуорин-урацилу. Стрілкою показано момент початку реєстрації сигналу з іншої ділянки зразка.

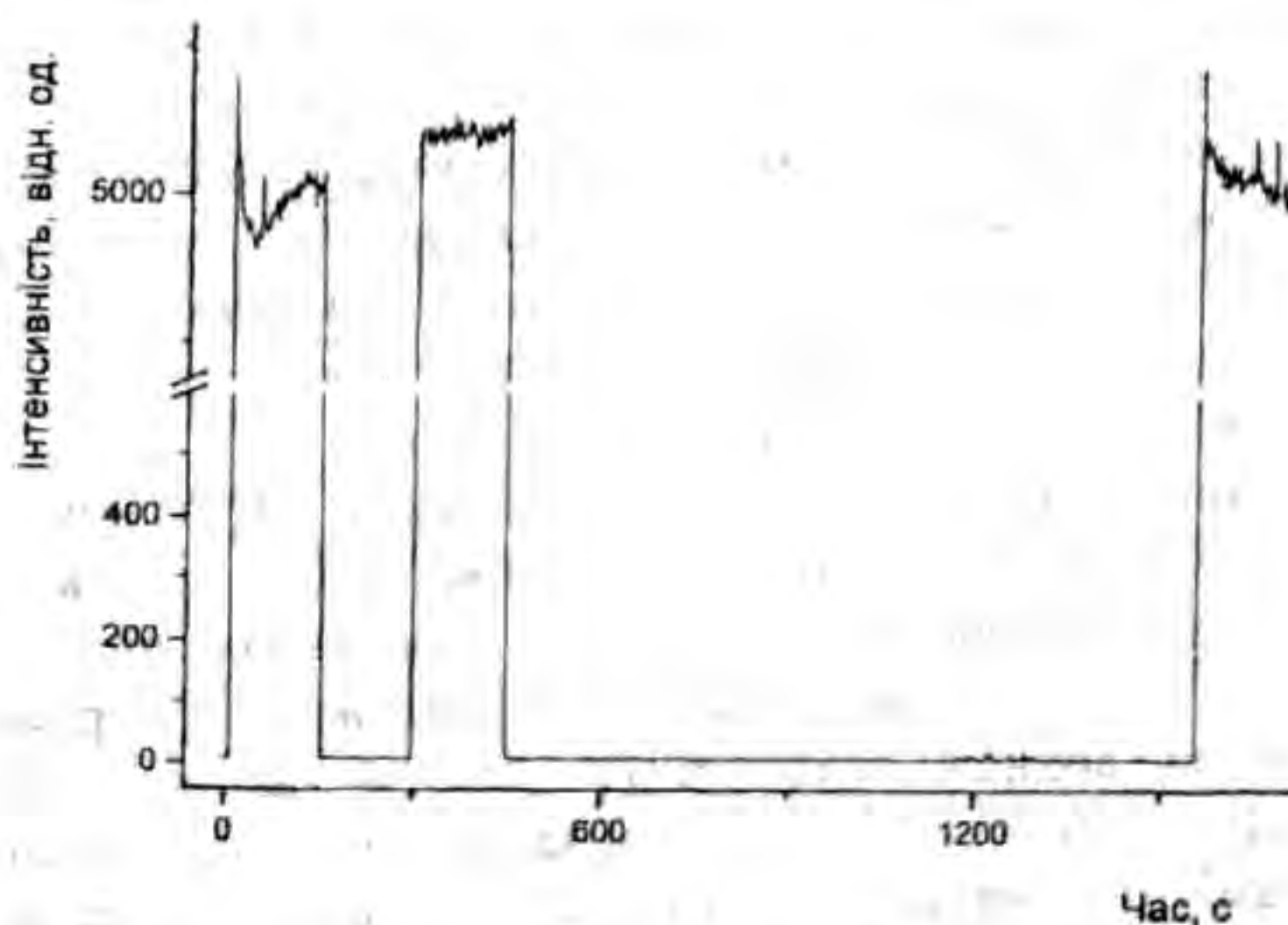


Рис.7 Залежність від часу інтенсивності люмінесценції розчину Р6Ж. Розриви на кривій показують періоди часу, коли розчин не опромінювався.

ОБГОВОРЕННЯ

На нашу думку встановлено факт нетеплового впливу лазерного випромінювання на водні розчини, що проявляється у виникненні в перші хвилини дії лазера повільних затухаючих коливань інтенсивності люмінесценції барвника.

Аналіз отриманих експериментальних результатів свідчить про те, що це явище не можна пояснити лише перебігом таких процесів, як фотохімічний розпад, конвекція, дифузія тощо. Раніше ми спостерігали повільні псевдостационарні коливання інтенсивності спектру комбінаційного розсіювання в області смуги валентних коливань [10], повільні коливання інтенсивності власної та домішкової люмінесценції води [7], а також стійку структурну модифікацію води після її контакту з гідрофобною поверхнею [3].

На сьогоднішній день для пояснення повільних процесів у водних системах застосовують два концептуальні підходи. Перший, який умовно можна назвати мікроскопічним, передбачає існування у воді аномально стабільних високосиметричних асоціатів (кластерів) [11]. Теоретичні розрахунки, виконані методами молекулярної динаміки та Монте-Карло допускають існування таких структур, що підтверджується також даними рентгеноструктурного аналізу та нейтронного розсіювання [12]. Однак, неоднозначність вибору потенціалу взаємодії та обмеженість ансамблю, що розглядається, не дозволяють коректно обґрунтувати форму та розміри стійкого кластера і визначити абсолютний час його життя. В рамках другого – макроскопічного – підходу припускається, що структура водних розчинів у присутності домішок, навіть при незначній їх концентрації, може сформуватись у вигляді ієрархії термодинамічно стійких неоднорідностей з фрактальними властивостями [13]. Передбачається, що структури, які виникають, за рахунок підвищеної агрегатної стійкості характеризуються власною динамікою з макроскопічними масштабами часу. Зокрема, в роботі [14] з використанням клітинкових автоматів показано, що фрактальна розмірність двовимірної моделі води релаксує до рівноважного стану з часом, пропорційним до кількості молекул у системі.

Як чинник, що забезпечує стабілізацію просторових фрактальних структур і їх спряження з водним середовищем, можуть виступати саме асоціати (базові кластери) з високою локальною симетрією [11].

Результати досліджень повільних коливань спектроскопічних параметрів води та водних розчинів [1-7,10], а також реєстрація ефектів "пам'яті" свідчать про те, що в основі зазначених феноменів лежить колективний динамічний структурний стан рідкого середовища, який формується комплексом взаємозалежних фізичних процесів: внутрішньо- і міжмолекулярними коливаннями, динамікою ОН-груп і структурою протонних потенціалів, асоціюванням та дисоціюванням клатратних систем тощо.

Таким чином, будь-яку водну систему можна розглядати, як середовище зі специфічним режимом структурної динаміки, сформованим за фрактальним принципом. В першу чергу, це проявляється у широкомасштабній флуктуативній поведінці структури води [1] зі спектром частот від високочастотної області внутрішньомолекулярних коливань до інфранизько-частотного діапазону процесів утворення і руйнування макроскопічних фрактальних кластерів. Відповідні процеси поєднані в загальну систему

кооперативних взаємодій і забезпечують стійкість загального динамічного стану середовища. Різноманітні хімічні (розчини різних речовин в широкому діапазоні концентрацій) і фізичні (механічні збурення, температура, електричні і магнітні постійні і змінні поля) чинники спричиняють суттєвий вплив на режими цих коливань. В наших експериментах було показано, що поведінка у часі спектроскопічних параметрів специфічна для кожного із зразків відповідно до численних технологічних особливостей їх приготування, транспортування, зберігання тощо.

Надзвичайно висока чутливість динамічного стану середовища до зовнішніх, часто неконтрольованих факторів зумовлює незадовільну, з погляду фізичного експерименту, відтворюваність відповідних залежностей у часі. Натомість, інтегральні показники (наприклад, динамічний спектр [15]) виявляють стійку специфічність до найбільш важливих характеристик зразка – концентрації домішок, температури, передісторії. Можна провести аналогію із явищем детермінованого хаосу, коли реалізації конкретних часових рядів невідтворювані в принципі, а відповідні фазові картини, навіть за умови їх складності, практично тотожні [16].

Ми вважаємо, що явища, які ми спостерігаємо, з робочою назвою “локальна” та “глобальна” пам’ять, зумовлені існуванням у воді динамічно стійких станів, переходи між якими відбуваються внаслідок різноманітних чинників, про які згадувалось вище. Одним із таких чинників виступає лазерне випромінювання, яке, з одного боку, переводить воду з одного динамічно стійкого стану в інший, а з іншого – виступає як зондуєчий промінь, що збуджує люмінесценцію.

Механізм нестійкої дії лазерного випромінювання можна представити як результат взаємодії двох відкритих систем: водної системи та електромагнітного поля оптичного діапазону. Можна припустити, що лазерне випромінювання, додаючись до постійно діючого теплового фактору, модифікує єдине енергетичне оточення водного розчину, відповідно до якого відбувається трансформація динамічної структури води.

Явище з робочою назвою “локальна” пам’ять спостерігається в області прямої дії випромінювання, де відбувається своєрідна руйнація структури рідини під дією лазера, яка являє собою зміну на мікрорівні форми та локальної симетрії базових кластерів. Таким чином, в результаті лазерного опромінення води в об’ємі, який визначається геометричними розмірами збуджуючого променя, виникає область структурно модифікованих кластерів. Оскільки швидкість переносу енергії, а відповідно і ймовірність дезактивації енергетичних рівнів, залежить від структурних параметрів середовища, то така зміна структури призводить до зміни виходу люмінесценції, що фіксується в експерименті.

Явище, що отримало в наших експериментах робочу назву “глобальна” пам’ять є наслідком опосередкованої дії лазера на воду, яку можна розглядати як реплікацію фрактальних структур, утворених модифікованими базовими кластерами в збудженому об’ємі води. При цьому стан динаміч-

ної рівноваги змінюється, що супроводжується релаксаційними процесами смуги ФЛ, які проявляються в складному законі зміни її інтенсивності з часом. Характер релаксації інтенсивності смуг ФЛ не залежить від тривалості лазерного опромінення води.

Як засвідчили наші експерименти (рис. 7), для запуску механізму релаксаційних змін достатньо кількох хвилин, після чого характер змін не залежатиме від того опромінювати воду далі, чи припинити процес опромінення. Після релаксації, яка відбувається протягом трьох-чотирьох десятків хвилин, вода зберігає набутий стан декілька годин, про що свідчить відсутність коливань інтенсивності смуги ФЛ. Зберігання набутого стану, який не змінюється при повторному опроміненні води, ми пов'язуємо з пам'яттю води.

Таким чином, результатом лазерної дії на воду є зміна стану її динамічної рівноваги у всьому об'ємі — як в опроміненій, так і в не опроміненій області. Цей ефект дає підстави розглядати досліджуваний об'єм води як макросистему, що характеризується єдиним станом динамічної рівноваги, зумовленим дією зовнішніх чинників.

ЛІТЕРАТУРА

1. Семихина Л.П., Киселев В.Ф. Влияние слабых магнитных полей на свойства воды и льда // Изв. вузов. Физика, 1988, №5, с.13-17.
2. Семихина Л.П., Киселев В.Ф., Левшин Л.И. // Журн. прикл. спектроскопии.- 19878, т.48, № 5, с.811.
3. Шпак А.П., Булавін Л.А., Білий М.М., Якунов А.В. та ін. // Довготривала структурна модифікація води після її контакту з гідрофобною поверхнею // Вісник Київського університету, серія: фіз.-мат. науки, 2004, т.3, с.357-361.
4. Фесенко Е.Е., Терпугов Е.Л. О необычных спектральных свойствах воды в тонком слое // Биофизика.- 1999.- 44, №1 - с.5-9.
5. Лобышев В.И., Рыжиков Б.Д., Шихлинская Р.И. Спонтанные и индуцированные внешними электромагнитными полями долговременные переходные процессы в разбавленных водных растворах глицилтриптофана и воде // Биофизика.- 1998.- 43, №4 – с.710-715.
6. Черников Ф.Р. Сверхмедленные колебания светорассеяния в жидкостях разного типа // Биофизика. -1990. – 35, №5 - с.717-721.
7. Булавін Л.А., Якунов А.В., Білий М.М. Повільні нестационарні коливання інтенсивності люмінесценції води та її слабких розчинів // Вісник Київського університету, серія: фіз.-мат. науки, 2006, № 3, с. 425-433.
8. Баранов А.Н., Салецкий А.М., Хвостов А.В., Червяков А.В. Фотофизические процессы в водных системах. Роль структуры воды // Физическая мысль России, 1995, № 3, с.27-39.
9. Визнюк С.А., Пашинин П.П., Прохоров А.М., Растопов С.Ф., Суходольский А.Т. Эффект температурного возгорания люминесценции в водных

растворах родана бж // Письма в ЖЭТФ, 1988, т.47, №4, с.190-193.

10. Булавін Л.А., Якунов А.В., Білий М.М., Федосенко О.О. Прояв повільних флуктуацій структури води в спектрах комбінаційного розсіяння світла // Фізика живого - 2005.- 13, №1 - с.43-50.

11. Высоцкий В.И., Корнилова А.А. Физические основы памяти воды // Вестник Московского университета, сер: Физика. Астрономия, 2004, №3, с.58-62.

12. Булавін Л.А., Маломуж М.П., Панкратов К.М. Колективні внески до коефіцієнту самодифузії молекул води згідно з експериментальними даними щодо когерентного розсіювання повільних нейтронів // Доповіді НАН України, 2005, №3, с. 72-77.

13. Тимашев С.Ф. О возможной природе замедленной релаксации водных систем // Журнал физ. химии, 1990, т.64, №4, с.1142-1144.

14. Yakunov A.V., Yakunov P.A. Slow dynamics of water structure in cellular automata model // Physics of liquid matters: Modern problems// Kyiv, 2005, p.140.

15. Yakunov A.V., Vikarchuk O.I., Wavelets in the analysis of the non-stationary optical phenomena // Optics and high technology material science// Kyiv, 2005, p.181.

16. Мун В. Хаотические колебания. М., Мир, - 1990, 311 с.

УДК 621.315.529: 535.683

Петро В. Бурлій
Олена С. Городниченко¹,
Володимир А. Гнатюк²

**Лазерна ударна хвиля як
механізм трансформації
дефектної структури
напівпровідника**

На основі узагальнення літературних даних та експериментів щодо опромінення варізонних епітаксійних шарів $Cd_xHg_{1-x}Te$ розглянуто вплив лазерно-індукованих ударних хвиль на властивості напівпровідників з метою подальшого з'ясування механізмів дефектоперетворення при імпульсному лазерному опроміненні. Відзначається перспективність використання лазерних ударних хвиль при оптимізації функціональних параметрів напівпровідникових структур.

Ключові слова: лазерно-індукована ударна хвиля, полікристалічні шари.

Petro V. Burliy
Olena S. Gorodnychenko¹,
Volodymyr A. Gnatyuk²

**Transformation of the defect
structure of the semiconductor by
laser-induced shock wave.**

On the basis of literature data and the experiments on irradiation of epitaxial $Cd_xHg_{1-x}Te$ layers, the influence of laser-induced waves on the semiconductor properties are analyzed with a view to identification of the defect transformation mechanisms under pulsed laser irradiation. It is established that using the laser-induced shock waves is a promising method for optimization of functional parameters of semiconductor structures.

Keywords: laser-induced wave, polycrystalline layers.

¹ E-mail: semicondalf2002@rambler.ru

² E-mail: gnatyuk@lycos.com

Аналізуючи процеси дефектоутворення у напівпровідниковому матеріалі під впливом імпульсного лазерного опромінення, слід враховувати дію такого фактору як імпульс тиску, що може досягати величини 10^8 Па і викликати генерацію різного типу дефектів в об'ємі твердого тіла [1].

Так, дослідження просторової картини розподілу дефектів у зоні дії потужного лазерного імпульсу виявили, окрім великої кількості дефектів поблизу поверхні, максимум концентрації їх на певній глибині в об'ємі кристалу [2, 3]. Ця відстань перевищувала глибину поглинання лазерного випромінювання в матеріалі та довжину теплої дифузії за час опромінення, що наводить на думку про нетермічний характер даного механізму дефектоутворення.

У роботі [3] також було встановлено, що даний аномальний розподіл дефектів, який виникав при дії лазерного імпульсу в режимі модульованої добротності, відрізнявся від результатів опромінення твердого тіла в режимі вільної генерації. При застосуванні останнього режиму концентрація дефектів монотонно зменшувалася з віддаленням від кратера за степеневим законом з показником степені $n = -1$ [4]. Окрім того, не було виявлено впливу середовища, в якому проводилося опромінення, на положення максимуму густини дефектів, індукованих лазерним імпульсом. Визначальною характеристикою в даному випадку була крутизна переднього фронту лазерного імпульсу. Тобто, найімовірнішим механізмом даного ефекту далекодії є ударна хвиля (УХ), що формується у твердому тілі при зростанні крутизни фронту хвилі напруженості. Генерація хвиль напруженості в об'ємі напівпровідника є наслідком нерівноважного характеру взаємодії лазерного випромінювання з твердим тілом (градієнт температур в локальній області, випаровування, плавлення поверхні і рекристалізація за час дії імпульсу, виникнення локальних механічних напруг).

Густина енергії лазерного імпульсу, при якій відбувається формування у твердому тілі ударної хвилі, $E \geq E_{\text{пор}}$, де $E_{\text{пор}}$ поріг плавлення. Тобто, відбувається різка зміна агрегатного стану кристалу. У цьому випадку може реалізовуватися, так званий, випаровувальний механізм перетворення світлової енергії, коли тверде тіло отримує акустичний імпульс за рахунок реактивного імпульсу віддачі при випаровуванні. Цей імпульс не пов'язаний з тепловим розширенням середовища і характеризується значною потужністю [5, 6]. Однак, як показали, проведені авторами [7], дослідження руйнування металів імпульсами ТЕА CO_2 - лазера, випаровувальний механізм домінує лише при тиску зовнішнього середовища 5 - 10 мм рт. ст.

В основі іншого механізму лежить явище оптичного пробою середовища. Він виникає у фокусі потужного лазерного пучка, коли за рахунок поглинання значної кількості енергії випаровується частина матеріалу і пари розігріваються до утворення плазми. Проведені у [8] дослідження кінетики розльоту плазми графіту при дії гігантських імпульсів рубінового лазера тривалістю 50 нс з густиною енергії 70 та 700 Дж/см² показали, що плазма, початкова швидкість якої поблизу поверхні мішені становила $4,8 \cdot 10^3$ м/с, поглинаючи випромінювання розігрівається і при подальшому розширенні прискорюється до $7 \cdot 10^4$ м/с.

Тиск, який виникає за рахунок розширення хмари гарячої плазми, можна оцінити користуючись виразом [9]:

$$P_{\text{пл}} = (a_{\text{пл}} \tau)^{-1/3} I^{3/4}, \quad (1)$$

(де $a_{пл}$ - коефіцієнт, який характеризує властивості плазми, τ - тривалість лазерного імпульсу, I - інтенсивність випромінювання лазера). Тобто швидке нагрівання призводить до газодинамічного розширення плазменної області, що наче поршень виштовхує холодні шари повітря і генерує ударну хвилю, яка передає твердому тілу, як вперше було показано у роботі [10], механічний імпульс. Наслідком є збудження в матеріалі мішені хвиль напруженості. Подібний ефект «віддачі» мішені не пов'язаний з реактивним імпульсом віддачі випаровування матеріалу.

За аналогією зі звуковою хвилею в газі, метаморфозу процесу переходу хвилі напруженості в ударну можна уявити таким чином. Рухаючись через напівпровідник хвиля напруженості викликає збурення у вигляді деякої ступінчастої функції тиску, причому тиск за хвильовим фронтом виявляється вищим ніж у незбуреній області. Це означає, що будь-яке інше збурення за фронтом буде мати вищу швидкість ніж сам фронт: із збільшенням тиску швидкість зростає. Області високого тиску з часом «підганяють» хвильовий фронт, поки хвиля тиску нарешті не перетвориться в ударну на деякій глибині в об'ємі матеріалу. Більш строго фізично ударну хвилю можна представити через поняття поверхні розриву - поверхні, при проходженні через яку відбувається розрив фізичних характеристик- стрибок швидкості, тиску, густини і т. д.

Ударна хвиля – це хвиля, фронтом якої є поверхня розриву на якій відбувається стрибок густини, тиску (а отже й інших термодинамічних величин) і нормальної компоненти швидкості. Неперервною залишаються тангенційна складова швидкості. Щоб записати граничні умови на поверхні розриву розглянемо будь-який її елемент, з яким пов'яжемо систему координат, яка має нормально напрямлену до нього вісь x . А різницю значень будь-якої величини з обох боків поверхні позначимо квадратними дужками. Тоді, враховуючи умову неперервності потоку речовини, потоку енергії та потоку імпульсу:

$$[\rho v_x] = 0; \quad \left[\frac{v_x^2}{2} + w \right] = 0; \quad [p + \rho v_x^2] = 0, \quad (2)$$

(де ρ - густина речовини, v_x - компонента швидкості вздовж осі x , w - теплова функція одиниці маси, p – тиск) [11].

Стосовно напівпровідникового кристалу під ударною розуміють пружну хвилю, протяжність фронту якої має порядок міжатомних відстаней [12]. Принципова відмінність ударної хвилі від хвилі напруженості полягає у тому, що передача імпульсу від стиснутої УХ речовини до ще не збуреної має характер не колективного руху атомів, а є наслідком індивідуальних зіткнень.

Глибина d , на якій хвиля напруженості у напівпровіднику стає ударною, визначається параметрами твердого тіла та крутизною фронту лазерного імпульсу. Її значення обчислюється за формулою [2]:

$$d = \frac{c_l^2 \tau}{\xi (k+1)} \cdot \sqrt{\frac{2\rho}{\eta (\gamma-1)(1-R)E\alpha}} \quad (3)$$

(де c_l - поздовжня швидкість звуку, τ - тривалість лазерного імпульсу, ξ - коефіцієнт пропорційності між прискоренням поверхневого шару та зміною швидкості звуку в парах, що утворюються при дії на поверхню твердого тіла лазерного імпульсу, k - показник ізотропії твердого тіла, ρ - густина твердого тіла, η - ефективне значення коефіцієнта спотворення фронту лазерного імпульсу, γ - показник адіабати парів матеріалу, R - ефективний коефіцієнт відбивання твердого тіла на довжині хвилі лазерного випромінювання до початку випаровування, E - густина енергії лазерного імпульсу, α - коефіцієнт поглинання твердого тіла на довжині хвилі лазерного випромінювання до початку випаровування).

Очевидно, що зростання густини енергії імпульсу ОКГ призводить до швидшого викривлення фронту хвилі напруженості і скорочення відстані її переходу в ударну. Тобто зменшується глибина утворення у напівпровідниковому кристалі лазерно-індукованої УХ. Експериментальне спостереження зміщення в бік поверхні положення максимуму концентрації точкових дефектів в об'ємі матеріалу при лазерному опроміненні в режимі модульованої добротності зі зростанням густини

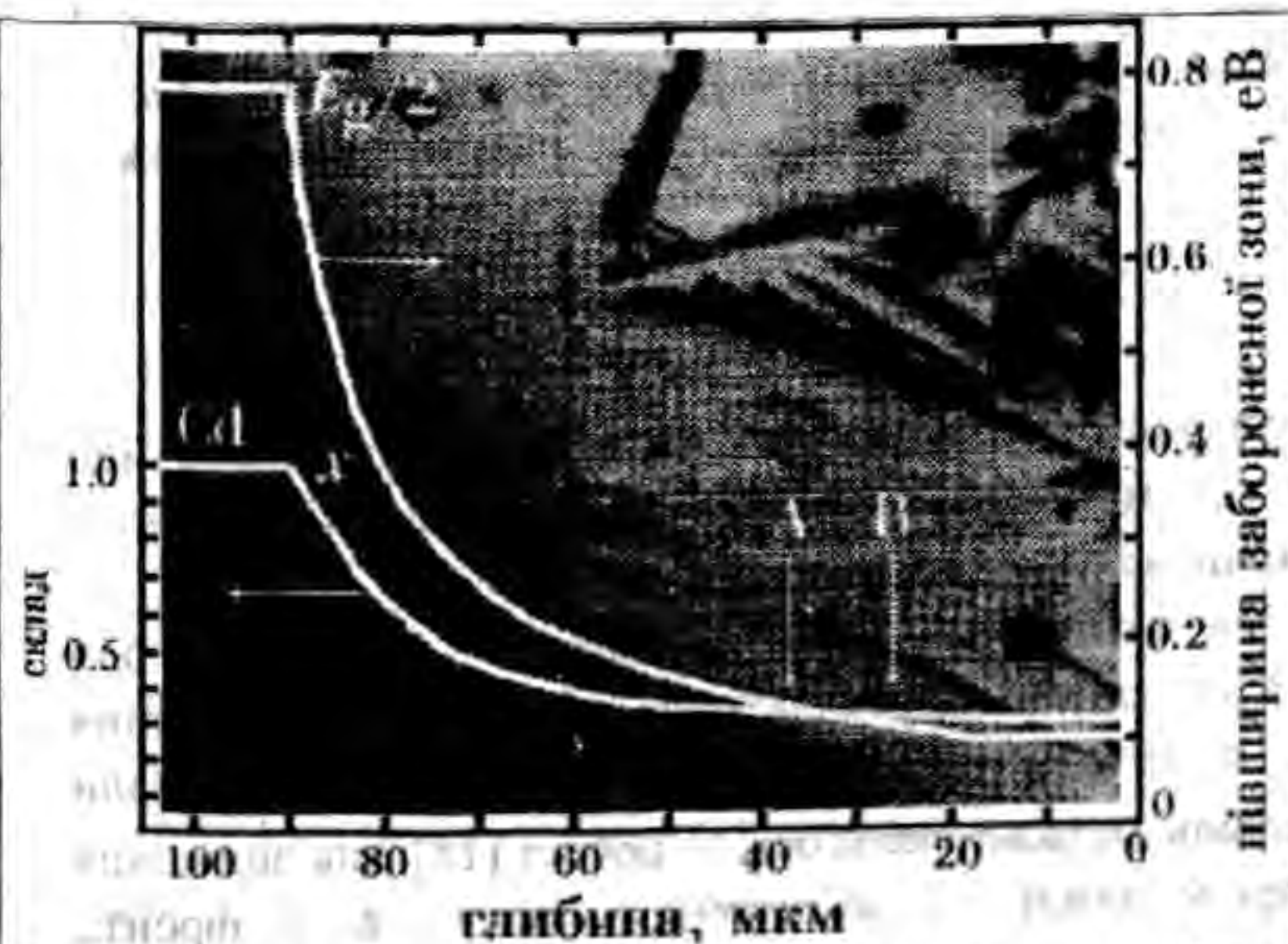


Рис. 1. Глибина утворення лазерної ударної хвилі в епітаксійних варізонних шарах $n\text{-Cd}_{0.28}\text{Hg}_{0.72}\text{Te}$ при опроміненні імпульсами з густиною енергії E , Дж/см²: 0,32 (А), 0,64 (В).

енергії імпульсу досить добре співпадає з теоретично розрахованою глибиною утворення УХ (Рис 1).

До речі, відсутність даних щодо наявності об'ємних максимумів концентрації дефектів при дії на кристали гігантських імпульсів ОКГ у

дослідженнях деяких авторів [13] можна пояснити тим, що внаслідок

значної крутизни переднього фронту імпульсу глибина утворення УХ наближалася до поверхні на відстань < 10 мкм і її вплив було важко виявити.

Швидкість лазерно-індукованої ударної хвилі у напівпровіднику із врахуванням спільного впливу дисипативних процесів і періодичності кристалічної структури визначається як $c_T[1 + \theta/3]$ (θ - константа ангармонізму), що відрізняється від величини $c_T[1 + \theta/4]$, отриманої для моделі суцільного середовища [14].

Зміни на певній глибині в об'ємі напівпровідникового матеріалу свідчать, що процеси дефектоперетворення у даному випадку є наслідком дії саме ударної, а не акустичної хвилі. Дійсно, незважаючи на те, що при опроміненні кристалу імпульсами ОКГ, величина напруженостей на поверхні не може бути меншою ніж в об'ємі, максимальна концентрація дефектів спостерігається в області формування УХ. Це вказує на відмінність механізмів впливу на дефектну структуру напівпровідникових матеріалів акустичних та ударних хвиль рівної амплітуди.

Критерієм можливості формування ударної хвилі при дії лазерного імпульсу на тверде тіло служить умова одновимірного характеру хвиль стискання [15]. Тобто, процес повинен проходити у межах півсфери, радіус якої рівний радіусу пучка випромінювання, оскільки, якщо хвиля напруженості не стала УХ в області одновимірного руху, відбувається швидке затухання її амплітуди за законом для точкового джерела [15]. Також, тверде тіло, що опромінюється, повинно мати достатню товщину. Ці дві умови можна об'єднати вводячи поняття характерного розміру l , який є меншим із значень двох величин: товщини матеріалу чи радіуса пучка випромінювання. Тоді критерій виникнення ударної хвилі можна записати у вигляді [3]:

$$\frac{\eta l^2 (1-R) E \alpha}{c_l^4 \tau^2 \rho} > \frac{8}{\xi^2 (k+1)^2 (\gamma-1)} \equiv K \quad (4)$$

Права частина нерівності (4), позначена через K , є величиною, що досить слабо залежить від умов опромінення. Числове значення K порядку одиниці і може бути уточнене експериментально.

Автори [16, 17] для запобігання термонагріванню і фотоефекту від прямого або розсіяного лазерного випромінювання з метою виокремлення результатів впливу лазерно-індукованої ударної хвилі закривали напівпровідникові кристали мідною фольгою. У роботі [18] для зниження порогу генерації ударної хвилі та збільшення тиску на її фронті, опромінення досліджуваних зразків проводилося в оптично прозорих рідких середовищах - гідрооптичний ефект. Тоді амплітуду ударної хвилі, ініційованої лазерним випромінюванням, можна оцінити за формулою [18]:

$$P = \sqrt{\frac{E(\gamma - 1)}{\tau \gamma} \cdot \frac{\rho_1 u_1 \cdot \rho_2 u_2}{\rho_1 u_1 + \rho_2 u_2}} \quad (5)$$

(де $\rho_1 u_1$ та $\rho_2 u_2$ ударні імпеданси відповідно мідної фольги чи прозорого рідкого середовища і досліджуваного матеріалу).

Під час проходження ударної хвилі відбувається одновісне стискання напівпровідникового кристалу, що призводить до деформації зонної структури. При розповсюдженні індукованої наносекундним лазерним імпульсом УХ напівпровідник знаходиться в деформованому стані на протязі $\sim 10^{-7}$ с, а зонна структура «підстроюється» до зміни міжатомних відстаней кристалічної ґратки за $\sim 10^{-11}$ с. Тобто, можна вважати, що ширина забороненої зони стрибком звужується на величину ΔE_g , в результаті чого зменшується енергія іонізації дефектів. Саме з таким ефектом автори [19, 20] пов'язують різке зростання та релаксацію провідності Ge, що викликані зміною концентрації носіїв заряду під час дії УХ внаслідок іонізації домішкових атомів, які мають глибокі рівні в забороненій зоні.

Причиною дефектоутворення є також і сама ударна хвиля, яка викликає просторове зміщення атомів та утворення залишкових дефектів. Ідея ударного процесу дефектоутворення у твердому тілі була запропонована авторами робіт [2, 21, 22], коли при проходженні лазерно-індукованих УХ спостерігалось виникнення точкових дефектів або дислокацій в залежності від умов опромінення. Температурна стійкість утворених дефектів визначалася їх кристалографією, концентрацією і т. п.

У роботі [23] запропоновано механізм дефектоутворення, в основі якого лежить гіпотеза, згідно з якою УХ являє собою направлений потік нерівноважних фононів, а також проведено аналіз ролі фононного тиску на розсіюючі центри (термічні флуктуації, домішки, фізичні дефекти) в накопиченні останніми достатнього для утворення дефектів у напруженій кристалічній ґратці надлишкового імпульсу ΔJ , пропорційного величині:

$$\Delta J \sim \left[\left(\frac{\Delta G}{G_0} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{\Delta M}{M} \right)^2 \right] \quad (6)$$

(де G_0 - модуль пружності, ΔG - зміна модуля пружності за наявності розсіюючого центру, M - маса атома матриці, ΔM - відхилення маси розсіюючого центру від маси атома матриці).

Оскільки величина надлишкового імпульсу залежить від значень ΔG та ΔM , то спостерігається різне зміщення у фронті УХ атомів з різною масою і енергією зв'язку з ґраткою. Тобто, найбільші ушкодження повинні спостерігатися для напівпровідників, які містять важкі домішки. Це узгоджується з результатами роботи [2], де лазерні УХ ініціювалися в

монокристалах кремнію легованого залізом, атомна вага якого в два рази більша кремнію та [24], коли легуючою домішкою були атоми золота, які більш ніж утричі важчі за залізо. Фізичну картину утворення дефектів у цьому випадку можна уявити як відставання важких атомів домішки від зміщення оточуючої ґратки монокристалу у фронті УХ, у результаті чого вони вибивають зі своїх місць сусідні атоми речовини.

Із розглянутої моделі також можна зробити висновок, що лазерна УХ, розсіюючись на неоднорідностях твердого тіла, створює локальні пошкодження кристалічної ґратки, ступінь яких прямо пропорційна вихідній концентрації розсіюючих центрів. Так як дефекти, які утворюються в напівпровідниковому кристалі при проходженні УХ, є новими центрами розсіювання, зростання їх концентрації з числом лазерних імпульсів має експоненціальний характер, що підтверджується результатами роботи [24], автори якої вивчали вплив лазерно-індукованої ударної хвилі на n -Ge і p -Si.

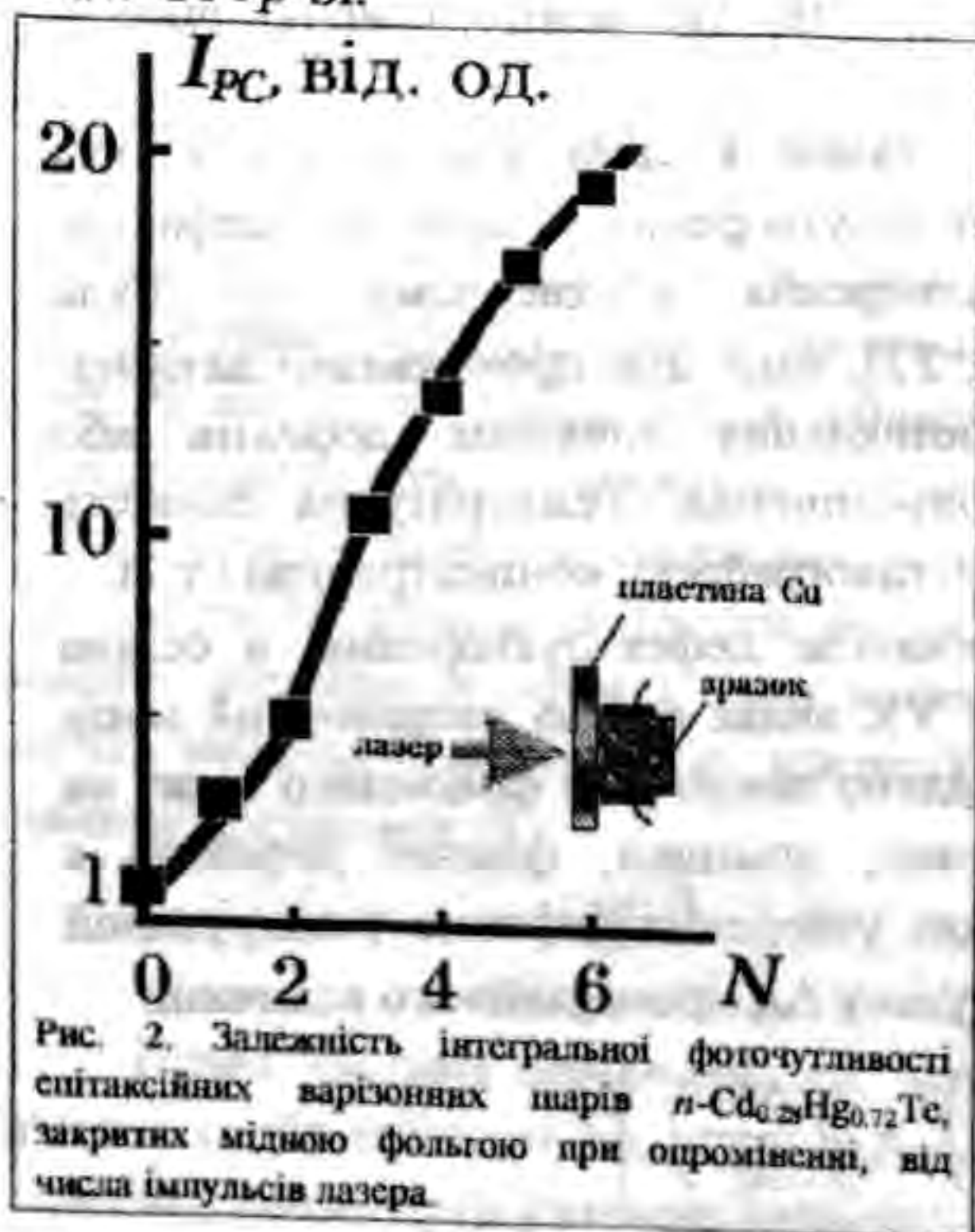


Рис. 2. Залежність інтегральної фоточутливості епітаксійних варізонних шарів n - $\text{Cd}_{0.25}\text{Hg}_{0.75}\text{Te}$, закритих мідною фольгою при опроміненні, від числа імпульсів лазера.

Таким чином, генерація точкових дефектів в об'ємі напівпровідникового матеріалу при дії лазерно-індукованої ударної хвилі може відбуватися без участі пластичної деформації кристала та термічної активації (при наносекундній тривалості імпульсу ОКГ теплова хвиля залишається поблизу поверхні, а адіабатичне нагрівання в УХ не перевищує 1 K) [25].

У випадку варізонних епітаксійних шарів $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ комірковій будови спостерігається зростання фоточутливості матеріалу (Рис. 2) та модифікація спектру фотопровідності

матеріалу, що є наслідком "очутливлення" глибинних областей з більшим значенням E_g в результаті активації границь комірок [17]. У даному випадку УХ стимулює десорбцію і сегрегацію міжвузлової ртуті та інших точкових дефектів на стоки, роль яких виконують границі комірок, при цьому підвищена активація останніх стосовно об'єму комірок призводить до генерації на них значної кількості акцепторів (V_{Hg}) і, як результат, - зменшення області просторового заряду.

Знакозмінні поля механічних напруг, що утворюються у кристалі в результаті формування лазерно-індукованої УХ, можуть призводити до виникнення вакансій, висока рухливість яких сприяє дифузії домішкових (міжвузлових) атомів у бік деформації, тобто відбувається процес лазерного гетерування [26].

При проходженні ударної хвилі внаслідок локалізації дефектів навколо вихідних центрів розсіяння та локальності лазерного впливу існує можливість формування в об'ємі напівпровідника обмежених областей збагачених точковими дефектами і створення на великій глибині p - n переходів [24, 27]. Дифузія нерівноважних дефектів із об'єму кристалу на його поверхню є причиною суттєвої зміни її хімічної активності поверхні, викликаючи нерівноважні хімічні процеси у приповерхневому шарі. Тобто, генерація точкових дефектів лазерно-індукованою УХ є також одним із методів ініціювання хімічних реакцій у кристалі - лазерної хімії твердого тіла [28].

Отже, у результаті дії лазерно-індукованої ударної хвилі в напівпровідниковому кристалі генеруються дефекти, концентрація яких на кілька порядків перевищує рівноважну концентрацію при температурі опромінення, а їх висока рухливість дає можливість отримувати упорядковані стани, реалізація яких нелазерними методами майже неможлива або досягається з великими труднощами.

Література

1. Вавилов В.С., Кив А.Е., Ниязова С.Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. - М.: Наука, 1981. - 368 с.
2. Золотухин А.А., Иванов Л.И., Милевский Л.С., Пруцков Е.Г., Янушкевич В.А. // Квантовая электроника. - 1975. - Т. 2, № 2. - С. 417.
3. Иванов Л.И., Литвинова Н.А., Янушкевич В.А. // Квантовая электроника. - 1977. - Т. 4, № 1. - С. 204-206.
4. Рыкалин Н.Н., Иванов Л.И., Литвинова Н.А., Янушкевич В.А. // Труды Междунар. конф. «Лазеры и их применение». - Дрезден. - 1970. - С. 1481.
5. Гуревич С.Б., Муратиков К.Л. Фототермоакустика. - М.: Знание, 1990. - 64 с.
6. Веденов А.А., Гладуш Г.Г. Физические процессы при лазерной обработке материалов. - К.: Энергоатомиздат, 1985. - 208 с.
7. Агеев В.П., Барчуков А.И., Бупкин Ф.В., Конов В.И., Силенок А.С., Чаплиев Н.И. // Квант. электрон. - 1977. - Т. 4, № 2. - С. 310.
8. Weichel H., Avizonis P.V. // Appl. Phys. Lett. - 1966. - V. 9, № 9. - P. 334.
9. Мирзоев Ф.Х., Панченко В.Я., Шелепин Л.А. // Успехи физ. наук - 1996. - Т. 166, № 1. - С. 3.

10. Аскар'ян Г.А., Мороз Е.М. // ЖЭТФ. - 1962. - Т. 43, № 6(12). - С. 2319.
11. Л.Д. Ландау., Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1988. - Т. 6: Гидродинамика. - 736 с.
12. Иванов Л.И., Янушкевич В.А. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1977 - № 6 - С. 3.
13. Акимов А.И., Миркин Л.И. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1969. - № 2. - С. 17.
14. Дынин Е.А. // Физика твердого тела. - 1974. - Т. 16, № 11. - С. 3310.
15. Янушкевич В.А. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1975. - № 5. - С. 9.
16. Gnatyuk V.A., Vlasenko A.I., Mozol' P.O., Gorodnychenko O.S. // Semicond. Sci. Technol., 1998, V. 13, N 11, P. 1298.
17. Gnatyuk V.A., Gorkovenko B.L., Gorodnychenko O.S. Mozol' P.O. et al. // Proc. of SPIE. - 1999. - V. 3890. - P. 458
18. Иванов Л.И., Никифоров Ю.Н., Янушкевич В.А. // ЖЭТФ. - 1974. - Т. 67, № 1. - С. 147.
19. Полянинов А. В., Гуров К.П., Янушкевич В.А. // ЖЭТФ. - 1978. - Т. 75, № 2. - С. 617.
20. Полянинов А.В., Гуров К.П., Янушкевич В.А. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1986. - № 6. - С. 33.
21. Дехтяр И.Я., Иванов Л.И., Карлов Н.В., Кузьмин Г.П. и др. // Квантовая электроника. - 1976. - Т. 3, № 4. - С. 844.
22. Мезох З.И., Иванов Л.И., Янушкевич В.А. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1971. - № 4. - С. 163.
23. Янушкевич В.А. // Физ. и хим. обработки материалов. - 1979. - № 2. - С. 47.
24. Никифоров Ю.Н., Янушкевич В.А. // Физика и техника полупроводников. - 1980. - Т. 14, № 3. - С. 534.
25. Янушкевич В.А., Полянинов А.В., Пруцков Е.Г., Польшалов Г.А. // Изв. АН СССР. Сер. физич. - 1985. - Т. 49, № 6. - С. 1146.
26. Зуев В.А., Литовченко В.Г., Попов В.Г. // Квантовая электроника. - 1982. - № 23. - С. 33.
27. Кузьмин Е.И., Пруцков Е.Г., Янушкевич В.А. // Тезисы докл. Всесоюз. науч. конф. «Применение лазеров в науке и технике». - Л. - 1980. - С. 7.
28. Дехтяр И.Я., Иванов Л.И., Карлов Н.В., Никифоров Ю.Н. и др. // Письма в ЖЭТФ. - 1981. - Т. 33, № 2. - С. 126.

Надійшла до редакції 28.08.06р.

УДК 535.34:537.311.33

Олег В. Вакуленко¹,
Володимир С. Северин

Вплив електронної поляризації на оптичні властивості металу

При розгляді оптичних властивостей металу, обумовлених вільними електронами його зони провідності, традиційно використовується модель Друде-Лоренца. Ця модель не враховує поляризацію системи вільних електронів. Вона є справедливою тільки якщо частота світла є значно більшою плазмової частоти. Розгляд оптичних констант металу при менших частотах вимагає врахування поляризації таких електронів. Врахування цієї поляризації приводить до суттєвої зміни спектральної поведінки оптичних констант металу.

Ключові слова: поляризація, метал, оптичні спектри.

¹ E-mail

Oleg V. Vakulenko¹,
Volodymyr S. Severin

Influence of electronic polarization on optical properties of metal

Under the consideration of optical properties of metal, conditioned by free electrons of its conduction band, the Drude-Lorentz model is traditionally used. This model does not take the polarization of system of free electrons into account. It is correct only if the frequency of light is substantially more plasma frequency. The consideration of optical constants of metal under smaller frequencies requires to take the polarization of such electrons into account. The taking this polarization into account causes the substantial change of spectral behavior of optical constants of metal.

Key Words: polarization, metal, optical spectrums.

Вступ

Для дослідження оптичних властивостей металу при поглинанні світла вільними електронами його зони провідності традиційно використовується наближення Друде-Лоренца. У першому розділі статті показано, що таке наближення не враховує екранування рухливими електронами металу зовнішнього електричного поля. Спосіб врахування такого екранування (тобто поляризації) наведений у другому розділі. Він дозволяє використовувати результати, отримані в моделі Друде-Лоренца, при врахуванні поляризації. Оптичні властивості металу, обумовлені вільними електронами його зони провідності, із врахуванням електронної поляризації розглянуто в третьому розділі.

1. Діелектрична проникність у моделі Друде-Лоренца

Оптичні властивості металу визначаються його діелектричною проникністю. А для знаходження її в області частот світла ω , яка розглядається, традиційно використовується модель Друде-Лоренца [1-6]. У цій моделі вільні (у межах енергетичної зони) електрони покладаються нейтралі-

зованими позитивним фоном кристалічної ґратки, яка має не залежну від частоти діелектричну проникність ϵ_0 [1, 4, 5]. При цьому, під дією прикладеного до металу зовнішнього електричного поля D , виникає електричний струм електронів із густиною $j = env$, де e – заряд електрона, v – його швидкість, n – концентрація вільних електронів у зоні провідності. Зовнішнє змінне поле $D(\omega)\exp(i\omega t)$, де $D(\omega)$ – амплітуда поля, створює змінний струм таких електронів з амплітудою густини електричного струму $j(\omega)$. Лінійний відгук цього струму на зовнішнє поле D дається виразом

$$j(\omega) = s(\omega) D(\omega) \frac{1}{\epsilon_0}, \quad (1)$$

де

$$s(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m(1 + i\omega\tau)} \quad (2)$$

– питома електропровідність вільних електронів у моделі Друде–Лоренца, m – їх ефективна маса, $\tau = 1/\gamma$ – час релаксації імпульсу цих електронів.

При розгляді оптичних властивостей металу традиційно використовують його діелектричну проникність у вигляді [1–6]

$$\epsilon_s(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi}{i\omega} s(\omega). \quad (3)$$

Співвідношення (2), (3) дають ϵ_s , дійсну $\epsilon_{s1} = \text{Re}\epsilon_s$ та уявну $\epsilon_{s2} = -\text{Im}\epsilon_s$ частини ϵ_s у вигляді

$$\epsilon_s(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - i\gamma)} \right), \quad (4)$$

$$\epsilon_{s1}(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \right), \quad (5)$$

$$\epsilon_{s2}(\omega) = \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega} \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (6)$$

де $\omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{\epsilon_0 m}$ – квадрат плазмової частоти. Вирази (4)–(6) покладаються основними при розгляді оптичних властивостей металу, обумовлених вільними електронами, [1–6].

Проте, модель Друде–Лоренца може бути застосована тільки в області частот, суттєво більших ω_p , та може бути не придатною при зменшенні частоти до ω_p . Це обумовлено тим, що у моделі Друде–Лоренца не враховується екранування зовнішнього поля рухливими електронами. Таке екранування починає проявлятися на часах $t_p = \omega_p^{-1}$ [7]. Тому на часах $t \approx t_p$ (тобто на частотах світла $\omega \approx \omega_p$) у речовині буде діяти на електрони

провідності не зовнішнє відносно їх поле $\frac{D}{\epsilon_0}$, а внутрішнє поле $E \neq \frac{D}{\epsilon_0}$.

Відмінність полів E та $\frac{D}{\epsilon_0}$ обумовлена P – вектором електронної поляризації [5, 7–14]. Ця відмінність не врахована при отриманні виразів (4)–(6) для діелектричної проникності.

2. Діелектрична проникність металу при врахуванні електронної поляризації

Густину струму j можна виразити як через внутрішнє електричне поле E , так й через поле D/ϵ_0 [7, 8, 11–14]

$$j(\omega) = \sigma(\omega)E(\omega) = s(\omega)D/\epsilon_0. \quad (7)$$

Електропровідність s визначає відгук струму на зовнішнє (по відношенню до підсистеми електронів провідності металу) електричне поле D/ϵ_0 , а електропровідність σ дає відгук струму на внутрішнє електричне поле E . Тому s називають зовнішньою, а σ – внутрішньою електропровідностями речовини [11–13]. Відмінність електропровідностей σ та s у виразі (7) обумовлюється відмінністю від нуля електронної поляризації $P = (D - \epsilon_0 E)/(4\pi)$.

Заряди, які не беруть участь в оптичних переходах у досліджуваному інтервалі частот, створюють незалежний від частоти фоновий вклад ϵ_0 у діелектричну проникність [4, 5, 10]. Тому вираз для діелектричної проникності металу $\epsilon(\omega)$ можна подати у такому вигляді

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi}{i\omega} \sigma(\omega). \quad (8)$$

Що випливає зі співвідношення $D(\omega) = \epsilon(\omega)E(\omega)$, яке є визначенням діелектричної проникності речовини $\epsilon(\omega)$ [5, 7–14], та яке вимагає наявності у ньому σ а не s [7, 8, 10–14]. Враховуючи це співвідношення та формули (7), (8), маємо

$$\sigma(\omega) = s(\omega)\epsilon(\omega) \frac{1}{\epsilon_0}. \quad (9)$$

Та з виразу (9) отримуємо

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{4\pi}{i\omega\epsilon_0} s(\omega)} s(\omega), \quad (10)$$

Підставивши вираз (10) у формулу (8), маємо

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \frac{1}{1 - \frac{4\pi}{i\omega\epsilon_0} s(\omega)}. \quad (11)$$

Вираз (11) для діелектричної проникності $\epsilon(\omega)$, суттєво відрізняється від діелектричної проникності ϵ_s (3), яка використовується традиційною теорією оптичних властивостей металу. Розкладаючи вираз (11) у ряд за степенями $z(\omega)$, бачимо, що тільки при малому $z(\omega)$ діелектрична проникність $\epsilon(\omega)$ збігається з ϵ_s (3). Формула (10) дозволяє використовувати при розгляді оптичних властивостей речовини, які визначаються σ , електропровідність s , отриману без урахування поляризації цієї речовини.

3. Оптичні властивості металу із врахуванням електронної поляризації

Підставивши вираз (2) у формулу (11), маємо

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \frac{1}{1 + \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - i\gamma)}}. \quad (12)$$

Для дійсної $\epsilon_1 = \text{Re}\epsilon$ та уявної $\epsilon_2 = -\text{Im}\epsilon$ частин ϵ із виразу (12) отримуємо

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_0 \frac{\gamma^2 + \omega^2 \left(1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)}{\gamma^2 + \omega^2 \left(1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2} \equiv \epsilon_0 \left[1 - \frac{\omega_p^2 \left(1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)}{\gamma^2 + \omega^2 \left(1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2} \right], \quad (13)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_0 \frac{\omega_p^2}{\omega} \frac{\gamma}{\gamma^2 + \omega^2 \left(1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2}. \quad (14)$$

Розкладаючи вирази (12)–(14) у ряд за степенями $(\omega_p/\omega)^2$, переконуємося у справедливості співвідношення

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_s(\omega) + O\left(\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^4\right).$$

Тому діелектрична проникність $\epsilon_s(\omega)$, яка не враховує вплив поляризації, може бути застосована тільки у наближенні великих частот $\omega^2 \gg \omega_p^2$.

Розглянемо оптичні константи металу в залежності від довжини хвилі світла $\lambda = 2\pi c/\omega$, де c – швидкість світла у вакуумі. Позначимо через $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$ – плазмову довжину хвилі світла, $z = \lambda/\lambda_p$ – безрозмірну довжину хвилі світла, $w = \omega_p \tau$.

Будемо позначати через $\epsilon_{s1}(z)$ дійсну, а через $\epsilon_{s2}(z)$ уявну частини діелектричної проникності (4), яка не враховує поляризації. У нових позначеннях маємо з (5), (6) вирази

$$\epsilon_{s1}(z) = \epsilon_0 \left[1 - \frac{w^2}{1 + \left(\frac{w}{z} \right)^2} \right], \quad (15)$$

$$s_{s2}(z) = \epsilon_0 \frac{wz}{1 + \left(\frac{w}{z} \right)^2}. \quad (16)$$

Позначимо через $\epsilon_1(z)$ дійсну, а через $\epsilon_2(z)$ уявну частини діелектричної проникності ϵ (12), яка враховує поляризацію. З (12) – (14) маємо

$$\epsilon_1(z) = \epsilon_0 \left[1 - \frac{w^2(1+z^2)}{1 + \left(\frac{w}{z} \right)^2 (1+z^2)^2} \right], \quad (17)$$

$$\epsilon_2(z) = \epsilon_0 \frac{wz}{1 + \left(\frac{w}{z} \right)^2 (1+z^2)^2}. \quad (18)$$

Коефіцієнт поглинання світла α дається формулою [6]

$$\alpha(z) = \frac{4\pi K(z)}{\lambda_p z}, \quad (19)$$

де

$$K(z) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\epsilon_1(z) + \sqrt{\epsilon_1^2(z) + \epsilon_2^2(z)} \right)} \quad (20)$$

– показник поглинання. Позначимо через $\alpha_s(z)$ коефіцієнт поглинання світла, який не враховує електронної поляризації. Він виникає при використанні замість діелектричної проникності ϵ (12) у виразах (19), (20) діелектричної проникності ϵ_s (4) та має вигляд

$$\alpha_s(z) = \frac{4\pi K_s(z)}{\lambda_p z}, \quad (21)$$

де

$$K_s(z) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(-\epsilon_{s1}(z) + \sqrt{\epsilon_{s1}^2(z) + \epsilon_{s2}^2(z)} \right)}. \quad (22)$$

В області слабкого поглинання, у наближенні $\omega^2 \tau^2 \gg 1$ коефіцієнт поглинання світла $\alpha_s(z)$ має вигляд [6]

$$\alpha_{sl}(z) = \frac{1}{L_1} \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 = \frac{1}{L_1} z^2, \quad (23)$$

де $L_1 = \frac{c\tau}{\sqrt{\epsilon_0}},$

Коефіцієнт нормального відбиття світла металом є [6]

$$R(z) = \frac{(N(z) - 1)^2 + K(z)^2}{(N(z) + 1)^2 + K(z)^2}, \quad (24)$$

де

$$N(z) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\epsilon_1(z) + \sqrt{\epsilon_1^2(z) + \epsilon_2^2(z)} \right)} \quad (25)$$

– показник заломлення, та $\epsilon_1(z)$, $\epsilon_2(z)$ даються формулами (17), (18). Вираз (24) враховує поляризацію. А без врахування поляризації коефіцієнт відбиття світла металом є

$$R_s(z) = \frac{(N_s(z) - 1)^2 + K_s(z)^2}{(N_s(z) + 1)^2 + K_s(z)^2}, \quad (26)$$

де

$$N_s(z) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\epsilon_{sl}(z) + \sqrt{\epsilon_{sl}^2(z) + \epsilon_{s2}^2(z)} \right)}. \quad (27)$$

Розглянемо для конкретності чисельні значення параметрів: $m = \zeta m_e$, $\zeta = 1,32$, m_e – маса електрона, $n = 8,45 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Для оцінки приймемо $\epsilon_0 = 12$. Для цих значень маємо: $\omega_p = 4,12 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, енергію плазмону $E_p = \hbar \omega_p = 2,712 \text{ eV}$, $w = 82,407$, $\lambda_p = 4,572$.

Результати розрахунків діелектричної проникності, коефіцієнта відбиття світла та коефіцієнта поглинання світла подані на рис. 1–3. З цих рисунків видно, що вказані фізичні величини, обчислені з врахуванням електронної поляризації та без врахування її, співпадають тільки при $z \ll 1$ (тобто у наближенні великих частот $\omega \gg \omega_p$ чи малих довжин хвиль $\lambda \ll \lambda_p$) як і повинно бути.

При умові слабого поглинання, коли $N^2 \gg K^2$, чи $\epsilon_1^2 \gg \epsilon_2^2$, із виразів (26), (27) випливає

$$R = \left(\frac{N - 1}{N + 1} \right)^2, \quad (28)$$

де вже $N = \sqrt{\epsilon_1}$.

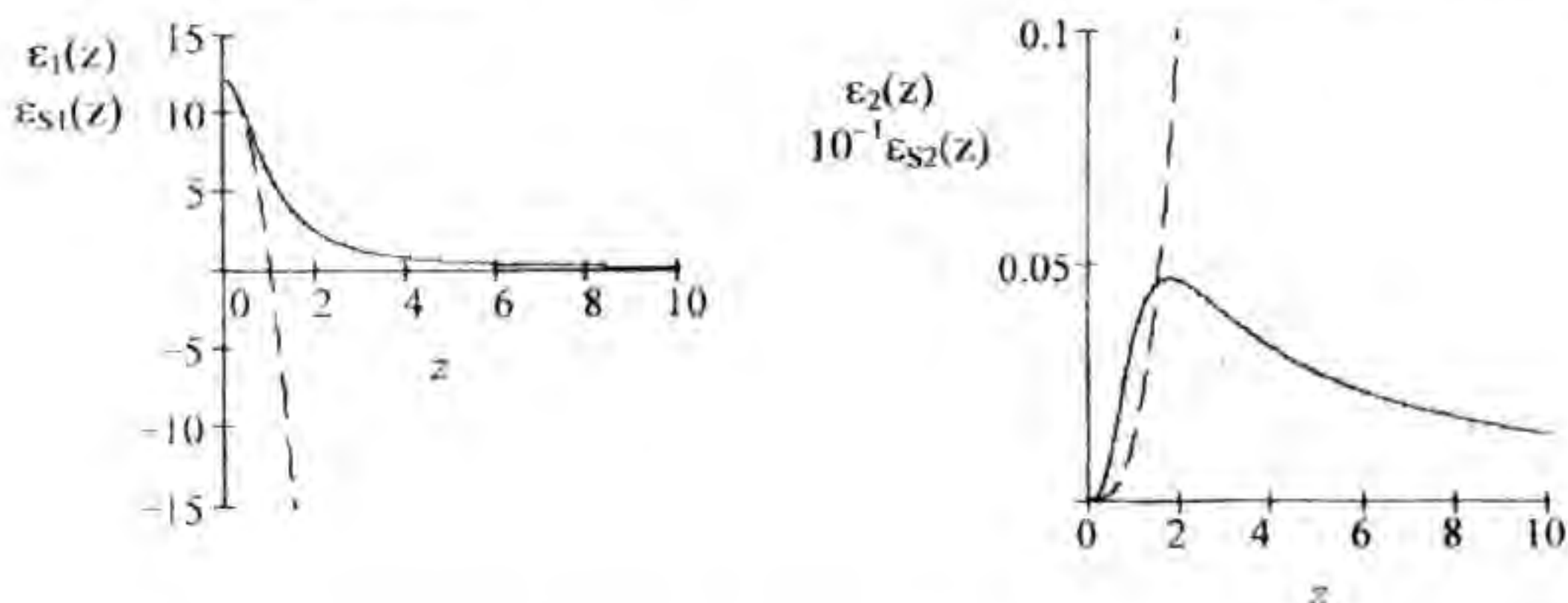


Рис. 1. Розрахунок дійсної та уявної частин діелектричної проникності $\epsilon(z)$: з врахуванням електронної поляризації $\epsilon_1(z)$, $\epsilon_2(z)$ (суцільна лінія) та без $\epsilon_{s1}(z)$, $\epsilon_{s2}(z)$ (штрих).

При $\omega^2 \tau^2 \gg 1$, підстановка діелектричної проникності у наближенні (15) (без врахування поляризації), тобто ϵ_{s1} , у вираз (28) дає мінімум коефіцієнта відбиття на частоті [1, 6]

$$\omega_1 = \omega_p \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_0 - 1}}. \quad (29)$$

Що відповідає довжині хвилі світла $\lambda_1 = 2\pi c/\omega_1$. Значення ω_1 , λ_1 отримані при використанні моделі Друде-Лоренца у виводі вигляду діелектричної проникності речовини, яка не враховує вплив поляризації.

Якщо ж, при $\omega^2 \tau^2 \gg 1$, підставити у вираз (28) діелектричну проникність (17), тобто ϵ_1 , при отриманні якої враховано вплив поляризації, то мінімум коефіцієнта відбиття буде на частоті

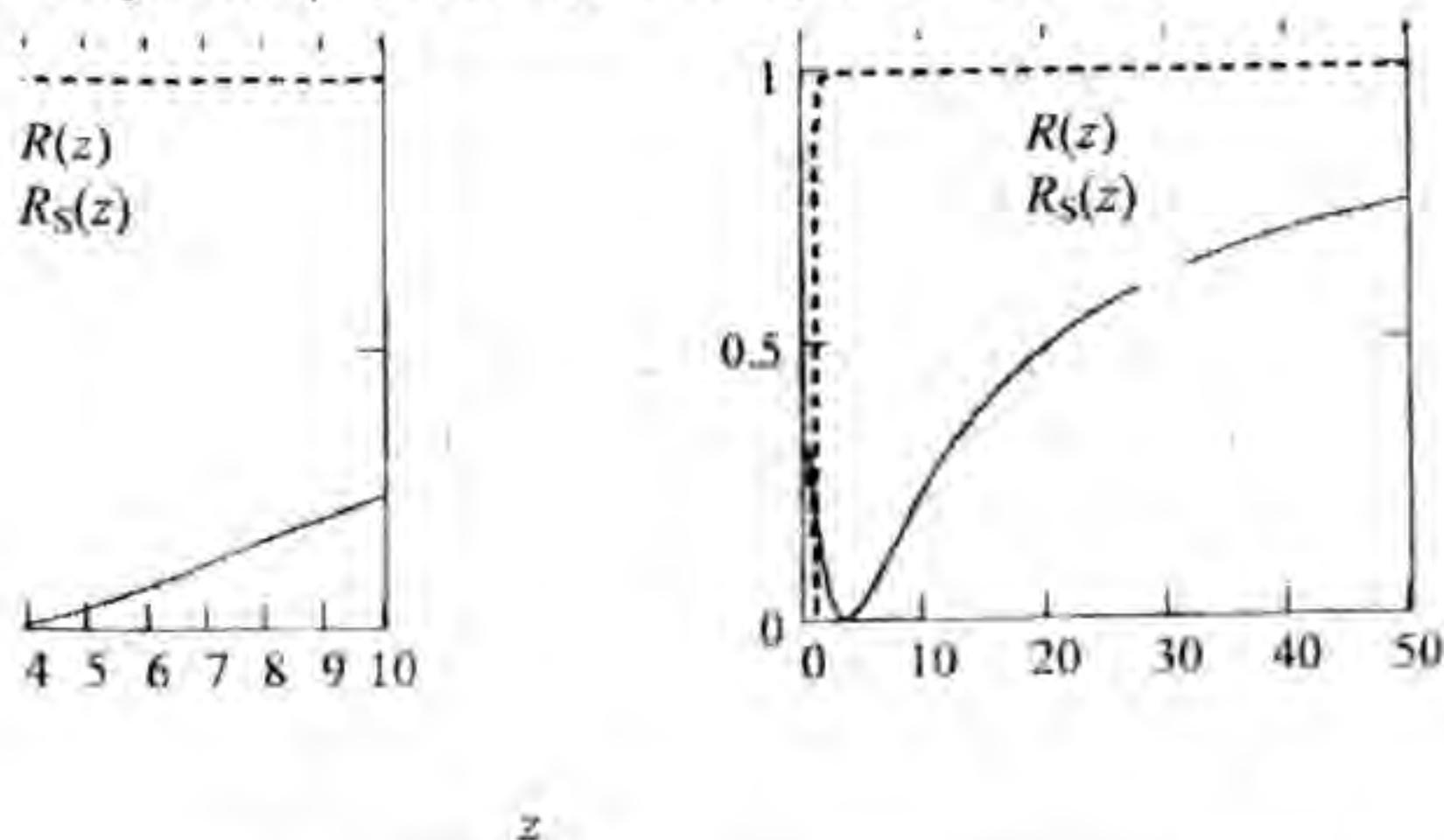


Рис. 2. Розрахунок коефіцієнта відбиття світла з врахуванням електронної поляризації $R(z)$ (суцільна лінія) та без $R_s(z)$ (штрих).

$$\omega_2 = \omega_p \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 - 1}} \quad (30)$$

З формул (29), (30) випливає що

$$\omega_2 = \omega_1 \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \quad (31)$$

Для використаних вище значеннях параметрів маємо $\omega_1 = 4,304 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\lambda_1 = 4,377 \text{ мкм}$, $\omega_2 = 1,242 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\lambda_2 = 15,16 \text{ мкм}$, $\omega_1/\omega_2 = \lambda_2/\lambda_1 = 3,464$.

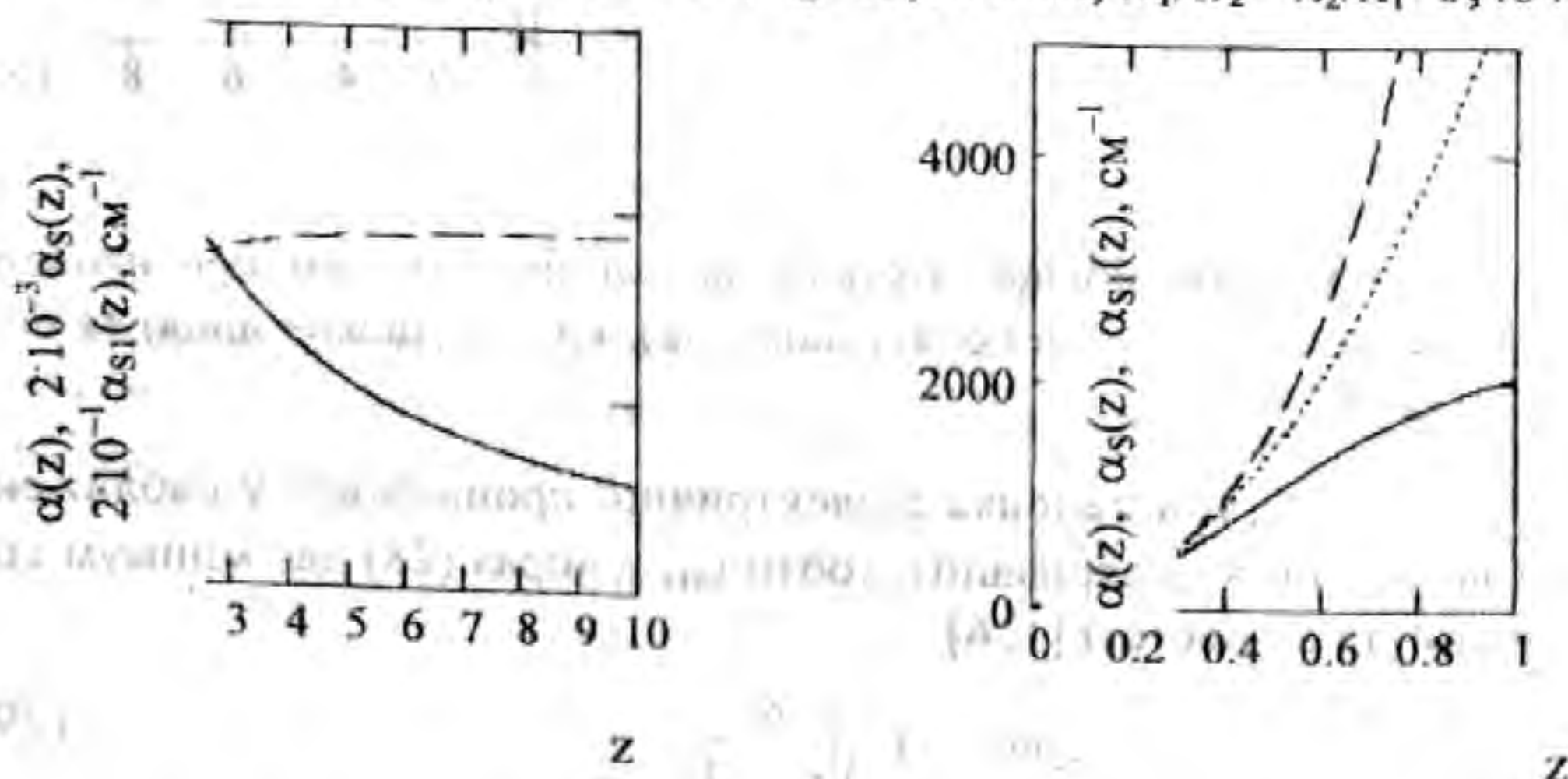


Рис. 3. Розрахунок коефіцієнта поглинання світла з врахуванням електронної поляризації $\alpha(z)$ (суцільна лінія), та без: $\alpha_S(z)$ (штрих), $\alpha_{SI}(z)$ (пунктир).

4. Обговорення результатів

Через поляризацію електричне поле у речовині, яке діє на носії заряду, відрізняється від зовнішнього електричного поля. Модель Друде-Лоренца не враховує вплив поляризації та може бути застосована тільки у наближенні малих довжин хвиль $\lambda^2 \ll \lambda_p^2$. Метод врахування поляризації, викладений у статті, використовує результати традиційної моделі Друде-Лоренца. Отримані у рамках цього методу оптичні константи металу співпадають з отриманими у рамках моделі Друде-Лоренца тільки при малих λ , коли $\lambda^2 \ll \lambda_p^2$. При збільшенні λ порушується умова $\lambda^2 \ll \lambda_p^2$ та оптичні константи металу стають суттєво відмінними від отриманих у рамках моделі Друде-Лоренца. Зокрема, врахування електронної поляризації суттєво зсуває мінімум плазмового відбиття в сторону довгих хвиль та значно розмиває його у порівнянні з результатами моделі Друде-Лоренца. У моделі Друде-Лоренца при зростанні λ коефіцієнт поглинання світла зростає як λ^2 . А врахування електронної поляризації припиняє зростання $\alpha(z)$ при $z \approx 1,3$. Подальше зростання λ дає повільне зменшення α .

Гобто утворюється широка смуга поглинання, обумовлена не міжзонними переходами електронів металу, а поглинанням світла електронами у середині зони провідності.

Така спектральна поведінка металу, отримана теоретично, відповідає експериментальним результатам [15, 16]. У цих роботах вивчалися Ni-Cr плівки. Вигляд спектральної поведінки $R(\lambda)$ та $\alpha(\lambda)$, отриманий у [15, 16] в інтервалі значень λ 0,2–5 мкм, відповідає нашим розрахункам (із врахуванням електронної поляризації) при $\lambda \geq \lambda_p$ на схилі смуги поглинання, обумовленої поглинанням світла електронами зони провідності. Порівняння дано на рис. 4, 5. При розрахунках використано $\epsilon_0=2$, а значення інших параметрів залишені такі ж як вище. Рис. 5 дає добру кореляцію

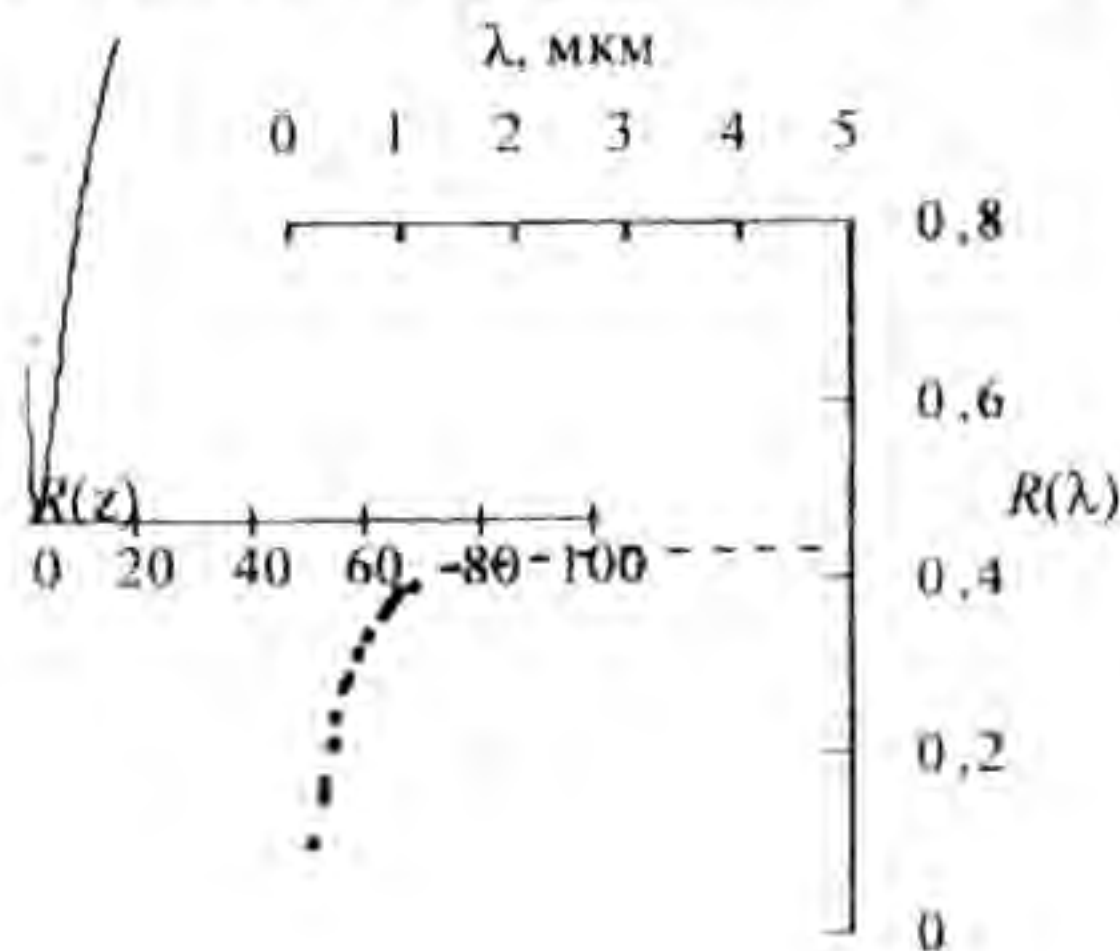


Рис. 4. $R(\lambda)$ – експериментальні значення показника відбиття для Ni-Cr плівки (пунктир), $R(z)$ – розрахунок (суцільна лінія).

експерименту та розрахунку для поглинання, яка відсутня у рамках моделі Друде–Лоренца. На рис. 4 спектральна поведінка відбиття однакова для експерименту та розрахунку при $\lambda < 1$ мкм. При $\lambda > 1$ мкм плівка металу стає достатньо прозорою і відбиття визначається підкладкою плівки металу [15, 16].

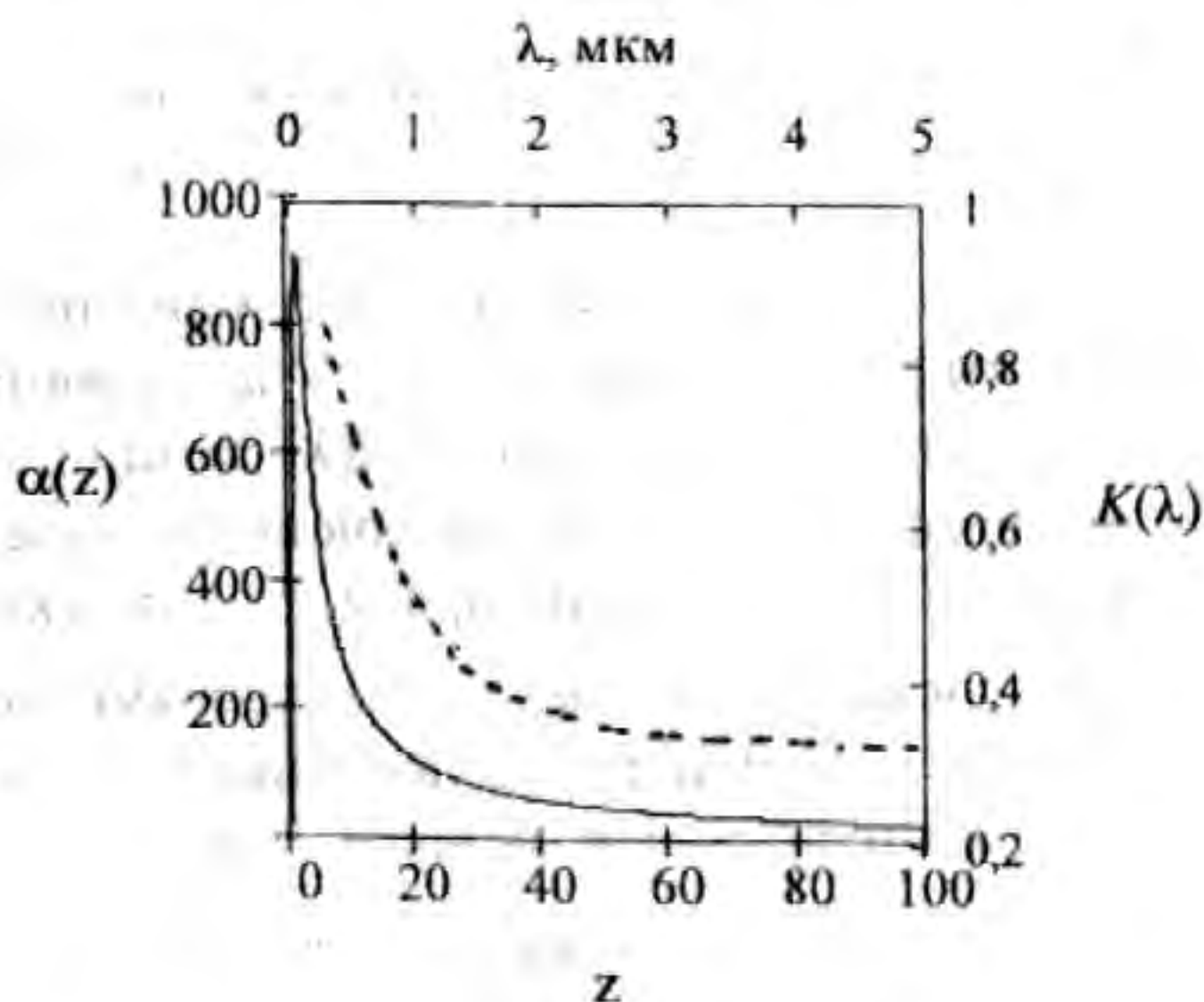


Рис. 5. $K(\lambda)$ – експериментальні значення показника поглинання для Ni-Cr плівки (пунктир), $\alpha(z)$ – розрахунок (суцільна лінія).

Література

1. Маделунг Ю. Теория твердого тела. – М.: Наука, 1980.
2. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы. – М.: Мир, 1969.
3. Гроссе П. Свободные электроны в твердых телах. – М.: Мир, 1982.
4. Металлооптика // Физический энциклопедический словарь. – М.: Сов. энциклопедия, 1983. – с. 409.
5. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978.
6. Уханов Ю. И. Оптические свойства полупроводников. – М.: Наука, 1977.
7. Платцман Ф., Вольф П. Волны взаимодействия в плазме твердого тела. – М.: Мир, 1975.
8. Ильинский Ю. А., Келдыш Л. В. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом: Учеб. пособие. – М.: Изд-во МГУ, 1989.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Наука, 1982.
10. Пекар С. И. Кристаллооптика и добавочные световые волны. – Киев: Наукова думка, 1982.
11. Kubo R. // Rep. Progr. Phys. – 1966. – V. 29, Pt. 1. – P. 255-284.
12. Izuyma T. // Progr. Theor. Phys. – 1961. – V. 25, N. 6. – P. 964-980.
13. Eykholt R. // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 34, N. 10. – P. 6669-6674.
14. Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971.

15. Вакуленко О. В., Головинская Л. С., Елфимов О.В., Кременчугский Л. С., Леваш Л. В., Сташук В. С.// Журнал прикладной спектроскопии. – 1989. – Т. 51, № 1. – С. 140-143.
16. Вакуленко О. В., Елфимов О.В., Кременчугский Л. С., Леваш Л. В., Сташук В. С., Супруненко В. Н.// Укр. физ. Журн. – 1989. – Т. 34, № 12. – С. 1826-1829.

Надійшла до редакції 30.12.2006р

УДК 669.017:669.15-194:621.785.9:661.665

Гіржон* В.В., професор,
Смоляков О.В., доцент,
Танцюра І.В., аспірант.

Формування квазікристалічної фази в поверхневих шарах технічного алюмінію при лазерному легуванні

Досліджено структурно – фазовий стан поверхневих шарів алюмінію А8 після лазерного легування сумішшю порошків міді та заліза з різною товщиною обмазки.

Показана можливість формування квазікристалічної ψ -фази в легуваному прошарку. Встановлено нерівномірний перерозподіл легуючих компонентів за глибиною зони лазерного оплавлення.

Ключові слова: лазерне легування, квазікристалічна фаза, алюміній, зона лазерного легування.

V.V. Girzhon*, professor,
O.V. Smolyakov, associate professor,
I.V. Tantsura, post-graduate student.

Formation quasicrystalline phase in surface layers of technical aluminium after laser alloying process.

Structurally - phase condition of surface layers of aluminium alloy A8 after laser alloying process by mix of copper and iron powders with different thickness cover has been investigated

The opportunity of formation quasicrystalline ψ - phase in alloyed layer was shown. Non-uniform redistribution of alloying component on depth in zone of laser melting was established.

Key Words: laser alloying, quasicrystalline phase, aluminium, zone of laser alloying

*E-mail: girzhon@zsu.zp.ua.

Розробка нових металевих сплавів, що мають унікальний комплекс фізичних властивостей – актуальне завдання сучасного матеріалознавства. Істотний прорив у цьому напрямку було зроблено у 1960 році, коли вперше було одержано аморфний металевий сплав методом гартування з рідкого стану [1]. У 1984 році відкрито новий клас матеріалів, який не можна віднести ні до кристалічних, ні до аморфних. Атомна структура цих матеріалів характеризується наявністю далекого порядку, як у кристалічних сплавах, та відсутністю трансляційної симетрії, подібно до аморфних сплавів. Окрім того, наявні заборонені, з точки зору класичної кристалографії, осі симетрії 5-го, 8-го, 10-го та 12-го порядків. Тому ці сплави відносять до проміжного між кристалічними та аморфними сплавами класу, що одержав назву квазікристалічних сплавів, або квазікристалів. На сьогодні відомо понад 100 металевих систем, у яких можливе утворення квазікристалічної структури [2]. У порівнянні з кристалічними аналогами квазікристали мають комплекс фізико-механічних властивостей, що наближає їх до діелектриків, зокрема високий питомий електроопір та низьку теплопровідність [3-5]. Висока твердість квазікристалів у поєднанні з низьким коефіцієнтом тертя [2] дає

можливість застосування їх у вузлах машин з високими вимогами до зносостійкості. На жаль квазікристалічні сплави дуже крихкі [2, 6], тому перспективним є використання таких матеріалів в якості покриттів та тонких плівок, що, в свою чергу, потребує розробки методів їх отримання на поверхнях масивних виробів. Існує декілька таких методів, зокрема це різні види газотермічного [7], електронно - променевого напилення [8], тощо. Проте в науковій літературі відсутні дані про можливість створення покриттів з вмістом квазікристалічної фази за допомогою лазерного легування металів. Відомо [9], що в системі Al-Cu-Fe можливе утворення квазікристалічної фази з областю гомогенності (ат.%) Al (65 – 70), Cu (17 – 25) та Fe (8 – 13). Тому метою роботи було встановлення можливості формування квазікристалічної структури в приповерхневих шарах алюмінієвого сплаву А8 при його лазерному легуванні порошками міді та заліза.

Приготування зразків та методика експерименту. Лазерне легування поверхні зразків, що мали форму паралелепіпедів з розмірами $10 \times 5 \times 5$ мм, виконувалось на імпульсному рубіновому лазері «Квант- 12» ($\lambda=0,6943$ мкм, $\tau=4$ нс) з густиною потужності 900 МВ/м^2 при 30 % перекритті плям.

В якості легуючої речовини використовували порошки міді та заліза, одержані газовим розпиленням з розплаву з фракцією ≤ 25 мкм. Легуючі елементи наносилися на поверхню зразків у вигляді обмазки із суміші порошків міді та заліза на основі клею БФ-6 у розчині ацетону. Атомарне співвідношення міді до заліза в суміші вибрали як 2 : 1. Товщина обмазки на різних зразках варіювалася від 25 до 180 мкм.

Структурно-фазовий склад поверхневих шарів зразків після лазерного легування досліджувався методами рентгеноструктурного (ДРОН-3, Cu-K $_{\alpha}$ -випромінювання), електронно – мікроскопічного (JSM 6360LA) та металографічного (EPIQUANT) аналізів. Розподіл мікротвердості за глибиною зразків визначався за допомогою мікротвердоміру ПМТ-3.

Експериментальні дані та їх обговорення. Згідно з даними рентгеноструктурного фазового аналізу лазерне легування сумішшю міді та заліза з товщиною обмазки 25 мкм призводило до формування незначної кількості кубічної β - фази Al(Cu, Fe) із структурним типом CsCl [3] (рис. 1, а). Значення мікротвердості H_r при цьому у зоні легування зросло у півтора-два рази у порівнянні з вихідним її значенням, яке складало близько 100 МПа (рис. 2). При цьому розподіл значень H_r в зоні лазерного легування (ЗЛЛ) був нерівномірним як за глибиною зони, так і вздовж поверхні. Збільшення товщини обмазки до 60 мкм призводило до формування окрім β -фази ще й квазікристалічної ψ -фази (рис. 1, б), що співпадає з даними, наведеними в [3,8,10]. Формування ψ -фази проявилось в різкому зростанні значень мікротвердості в приповерхневих шарах

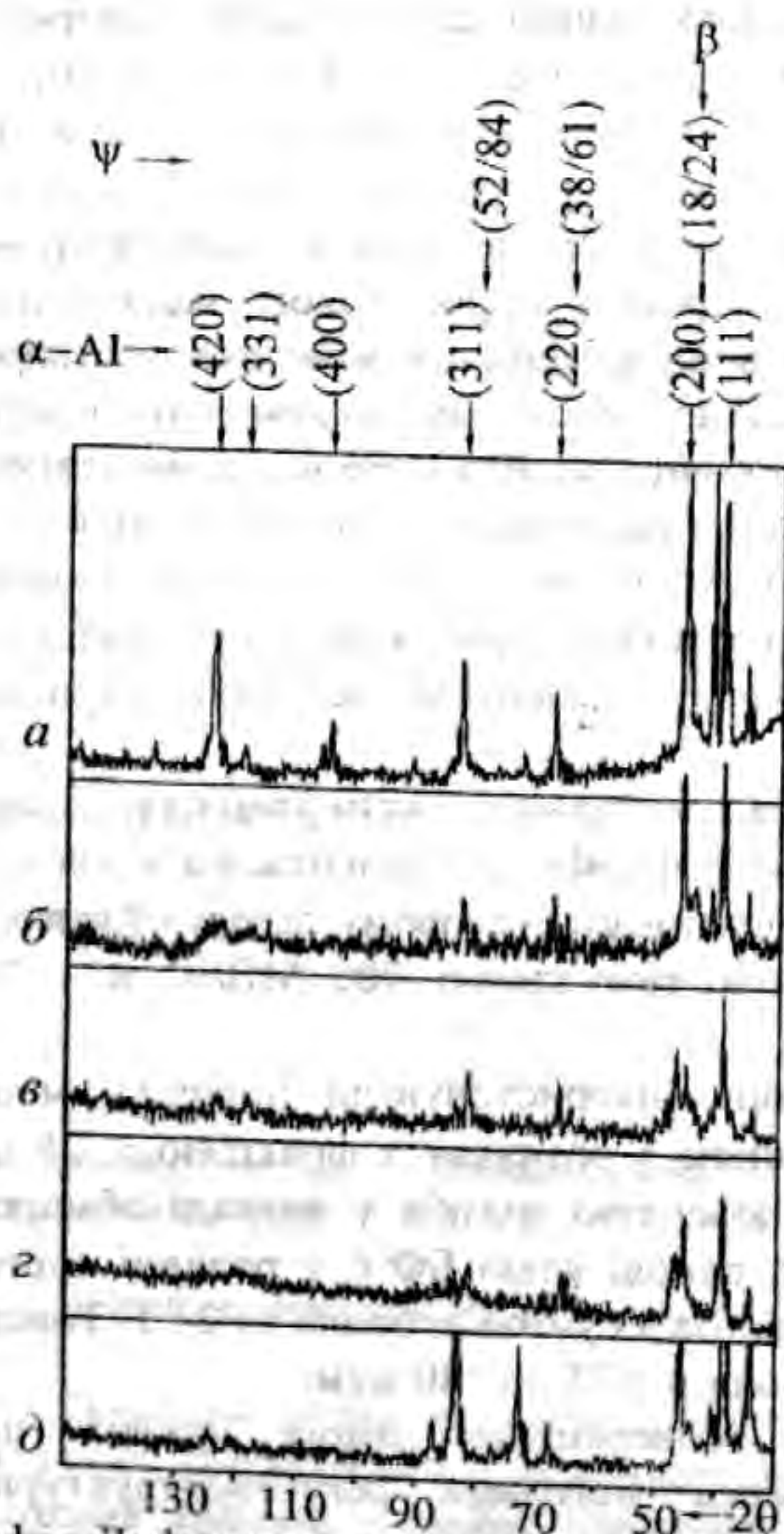


Рис.1. Дифрактограми від поверхневих шарів А8 після лазерного легування міддю та залізом з товщиною обмазки: 25 мкм (а), 60 мкм (б), 100 мкм (в), 110 мкм (г), 180 мкм (д).

на те, що при такій товщині обмазки алюмінієва матриця не встигала розплавитися в достатній мірі.

Металографічно встановлено, що під час легування в поверхневих шарах усіх зразків формувалися макродефекти у вигляді пор з формою близькою до сферичної з розмірами від 3 до 60 мкм (рис. 3). Наявність такого типу дефектності ЗЛЛ є характерною для лазерної обробки алюмінію в режимах оплавлення [2]. В поверхневих шарах усіх зразків, де рентгенографічно фіксувалася квазікристалічна фаза, спостерігались поодинокі тріщини, що обумовлено, очевидно, істотною різницею

(~ 30 мкм) до 2500 МПа. Лазерне легування з товщиною обмазки 100 мкм призводило до зростання інтенсивності ліній β-фази. Розподіл мікротвердості за глибиною ЗЛЛ виявився подібним до розподілу в зразку з товщиною обмазки 60 мкм. Збільшення товщини обмазки до 110 мкм викликало подальше зростання інтенсивностей максимумів від ґратки β-фази, причому максимальні значення мікротвердості виявилася приблизно в 10 разів вищими, ніж для алюмінієвої матриці (рис. 2). Лазерне легування з максимально можливою для даного лазера товщиною обмазки (180 мкм) призводило до зростання мікротвердості в поверхневих шарах у два-три рази. На рентгенограмах при цьому фіксувалися відбитки лише від ґраток алюмінію та β-фази, лінії ж квазікристалічної фази не виявлялися. Це вказувало

термічних коефіцієнтів
розширення ψ -фази та
кристалічних фаз [2]. В цих

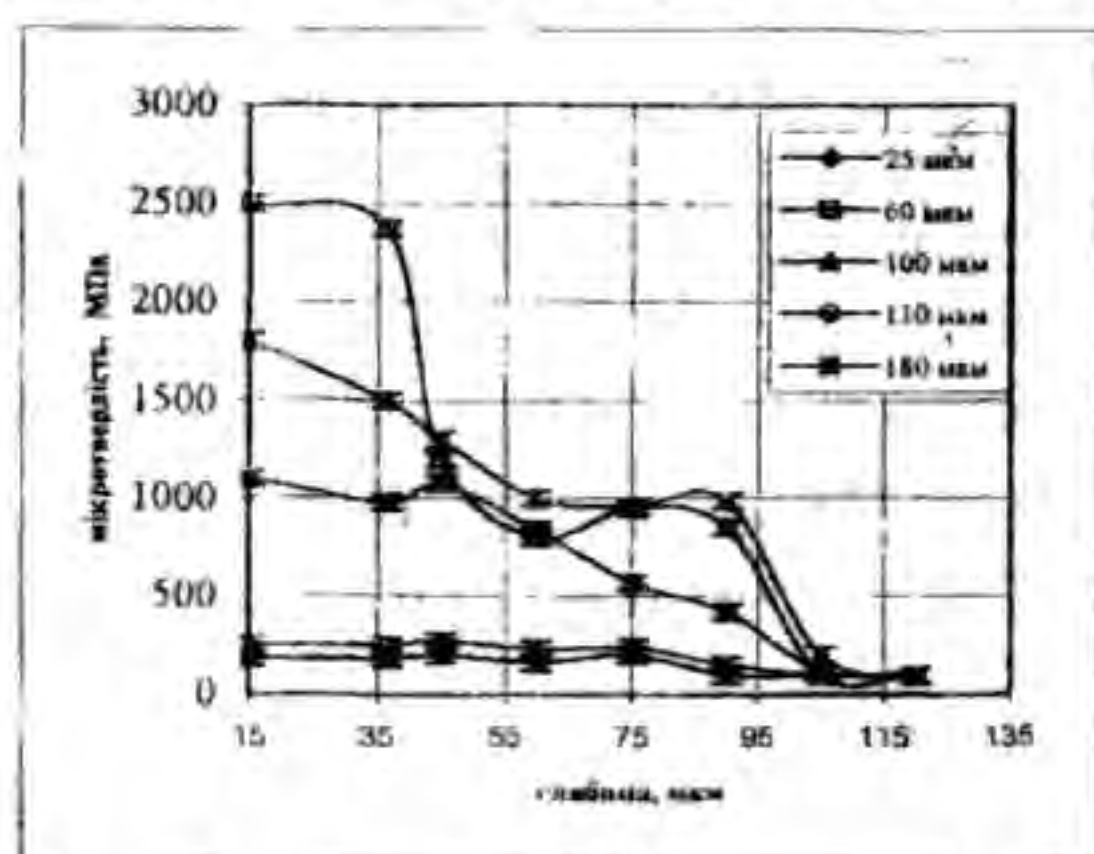


Рис.2. Розподіл мікротвердості за глибиною ЗЛЛ.



Рис.3. Мікроструктура сплаву А8 після лазерного легування з товщиною обмазки 60 мкм.

же зразках в ЗЛЛ фіксувалися точкові та голкоподібні включення, які формувались, переважно, в приповерхневому прошарку.

На зображеннях ЗЛЛ, одержаних у вторинних електронах на растровому електронному мікроскопі, виявлялися всі структурні складові, що спостерігалися металографічно (рис. 4). Окрім того, була виявлена структура придонних ділянок ЗЛЛ (рис. 5) Рентгеноспектральний аналіз поверхневого шару зразків показав нерівномірний розподіл легуючих елементів у ЗЛЛ. Визначення хімічного складу ділянок *a*, *b*, *c*, *d* (рис. 4) в

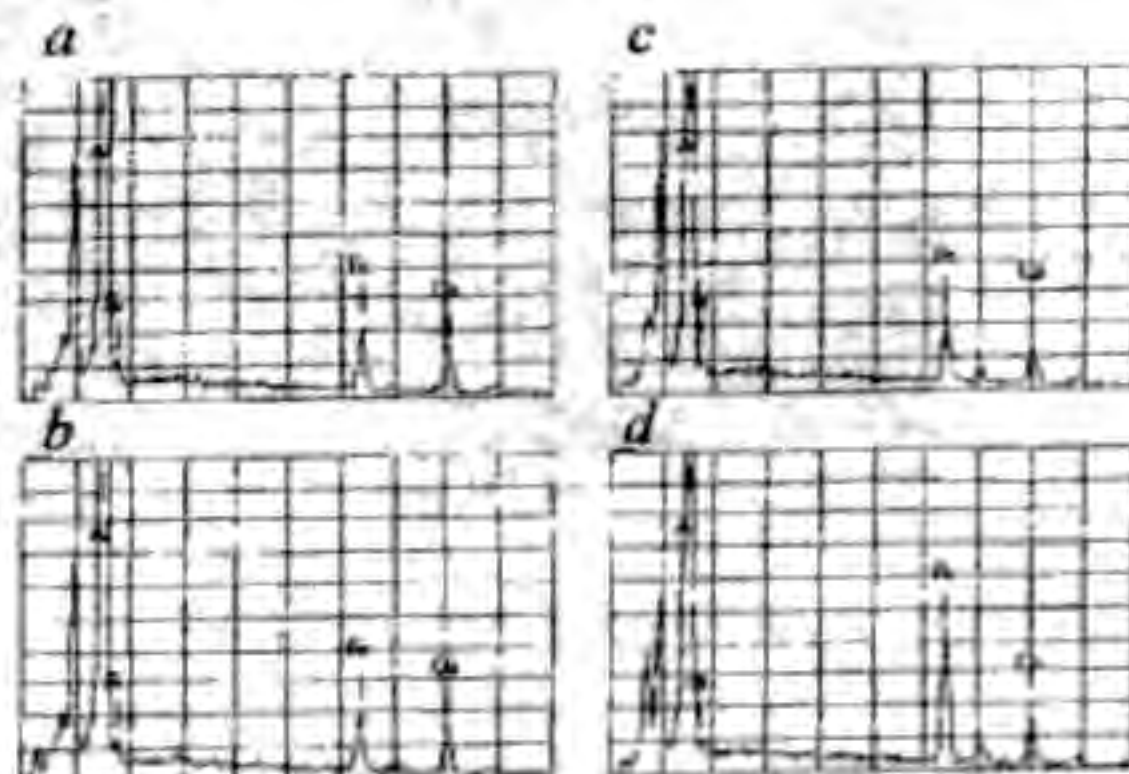


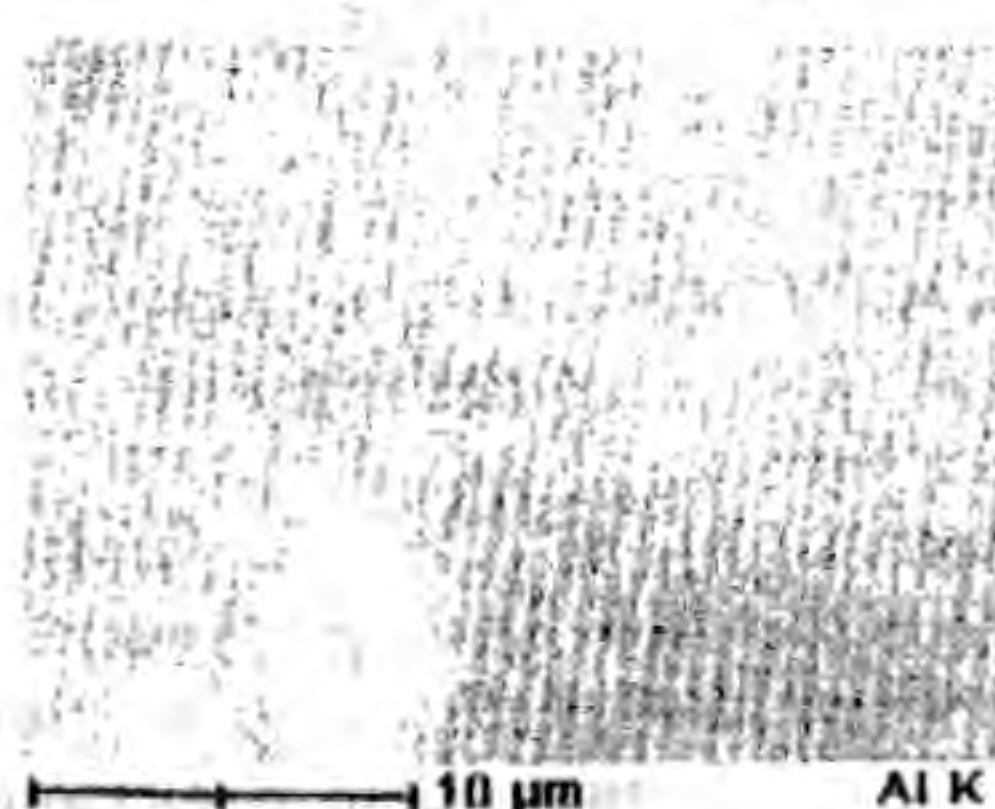
Рис.4. Результати рентгеноспектрального мікроаналізу з поперечного перетину зразку: мікроструктура (а), спектри (б).

ЗЛЛ виконувалося безеталонним методом з урахуванням коефіцієнтів відбивання електронів зонду, поглинання характеристичного

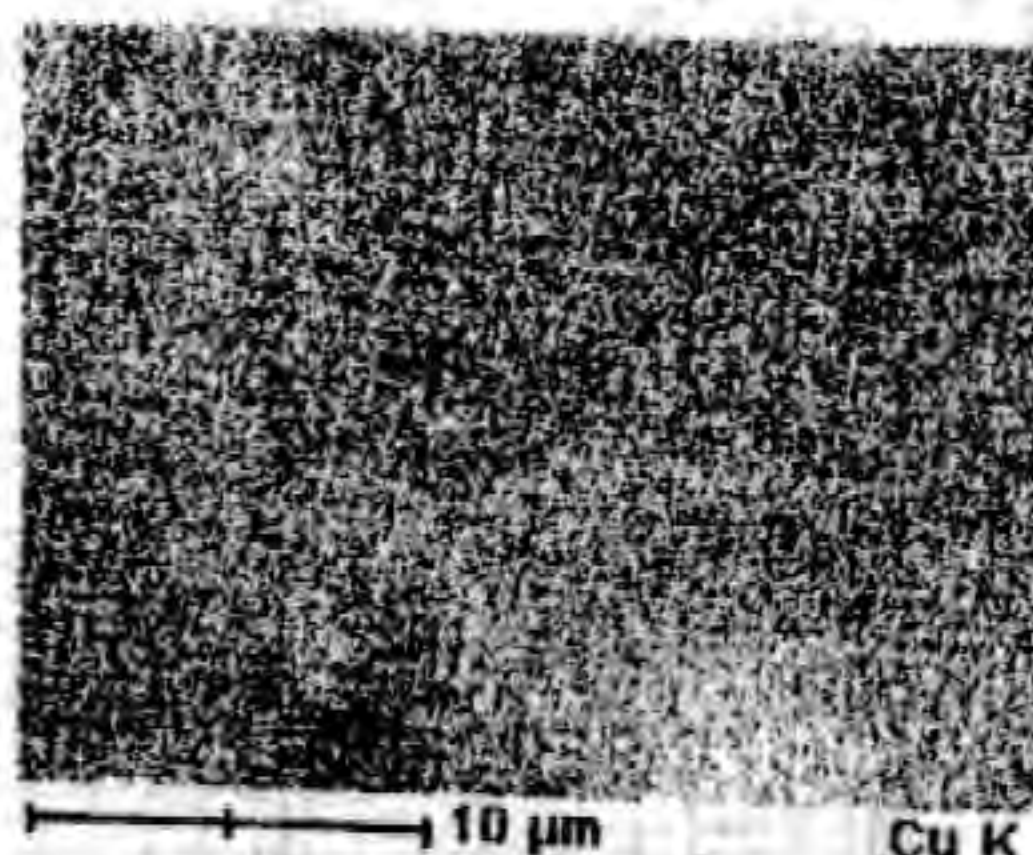
рентгенівського випромінювання та флуоресценції, точність визначення концентрації елементів складала $\sim 0,5$ ат. %. На рентгенівських спектрах спостерігались лінії Al, Cu, Fe та Si. Хімічний склад приповерхневих ділянок *a* та *b* виявився практично однаковим із вмістом міді та заліза - 14% та 8% відповідно. В середній частині ЗЛД (ділянка *c*), вміст міді та заліза був дещо більшим - 15% та 9%. Рентгеноспектральний аналіз придонних ділянок ЗЛЛ показав підвищений вміст заліза, концентрація якого досягала 18 ат. %. При цьому концентрація міді була дещо меншою, ніж у ділянках зразка, близьких до поверхні і складала 12 ат.%. Наявність кремнію в кількості ≤ 2 ат.% в усіх досліджених ділянках зразка була, ймовірно, обумовлена забрудненнями, внесеними шліфувальним порошком.



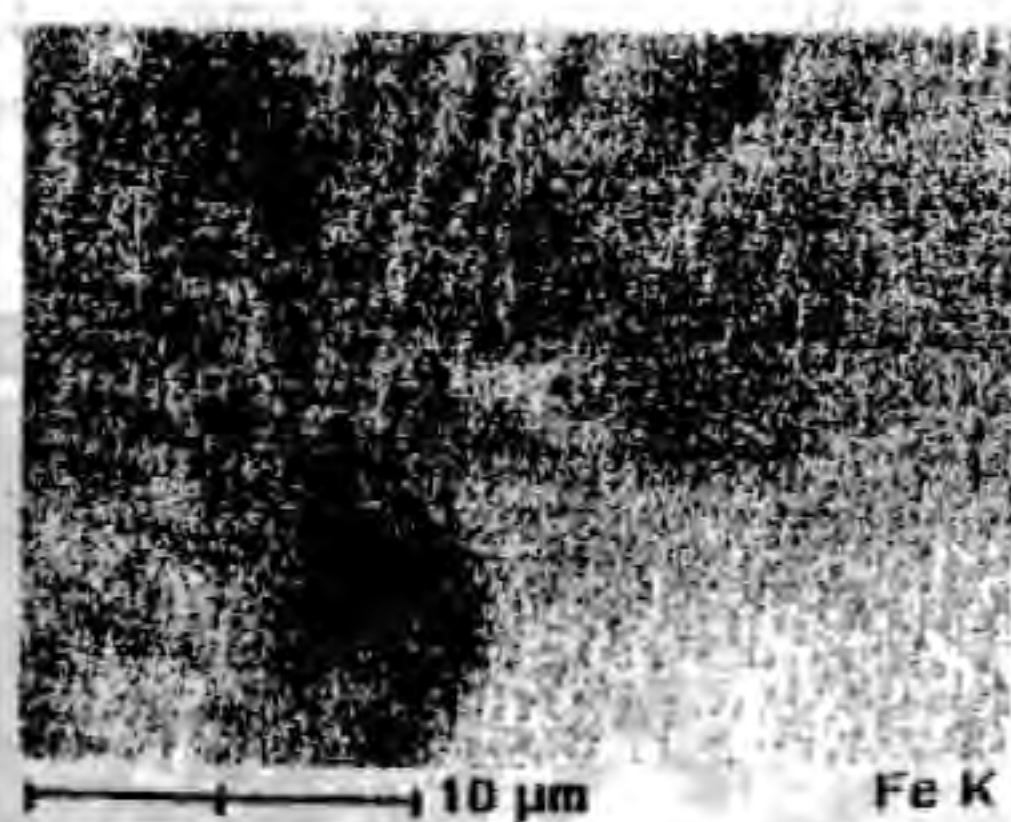
a



b



c



d

Рис.5. Мікроструктура та зображення придонної ділянки ЗЛЛ в характеристичному рентгенівському випромінюванні елементів сплаву.

На зображеннях придонної ділянки ЗЛД в характеристичному рентгенівському K_{α} -випромінюванні компонентів сплаву (рис. 5, *b-d*)

видно нерівномірний розподіл алюмінію та заліза між структурними складовими при відносно рівномірному розподілі міді. Так, світлі дендритні та точкові зерна, збагачені залізом, концентрація якого складала ≈ 20 ат.%, вміст міді складав ≈ 10 ат.%, а в міждендритних областях концентрація міді перевищувала концентрацію заліза.

Рентгеноспектральний аналіз приповерхневих шарів ЗЛД показав, що відношення концентрацій міді до заліза в голкоподібних включення складає приблизно 1,5, в той час, як у областях між голками це відношення досягає 1,8. Враховуючи те, що співвідношення між концентраціями міді та заліза в ψ фазі є близьким до 2, та виходячи з даних рентгенівського фазового аналізу можна стверджувати, що голкоподібні включення являють собою β -фазу, а матриця в якій знаходяться ці включення складається з квазікристалічної ψ -фази та ГЦК фази алюмінію.

Одержані результати знаходять пояснення, якщо припустити неодноразовість плавлення легуючих компонентів та алюмінієвої підкладки. Так, на першому етапі імпульсного лазерного нагріву відбувається розплавлення міді, як більш легкоплавкого компонента у порівнянні із залізом. Утворений розплав, взаємодіючи з підкладкою, насичується алюмінієм. При цьому густина розплаву зменшується так, що стає меншою від густини порошків. В результаті утворюється мідно-алюмінієвий розплав із зануреними в нього порошинками заліза, які на цьому етапі нагріву розподіляться рівномірно за глибиною ванни розплаву. У подальшому порошинки заліза рухаються вниз, до дна зони оплавлення і одночасно відбувається їх розчинення. Таким чином нижня частина ванни розплаву, збагачується залізом. Груба оцінка переміщення часток заліза у розплаві, яке було обумовлене їх більшою густиною, за час дії імпульсу (4 мс) дала величину близьку до 40 мкм, тобто співрозмірну з глибиною ЗЛЛ.

Кристалізація ванни розплаву після завершення нагріву лазерним імпульсом починалася із дна ЗЛЛ. При цьому в, першу чергу, відбувалося формування збагачених залізом більш тугоплавких фаз, що узгоджується з рівноважними діаграмами стану. Відзначимо, що в даній роботі, рентгенографічно встановлювався фазовий склад лише поверхневих шарів ЗЛЛ, тому, очевидно, що фазовий склад більш віддалених від поверхні прошарків з іншим хімічним складом може істотно відрізнитись.

Аналіз розподілу компонентів за глибиною ЗЛЛ показав, що сумарне відношення концентрацій міді до заліза виявилось меншим, ніж 2 : 1, тобто явно спостерігається недостача міді в зоні легування. Тоді можна припустити, що із-за більш раннього розплавлення міді (у порівнянні із залізом) вона досить легко видаляється із зони лазерної плями розжареними продуктами вигорання клейової основи обмазки.

Виходячи з викладених міркувань та враховуючи обмежену концентраційну область існування квазікристалічної фази, можна висунути

припущення, що варіація співвідношень між концентраціями міді та заліза в суміші порошків може дати можливість регулювання як товщиною прошарку ЗЛЛ із вмістом ψ -фази, так і глибиною його розтанування від поверхні.

ВИСНОВКИ

1. Показано можливість формування в поверхневих шарах алюмінію квазікристалічної фази за допомогою імпульсного лазерного легування, що призводить до 25-кратного зростання мікротвердості поверхневих шарів ЗЛЛ.
2. При лазерному модифікуванні сплаву А8 міддю та залізом концентрація заліза зростає із глибиною ЗЛЛ, що обумовлено значною різницею між температурами плавлення міді та заліза в прошарку легуючого порошку. Це дає можливість за допомогою зміни співвідношення легуючих компонентів, змінювати глибину залягання прошарку в ЗЛЛ із сприятливим для утворення квазікристалічної фази хімічним складом.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Мирови́ченко И. С. Закалка из жидкого состояния. - М.: Металлургия, 1982.
2. Борисов Ю.С., Борисова А.Л., Адсєва Л.І., та ін. Газотермічні покриття, що містять квазікристалічну фазу, властивості і застосування // Фізика і хімія твердого тіла. - 2005. - Т. 6, №1 - с. 124-136.
3. Яковлев В.А., Новикова Н.Н., Матеи Дж. и др. Спектры отражения и оптические постоянные тонких квазикристаллических пленок Al-Cu-Fe в инфрокрасной области // Физика твердого тела. - 2006. - Т. 48, вып.5 - с. 583-587.
4. Sanche A., Garcia de Blas F.J., Algaba I.M. et al. Application of quasicrystalline materials as thermal barriers in aeronautics and future perspectives of use for these materials // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. - 1999. - 553. - p. 447 - 458.
5. Dubois J.-M. New prospects from potential applications of quasicrystalline materials // Materials Science and Engineering. - 2000. - 249-296. - p. 4 - 9.
6. Ажажа В.М., Борисова С.С., Дуд С.Н. и др. Механическое напряжение Ti-Zr-Ni - квазикристаллов при наноиндентировании // Физика твердого тела. - 2005. - Т. 47, вып.12 - с. 2170-2175.
7. Панова Г.Х., Черноплеков Н.А., Шиков А.А. Теплоемкость и сопротивление икосаэдрического сплава $Zr_{70}Pd_{30}$ и его аморфного и кристаллического аналогов // Физика твердого тела. - 2005. - Т. 47, вып.7 - с. 1165-1169.
8. Устинов А.И., Мовчан Б.А., Полищук С.С. Получение квазикристаллических покрытий из сплава Al-Cu-Fe электронно -

The first part of the paper is devoted to a general discussion of the problem. It is shown that the problem is of great importance in the theory of the structure of the atom. The second part is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The third part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The fourth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The fifth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The sixth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The seventh part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The eighth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The ninth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The tenth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The eleventh part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The twelfth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

The thirteenth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom. The fourteenth part of the paper is devoted to a detailed analysis of the results of the experiments of Rutherford and his colleagues. It is shown that the results of these experiments are in good agreement with the theory of the structure of the atom.

УДК 535.3

Віктор В.Гоженко, канд. техн. наук,
Юлія С.Гончарук, аспірант,
Леонід Г. Гречко, доктор. ф.-м. наук,
Любов Ю.Куницька, пров. інж.

Victor V.Gozhenko Ph.D.,
Yulia S.Goncharuk, post gradient student,
Leonid G. Grechko, Dr. Sc.,
Lyubov Yu.Kunitska, basis engineer.

Поверхневі моди малих частинок межі розділу фаз.

Surfaces modes of small particles in border of faze division

Розглянуто електродинамічний відгук на зовнішнє електричне поле системи малих частинок (наночастинок) над поверхнею твердого тіла. Розраховано і проаналізовано вплив поверхні на поляризованість окремої частинки. Визначені частоти поверхневих мод такої частинки та знайдені відповідні їм сили осциляторів

Electrodynamics' responses of a system of small particles (nanoparticles) on surfaces of solid are considered. The influence of surface to the polarizability of individuality particles is calculated and analyze. Surfaces modes of the particle are determinate and correspondent forces of oscillators are founded/

Ключові слова: наночастинок, поляризованість, поверхневі моди, діелектрична проникність

Key words: nanoparticles, polarizability, surfaces modes, permittivity

E-mail: user @ surfchem.freenet.kiev.ua)

1. Вступ. Вивчення процесів взаємодії електромагнітного випромінювання (ЕМВ) з системами частинок на межі розділу фаз (підкладка) стимулюється, в першу чергу, можливістю дослідження структури таких систем за допомогою оптичної спектроскопії поглинання та розсіяння випромінювання ЕМВ. При цьому варто зауважити, що частинки на підкладці можуть мати властивості, які значно відрізняються від властивостей вільних частинок [1,2].

У загальному випадку на характеристики спектрів (висоту, ширину та положення піків) впливають декілька факторів. Ті з них, що розглядаються в класичній (не квантової) теорії, зручно об'єднати в три групи, що відповідають трьом типам взаємодії в системі часток на підкладці. Перелічимо ці взаємодії в порядку зменшення їх інтенсивності і, відповідно, впливу на спектри частинок.

По-перше, це взаємодія частинок із зовнішнім електромагнітним полем. Ця взаємодія обумовлена тільки характеристиками самих частинок – їхньою формою, розміром, структурою (наявність оболонок, додаткових шарів тощо) та властивостями матеріалу, з якого вони виготовлені.

По-друге - міжчастинкова взаємодія. Вона обумовлена характером просторового розподілу частинок (щільний чи розріджений розподіл; для частинок несферичної форми має значення також характер їх просторової орієнта-

ції: чи є вона упорядкованою чи хаотичною, а також характером розподілу їх по розмірах (моно- чи полідисперсний розподіл).

І по-третє – це взаємодія частинок з підкладкою, яка визначається комбінацією матеріалів частинок і підкладки, зокрема, їх діелектричним проникностями і відстанню частинок від підкладки.

Поява, наприклад, смуг інтенсивного поглинання в тих ділянках спектра частинок, у яких ці смуги не спостерігаються для відповідного об'ємного матеріалу, добре пояснюється на основі теорії Мі розсіювання світла кулею [1]. Згідно з цією теорією, інтенсивне поглинання електромагнітного випромінювання сферичними частинками пов'язано зі збудженням поверхневих мод електромагнітним полем світлової хвилі. З теорії Мі витікає, що для сферичних частинок, виготовлених з благородних металів, найнижча (фр'юліхівська) частота поверхневих плазмонів дорівнює (див., наприклад, [2]) $\omega_p = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}$,

($\omega_p = \sqrt{ne^2 / (\epsilon_0 m)}$ – плазмова частота для матеріалу частинки, e, m – відповідно заряд і маса електрона, n – концентрація вільних електронів у металі).

Міжчастинкова взаємодія і взаємодія частинок з підкладкою призводять до модифікації одночастинкових спектрів, яка виявляється звичайно (для не дуже щільних систем частинок) у вигляді незначного зсуву і зміни висоти одночастинкових піків. При ущільненні просторового розподілу частинок кількісні зміни в їх спектрах зростають.

Через складність самого об'єкта дослідження (системи часток на підкладці) при поясненні тих чи інших експериментальних даних часто проводять теоретичний розгляд деякої спрощеної моделі і не враховують вплив певних факторів чи навіть усіх факторів певної групи. Наприклад, часто розглядають модельну систему, що являє собою плоский розподіл частинок без підкладки [3] або ж єдину частинку на напівнескінченній підкладці [4]. Так, у випадку розрідженого розподілу частинок можна не брати до уваги міжчастинкову взаємодію і розглядати модель однієї частинки на підкладці. У випадку ж щільного розподілу частинок для реалістичного опису експериментальних даних потрібно враховувати як міжчастинкову взаємодію, так і взаємодію частинок з підкладкою.

В другому розділі роботи приведено загальні формули [10] для розрахунку потенціалу в системі кульових частинок над підкладкою. Із знайдених виразів, в третьому розділі, знайдено поляризованості двох куль над поверхнею підкладки. У випадку однієї кулі над підкладкою в наближенні Лоренцівських частотних залежностей діелектричної проникливості кулі і поверхні отримано вирази для частот і сил осциляторів поверхневих мод частинки. Проведено аналіз оптичної активності (величина сил осциляторів) цих мод.

2. Вихідні рівняння. При теоретичному вивченні процесів електродинамічної взаємодії частинок з поверхнею твердих тіл зручно починати з розгляду найпростішої модельної системи, апроксимуючи частинки кулями відповідного розміру. Маючи на увазі застосування теорії до задач оптичної

спектроскопії систем наночастинок на підкладці, ми розглядаємо модельну систему однорідних ізотропних нанорозмірних куль поблизу підкладки. При цьому підкладка розглядається як напівнескінченний діелектрик із залежною від частоти ефективною діелектричною функцією. Така модель є корисною при розгляді багатьох реальних систем, що зустрічаються в різних галузях науки і техніки – наприклад, матричних дисперсних систем (МДС), колоїдів (у тому числі й біологічних).

Оптичні властивості малих частинок поблизу підкладки (розмір яких набагато менший за довжину хвилі електромагнітного випромінювання оптичного діапазону) можуть бути знайдені в електростатичному наближенні на основі теорії електростатичного відгуку системи сферичних частинок поблизу поверхні [10]. Наведемо основні результати цієї теорії.

Нехай ε_i , ε_a та ε_s є відносні діелектричні проникності відповідно i -ї сферичної частинки ($i = \overline{1, N}$), оточуючого середовища (ambient) та підкладки (рис. 1). Потенціал ψ результуючого поля, яке встановлюється в системі після включення зовнішнього поля E_0 , повинен задовольняти рівнянню Лапласа

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

всередині областей оточуючого середовища (область a), i -ї кулі (область i) та підкладки (область s), а також стандартним граничним умовам

$$\psi^u = \psi^v, \varepsilon_u \frac{\partial \psi^u}{\partial n_u} = \varepsilon_v \frac{\partial \psi^v}{\partial n_v} \quad (2)$$

на межі цих областей.

В рівняннях (2) ε_u – діелектрична проникність речовини, що заповнює область u ($u = a, i, s$), ψ^u – потенціал результуючого поля в області u , а символом σ_{uv} позначено спільну межу поділу областей u та v . Використовуючи принцип суперпозиції, мультипольний розклад потенціалу та ідеї методу зображень, розв'язок крайової задачі (1)-(2) можна шукати у вигляді

$$\psi^a = \psi_{\text{ext}}^a + \psi_{\text{sc}}^a + \psi_{\text{ind}}^a = -E_0 \mathbf{r} + \sum_{ilm} A_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}_i) + \sum_{ilm} A'_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}'_i) \quad (3)$$

$$\psi^i = \sum_{ilm} B_{ilm} G_{lm}(\mathbf{p}_i), \quad (4)$$

$$\psi^s = \psi_{\text{ext}}^s + \psi_{\text{ind}}^s = -E'_0 \mathbf{r} + \psi_0^s + \sum_{ilm} C_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}'_i), \quad (5)$$

де $\psi_{\text{ext}}^a = -E_0 \mathbf{r}$ та $\psi_{\text{ext}}^s = -E'_0 \mathbf{r} + \psi_0^s$ – потенціал зовнішнього поля E_0 в оточуючому середовищі та всередині підкладки відповідно; E'_0 – напруженість зовнішнього поля всередині підкладки ($E'_0 \neq E_0$ внаслідок "заломлення" силових ліній на межі підкладки); ψ_0^s – сталий внесок до потенціалу ψ_{ext}^s обумовлений вибором початку відліку координат; $\psi_{\text{sc}}^a = \sum_i \psi_i^a = \sum_{ilm} A_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}_i)$ – внесок до потенціалу ψ^a , обумовлений полем індукованих зарядів усіх частинок; $\psi_{\text{ind}}^a = \sum_{ilm} A'_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}'_i)$ – внесок індукованих зарядів підкладки; $\psi_{\text{ind}}^s = \sum_{ilm} C_{ilm} F_{lm}(\mathbf{p}'_i)$ –

внесок до ψ^s від усіх індукованих зарядів (частинок та підкладки разом); $F_{lm}(\mathbf{r}) \equiv r^{-(l+1)} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ та $G_{lm}(\mathbf{r}) \equiv r^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ – кульові гармоніки, регулярні, відповідно, на нескінченності та в нулевій; $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ – сферична функція, нормована стандартним чином [11,12]; $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ – одиничний вектор в напрямку $\mathbf{r}$; $\mathbf{p}_i \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}_i$ – радіус-вектор точки спостереження відносно центру i -ї кулі, $\mathbf{p}'_i \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}'_i$ – радіус-вектор точки спостереження відносно зображення центру i -ї кулі; $\mathbf{r}_i$ – радіус-вектор центру i -ї кулі; $\mathbf{r}'_i$ – радіус-вектор зображення центру i -ї кулі.

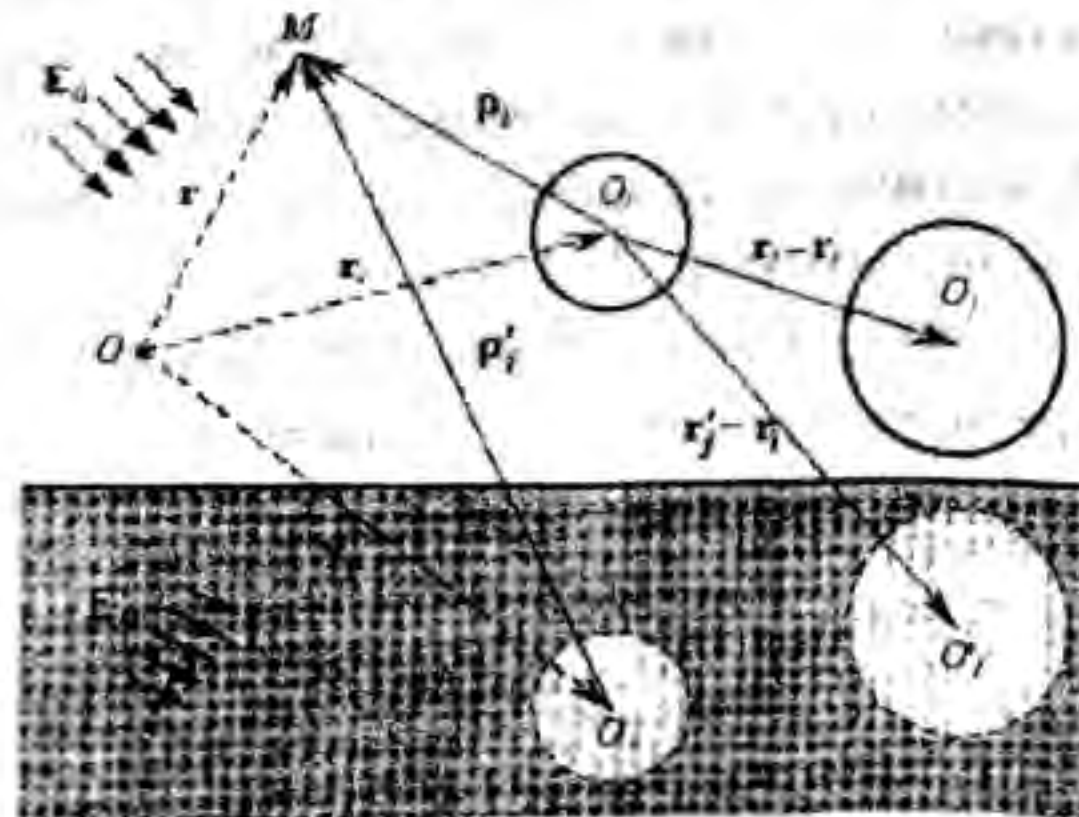


Рис.1. Частинки над підкладкою, їх зображення та векторний опис системи

Підстановка розкладів (3)- (5), в граничні умови (2) приводить до співвідношень:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0^{\perp} &= \mathbf{E}_0^{\perp}, & E_{0z}^s &= \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_s} E_{0z}, & \psi_0^s &= \left(1 - \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_s}\right) E_{0z} h_0, \\ A_{ilm}^s &= (-1)^{l+m} \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_s}{\varepsilon_a + \varepsilon_s} A_{ilm}, & B_{ilm} &= f(A_{ilm}), & C_{ilm} &= \frac{2\varepsilon_a}{\varepsilon_a + \varepsilon_s} A_{ilm}, \end{aligned} \quad (6)$$

та рівняння для знаходження мультипольних коефіцієнтів A_{ilm}

$$\sum_{ilm} \{ \delta_{ilm} + K_{ilm} \} A_{ilm} = U_{ilm}, \quad (7)$$

$$\text{де} \quad K_{ilm} \equiv \alpha_{jl} T_{lm}^{ilm} \left[F_{LM}'(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + (-1)^{l+m} \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_s}{\varepsilon_a + \varepsilon_s} F_{LM}(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j) \right], \quad (8)$$

$$a_{il} \equiv \frac{l(\varepsilon_s - \varepsilon_a)}{l\varepsilon_s + (l+1)\varepsilon_a} R_i^{2l+1}, \quad (9)$$

$$T_{lm}^{ilm} \equiv (-1)^{l+m} \left[4\pi \frac{(2l+1)}{(2l_1+1)(2L+1)} \times \frac{(L+M)!(L-M)!}{(l+m)!(l-m)!(l_1+m_1)!(l_1-m_1)!} \right]^{1/2},$$

$$L \equiv l + l_1, \quad M \equiv m - m_1 \quad (l_1 = 0, \infty, \quad m_1 = -l_1, l_1),$$

$$F_{lm}'(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \equiv \begin{cases} F_{lm}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), & i \neq j \\ 0, & i = j \end{cases} \quad (10)$$

$$U_{im} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} a_{im} E_0^m \delta_i^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\epsilon_i - \epsilon_a}{\epsilon_i + 2\epsilon_a} V_i E_0^m \delta_i^1, \quad (11)$$

$V_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3$ є об'єм i -ї кулі, а h_0 – відстань початку координат від поверхні підкладки.

Рівняння (7) пов'язує A_{im} з величинами K_{jlm} та U_{im} , які визначаються лише параметрами $\epsilon_a, \epsilon_s, \epsilon_i, R_i, r_i$ та E_0 . Коефіцієнти A_{im} можуть бути знайдені з цього рівняння, коли задані характеристики оточення, підкладки, частинок, величина та напрямок зовнішнього поля.

3. Вплив взаємодії з підкладкою на оптичні властивості частинок. Розглянемо систему двох сферичних частинок, розташованих поблизу підкладки таким чином, що лінія центрів куль напрямлена по нормалі до підкладки (рис. 2). В частинних випадках ця система зводиться до системи двох куль (над підкладкою) (рис. 2,а) та кулі над підкладкою (рис. 2,б).

В цьому випадку можна отримати з (7) вираз для (mm_1) -ї циклічної координати тензора поляризованості $\hat{\alpha}_i$ i -ї кулі:

$$\alpha_{im_1}^m = 4\pi a_{i1} \frac{1 + (-1)^m \eta_m \frac{a_{i1}}{d^3} + \Delta_{im}}{1 - \eta_m^2 \frac{a_{11}a_{21}}{d^6} + \Delta_m} \delta_{m_1}^m, \quad (12)$$

де $\eta_m = \begin{cases} 1, & m = \pm 1 \\ 2, & m = 0 \end{cases}$, $\Delta_{im} = H_m a_{i1} \left[\frac{1}{(h_1 + h_2)^3} - \frac{1}{(2h_i)^3} \right]$, $H_m = \eta_m \frac{\epsilon_s - \epsilon_a}{\epsilon_s + \epsilon_a}$,

$$\Delta_m = H_m^2 a_{11} a_{21} \left[\frac{1}{(2h_1)^3 (2h_2)^3} - \frac{1}{(h_1 + h_2)^6} \right] - H_m \left[\frac{a_{11}}{(2h_1)^3} + \frac{a_{21}}{(2h_2)^3} + (-1)^m \eta_m \frac{2a_{11}a_{21}}{d^3 (h_1 + h_2)^3} \right],$$

а геометричні параметри h_1, h_2 та d визначено на рис.2,а. Величини Δ_{im} та Δ_m являють собою деякі добавки відповідно до чисельника та знаменника тензора $\alpha_{im_1}^m$, які описують вплив підкладки на поляризованість куль та зникають у випадках, коли підкладка відсутня (формально, при $\epsilon_s = \epsilon_a$).

У випадку кулі над підкладкою (рис.2,б), покладаючи в (12) $\epsilon_i = \epsilon_a$ або $d = \infty$ (тобто вважаючи однаковими матеріали однієї з куль та оточуючого середовища, або, альтернативно, віддаляючи одну з куль на нескінченну відстань), знаходимо

$$\alpha_{im_1}^m = 4\pi \frac{a_{i1}}{1 - H_m^2 \frac{a_{11}}{(2h_i)^3}} \delta_{m_1}^m. \quad (13)$$

Перерізи розсіяння та поглинання світла малими частинками поблизу підкладки можна розрахувати на основі виразу (13), використовуючи формули

$$C_{\text{ра}} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2, \quad C_{\text{аб}} = k \operatorname{Im} \alpha, \quad (14)$$

де $k \equiv 2\pi/\lambda$ – хвильове число падаючої хвилі, а резонансні частоти ω_{res} знаходяться з умови нескінченного зростання поляризованості при резонансі:

$$\alpha(\omega_{\text{res}}) = \infty. \quad (15)$$

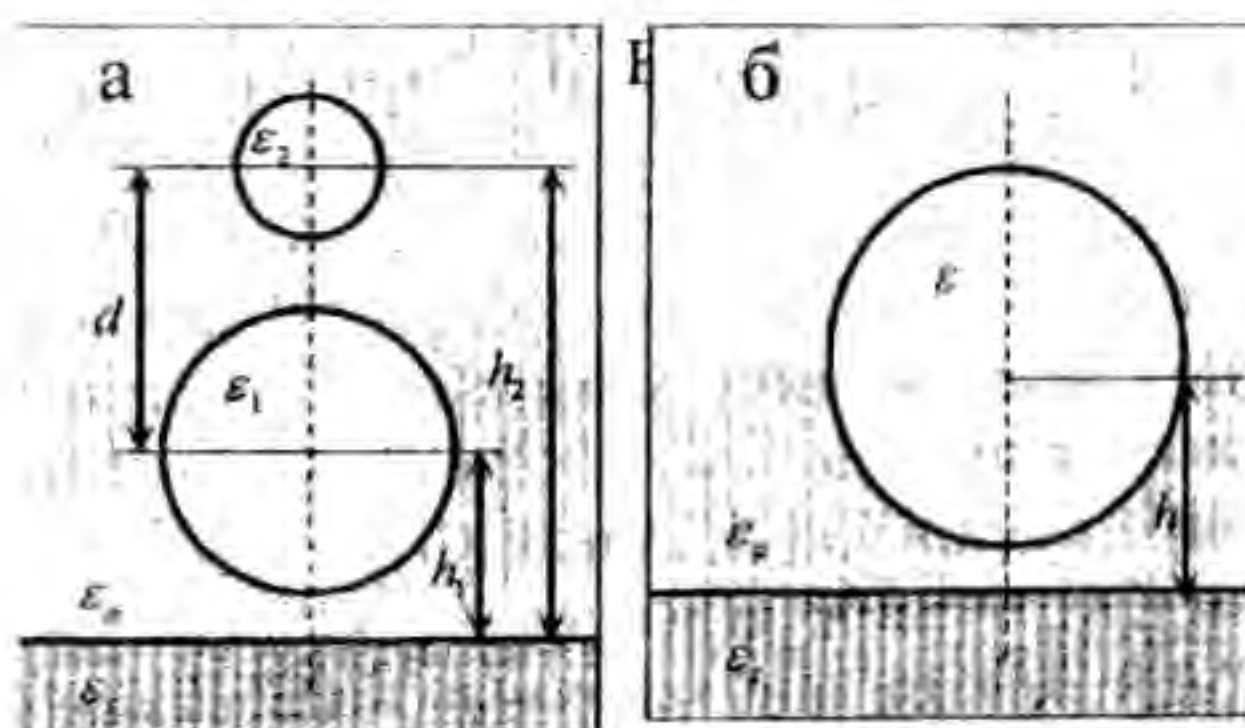


Рис.2. Система двох та однієї частинки поблизу поверхні

Для подальшого зручно записати тензор $\hat{\alpha}$ у вигляді

$$\alpha_{mn}^{\text{res}} = R^3 \frac{(\varepsilon - \varepsilon_s)(\varepsilon_s + \varepsilon_a)}{(\varepsilon + 2\varepsilon_s)(\varepsilon_s + \varepsilon_a) - \eta_m \left(\frac{R}{2h} \right)^3 (\varepsilon - \varepsilon_s)(\varepsilon_s - \varepsilon_a)} \delta_{mn}^m. \quad (16)$$

Щоб мати можливість аналітично дослідити поведінку $\hat{\alpha}$, будемо вважати, що проникності кулі ε та підкладки ε_s описуються лоренцевими діелектричними функціями

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}, \quad \varepsilon_s(\omega) = 1 + \frac{\omega_{ps}^2}{\omega_{0s}^2 - \omega^2 - i\gamma_s\omega}, \quad (17)$$

а проникність оточення $\varepsilon_a = 1$ (тобто оточенням є вакуум або розріджені гази). Величини ω_p , ω_0 і γ з (16) є відповідно плазмова частота,

власна частота та коефіцієнт затухання для матеріалу кулі, а індексом s позначені ті ж величини для матеріалу підкладки (substrate).

Знайдемо резонансні частоти для кулі поблизу підкладки і проаналізуємо їх поведінку при зміні параметрів системи. Визначаючи резонансну частоту згідно (15) як таку, при якій поляризованість (16) стає нескінченною, а її знаменник, відповідно, перетворюється на нуль, після підстановки проникностей (17) в (16) та деяких перетворень отримаємо наступне алгебраїчне рівняння для визначення резонансних частот:

$$\omega^4 + a_3\omega^3 + a_2\omega^2 + a_1\omega + a_0 = 0, \quad (18)$$

де $a_3 = i(\gamma + \gamma_s), \quad a_2 = -(\tilde{\omega}_0^2 + \tilde{\omega}_{0s}^2 + \gamma\gamma_s),$

$$a_1 = -i(\tilde{\omega}_0^2\gamma_s + \tilde{\omega}_{0s}^2\gamma), \quad a_0 = \tilde{\omega}_0^2\tilde{\omega}_{0s}^2 - x_m \frac{\omega_p^2}{3} \frac{\omega_{ps}^2}{2}, \quad x_m \equiv \eta_m \left(\frac{R}{2h} \right)^3, \quad (19)$$

а $\tilde{\omega}_0^2 \equiv \omega_0^2 + \frac{\omega_p^2}{3}$ та $\tilde{\omega}_{0s}^2 \equiv \omega_{0s}^2 + \frac{\omega_{ps}^2}{2}$ є "зміщеними" квадратами частот ω_0 та ω_{0s} відповідно.

За відсутності затухання рівняння (18) зводиться до біквадратного рівняння з розв'язком

$$(\omega_m^\pm)^2 = \frac{\tilde{\omega}_0^2 + \tilde{\omega}_{0s}^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{\omega}_0^2 - \tilde{\omega}_{0s}^2}{2}\right)^2 + x_m \frac{\omega_p^2 \omega_{ps}^2}{3 \cdot 2}}. \quad (20)$$

Цей досить простий вираз містить в собі інформацію про резонансні частоти кулі і дозволяє, наприклад, прослідкувати за тим, яким чином змінюється положення піка поглинання електромагнітного випромінювання частинкою при наближенні її до підкладки.

Вираз (20) передбачає існування чотирьох позитивних значень резонансної частоти. Дійсно, при кожному фіксованому значенні m ($m=0,1$ або, еквівалентно, $m=\parallel, \perp$) маємо дві резонансні частоти ω_m^+ , ω_m^- , які відповідають різним знакам перед квадратним коренем у (20). Отже, маємо два поздовжніх резонанси ($m=0$) і два поперечних ($m=1$). У загальному випадку зовнішнє поле $\vec{E}_0$, яке орієнтоване довільним чином по відношенню до підкладки і має як поздовжні, так і поперечні компоненти, може збуджувати значні дипольні моменти кулі при чотирьох різних частотах. Поява чотирьох резонансів пов'язана з розщепленням поодинокі кулі (який, наприклад, для металевої кулі визначається частотою Фрьоліха $\omega_p / \sqrt{3}$) внаслідок її дипольної взаємодії з підкладкою.

Аналіз рівняння (20) дозволяє встановити закономірності та картину розщеплення резонансу сферичної частинки поблизу підкладинки (рис. 3).

У загальному випадку різні резонансні моди $\omega_m^\pm$ мають різну оптичну активність: деякі з них можуть спостерігатися експериментально, в той час як інші майже не проявляються. Для аналізу оптичної активності мод $\omega_m^\pm$ зручно використовувати вирази для сили їх осциляторів. Ці вирази в наближенні нульового затухання виводяться з частотної залежності поляризованості кулі поблизу підкладки, зведеної до лоренцевої форми

$$\alpha_m^{\pm}(\omega) = R^3 \frac{\omega_p^2}{3} \left\{ \frac{f_m^+}{(\omega_m^+)^2 - \omega^2} + \frac{f_m^-}{(\omega_m^-)^2 - \omega^2} \right\}, \quad (21)$$

де

$$f_m^+ \equiv \frac{(\omega_m^+)^2 - \tilde{\omega}_{0s}^2}{(\omega_m^+)^2 - (\omega_m^-)^2}, \quad f_m^- \equiv \frac{\tilde{\omega}_{0s}^2 - (\omega_m^-)^2}{(\omega_m^+)^2 - (\omega_m^-)^2}, \quad (22)$$

З огляду на тотожність $f_m^+ + f_m^- \equiv 1$ величини f_m^+ та f_m^- інтерпретуються як сили осциляторів мод ω_m^+ та ω_m^- відповідно.

для паралельної складової електричного поля E_0 . У виразах (24) і (25) $d = h + R$ - це відстань від центра частки до підкладки, а R - радіус частки. Використовуючи ці співвідношення після деяких перетворень одержуємо співвідношення для розрахунку ефективності поглинання (Q_{abs}) і ефективності розсіювання (Q_{scat}) p -поляризованого випромінювання, що падає на підкладку (кут падіння Θ) і частинку

$$Q_{abs} = \frac{k}{\pi R^2} \sqrt{\text{Im}^2 \left[|1 + r_p| \sin \Theta \alpha_{\perp} \right] + \text{Im}^2 \left[|1 - r_p| \cos \Theta \alpha_{\parallel} \right]}, \quad (26)$$

$$Q_{scat} = \frac{k^4}{6\pi^2 R^2} \sqrt{\left[|1 + r_p| \sin \Theta \alpha_{\perp} \right]^2 + \left[|1 - r_p| \cos \Theta \alpha_{\parallel} \right]^2}, \quad (27)$$

де $k = 2\pi/\lambda$, r_p - амплітудний френелівський коефіцієнт відображення випромінювання від поверхні [1] для p -поляризованого випромінювання. Формули (24)-(27) дають змогу розв'язувати задачу взаємодії випромінювання з малою часткою над підкладкою і дозволяють (чисельно) розраховувати частотні залежності $Q_{abs}(\omega)$ і $Q_{scat}(\omega)$ для різноманітних конкретних систем.

Відзначимо, що результати стосовно розщеплення резонансу кулі поблизу підкладки були одержані нами в дипольному наближенні з використанням лоренцевих діелектричних функцій в наближенні нульового згасання. Якщо в деяких випадках немає потреби в аналітичних результатах, то оптичні властивості кулі можна обчислювати на основі виразу (16) для тензора поляризованості. Сам по собі вираз (16) не передбачає ніяких обмежень на вигляд діелектричних проникностей ε , ε_a та ε_s , тому в чисельних розрахунках можна використовувати реалістичні вирази для проникностей.

4. Висновки. На підставі розробленої нами загальної теорії взаємодії малих частинок з різноманітними поверхнями (у тому числі біологічними) можна стверджувати, що ця мультипольна взаємодія виникає лише в присутності зовнішнього електричного поля і вона приводить до зміни електродинамічних властивостей як частинок, так і поверхні – перерозподілу зарядів, зсуву положення піків і зміни інтенсивності поглинання електромагнітного випромінювання системою частинок на поверхні. При цьому характер зміни процесів поглинання, як частинками, так і поверхнею залежить від електродинамічних параметрів поверхні і частинок (ефективні діелектричні проникності, фізико-хімічний стан поверхні і т.д.). Наприклад, це дає можливість здобувати інформацію про фізичні і хімічні параметри поверхні на підставі аналізу оптичних спектрів адсорбованих на ній частинок.

З виразу для резонансних частот модельної системи «діелектрична куля на діелектричній підкладці у вакуумі» маємо, що в зовнішньому полі має місце зміщення і розщеплення резонансної частоти поглинання малою частинкою залежить від напрямку зовнішнього поля. Виходячи з цього, можна стверджувати, що моношар малих часток на підкладці має анізотропні діелектричні властивості. Відзначимо, що вирази (15-18) дозволяють розраховувати поляризованості для випадку малої частки на поверхні біологічної мем-

брани, якщо відома частотна залежність діелектричної функції цієї мембрани. Знайдена поляризованість дозволяє оцінити перерізи розсіювання і поглинання електромагнітного випромінювання частинкою, розміщеною поблизу мембрани, а з виразу для потенціалу кулі можна знайти розподіл поверхневого заряду на мембрані, що може бути суттєвим при вивченні процесів життєдіяльності клітин.

Робота виконана в Інституті хімії поверхні НАН України в рамках бюджетного проекту "Супрамолекулярна хімія на межі розділу фаз".

Література

1. G. Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien speziell kolloidaler Metallösungen // Ann. Phys. – 1908. – Vol. 25. – P. 377-445.
2. К. Борен, Д. Хафмен. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 664 с.
3. Zhao L., Kelly K.L., and Schatz G.C. The extinction spectra of silver nanoparticle arrays: influence of array structure on plasmon resonance wavelength and width // J. Phys. Chem. B. – 2003. – Vol. 107, N 30. – P. 7343-7350.
4. Okamoto T. and Yamaguchi I. Optical absorption study of the surface plasmon resonance in gold nanoparticles immobilized onto a gold substrate by self-assembly technique // J. Phys. Chem. B. – 2003. – Vol. 107, N 38. – P. 10321-10324.
5. Grechko L.G., Gozhenko V.V., Malnev V.N., and Whites K.W. Anisotropy of electrical properties of mono-layers of spherical particles located on substrate // Proc. 8th Int. Conf. on Electromagnetics of Complex Media (BIANISOTROPICS 2000). – Lisbon (Portugal). – 2000. – P. 111-114.
6. Grechko L.G., Gozhenko V.V., and Whites K.W. Anisotropy of electrical properties of a layer of spherical particles located near a substrate // Chemistry, Physics and Technology of Surfaces, Issues 4-6. – Kyiv: KM Academia, 2001. – P. 179-185.
7. Gozhenko V.V., Grechko L.G., Goncharuk Yu.S., and Ogenko V.M. Optical properties of metal-composite based thin films // Chemistry, Physics and Technology of Surfaces, Issue 8. – Kyiv: KM Academia, 2002. – P. 221-230.
8. Gozhenko V.V., Grechko L.G., Shkoda N.G., and Whites K.W. Substrate influence on infrared absorption by clusters of small spheres // Proc. 6-th Int. Conf. on Material Science and Material Properties for Infrared Optoelectronics. – Kyiv (Ukraine). – 2002. / In: Proc. SPIE. – 2003. – Vol. 5065. – P. 122-126.
9. Гоженко В.В., Гречко Л.Г., Дмитрук М.Л., Семчук О.Ю. Оптичні властивості малої кулі поблизу підкладки // Фізика і хімія твердого тіла. – 2003. – Т. 4, № 1. – С. 118-122.
10. Gozhenko V.V., Grechko L.G., and Whites K.W. Electrodynamics of spatial clusters of spheres: substrate effects // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68, N 12. – 125422.
11. Джексон Дж. Классическая электродинамика: Пер. с англ. – М.: Мир, 1965. – 702 с.
12. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Л.: Наука, 1975. – 439 с.
13. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами: Пер. с англ. – М.: Изд. иностр. литературы, 1961. – 530 с.
14. Chatterjee K., Banerjee S., and Chakravorty D. Plasmon resonance shifts in oxide-coated silver nanoparticles // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66, N 8. – 085421.
15. Palik E.D. Handbook of Optical Constants of Solids – New York: Academic Press, 1985. – 804 p.

Надійшла до редакції 12 грудня 2006 р.

УДК 535.3

Леонід Г. Гречко, д. ф.-м. наук,
Леонід Б. Лерман, канд. техн. наук,
Людмила М. Білокриницька, ст. наук.
співробітник,
Сергій В. Шостак, канд. фіз.-мат наук

Leonid G. Grechko, Dr. Sc.,
Leonid B. Lerman, Ph. D,
Ludmila M. Bilokrinizna, superior re-
search officer,
Sergiy V. Shostak, Ph. D

Поверхневі моди в багатошарових малих частинках еліпсоїдальної форми

Surfaces modes in ellipsoidal multi- layered small particles

В електростатичному наближенні
знайдено відгук малих багатошарових час-
тинок (наночастинок) у вигляді системи
конфокальних еліпсоїдів загального вигляду
з різними діелектричними проникностями.
Розв'язки відповідних задач теорії потенці-
алу отримано з використанням трансля-
ційних матриць, які дозволяють переноси-
ти граничні умови з шару на шар. Отрима-
ні аналітичні вирази для обчислення поляри-
зованості таких частинок, що дозволяє
визначати спектри поверхневих мод.

Electrostatic response of small particles
(nanoparticles) formed a system of confocal
ellipsoids with different permittivities is
founded. The translation matrixes to transfer
the boundary conditions from slab to slab are
used to solution of problem. Polarizability of
the particle is calculated in within the pro-
posed limits. It gives the opportunity to deter-
minate specters of surfaces modes.

Key words: nanoparicles, translation matrixes,
ellipsoid, polarizability, surfaces modes

Ключові слова: наночастинки, транс-
ляційні матриці, еліпсоїд, поляризованість,
поверхневі моди

E-mail: user @ surfchem.freenet.kiev.ua)

1. **Вступ.** Відомо [1], що в малих частинках існує цілий клас типів електромагнітних хвиль, так званих поверхневих мод (плазмонів), які приводять до нових спектрів поглинання. В цих спектрах з'являються особливості, які не спостерігається в спектрах об'ємних матеріалів, і можуть виникати кілька смуг поглинання замість єдиної смуги поглинання для об'ємної речовини. При цьому число, положення таких особливостей визначаються формою частинок і частотною залежністю діелектричної функції, і в цьому і проявляється існування поверхневих мод. Малі частинки в перерахунку на одиницю об'єму входять до числа найбільш ефективних поглинаючих матеріалів. Особливістю малих частинок є те, що вони можуть проявляти такі властивості поглинання, які в основному визначаються їх формою. Наприклад, суцільна кульова частинка має одну плазмову частоту, для суцільного сфероїда (еліпсоїда обертання) їх буде дві, а для частинок у формі еліпсоїда загального вигляду - вже три [1]. В більшості випадків таку залежність вдається пояснити в

рамках класичної електродинаміки і, навіть електростатики та оптичних ста-
лих об'ємної речовини без залучення квантових ефектів.

Для малих частинок (наночастинок), розміри яких складають 3–40 нм,
зручним виявляється, так зване, електростатичне наближення (довгохвильове
наближення, наближення Релея-Дебая-Ганса (РДГ)). Взагалі частинки мо-
жуть мати складну будову, наприклад, шарову структуру, або нести певний
заряд, тощо. Відомо [1], що прикладене поле в діелектричній частинці наво-
дить пропорційний йому дипольний момент. Тому при розгляді частинок до-
вільної внутрішньої будови і форми задача полягає в знаходженні збурного
потенціалу, який створює окрема частинка у конкретних випадках, а для його
знаходження потрібно розв'язати певну задачу електростатики.

У цій статті викладається один з можливих підходів до визначення по-
ляризованості частинок з довільним числом шарів із застосуванням так званих
трансляційних матриць [2-5]. Трансляційні матриці дозволяють переносити
граничні умови з шару на шар і для обчислення збурного потенціалу вони
виявляються дуже зручними [6,7]. З їх допомогою були розглянуті задачі з
різних областей фізики В статті в електростатичному наближенні розгляда-
ються багатошарові (конфокальні) еліпсоїди. Зауважимо, що гладкою части-
нкою найбільш загального вигляду – без ребер і зломів – є еліпсоїд з довіль-
ними значеннями піввісей, що дозволяє в рамках єдиної моделі описувати і
кулі, і плоскі і лінійні частинки. Ця задача розглядалася багатьма авторами, і
замкнуті формули для обчислення поляризованості суцільного еліпсоїда й
еліпсоїда з покриттям (двошаровий еліпсоїд) і для трьохшарового еліпсоїда
обертання добре відомі [1, 10], але задача для багатошарового еліпсоїда зна-
чно ускладнюється. Нами раніш [11] було побудовано загальний розв'язок
цієї задачі, але отримані там формули не зручні для практичного користуван-
ня. В цій роботі нами отримані нові вирази для трансляційних матриць, які
мають досить прозорий фізичний зміст. За їх допомогою отримано трансцен-
дентне рівняння для визначення частот поверхневих плазмонів багатошаро-
вого еліпсоїда.

Для суцільного еліпсоїда і еліпсоїда з оболонкою (в частинному випад-
ку кулі) отримано алгебраїчні рівняння, які дозволяють визначати всі значен-
ня частот поверхневих плазмонів.

2. Постановка і розв'язання задачі електростатики. В електро-
статичному наближенні поглинання визначається за допомогою поляризов-
ності, що, в свою чергу, зводиться до розв'язання певної задачі електростати-
ки [1-3]. Як вказувалось вище, ми будемо розглядати багатошарові частинки,
які складаються з n шарів, а нумерація починається з ядра частинки. Початок
які складаються з n шарів, а нумерація починається з ядра частинки. Початок
декартових x, y, z і відповідних криволінійних α, β, γ (сферичних r, θ, φ або
еліпсоїдальних ξ, η, ζ) координат приймемо в геометричних центрах части-
нок (рис.1). Вважається, що окрема частинка розташована в середовищі з діе-
лектричною проникністю ϵ_m , а діелектричні комплексні проникності шарів
 ϵ_j – діелектрично-ізотропними.

Позначимо потенціал зовнішнього поля через U_0 , потенціали в шарах - U_i ($i=1,2,\dots,n$), збурний потенціал - U_p , і тоді у зовнішньому просторі буде $U_{n+1}=U_0+U_p$. Кожний з потенціалів повинен задовольняти рівнянню Лапласа і певним додатковим умовам. Нами розглядаються суцільні частинки, тому в початку координат потенціал у ядрі частинки U_1 повинен бути обмеженим. Аналогічно, збурний потенціал повинен згасати на нескінченності, тобто $U_p \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. На межах поділу шарів повинні виконуватись умови сумісності (сполучення), які виражають рівність тангенціальних складових векторів електричної напруженості.

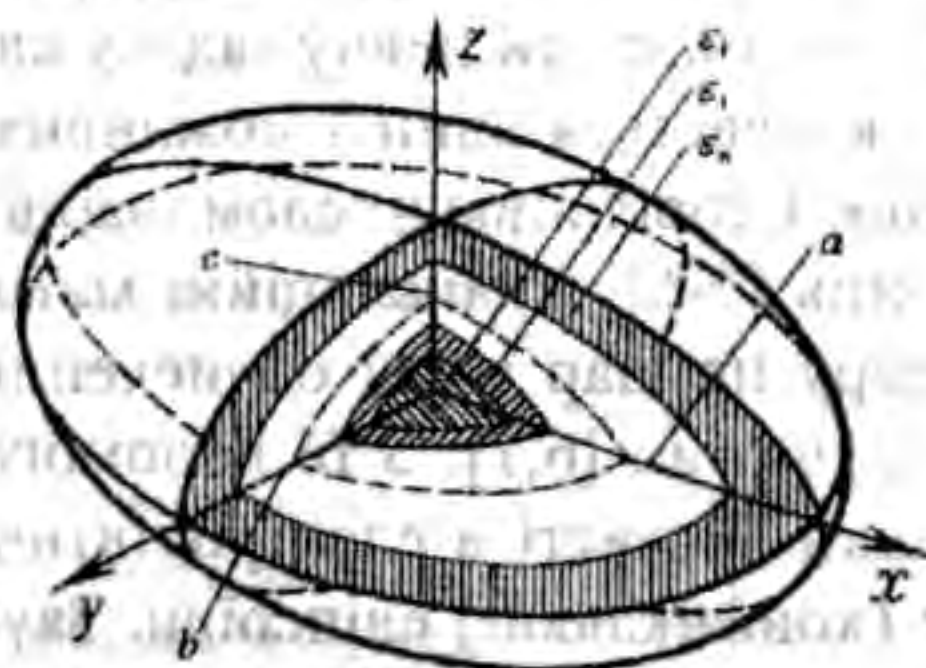


Рис.1. Багатошарова частинка у вигляді конфокальних еліпсоїдів.

Нам здається, що найбільш загальним методом розв'язання задач такого типу є застосування трансляційних матриць, що було показано у роботах [2-9]. Зауважимо, що для рівнянь другого порядку неважко виписати обернені матриці у явному вигляді, як це зроблено, наприклад в [3], і тоді фактично задача зводиться просто до перемноження трансляційних матриць.

Отже, розглядається частинка шарової структури, яка складається з n конфокальних еліпсоїдів із півосями $a_j > b_j > c_j$ ($j=1,2,\dots,n$). Зовнішнє електростатичне поле вважається однорідним та направленим, наприклад, вздовж вісі z . Граничні умови мусять забезпечити неперервність функцій Φ_j , Φ_p і $\epsilon_j(\partial\Phi_j/\partial\xi)$ на межах шарів. Для j -ої межі поділу еліпсоїдів ($j=1,2,\dots,n-1$) мають місце умови сполучення

$$\Phi_j = \Phi_{j+1}, \quad \epsilon_j \partial\Phi_j / \partial\xi = \epsilon_{j+1} \partial\Phi_{j+1} / \partial\xi, \quad \text{при } \xi = \xi_j, \quad (1)$$

а на зовнішній поверхні частинки із врахуваннями прикладеного поля ці умови приймають вигляд

$$\Phi_n = \Phi_0 + \Phi_p, \quad \epsilon_n \partial\Phi_n / \partial\xi = \epsilon_m \partial\Phi_0 / \partial\xi + \epsilon_m \partial\Phi_p / \partial\xi, \quad \text{при } \xi = \xi_n \quad (2)$$

Повний розв'язок цієї задачі із застосуванням трансляційних матриць отримано нами раніш [11]. Зокрема поляризованість шаруватого еліпсоїда в напрямку прикладеного поля визначається за формулою

$$\alpha_3 = \frac{4\pi}{3} (a_n b_n c_n) \frac{(\epsilon_n - \epsilon_m)(a_n b_n c_n)t_{11} + 2(\epsilon_n - \epsilon_m)(L_3^{(n)} - \epsilon_n)t_{21}}{[(\epsilon_n - \epsilon_m)L_3^{(n)} + \epsilon_m](a_n b_n c_n)t_{11} + 2(\epsilon_n - \epsilon_m)L_3^{(n)}(L_3^{(n)} - 1)t_{21}}, \quad (3)$$

де t_{11}, t_{21} - елементи трансляційної матриці $T_n(\xi_n, \xi_1)$

при переході від 1-го до n -го шару

$$T_n(\xi_n, \xi_1) = \prod_{j=1}^{n-1} T_{n-j} \quad (4)$$

При цьому трансляційні матриці T_j при переході j -ої межі поділу визначаються співвідношенням

$$T_j = \begin{bmatrix} 1 + L_3^{(j)} \left(\frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} - 1 \right) & L_3^{(j)} (1 - L_3^{(j)}) \left(1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} \right) \\ \frac{v_j}{v_{j+1}} \left(1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} \right) & \frac{v_j}{v_{j+1}} \left[1 + L_3^{(j)} \left(1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} \right) \right] \end{bmatrix} \quad (5)$$

де на відміну від [11] в матриці використані так звані геометричні фактори $L_3^{(j)}$ [1]

$$L_3^{(j)} = \frac{a_j b_j c_j}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(c_j^2 + q) f_j(q)}, \quad f_j(q) = \sqrt{(a_j^2 + q)(b_j^2 + q)(c_j^2 + q)}. \quad (6)$$

Якщо $n=1$, формула (3) переходить у відому формулу для поляризованості суцільного еліпсоїда

$$\alpha_3 = \frac{4\pi}{3} a_1 b_1 c_1 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_m) L_3 + \varepsilon_m} \quad (7)$$

Для двошарового еліпсоїда (еліпсоїд в оболонці) слід прийняти $n=2$, і після деяких перетворень матимемо

$$\alpha_3 = V \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_m) [\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) (L_3^{(1)} - v L_3^{(2)})] + v \varepsilon_2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{[\varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) (L_3^{(1)} - v L_3^{(1)})] [\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m) L_3^{(2)}] + v L_3^{(2)} \varepsilon_2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}, \quad (8)$$

де V – об'єм еліпсоїда, $v = (a_1 b_1 c_1) / (a_2 b_2 c_2)$ – частина повного об'єму V , який займає внутрішній еліпсоїд, що співпадає з результатами, наведеними в [1].

Аналогічні вирази будуть мати місце і для поляризованостей α_1 і α_2 в напрямках двох інших осей x, y відповідно. Для цього досить замінити у всіх розрахункових формулах геометричні фактори, тобто замість $L_3^{(j)}$ використовувати формули

$$L_1^{(j)} = \frac{a_j b_j c_j}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(a_j^2 + q) f_j(q)} \quad \text{і} \quad L_2^{(j)} = \frac{a_j b_j c_j}{2} \int_0^\infty \frac{dq}{(b_j^2 + q) f_j(q)}. \quad (9)$$

Зауважимо, що завжди $L_1^{(j)} + L_2^{(j)} + L_3^{(j)} = 1$ і $L_4^{(j)} < 1$. З загальних формул для еліпсоїда можна отримати розрахункові формули для багатшарової кулі з діелектрично-ізотропними шарами, якщо покласти $a_j = b_j = c_j = r_j$ та $L_1^{(j)} = L_2^{(j)} = L_3^{(j)} = 1/3$, але в даному випадку зручніше використовувати безпосередньо розв'язок задачі для багатшарової кулі.

При вивченні світлорозсіяння на малих металевих частинках треба враховувати, що діелектричні проникності шарів залежать від довжини хвилі λ , тобто $\varepsilon_j = \varepsilon_j(\lambda)$. Тоді корені рівняння

$$\Delta_f = \{ [(\varepsilon_n - \varepsilon_m) L_3^{(n)} + \varepsilon_m] (a_n b_n c_n) M_{11} + 2(\varepsilon_n - \varepsilon_m) L_3^{(n)} (L_3^{(n)} - 1) M_{21} \} = 0 \quad (10)$$

визначають частоти поверхневих мод, тобто максимумами поглинання і світло-розсіяння. Для еліпсоїда загального вигляду фактично будемо мати три незалежних рівняння вигляду

$$[(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)} + \varepsilon_m](a_n b_n c_n)t_{11} + 2(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)}(L_k^{(n)} - 1)t_{21} = 0, \quad (k=1,2,3). \quad (11)$$

Отже задача зведена до знаходження дійсних коренів нелінійних рівнянь з комплексними коефіцієнтами. Аналітичне дослідження цих рівнянь практично неможливо за випадком суцільного еліпсоїда та еліпсоїда в оболонці, тому його доводиться розв'язувати чисельно.

Зауважимо, що взагалі комплексно значна функція $w = w(t)$ дійсного аргументу t обертається на нуль тоді і тільки тоді, коли одночасно $\operatorname{Re} w = 0$ і $\operatorname{Im} w = 0$. В загальному випадку можна стверджувати, що точного розв'язку рівняння (11) не існує. Одночасно для багаточислового еліпсоїду наближені розв'язки, які визначають резонансні хвилі, будуть існувати лише тоді, коли виконується система

$$\begin{cases} \operatorname{Re}\{[(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)} + \varepsilon_m](a_n b_n c_n)t_{11} + 2(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)}(L_k^{(n)} - 1)t_{21}\} = 0, \\ \operatorname{Im}\{[(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)} + \varepsilon_m](a_n b_n c_n)t_{11} + 2(\varepsilon_n - \varepsilon_m)L_k^{(n)}(L_k^{(n)} - 1)t_{21}\} \approx 0. \end{cases} \quad (12)$$

Перше рівняння визначає необхідну умову існування резонансних хвиль, а друге – достатню. При цьому, оскільки $\operatorname{Im} \Delta_f \neq 0$, то і $\Delta_f \neq 0$, хоча і може бути досить малим. На резонансній хвилі величина $\operatorname{Im} \Delta_f$ і буде визначати максимуми поляризованості.

3. Поверхневі плазмони в суцільному і двошаровому еліпсоїді. Отже, для знаходження резонансних частот маємо рівняння (11), (12). У випадку суцільного еліпсоїда буде

$$(\varepsilon_1 - \varepsilon_m)L_k^{(1)} + \varepsilon_m = 0, \quad (k=1,2,3) \quad (13)$$

звідки і випливає, що для еліпсоїда загального вигляду може існувати три резонансні довжини хвилі, у випадку еліпсоїда обертання – дві, а у випадку кулі ($L_1^{(1)} = L_2^{(1)} = L_3^{(1)} = 1/3$) може існувати тільки одна, яка визначається з відомого рівняння $\varepsilon_1 + 2\varepsilon_m = 0$ [1]. Рівняння (13) еквівалентно системі

$$\begin{cases} \operatorname{Re} \varepsilon_1(\lambda) = -\frac{1 - L_k^{(1)}}{L_k^{(1)}} \varepsilon_m, \\ \operatorname{Im} \varepsilon_1(\lambda) = 0 \end{cases} \quad (14)$$

Для багатьох металів діелектрична функція добре описується формулою Друде

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (15)$$

де $\omega = 2\pi c / \lambda$ – частота, c – швидкість світла, ε_∞ – граничне значення діелектричної проникності, ω_p – плазмова частота, γ – частота поглинання.

Відокремлюючи дійсну частину і підставляючи отриманий вираз в (14), отримаємо рівняння для знаходження резонансної частоти

$$\frac{\omega^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{\varepsilon_\infty + \varepsilon_m(1 - L_k)/L_k} - \frac{\gamma^2}{\omega_p^2}. \quad (16)$$

В більшості випадків виконується сильна нерівність $\gamma \ll \omega_p$ (наприклад для алюмінія $\gamma/\omega_p = 0,04$, для срібла $\gamma/\omega_p = 0,0016$), тому другим доданком можна знехтувати. Тоді отримусмо зручну формулу для знаходження резонансної частоти в залежності від геометричного фактора еліпсоїда

$$\omega_r = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_\infty + \varepsilon_m(1 - L_k)/L_k}} \omega_p. \quad (17)$$

Залежність зсуву $t = 1 - \omega_r/\omega_p$ відносної резонансної частоти ω_r/ω_p від L_k при деяких значеннях ε_m показана на рис. 2. При розрахунках було прийнято, що $\varepsilon_\infty = 1$ (як для алюмінія).

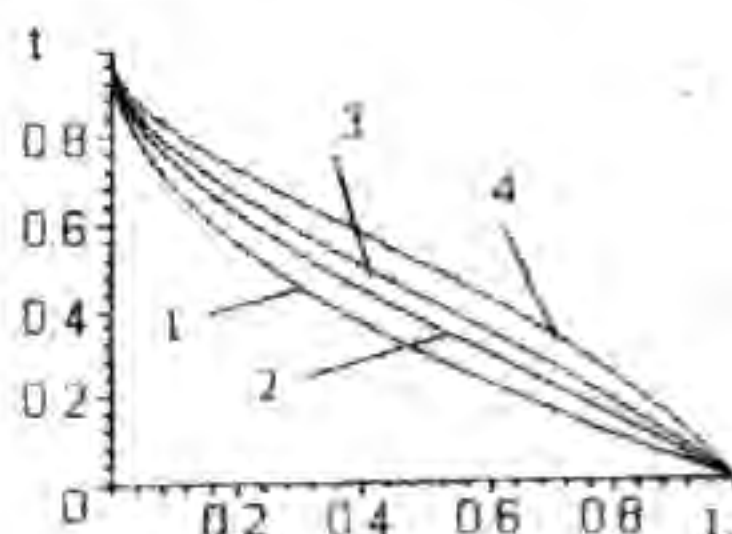


Рис. 2. Зсув відносної резонансної частоти ω_r/ω_p в залежності від геометричного фактора еліпсоїда при різних значеннях діелектричної проникності середовища:

$$1 - \varepsilon_m = 1; 2 - \varepsilon_m = 1,5; 3 - \varepsilon_m = 2; 4 - \varepsilon_m = 3.$$

З рис. 2 видно, що найбільший зсув має місце для малих значень L_k , а вплив діелектричної проникності середовища виявляється найбільш істотним для середніх значень L_k . Зі збільшенням ε_m в цій області зміни геометричного фактора зсув збільшується. Оскільки для еліпсоїда повинно бути $L_1 + L_2 + L_3 = 1$, то резонансні частоти можуть бути суттєво рознесені.

Отже резонансна частота ω_r зсувається відносно плазмової частоти в область більш низьких частот. Для кулі у повітрі ($\varepsilon_m = 1$) при $\varepsilon_\infty = 1$ матимемо відоме співвідношення $\omega = \omega_p/\sqrt{3}$.

Далі розглянемо еліпсоїд загального вигляду в оболонці, для якого з (11) матимемо три незалежних рівняння

$$[\varepsilon_1 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(L_k^{(1)} - \nu L_k^{(2)})][\varepsilon_m + (\varepsilon_2 - \varepsilon_m)L_k^{(2)}] + \nu L_k^{(2)}\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) = 0, \quad (k = 1, 2, 3) \quad (18)$$

де ν - відносне заповнення частинки ядром, які узгоджуються з наведеними у роботі [1].

Для кульової частинки в оболонці всі три рівняння (18) співпадають і приймають більш простий вигляд

$$(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_m)(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) + 2\nu(\varepsilon_2 - \varepsilon_m)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) = 0. \quad (19)$$

Неважко побачити, що рівняння (18), (19) - це квадратні рівняння відносно ε_2

$$\varepsilon_2^2 + 2p_k \varepsilon_2 + q_k = 0, \quad (k=1,2,3), \quad (20)$$

де коефіцієнти p_k, q_k для випадку еліпсоїда (рівняння (18)) мають вигляд

$$p_k = \frac{\beta_k(\alpha_k + \nu)\varepsilon_1 + (1 - \alpha_k)(1 - \beta_k)\varepsilon_m}{2\beta_k(1 - \alpha_k - \nu)}, \quad q_k = \frac{\alpha_k(1 - \beta_k)}{\beta_k(1 - \alpha_k - \nu)}\varepsilon_1\varepsilon_m, \quad (21)$$

і для скорочення запису введені параметри $\alpha_k = L_k^{(1)} - \nu L_k^{(2)}$, $\beta_k = L_k^{(2)}$.

Корені рівняння ξ_1, ξ_2 визначаються формулами

$$\xi_{1,2}^{(k)} = -p_k \pm \sqrt{p_k^2 - q_k}. \quad (23)$$

У випадку двошарової кулі (рівняння (19)) вирази (21) спрощуються і приймають вигляд

$$p_k = p = \frac{(1 + 2\nu)\varepsilon_1 + 2(2 + \nu)\varepsilon_m}{4(1 - \nu)}, \quad q_k = q = \varepsilon_1\varepsilon_m, \quad (24)$$

а для коренів лишається вираз (23).

Зауважимо, що завжди $p_k^2 - q_k > 0$, що неважко встановити без посередньою перевіркою, і тому корені будуть завжди дійсними.

Надалі вважатиме, що діелектрична проникність ядра еліпсоїда і зовнішнього середовища – це діелектрики, а діелектрична проникність оболонки описується моделлю Друде (15) при $\varepsilon_\infty = 1$. Тоді для знаходження резонансних частот будемо мати рівняння

$$\frac{\omega_r^2}{\omega_p^2} + i \frac{\gamma}{\omega_p} = \frac{1}{1 - \xi_{1,2}^{(k)}}. \quad (25)$$

Якщо в рівнянні (22), як вище було зроблено для суцільного еліпсоїда, враховуючи, що $(\gamma/\omega_p) \ll 1$ знехтувати втратами і формально покласти $\gamma = 0$, отримаємо вираз, який визначає по два значення резонансної частоти відповідно для $k=1,2,3$, отже, усього шість резонансних частот

$$\omega_{r1}^{(k)} = \omega_p / (1 - \xi_1^{(k)}), \quad \omega_{r2}^{(k)} = \omega_p / (1 - \xi_2^{(k)}) \quad (k=1,2,3). \quad (26)$$

Таким чином наявність оболонки призводить до розщеплення резонансної частоти суцільної частинки, як для кулі, так і для еліпсоїда. В останньому випадку з'являються додаткові частоти, поява яких пов'язана зі зміною форми частинки. Слід зауважити, що ці частоти можуть бути достатньо близькими, тому часом їх важко буде визначити як на розрахункових, так і на експериментальних спектрах.

Маючи явні вирази для резонансних частот можна отримати залежність їх розходження $\Delta_w^{(k)}$ від об'ємної долі наповнення. Дійсно, обчислюючи різницю між коренями і застосовуючи теорему Вієтта, отримаємо формулу

$$\Delta_w^{(k)} = 2 \frac{\sqrt{p_k^2 - q_k}}{1 + 2p_k + q_k}, \quad (27)$$

де p_k, q_k визначаються формулами (21).

Висновки. Таким чином, розроблена методика дозволяє досліджувати вплив на резонансні частоти, як кількості шарів, так і їх діелектричних властивостей. Показано, що наявність оболонки приводить до розщеплення час-

В більшості випадків виконується сильна нерівність $\gamma \ll \omega_p$ (наприклад для алюмінія $\gamma/\omega_p = 0,04$, для срібла $\gamma/\omega_p = 0,0016$), тому другим доданком можна знехтувати. Тоді отримуємо зручну формулу для знаходження резонансної частоти в залежності від геометричного фактора еліпсоїда

$$\omega_r = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_\infty + \epsilon_m(1 - L_k)/L_k}} \omega_p. \quad (17)$$

Залежність зсуву $t = 1 - \omega_r/\omega_p$ відносної резонансної частоти ω_r/ω_p від L_k при деяких значеннях ϵ_m показана на рис. 2. При розрахунках було прийнято, що $\epsilon_\infty = 1$ (як для алюмінія).

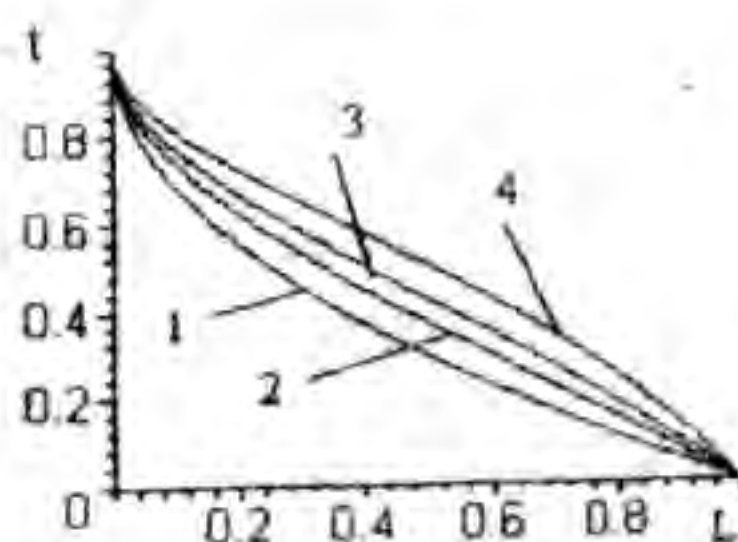


Рис.2. Зсув відносної резонансної частоти ω_r/ω_p в залежності від геометричного фактора еліпсоїда при різних значеннях діелектричної проникності середовища:

$$1 - \epsilon_m = 1; 2 - \epsilon_m = 1,5; 3 - \epsilon_m = 2; 4 - \epsilon_m = 3.$$

З рис.2 видно, що найбільший зсув має місце для малих значень L_k , а вплив діелектричної проникності середовища виявляється найбільш істотним для середніх значень L_k . Зі збільшенням ϵ_m в цій області зміни геометричного фактора зсув збільшується. Оскільки для еліпсоїда повинно бути $L_1 + L_2 + L_3 = 1$, то резонансні частоти можуть бути суттєво рознесені.

Отже резонансна частота ω_r зсувається відносно плазмової частоти в область більш низьких частот. Для кулі у повітрі ($\epsilon_m = 1$) при $\epsilon_\infty = 1$ матимемо відоме співвідношення $\omega = \omega_p/\sqrt{3}$.

Далі розглянемо еліпсоїд загального вигляду в оболонці, для якого з (11) матимемо три незалежних рівняння

$$[\epsilon_2 + (\epsilon_1 - \epsilon_2)(L_k^{(1)} - \nu L_k^{(2)})][\epsilon_m + (\epsilon_1 - \epsilon_m)L_k^{(2)}] + \nu L_k^{(2)}\epsilon_2(\epsilon_1 - \epsilon_2) = 0, \quad (k=1,2,3) \quad (18)$$

де ν - відносне заповнення частинки ядром, які узгоджуються з наведеними у роботі [1].

Для кульової частинки в оболонці всі три рівняння (18) співпадають і приймають більш простий вигляд

$$(\epsilon_2 + 2\epsilon_m)(\epsilon_1 + 2\epsilon_2) + 2\nu(\epsilon_2 - \epsilon_m)(\epsilon_1 - \epsilon_2) = 0. \quad (19)$$

Неважко побачити, що рівняння (18), (19) - це квадратні рівняння відносно ϵ_2 .

$$\varepsilon_2^2 + 2p_k \varepsilon_2 + q_k = 0, \quad (k=1,2,3), \quad (20)$$

де коефіцієнти p_k, q_k для випадку еліпсоїда (рівняння (18)) мають вигляд

$$p_k = \frac{\beta_k(\alpha_k + \nu)\varepsilon_1 + (1 - \alpha_k)(1 - \beta_k)\varepsilon_m}{2\beta_k(1 - \alpha_k - \nu)}, \quad q_k = \frac{\alpha_k(1 - \beta_k)}{\beta_k(1 - \alpha_k - \nu)}\varepsilon_1\varepsilon_m, \quad (21)$$

і для скорочення запису введені параметри $\alpha_k = L_k^{(1)} - \nu L_k^{(2)}$, $\beta_k = L_k^{(2)}$.

Корені рівняння ξ_1, ξ_2 визначаються формулами

$$\xi_{1,2}^{(k)} = -p_k \pm \sqrt{p_k^2 - q_k}. \quad (23)$$

У випадку двошарової кулі (рівняння (19)) вирази (21) спрощуються і приймають вигляд

$$p_k = p = \frac{(1 + 2\nu)\varepsilon_1 + 2(2 + \nu)\varepsilon_m}{4(1 - \nu)}, \quad q_k = q = \varepsilon_1\varepsilon_m, \quad (24)$$

а для коренів лишається вираз (23).

Зауважимо, що завжди $p_k^2 - q_k > 0$, що неважко встановити без посередньою перевіркою, і тому корені будуть завжди дійсними.

Надалі вважатиме, що діелектрична проникність ядра еліпсоїда і зовнішнього середовища – це діелектрики, а діелектрична проникність оболонки описується моделлю Друде (15) при $\varepsilon_\infty = 1$. Тоді для знаходження резонансних частот будемо мати рівняння

$$\frac{\omega_r^2}{\omega_p^2} + i \frac{\gamma}{\omega_p} = \frac{1}{1 - \xi_{1,2}^{(k)}}. \quad (25)$$

Якщо в рівнянні (22), як вище було зроблено для суцільного еліпсоїда, враховуючи, що $(\gamma/\omega_p) \ll 1$ знехтувати втратами і формально покласти $\gamma = 0$, отримаємо вираз, який визначає по два значення резонансної частоти відповідно для $k=1,2,3$, отже, усього шість резонансних частот

$$\omega_{r1}^{(k)} = \omega_p / (1 - \xi_1^{(k)}), \quad \omega_{r2}^{(k)} = \omega_p / (1 - \xi_2^{(k)}) \quad (k=1,2,3). \quad (26)$$

Таким чином наявність оболонки призводить до розщеплення резонансної частоти суцільної частинки, як для кулі, так і для еліпсоїда. В останньому випадку з'являються додаткові частоти, поява яких пов'язана зі зміною форми частинки. Слід зауважити, що ці частоти можуть бути достатньо близькими, тому часом їх важко буде визначити як на розрахункових, так і на експериментальних спектрах. Крім того, частина з них може бути неактивна в спектрі поглинання (відповідні сили осциляторів цих плазмонів малі).

Висновки. Таким чином, розроблена методика дозволяє досліджувати вплив на резонансні частоти, як кількості шарів, так і їх діелектричних властивостей. Показано, що наявність оболонки приводить до розщеплення частоти для суцільної частинки. Отримано явні вирази для розрахунку частот поглинання поверхневих мод у випадку еліпсоїда загального вигляду з оболонкою і, як частинний випадок кулі з оболонкою. Це дає можливість керувати положеннями і максимумами поглинання в спектрах оптичного діапазону.

Робота виконана в Інституті хімії поверхні НАН України в рамках бю-

джетного проекту "Супрамолекулярна хімія на межі розділу фаз".

Література

1. Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света маленькими частицами. М: Мир, 1986. - 664 с.
2. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. - М.: «Наука», 1970. - 856 с.
3. Moroz A. A recursive transfer-matrix solution for a dipole radiating and outside a stratified sphere // *Annals of Physics*. - 2005. - 315. - P. 352-418.
4. Hongxing Xu. Surface plasmon Photonics. - Thesis for the degree of doctor of philosophy. - Goteborg University, 2002. - 92 p.
5. Wu Z.S., Wang Y.P. Electromagnetic scattering for multi-layered sphere: recursive algorithm // *Radio Sci.* - 1991, V. 26. - P. 1393-1401.
6. Лерман Л.Б. Применение уравнений плоской задачи теории упругости к исследованию колебаний протяженных слоистых плит с внутренними линейными опорами // *Прикл. механика*, 1994. - 30, № 6. С. 66 - 69.
7. Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, Н.Г. Шкода. Розсіювання електромагнітного випромінювання на багатшаровій кулі // *Вісник Київського університету. Сер.фіз.-мат.* - 2004. - №3. - С. 376-384.
8. L.B. Lerman, L.G. Grechko, V.V. Gozhenko. Electromagnetic waves interaction with a lamellar spherical lens // *Antenna Theory and Techniques. Proceeding VI-th International Conference*. - 24-26 May 2005, Kyiv, 2005. - P. 301-303.
9. Gurwich I., Kleiman M., Shiloah N., Cohen A. Scattering of electromagnetic radiation by multilayered spheroidal particles: recursive procedure // *Applied optics*. - 2000. - Vol. 39, No. 3. - P. 470-477.
10. K. Asami K., T. Hanai., N. Koizumi. Dielectric Analysis of Escherichia Coli Suspension in the Light of the Theory of Interfacial Polarization // *Biophys. J.* - 1980, V. 31. - P.215-228.
11. Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман, Н.Г. Шкода. Багатшаровий еліпсоїд в електростатичному полі // *Вісник Київського університету. Сер.фіз.-мат.* - 2004. - №1. - С. 386-394.

Надійшла до редколегії 12.12.2006

УДК 537

Олександр І. Єлізаров¹, Михайло
О. Єлізаров¹, Володимир В.
Журав², Олександр П. Руденко³

Особливості електропровідності дисперсної системи вологого грунту

В статті досліджено електропровідність дисперсного середовища ґрунту на прикладі модельного піщаного ґрунту в залежності від його зволоженості та зовнішнього тиску. Виявлено розмірний ефект зменшення провідності у тонких шарах ґрунту, що може бути практично важливим при антикорозійному захисті підземних металоконструкцій. Методом хемографії візуалізовано особливості перерозподілу вологи в ґрунті при накладанні електричного поля. Одержані результати розглянуті з позицій теорії протікання.

Ключові слова: провідність, ґрунт, розмірний ефект.

¹ E-mail: myel@vicard.net

² E-mail: VovaZhurav@mail.ru

³ E-mail: maths@pdpu.poltava.ua

Alexander I. Yelizarov¹, Mykhaylo
A. Yelizarov¹, Volodymyr V.
Zhurav², Alexander P. Rudenko³

Features of electrical conductivity of dispersed system of moisture soil

Electrical conductivity of dispersed system of moisture soil was studied in sandy soil conditions with different moisture and external pressure. The dimension effect has been discovered that conductivity decreases in thin layers of soil. It may be important practically for protection of underground hardware against rust. Features of repartition of moisture in the soil was visualized by a chemographic method when the electric field is applied. Obtained results have been examined from the position of percolation theory.

Key Words: conductivity, soil, dimension effect.

Вступ. Природні дисперсні середовища, до яких відносяться піски і ґрунти і які відіграють величезну роль в геологічних процесах, з фізичної точки зору вивчені недостатньо. Однією з причин цього є широка варіаторика їхніх властивостей, обумовлена розмірами частинок, які їх утворюють (від мікронів до міліметрів), відсотковим їх вмістом в загальній масі, рівнем зволоженості і т.д. Окрім самого складу дисперсної системи на її поведінку суттєво впливають силові поля взаємодії, типовими серед яких в природних умовах є ван-дер-ваальсівські сили і гравітація. І нарешті, кінцевий стан дисперсних систем значною мірою буде визначатися факторами зовнішнього впливу. Як приклад можна навести купку вільно насипаного сухого піску і правильні фігури його розподілу на поверхні металевої пластини, в якій збуджені коливання (фігури Хладні [1]). Не тепловий молекулярний рух, а зовнішні чинники фактично

Експеримент В якості модельного ґрунту для досліджень брався річковий пісок, який кілька разів промивався звичайною водопровідною водою, а останні рази – дистильованою. Після цього пісок прожарювався для усунення органіки і знищення мікрофлори.

Вихололий до кімнатної температури після прожарювання пісок використовувався для приготування модельного вологого піску. В порцію піску додавалась порція дистильованої води, що становила певну частку від об'єму порції піску; далі суміш вручну ретельно перемішувалась до цілковитої однорідності.

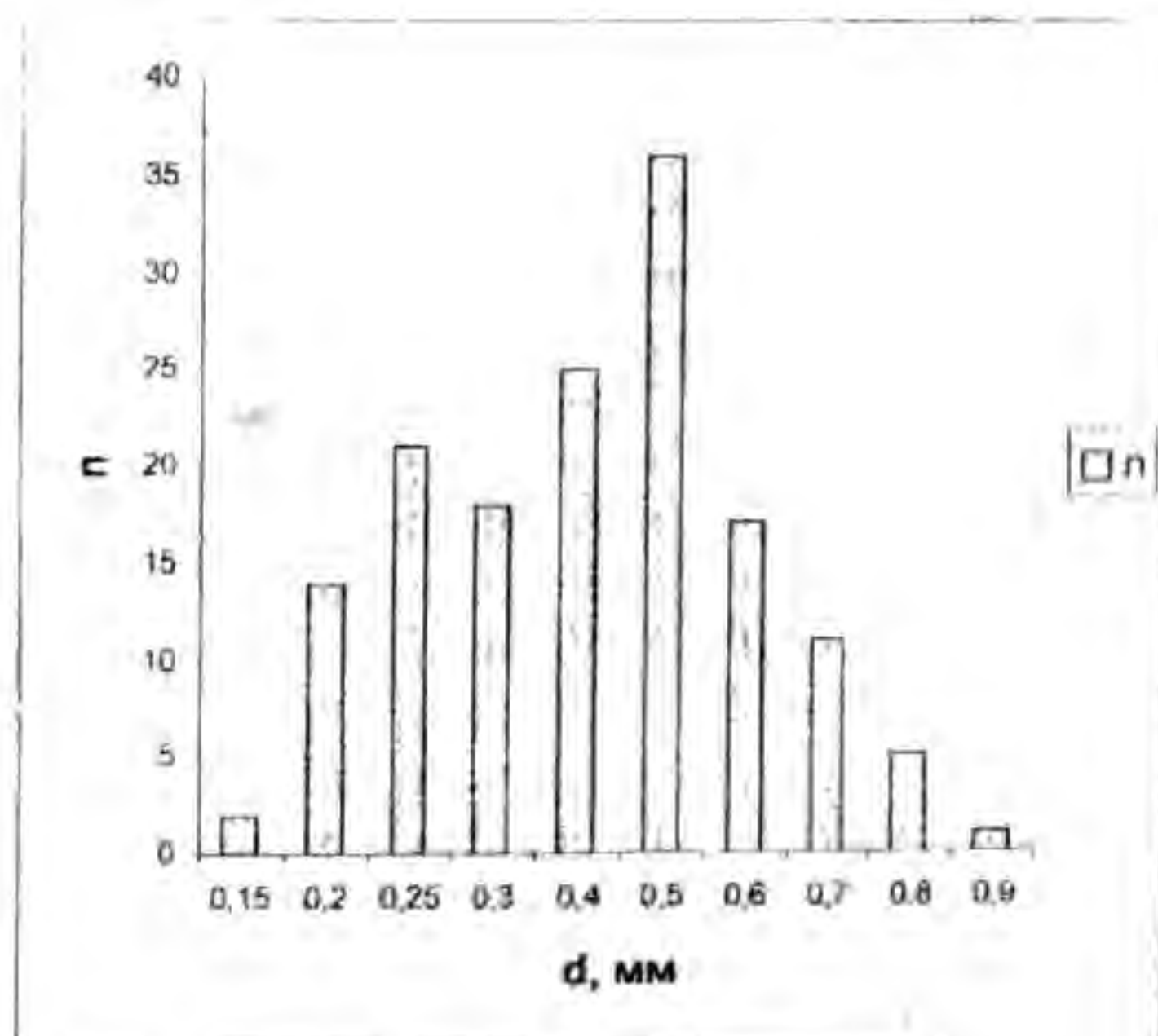


Рис. 2. Розподіл (n , %) піщинок досліджуваного ґрунту залежно від його діаметру d .

За допомогою мікроскопу було одержано наведений на рис.2 розподіл піщинок по діаметру. В деяких дослідках використовувався пісок, що складався з виділених за допомогою просіювання піщинок певного середнього діаметру.

Щитома провідність модельного зволоженого піску вимірювалась наступним чином. В об'єм піску занурювались дві однакові металеві пластини площею S , зафіксовані діелектричними деталями паралельно одна одній на відстані l . Зовнішні поверхні пластин були заізолювані. Далі вся система – пісок із пластинами в ньому – утримувалась, доки пісок

переставав осідати. Відтак опір піску вимірювався омметром, і питома провідність обчислювалась за формулою $\rho = \frac{l}{RS}$.

Аналогічно визначалась питома провідність тонкого шару піску. Між двома незмочуваними (навощеними) діелектричними пластинами, віддаленими одна від одної за допомогою діелектричних прокладок на невелику відстань d , містився тонкий шар ущільненого піску. На одній з пластин мались прямокутні металеві плівки-електроди, відстань між якими була l . Електроди було замкнуто на омметр (рис.3). Питома провідність піску визначалась як $\rho = \frac{l}{Rcd}$.

Схему вимірювання сили струму в щілинах, заповнених вологим піском, при різних значеннях тиску показано на рис. 4.

Дискусія. Вигляд залежності провідності ґрунту від об'ємної частки електроліту в ньому, встановлений в роботі [5], представлено на рис. 1, крива 1. Видно, що провідність у ґрунті виникає вже при щонайменшому зволоженні і далі з додаванням вологи збільшується більш як на п'ять порядків, причому її збільшення відбувається в два етапи, між якими є етап певного насичення ефекту. Це свідчить про наявність двох механізмів провідності, які непогано пояснюються за допомогою теорії протікання [6], якщо систему – зволожений пісок – розглядати як суміш сухих (непровідних) і звожених (провідних) піщинок. Справді, при малій кількості вологи вона не може бути “подарована” кожній піщинці, інакше б це значно збільшило енергію поверхневого натягу (рис. 5), яка в системі звожених піщинок відіграє суттєву роль завдяки великій кривизні поверхні вологої плівки [7]. Мінімізація енергії поверхневого натягу є тією причиною, яка приводить при малих кількостях вологи до утворення бінарної системи “звожені піщинки і сухі піщинки”. Дотикаючись одна до одної, вологі піщинки утворюють собою кластери провідності – фрактальні об'ємно-лінійні структури. Зі збільшенням кількості вологи ці кластери ростуть і, сполучаючись, утворюють провідний кластер (рис. 6), по якому носії струму переносять заряд з електрода на електрод. При малій кількості доданої вологи у цьому провідному кластері існують лише поодинокі доріжки, канали провідності. Додавання вологи збільшує кількість мокрих піщинок, провідний кластер росте, кількість каналів провідності збільшується, і провідність системи більшає. Потім система виходить на етап певного насичення, коли додавання вологи вже не збільшує її провідність, а з величини вологості порядку 10% від об'єму провідність знову починає збільшуватися, бо в дію вступає інший кластерний механізм провідності – по заповнених рідиною капілярах між піщинками.

Якщо провідність слабо вологого (до 1% від об'єму) піску забезпечується через кластер зі зволжених піщинок, то оскільки гілки кластера провідності шунтують одна одну, в тонких шарах слабо вологого піску провідність має суттєво зменшуватись, бо сама геометрія системи відсікає більшість гілок кластера, що могли б забезпечувати провідність в обраному напрямі (див. рис.6). Справді, наші дослідження засвідчили (рис. 1, криві 3-5), що питома провідність тонкого (<2мм) шару піску є для тих же величин зволоження значно меншою, ніж провідність грубших (від 2мм і більше) шарів, яка, своєю чергою, співпадає з величинами питомої провідності, одержаними в об'ємних вимірюваннях. Причому чим тонший шар піску, тим дужчий ефект, що також цілком логічно випливає з запропонованої моделі. Ми припускаємо, що товщина шару піску ≈ 2 мм, нижче якої спостерігається зменшення провідності, приблизно дорівнює середній довжині ланцюжка провідності між двома сусідніми вузлами кластера. Це також співмірно діаметру піщинок: 0,2мм, тож, якщо справедливе попереднє припущення, між вузлами кластера знаходиться приблизно 10 піщинок.

Просторова неоднорідність зволоження, а значить, і електропровідності дисперсного середовища, яка випливає з описаних вище дослідів, неминуче повинна позначитися на характері корозійних явищ, що мають місце, наприклад, на поверхні підземних металоконструкцій. У зв'язку з цим ми спробували візуалізувати процес окислення поверхні металу за умов її контакту з вологим піском. Для цього ми використали метод хемографії [8-10], в якому фотоплівка використовується не як детектор випромінювання, а як детектор атомарного водню, що здатен взаємодіяти з бромистим сріблом з тим самим наслідком – виділенням металевого срібла й утворенням прихованого зображення. Поверхні багатьох металів і напівпровідників під час окислення продукують атомарний водень як проміжний продукт і можуть давати так званий хемографічний ефект – при контакті з фотоплівкою в цілковитій темряві створювати в ній своє зображення, причому зображення є тим інтенсивнішим, чим слабше окислена поверхня, що дозволяє візуалізовувати методом хемографії наслідки дуже широкого кола фізико-хімічних впливів на поверхні хемографічно активних тіл, зокрема середовища вологого піску. В якості хемографічно-активного матеріалу з цією метою ми вибрали кремній, очищена поверхня якого, окислюючись, дає сильний і однорідний хемографічний ефект. Це обумовлено тим, що кремній є мономатеріалом напівпровідникової чистоти, і його поверхня в електроліті, на відміну від сплавів, самовільно не розбивається на позитивно і негативно заряджені ділянки, тому всі нюанси хемографічної активності ділянок поверхні кремнію можна приписувати дії зовнішніх чинників.

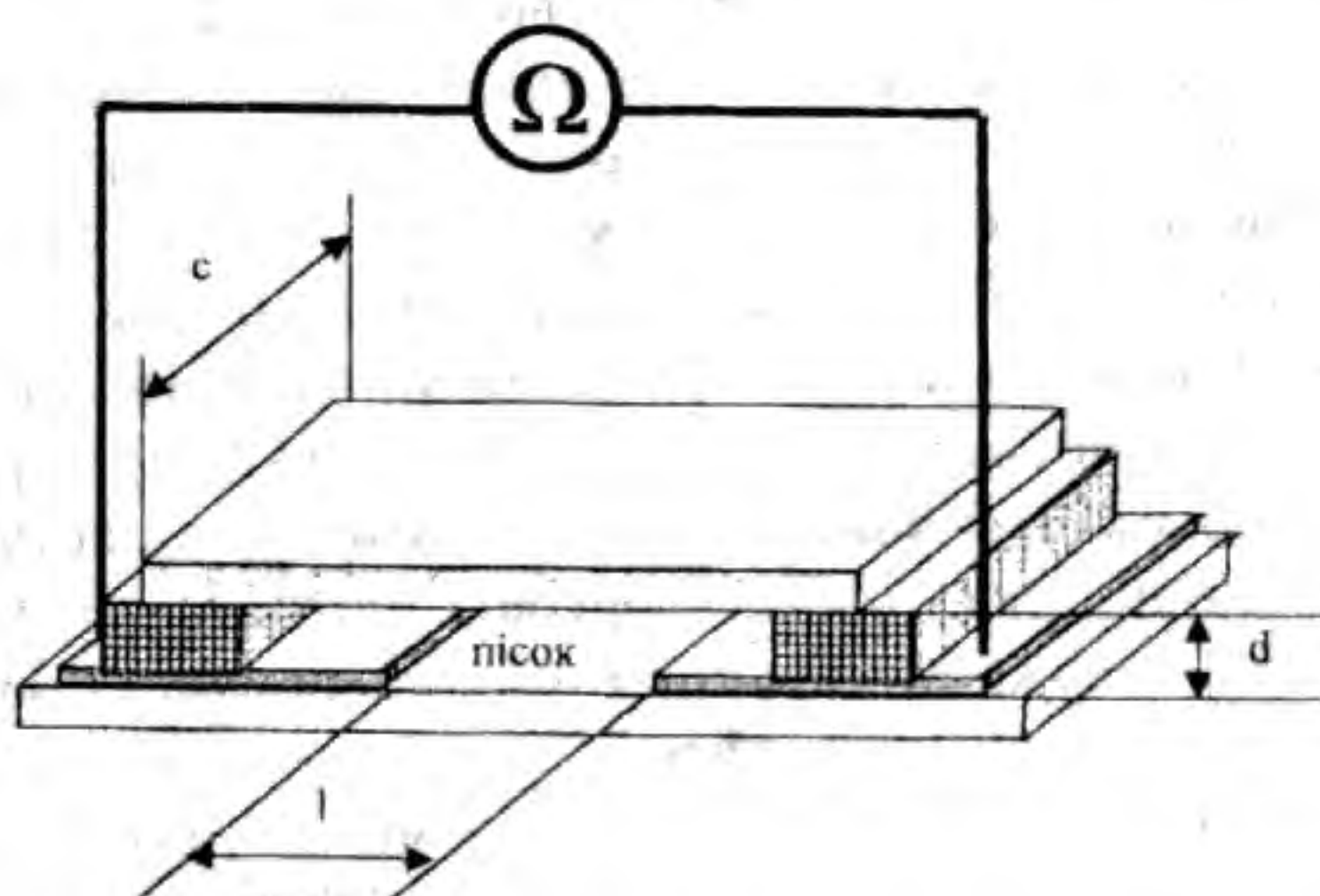


Рис. 3. Схема визначення питомої провідності тонкого шару піску.

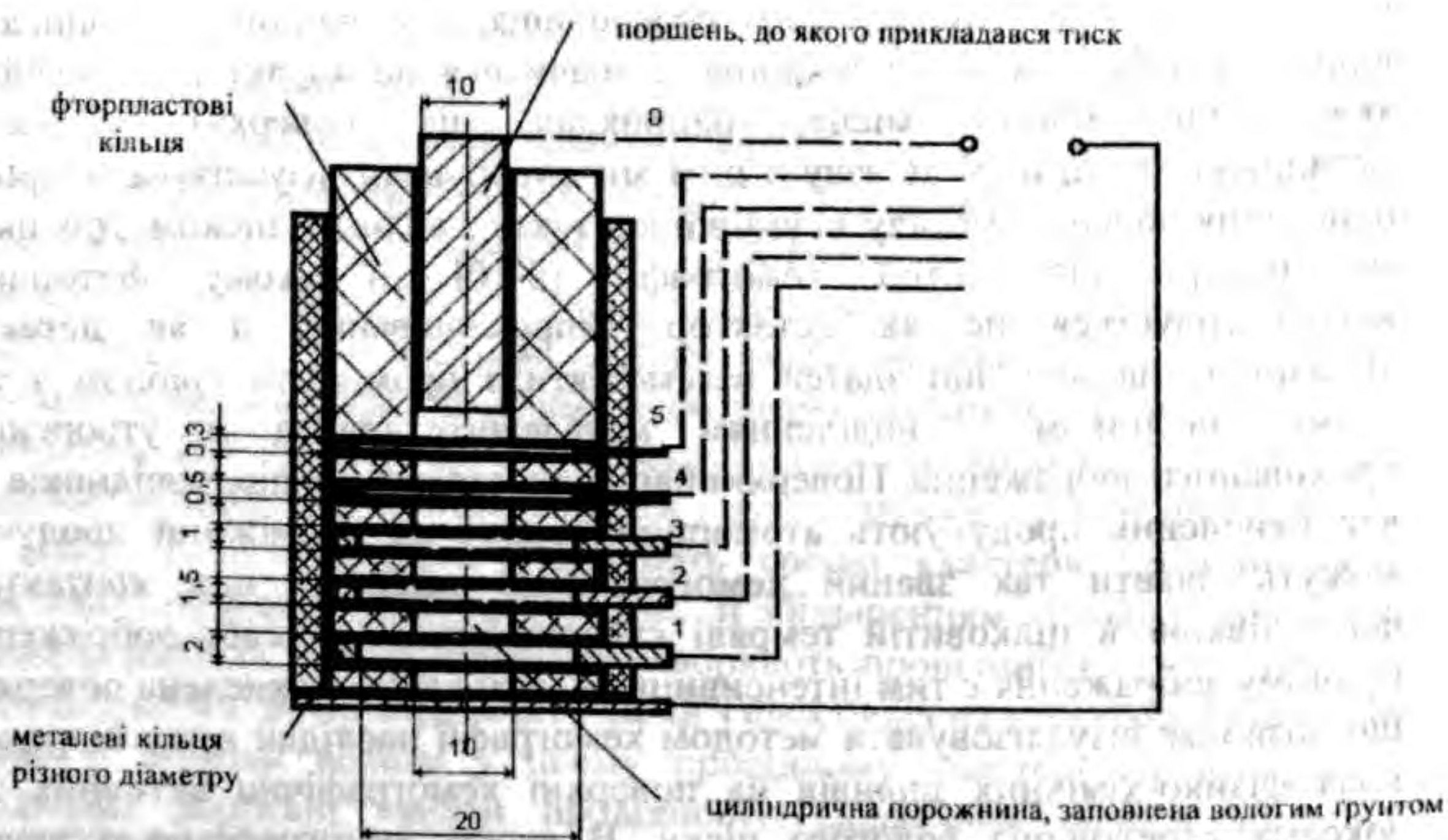


Рис. 4. Схема вимірювання сили струму в щілинах залежно від прикладеного тиску.



Рис. 5. Розподілення малої кількості води по всій поверхні піщинок (справа) енергетично невигідне, бо значно збільшує енергію поверхневого натягу.



Рис. 6. Провідний кластер – система, яка виникає з мокрих піщинок в малозволоженому піску між двома плоскими електродами (схематичне представлення). Жирними точками показано вузли-розгалуження кластера провідності. $\langle l \rangle$ – середня довжина ланцюжка провідності між двома сусідніми вузлами кластера. Виділена світлим смуга показує, як у тонкому шарі піску зменшується можливість для самошунтування гілок кластеру провідності.

Результати хемографічної візуалізації процесу окислення пластини кремнію, що контактувала з тонким шаром піску над плоскими електродами показано на рис. 7. На плоскі електроди, вкриті шаром піску, подавалась напруга 10В. Товщина шару піску була 2мм, об'ємна частка вологи в піску складала 10%, що відповідає переходу до капілярного кластеру провідності. На рис. 7а і 7б представлено хемограми поверхні Si через 15 і через 60 хвилин її контакту з шаром піску над електродами. Добре видно, що процес окислення ділянок поверхні Si, що знаходились над катодом і анодом, йде неоднаково від самого початку, і що межа між зонами протікання катодної й анодної реакцій лежить рівно посередині між електродами. Оскільки електролітичні реакції суттєво впливають на перебіг процесів окислення, можна констатувати, що отримані нами хемографічні зображення відтворюють неоднорідності окислення кремнію, які виникають завдяки проходженню струму через дисперсне середовище. Ці неоднорідності виникають, вочевидь, внаслідок просторового перерозподілу аніонів і катіонів, що в одних місцях блокують, а в інших – прискорюють окислення кремнію, і на хемограмах видно, що цей перерозподіл має центрально-симетричний характер, але відбувається по різному біля анода і біля катода та змінюється з часом. Вичерпне тлумачення відбитих тут хемограмами ефектів безумовно потребує додаткових дослідів, наразі важливою є вже сама можливість їх бачити.

Окремим питанням є заповнення виниклої щілини ґрунтом, яке відбувається під дією зовнішнього тиску, і її провідність. Очевидно, що заповнення вузької щілини піском сильно залежить від середнього розміру піщинок а також від глибини щілини. Поставлені нами експерименти, в яких визначалася сила струму в заповнюючому неглибоку (~5мм) щілину ґрунті залежно від таких факторів як ширина щілини, вологість ґрунту, зовнішній тиск показують, що провідність в тонких щілинах є на 3-4 порядки меншою, ніж у щілинах завтовшки 2 і більше мм (рис. 8). Встановлений факт різкого зменшення провідності тонких шарів вологого піску свідчить про те, що корозія металевих поверхонь, що контактують з тоншими за 2мм шарами ґрунту (щілинна корозія), відбувається зовсім інакше, ніж корозія поверхонь, що контактують з товстими пластами ґрунту. Це може мати велике практичне значення, бо пошкодження ізоляції підземної металевої конструкції, яке дає початок її корозії, звичайно починається з розтріскування. Це розтріскування ізоляції є наслідком дії на конструкцію вібрацій, тисків (так питомі тиски на ґрунт становлять в залежності від діаметру труб газопроводів 10 – 13 Н/см², а для нафтопроводів 34 – 49 Н/см² [11]), коливань температури, напружень засипки та різноманітних деформацій внаслідок переміщення ґрунтів, взаємодії покриття з поверхнево-активними складовими ґрунту і т.д. Таким чином катодний захист конструкції на початкових стадіях порушення ізоляції здійснюється через тонкі шари ґрунту, що забивається

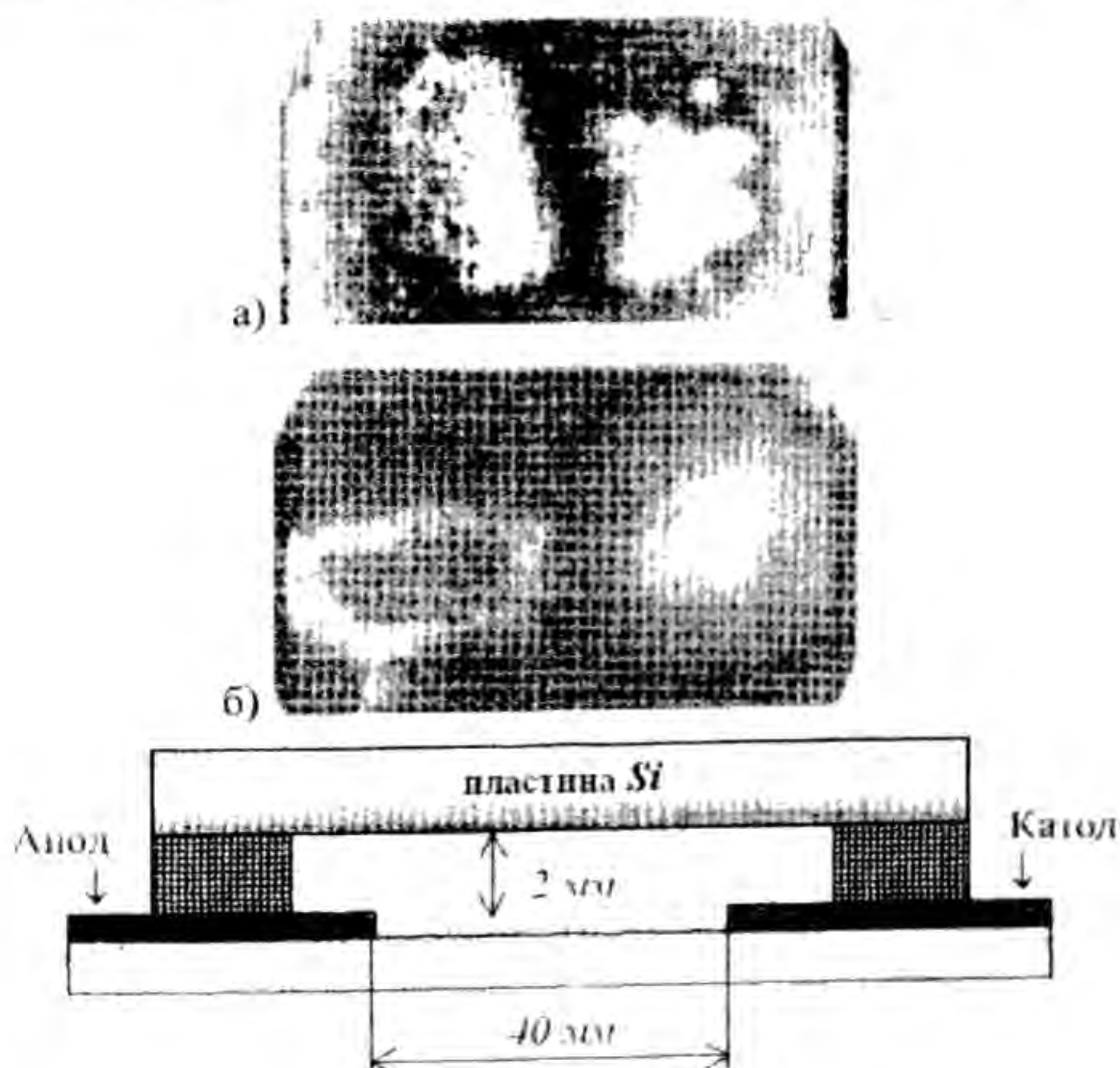


Рис. 7. Хемографічно візуалізовані за допомогою пластини Si процеси електролізу в тонкому (2мм) шарі вологого (10% від об'єму) піску. а) –15 хв, б) –60 хв контакту з піском. Внизу показано схему досліду: пластина кремнію очищеною від окислів хемографічно активною стороною контактувала з шаром піску.

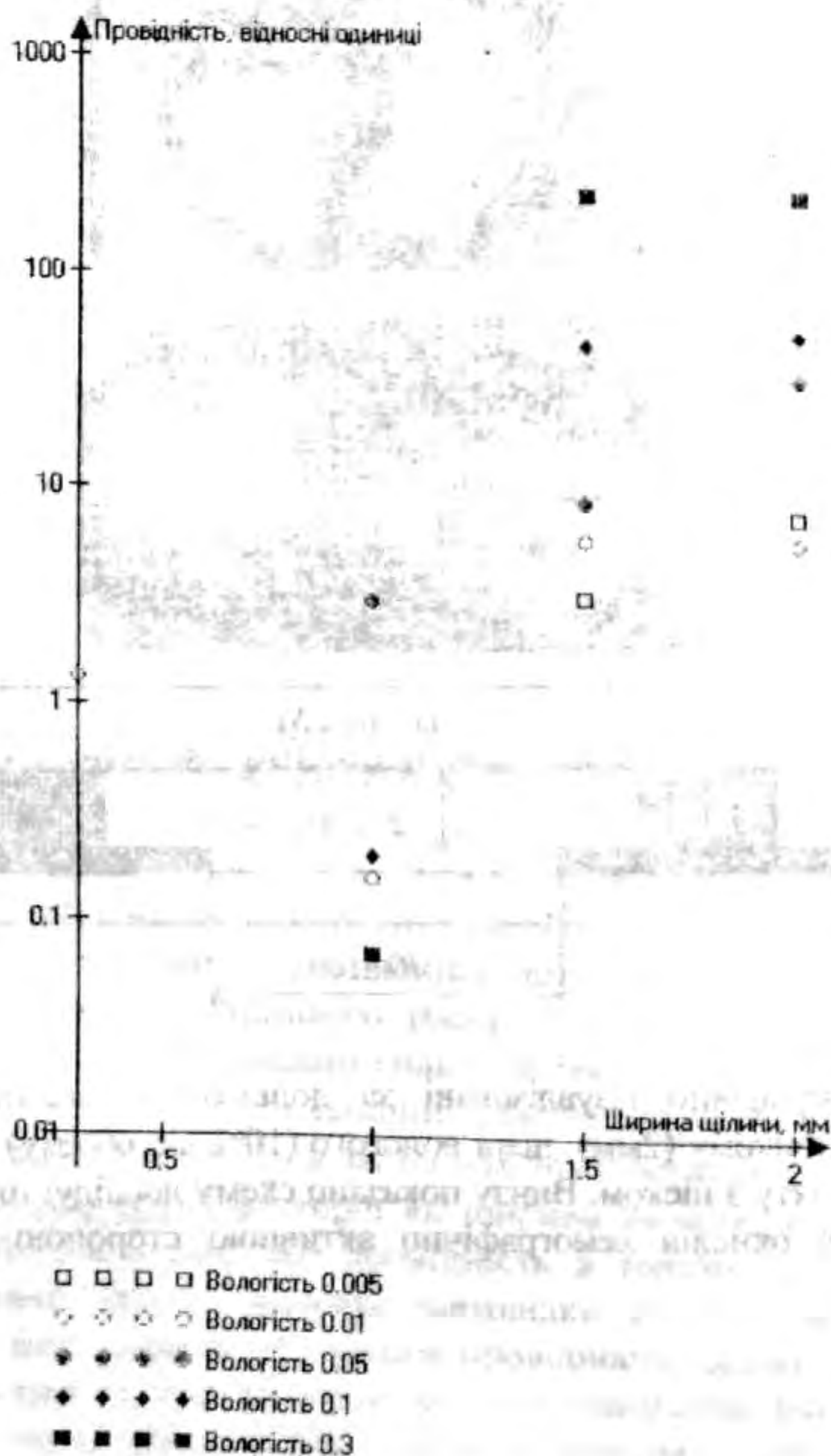


Рис. 8. Залежність провідності піску в щілині від ширини щілини при тиску 14,75МПа. Вологість піску вказана в об'ємних частках. Вимірювання робилися для щілин завширшки 0,3; 0,5; 1; 1,5; 2мм (див. схему дослідів на рис. 4).

в щілини й тріщини у ній, і цілком залежить від провідних властивостей цих шарів, а при малих вологостях ґрунту вона є, як видно з рис.1, на кілька порядків меншою за ту, яку має ґрунт як суцільне середовище. Особливо значне зменшення провідності може бути, якщо матеріал ізоляції робить частинки ґрунту, що забиваються в цю тріщину, масними і незмочуваними (рис.1, крива 2). Через це дієвість катодного захисту ділянок поверхонь металів, що контактують з тонкими шарами ґрунту (щілини, тріщини в металі, в ізоляції тощо), є вельми сумнівною, а біокорозія [12] на таких ділянках приводить до все більшого ураження металу.

Висновок. На прикладі модельного ґрунту досліджено його провідність в залежності від об'ємної частки електроліту. Встановлено найбільш можливі механізми провідності, а також те, що провідність тонких шарів піску значно відрізняється від провідності суцільного його об'єму, що потрібно враховувати при проектуванні систем катодного захисту.

Література

1. Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энциклопедия, 1966.
2. Дегасюк В. Геология. – М.: Аванта+, 1995.
3. Улиг Г.Г., Реви Р.У. Коррозия и борьба с ней – Л.: Химия, 1989.
4. Розенфельд И.Л. Коррозия и защита металлов. – М.: Металлургия, 1969.
5. Yelizarov M.A. Visualization of early stages of corrosion processes by a chemography method. // Surface and Interface Analysis, 2006. – 38. – с. 263-266.
6. Ефрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. – М.: Наука, 1982.
7. Штрауф Е.А. Молекулярная физика. – М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1949.
8. Елизаров А.И., Богобоящий В.В. Новый метод регистрации сверхнизких концентраций некоторых веществ в газовых смесях // Доклады АН УССР. Серия: "Матем. Природозн. Техн. науки". – 1991. – 3. – с. 60-62.
9. Єлизаров О.І., Куц В.М., Сукачов О.В. Про ефект взаємодії деяких напівпровідників з фотоемульсією // УФЖ. – 1996. – 41 (4). – с. 455-457.
10. Богобоящий В.В., Елизаров М.А. Десорбция атомарного водорода при окислении Si и его диффузия в водной среде. // Конденсированные среды и межфазные границы – 2004. – 6 (2). – с. 133-139.
11. Иванцов О.М. // Строительство трубопроводов. – 1996. – 2. – с. 24-31.

12.Середницький Я.А., Супрун В.В., Бодак В.С. и др. Микробиологическая коррозия стальных трубопроводов и изоляционных покрытий // Физико-химическая механика материалов. – 1988. – 4. – с. 97-101.

Надійшла до редакції ??.???.2006

УДК 539.213

Захаренко* М. І., доцент,
Семен'ко^о М. П., доцент

Вплив легування перехідними металами на електроопір аморфних сплавів на основі Fe.

Досліджено вплив легування перехідними металами на електричний опір ρ аморфних сплавів на основі заліза. Показано, що характер температурної залежності електроопору залежить від положення легуючої домішки в таблиці Менделєєва відносно заліза. Знайдені зміни температурної поведінки ρ досліджуваних систем неможливо пояснити лише в рамках дифракційної моделі Фабера-Займана, оскільки важливу роль відіграють інші механізми розсіювання.

Ключові слова: аморфні сплави, електричний опір, температурний коефіцієнт опору, залізо.

M. I. Zakharenko*, assistant prof.,
M. P. Semen'ko^o, assistant prof.,

Influence of transition metals doping on the electric resistivity of Fe-based amorphous alloys.

The influence of transition metals doping on the electric resistivity ρ of Fe-based amorphous alloys has been studied. The character of temperature dependence of electric resistivity was shown to be depended on the position of doping impurity in periodic table relatively to iron. These changes of temperature dependence of ρ can not be explained only within the Faber-Ziman diffraction model and required to use other scattering mechanisms.

Key Words: amorphous alloys, electric resistivity, thermal coefficient of resistivity, iron.

* E-mail: zakharenko@univ.kiev.ua; ^o E-mail: smp@univ.kiev.ua

Електричний опір матеріалів, в тому числі й аморфних металевих сплавів (АМС), є не тільки досить важливим функціональним параметром, який визначає технологічні характеристики, але й величиною, яка відображає особливості атомної та електронної структури. Не зважаючи на те, що концентрація носіїв електричного струму в АМС є відносно великою ($\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$), значення їх питомого електричного опору суттєво відрізняється від кристалічних аналогів. Для пояснення механізмів, які обумовлюють процеси розсіювання носіїв електричного струму в аморфних матеріалах в даний час використовують цілий ряд моделей [1,2]. Однак пояснити особливості змін величини питомого електричного опору є досить непросто. Причина полягає не тільки в наявності особливих механізмів розсіювання в аморфному стані, але й в тому, що питоме значення електричного опору ρ є досить чутливим до розмірних факторів, які виникають внаслідок різних швидкостей гартування, структурної релаксації, змінами в локальних атомних конфігураціях, тощо [3]. Через вказані вище причини аналіз експериментальних даних по електроопору є досить складний, і в більшості випадків носить лише якісний характер [1].

Однією з теорій, яка дає можливість пояснити особливості температурної поведінки електричного опору цілого ряду АМС є дифракційна теорія Фабера-Займана [1-3], яка була використана і нами для пояснення особливостей транспортних властивостей аморфних сплавів на основі заліза [4,5]. Однак проведення додаткових досліджень та розширення номенклатури АМС виявило певні протиріччя при аналізі результатів з використанням цієї теорії, особливо при проведенні низькотемпературних вимірювань ρ .

Тому метою даної роботи є дослідження температурної залежності електричного опору ряду АМС на основі заліза та аналіз правомірності застосування теорії Фабера-Займана для пояснення отриманих результатів.

Приготування зразків та методика експерименту. Аморфні металеві сплави $\text{Fe}_{80}\text{ПМ}_5\text{B}_{15}$, $\text{Fe}_{75}\text{ПМ}_5\text{B}_{20}$ та $(\text{Fe}, \text{Ni}, \text{Mo})_{82}\text{Si}_2\text{B}_{16}$ були виготовлені у вигляді стрічок шириною до 15 мм і товщиною 25-30 $\mu\text{м}$ методом спінінгування розплаву з використанням хімічно чистих компонентів.

Контроль структурного стану проводили на автоматичному дифрактометрі ДРОН-4-07 з використанням CoK_α випромінювання.

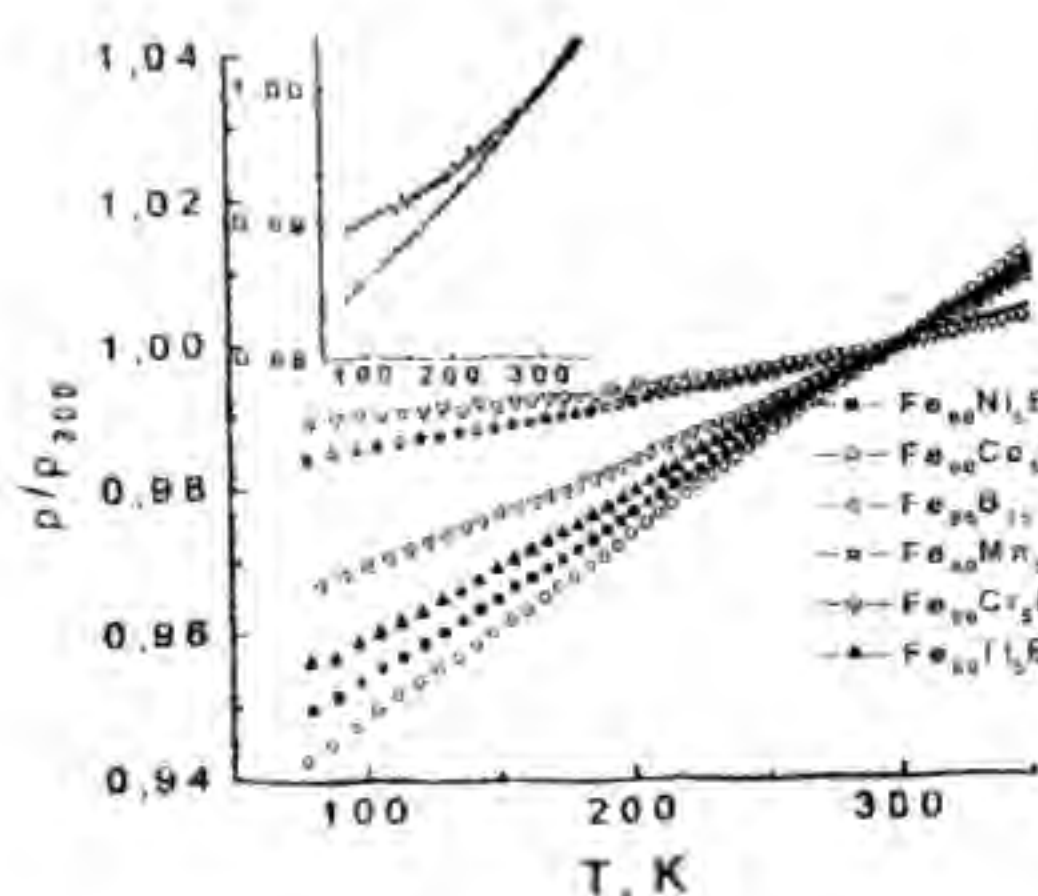
Дослідження температурної залежності електричного опору $\rho(T)$ проводили за стандартною чотирьохзондовою методикою в інтервалі 77-400 К. При необхідності дослідження проводили у більш широкому температурному інтервалі, з використанням іншого вимірювального блоку. Управління експериментом і запис кривих $\rho(T)$ проводився з використанням ПК.

Експериментальні дані та їх обговорення. Досліджувані АМС є рентгеноаморфними, про що свідчить характер кутового розподілу розсіяного рентгенівського випромінювання, де спостерігається лише широке гало, притаманне некристалічним матеріалам.

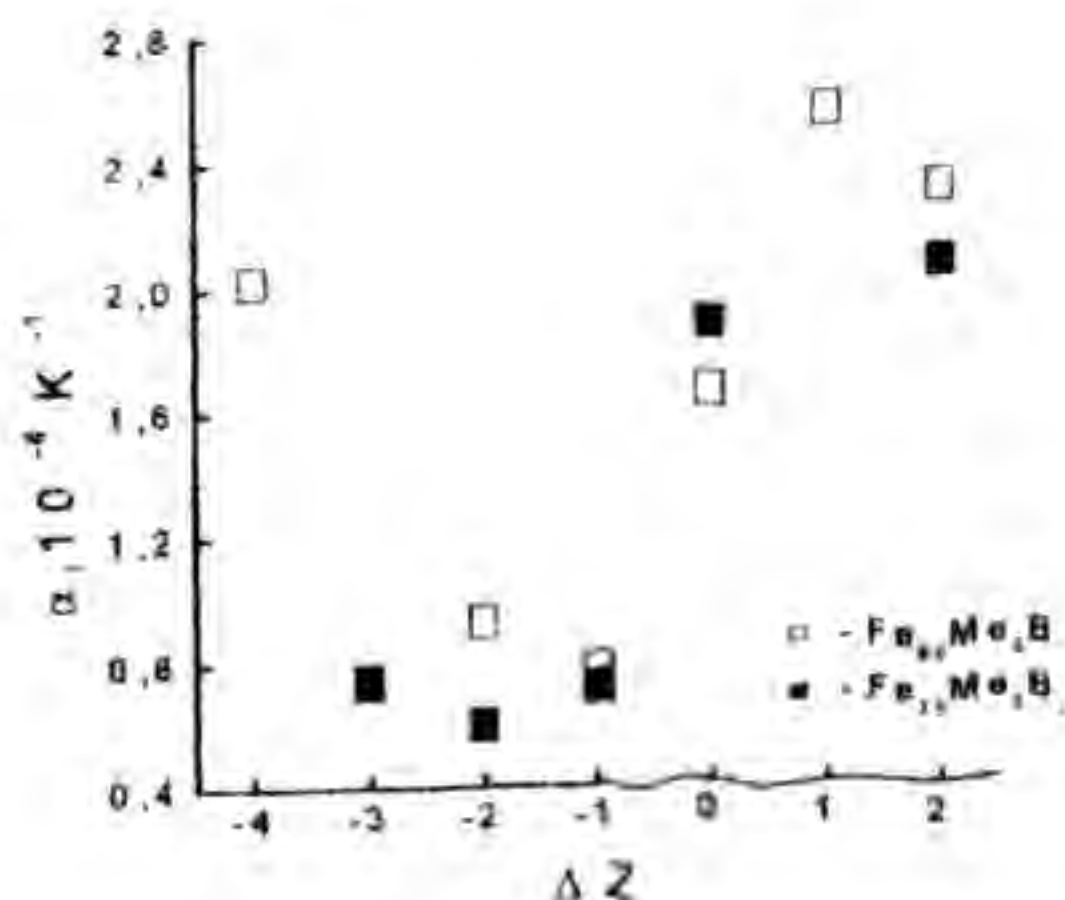
Температурна залежність приведенного електричного опору ρ/ρ_{300} для АМС $\text{Fe}_{80}\text{ПМ}_5\text{B}_{15}$ (ПМ=Ni, Co, Fe, Mn, Cr, Ti) представлена на Рис.1,а. Як видно з рисунка, температурна залежність ρ/ρ_{300} АМС з ПМ=Ni, Co, Fe та Ti є лінійною, що є типовим для подібних матеріалів. Однак при легуванні Mn та Cr спостерігається зменшення температурного коефіцієнта опору (ТКО) і з'являється суттєва нелінійність кривої $\rho/\rho_{300}(T)$ (див. виноску на Рис.1.а).

Такий же характер поведінки ρ виявляють аморфні сплави $\text{Fe}_{75}\text{ПМ}_5\text{B}_{20}$. Тобто, для ПМ=Ni та Fe залежність $\rho/\rho_{300}(T)$ є лінійною, в той час, як легування елементами Mn, Cr та V призводить до суттєвого зменшення ТКО і до нелінійної зміни ρ/ρ_{300} з температурою.

На Рис.1,б представлена залежність ТКО від ΔZ (різниця порядкових номерів Fe та ПМ) для АМС $\text{Fe}_{80}\text{ПМ}_5\text{B}_{15}$ та $\text{Fe}_{75}\text{ПМ}_5\text{B}_{20}$. Як видно,



а



б

Рис.1 Температурна залежність приведенного електричного опору ρ/ρ_{300} аморфних сплавів $\text{Fe}_{80}\text{PM}_5\text{B}_{15}$ (а) та залежність ТКО α від ΔZ для АМС $\text{Fe}_{80}\text{PM}_5\text{B}_{15}$ та $\text{Fe}_{75}\text{PM}_5\text{B}_{20}$.

незважаючи на різний вміст металоїду ці залежності є подібними для обох серій АМС і взаємно доповнюють одна одну.

Проведені нами дослідження показують, що такий характер поведінки ρ/ρ_{300} від T зберігається і при легуванні не тільки 3d, а й 4d та 5d елементами. Зокрема для АМС $\text{Fe}_{75}\text{Me}_5\text{B}_{20}$ з $\text{PM}=\text{Mo}, \text{W}, \text{Ta}$ та Nb значення ТКО становлять $0.85 \cdot 10^{-4}$, $0.6 \cdot 10^{-4}$, $0.51 \cdot 10^{-4}$ та $0.79 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, відповідно, і спостерігається суттєва нелінійність залежності $\rho(T)/\rho_{300}$.

Як і для систем Fe-B , при легуванні сплаву $\text{Fe}_{82}\text{Si}_{12}\text{B}_{16}$ нікелем лінійність залежності $\rho/\rho_{300}(T)$ зберігається, в той час як легування Mo призводить до суттєвого зменшення ТКО і помітної нелінійності $\rho/\rho_{300}(T)$. Сказане підтверджують результати, представлені на Рис.2.

Поведінка кривих, наведених на Рис.1, якісно і кількісно узгоджується з наявним в літературі експериментальними залежностями $\rho(T)$ для сплавів на основі заліза [6,7]. Розглянемо наскільки справомірним використувати теорію Фабера-Займана для аналізу результатів.

Розрахунок електронної структури аморфного заліза та АМС системи Fe-B та результати досліджень фотоелектронної спектроскопії показують, що легування базових складів 3d-перехідними металами практично не змінює електронних спектрів даних систем, а лише призводить до певного зсуву положення вектора Фермі k_F в той чи інший бік в залежності від типу легуючої домішки [8,9]. Суттєвих змін при цьому не зазнає і структурний фактор $S(K)$.

Згідно теорії Фабера-Займана, температурний коефіцієнт опору α визначається значенням структурного фактору при $K=2k_F$ і наближено може бути представлений у вигляді:

$$\alpha = B(1 - S(2k_F)).$$

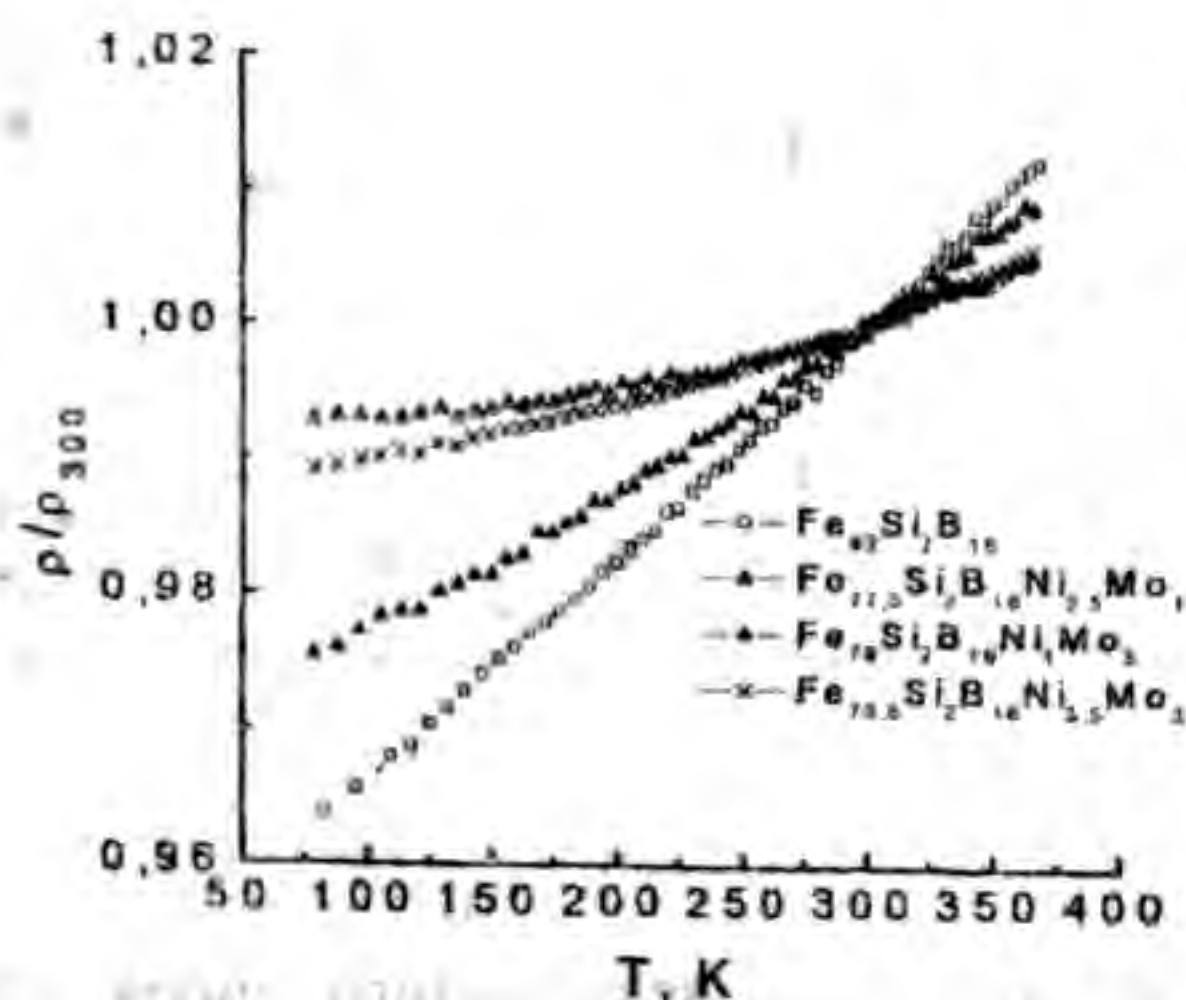


Рис.2. Температурна залежність приведенного електричного опору ρ/ρ_{300} аморфних сплавів системи Fe-Si-B.

Дійсно, в рамках даної моделі при $T > \theta_D$ (θ_D – температура Дебая) електроопір прямопропорційний температурі. При $T < \theta_D/2$ ця залежність має квадратичний характер. Однак, незважаючи на те, що в літературі мало даних про значення θ_D для цих АМС, а часом вони не узгоджуються між собою, сильні зміни температури Дебая при такому вмісті домішки, який у досліджуваних сплавах, здаються малоімовірним.

Однак в рамках існуючих моделей [1-3] досить складно визначити той чи інший домінуючий механізм розсіювання, який відповідає за виявлену поведінку $\rho(T)$. Зокрема, проведений нами аналіз не виключає можливості вкладу в електроопір когерентного електрон-магнетонного розсіювання [10], механізму інтерференції непружного електрон-електронного розсіювання на домішках [11]. Не виключено також існування в даних системах локалізованих [12] та резонансних d-електронних станів [13].

Отримані в даній роботі результати не дають можливості однозначно вибрати той чи інший механізм, який може пояснити зміну залежностей $\rho(T)$ досліджуваних АМС при заміщенні Fe іншими ПМ. На нашу думку, найбільш ймовірним є існування в даних АМС декількох механізмів розсіювання (зокрема механізму Фабера-Займана), які впливають на характер кривих $\rho(T)$. Вибір того чи іншого з них як домінуючого вимагає більш детального теоретичного аналізу та додаткових експериментальних досліджень.

Таким чином, якщо легуюча домішка розміщена правіше заліза, то це повинно було б привести до збільшення k_F та $S(2k_F)$, а відповідно – до зменшення α . Якщо ж легуюча домішка розміщена лівіше Fe, то повинна спостерігатися протилежна ситуація. Отримані нами експериментальні залежності $\alpha(\Delta Z)$ свідчать про те, що такий підхід не може бути використаний для пояснення електричних властивостей досліджуваних АМС. Крім того, теорія Фабера-Займана не може пояснити зміну лінійної залежності $\rho(T)$ при легуванні.

Література

1. Hasegawa R. Glassy Metals: Magnetic, Chemical and Structural Properties. – Boca Raton, Florida: CRC Press, 1983.
2. Немошкालенко В.В., Романова А.В., Ильинский А.Т. и др. Аморфные металлические сплавы - Киев: Наукова думка, 1987. - с. 119-146.
3. Люборский Ф.Е. Аморфные металлические сплавы. – М.: Металлургия, 1987., 464с.
4. Semen'ko M.P., Stelmakh O.I., Zakharenko M.I. Evolution of electrical resistivity Fe-B-based amorphous alloys at crystallization// High Temp. – High Press. – 2001. – 33. – p. 279 – 283.
5. H.Atmani, M.Babich, M.Semen'ko, M. Zakharenko. The investigation of FeZrB nanoperm-type metallic glass// Mater. Sci. Forum. – 2001. – v. 373–376. – p. 281 – 285.
6. Мерисов Б.А., Краснокутский А.В., Гриб А.Н., Прокошин А.Ф. Электросопротивление аморфных сплавов $Fe_{75}Cr_5B_{20}$ и $Fe_{75}Nb_5B_{20}$ при низких температурах// Металлофизика – 1990. – Т.12, №2. – с.36-40.
7. Zhan W., Shen B., Zhao J., Chen J. Electrical resistivity study of Fe-based amorphous alloys// Acta phys. Sinica – 1986. – 35, N5. – p.583-589.
8. Hafner J., Tegze M. The atomic and electronic structure of metallic glasses: search for a structure-induced minimum in the density of states // J. Phys. F: Met. Phys. – 1988. – v. 18, N 12. – p. 2583-2604.
9. Плющай І.В., Захаренко, М.І., Макара В.А., Наконечна О.І. Вплив топологічного безладу на електронний спектр атомів заліза // Вісник Миколаївського держ. пед. унів. – 1999. – в. 1. – с. 275-279.
10. Thummes G., Kotzler J., Ranganathan R., Krishnan R. Electron-electron interaction and magnon scattering in the d-electron dominated resistivity of $Ni_{80-x}Fe_xSi_8B_{12}$ glasses// Z.Phys. B, Condens.Matter. – 1988. – 69, N4. – p.489-499.
11. Альтшулер Б.Л., Аронов А.Г. К теории неупорядоченных металлов и сильнолегированных полупроводников// ЖЭТФ. – 1979. – 77, №5. – с.2028-2044.
12. Мотт Н. Электроны в неупорядоченных структурах.- М.: Мир, 1969, 172с.
13. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках// М.Наука. – 1984. – 352 с.

Надійшла до редакції 20.05.2006

УДК 548.4; 548.0:539.3.8

Макара В.А., зав. кафедри фізики металів,
Стебленко Л.П., старший науковий співробітник,
Курилюк А.М., аспірантка,
Кольченко Ю.Л., інженер,
Науменко С.М., провідний інженер,
Матвєєва О.В., студентка,
Кріт О.М., студент

Зміна мікротвердості кристалів кремнію в магнітних полях з різною індукцією

В роботі досліджено зміну мікротвердості кристалів кремнію в результаті дії магнітних полів (МП), що мають різну індукцію ($B = 0,03 \div 0,33$ Тл). Встановлено, що спричинена магнітним полем відносна зміна мікротвердості, тобто магнітомеханічний ефект (ММЕ), не залежить від величини індукції МП. Одержані результати вказують на те, що фізична природа ММЕ пов'язана з спин-ізотопними і спин-ядерними ефектами.

Ключові слова: кремній, магнітне поле, індукція, мікротвердість, магнітомеханічний ефект.

E-mail: yu_l_kolchenko@univ.kiev.ua, kurylyuk_a@univ.kiev.ua

V. A. Makara, head of the physics of metals department,
L. P. Steblenko, senior research worker,
A. M. Kuryliuk, post-graduate student,
Yu. L. Kolchenko, engineer,
S. M. Naumenko, principal engineer,
O. V. Matveeva, student
O. M. Kryt, student

The microhardness modification of silicon crystals in magnetic fields with different induction

The microhardness modification of silicon crystals due to action of the magnetic fields (MF) with different induction ($B = 0,03 \div 0,33$ T) was investigated. It has been shown that the relative microhardness modification caused by the action of the magnetic field, i.e. magnetomechanical effect (MME) does not depend on induction value of the MF. The obtained results prove that the physical nature of the MME is connected with spin-isotope and spin-nuclear effects.

Key Words: silicon, magnetic field, induction, microhardness, magnetomechanical effect.

Проблема взаємодії поля з речовиною є однією з фундаментальних проблем фізики твердого тіла. В літературі давно і детально розглядались впливи магнітних полів, в тому числі і слабких (≤ 1 Тл) магнітних полів на фізичні, зокрема, механічні властивості металів. Однак питання про можливий вплив магнітного поля на механічні властивості і реальну структуру „немагнітних” кристалів (наприклад, лужно-галоїдних або напівпровідникових) довго не ставилось. Це пов'язано з міркуваннями загального характеру. Енергія, яка передається полем $B \sim 1$ Тл одному парамагнітному центру (домішковому дефекту або електрону, локалізованому на дислокації), складає $\Delta U \sim \mu_B \sim 10^{-4}$ еВ (μ_B – магнетон Бора), що на три порядки нижче, ніж kT при $T=300$ К. Звідси слідує, що на зміни фізичних, зокрема механічних властивостей, немагнітних кристалів

під впливом такого поля очікувати не доводиться. Між тим, роботи останнього двадцятиріччя піддали вказані погляди принциповому перегляду. Так, останнім часом встановлено, що дія слабких імпульсних магнітних полів на напівпровідникові кристали призводить як до довгочасних немонотонних змін структури, так і до зміни структурно-залежних властивостей [1-4].

Домінуючими в літературі модельними уявленнями про магніточутливі ефекти в „немагнітних” матеріалах є уявлення, в основі яких лежить механізм викликаної дією зовнішнього магнітного поля спінової конверсії в парамагнітних центрах, що входять до комплексів точкових дефектів (КТД). При цьому роль магнітного поля зводиться до зняття спінової заборони на певний електронний перехід в системі, що радикально змінює спінову конфігурацію домішкових центрів в КТД і приводить до їх розпаду. Відмітимо, що не дивлячись на певні успіхи, природа магнітозалежних явищ в підсистемі структурних дефектів на сьогоднішній день не до кінця з'ясована.

Слід також зазначити, що в літературі питома вага досліджень впливу слабких постійних магнітних полів на кристали напівпровідників, порівняно з лужно-галоїдними кристалами, мала. В зв'язку з цим метою даної роботи було вивчення фізичних ефектів зміни мікротвердості в кристалах кремнію під дією слабких постійних магнітних полів (МП) з різною магнітною індукцією. Індукція магнітного поля, яке створювалось за допомогою електромагніту, варіювалась в межах $B = 0,03 \div 0,33$ Тл. Час витримки зразків Si в МП, тобто час магнітної обробки складав $t_{\text{мп}} = 30$ хвилин. Виміри мікротвердості здійснювались на приладі ПМТ-3 після вилучення зразків з магнітного поля. Після цього розраховувалась відносна мікротвердість (величина зміни мікротвердості після магнітного впливу по відношенню до мікротвердості зразків Si, які не зазнали магнітної обробки (МО)). Ця характеристика інтерпретувалась як магнітомеханічний ефект (ММЕ). Похибка в оцінці ММЕ по вимірам мікротвердості складала $\sim 4\%$. ММЕ досліджувався на кристалах Si p – типу провідності. Одержані результати, які представлені на рис. 1, вказують на відсутність залежності магнітомеханічного ефекту від індукції магнітного поля в досліджуваному діапазоні зміни величини індукції.

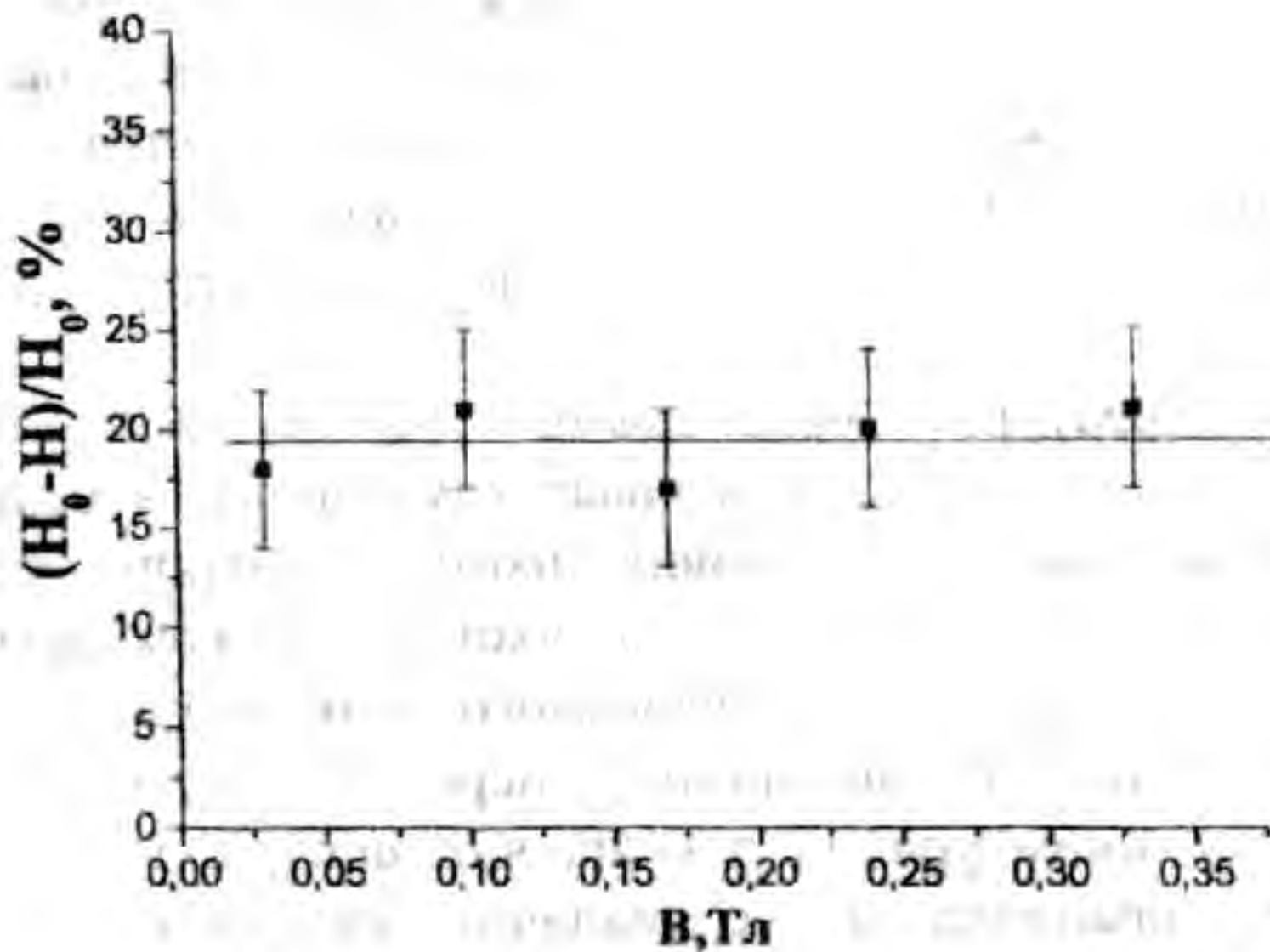


Рис. 1. Залежність відносної мікротвердості кристалів кремнію від величини індукції магнітного поля. H_0 – мікротвердість вихідних (контрольних) зразків Si; H – мікротвердість зразків Si після магнітної обробки. Час магнітної обробки $t_{mo} = 30$ хвилин.

Таким чином, здійснене в роботі вивчення ефекту магнітного впливу на кристали кремнію свідчить про нечутливість магнітомеханічного ефекту, тобто кінетики деформування приповерхневих шарів кристалів кремнію, що зазнали МО, до величини індукції магнітного поля.

Крім того, в роботі встановлено, що ММЕ, який з'являється після магнітної обробки кристалів кремнію, не релаксує протягом тривалого часу (рис. 2). Релаксація ММЕ спостерігалась лише через ~ 360 днів (тобто через 1 рік) після вилучення зразків Si з магнітного поля.

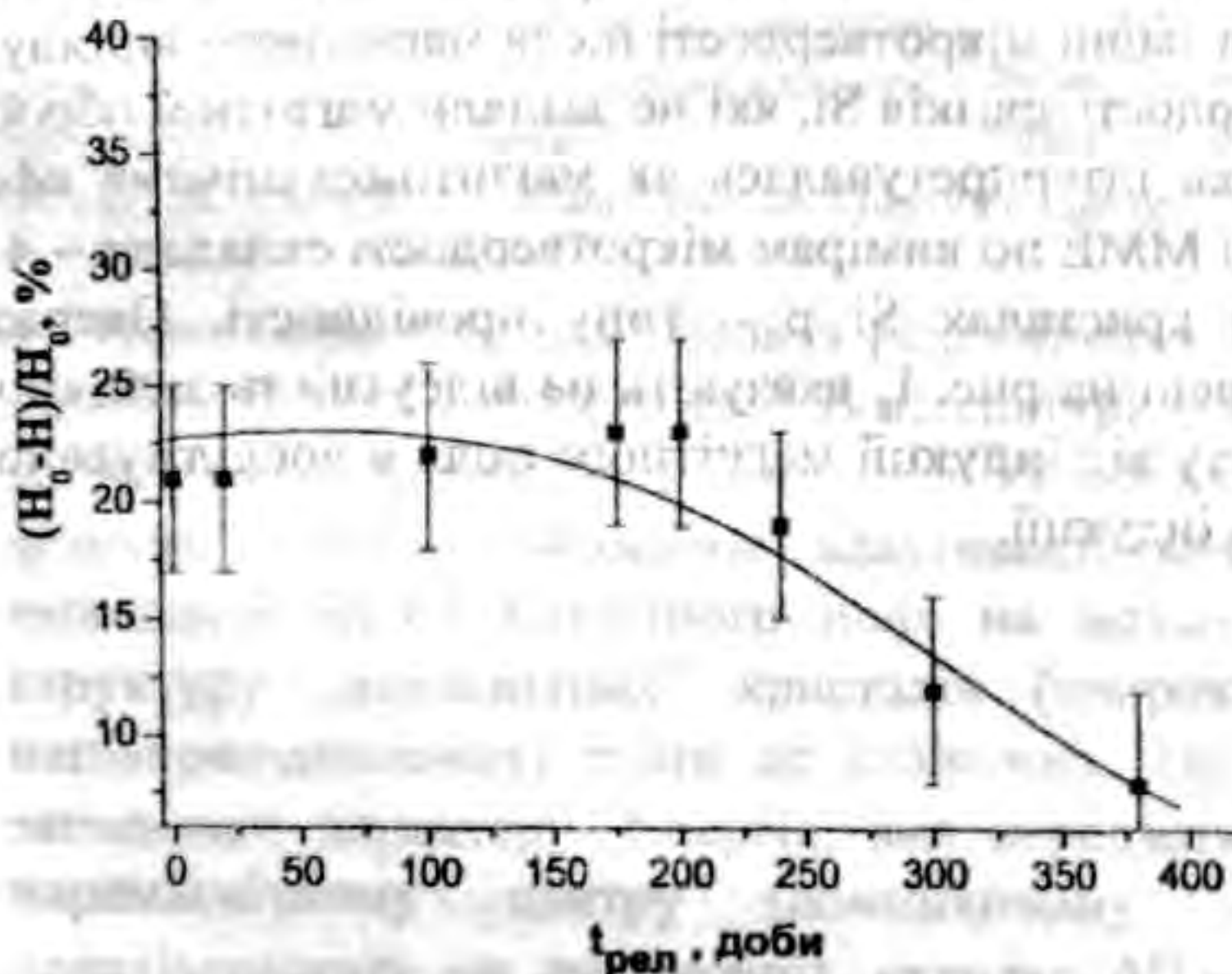


Рис. 2. Релаксація відносної мікротвердості в кристалах кремнію після завершення магнітної обробки. H_0 – мікротвердість вихідних (контрольних) зразків Si; H – мікротвердість зразків Si після магнітної обробки. Індукція магнітного поля $B = 0,33$ Тл.

Таким чином, нетривіальна особливість одержаного ММЕ полягає в тому, що він ідентифікується не в процесі прикладання магнітного поля, а після завершення його дії. Такий прояв магнітного впливу свідчить про появу своєрідної «магнітної пам'яті». Отже, ініційовані магнітним полем перетворення можуть продовжувати розвиватись і після завершення магнітної обробки та проявлятись на протязі тривалого часу в зміні мікромеханічних властивостей.

Особливості зміни мікромеханічних властивостей в магнітному полі, подібно до інших магніточутливих явищ, знаходять свою фізичну інтерпретацію в рамках спін-залежної електронної теорії [5]. Найбільш імовірним результатом спін-залежного процесу в магнітному полі може бути розпад домішкового кластера на складові, які потім рекомбінують з іншими дефектами. Подібна модифікація дефектно-домішкової підсистеми, викликана дією МП, на нашу думку, і призводить до появи ММЕ. Відсутність залежності ММЕ від величини індукції магнітного поля, яка спостерігалась в наших експериментальних умовах, з позицій розвинутих в спін-залежній електронній теорії положень вказує на необхідність врахування в аналізі природи ММЕ надтонкої взаємодії, спін-ядерних та ізотопних ефектів. Ці міркування виводять подальші дослідження механічних властивостей і, зокрема ММЕ, на ще більш глибокий рівень побудови речовини – ядерно-ізотопний.

Слід також зазначити, що експериментальні результати, одержані в даній роботі, по характеру деяких залежностей, зокрема по характеру релаксаційних залежностей відрізняються від результатів одержаних в попередніх дослідженнях. Так, на відміну від більш ранніх результатів [6], які одержані при дослідженні впливу слабкого $B = 0,17$ Тл постійного магнітного поля на мікротвердість кристалів Si, і в яких був зафіксований факт досить швидкої (~ 3 години) релаксації ММЕ, експериментальні результати даної роботи свідчать про тривалу (~ 1 рік) релаксацію ММЕ. Крім того, час магнітної обробки зразків Si, який використовувався в даній роботі $t_{mo} = 30$ хв був значно меншим, ніж у попередніх дослідженнях ($t_{mo} = 7$ діб). Відмінності експериментальних умов, в яких проявляється ММЕ і вплив цих умов на характер релаксації ММЕ, імовірно, може бути пов'язаний з відмінністю природи тих магнітних полів, які використовувались в роботі [6] та в даній роботі. Але це питання потребує подальшого експериментального вивчення і уточнення.

Робота виконана в рамках спільного проекту фундаментальних досліджень Державного фонду фундаментальних досліджень України і Білоруського республіканського фонду фундаментальних досліджень "ДФФД - БРФФД - 2005" (проект № 10.01/008).

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Кукушкин Н.В., Постников С.Н., Терман Ю.А., Кедяркин В.М. Изменение упругонапряженного состояния структур Si-SiO₂ под воздействием импульсного магнитного поля // ЖТФ. – 1985. – т. 55, вып. 10 – с. 2083 – 2084.
2. Данилюк А.Л., Нарейко А.И., Колебательная релаксация поверхностной проводимости кремния после воздействия слабого магнитного поля // Поверхность. – 1996. – №9 – с.27-33.
3. Бузыкин В.Н., Дацко О.И., Постников С.Н. Процессы долговременной релаксации реальной структуры кремния после ее обработки импульсным магнитным полем // Электронная обработка материалов. – Кишинев: Институт прикладной физики АН Республики Молдова. – 1993. – № 2. – С.16-19.
4. Левин М.Н., Татаринцев А.В., Косцов О.А., Косцов А.М. Активация
5. Зельдович Я. Б., Бучаченко А. Л., Франкевич Е. Л. Магнито-спиновые эффекты в химии и молекулярной физике. // УФН. – 1988. – Т.155, №1. – С.3-45.
6. Макара В.А., Кольченко Ю.Л., Стебленко Л.П., Руденко О.В., Науменко С.М. Вплив постійного магнітного поля на мікротвердість кристалів кремнію. // Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки. – 2003. – в.1. – С.377-383.

Поступила в редакцію 30.08.06

УДК 539.194

Борис А. Охріменко¹, Катерина С.
Яблочкова²

Вплив ангармонізму нормальних коливань на девіацію зв'язків H-X молекул типу H₂X

Стаття присвячена дослідженню девіації хімічного зв'язку молекул H₂S, H₂Se, H₂Te. З метою дослідження у роботі було розглянуто обернену спектральну задачу коливної спектроскопії. Розрахунки виконано методом 3N - матриць, який не потребує використання попередніх припущень про характер силового поля молекули. В статті оцінено як кути девіації хімічного зв'язку для кожної з молекул, так і частоту інверсії цих молекул через бар'єр лінеаризації.

Ключові слова: хімічний зв'язок, потенціальний бар'єр, інверсія.

¹ E-mail: bao@mail.univ.kiev.ua

² E-mail: yablochkova@yahoo.com

Boris A. Okhrimenko¹, Kateryna S.
Yablochkova²

Influence of anharmonicity of normal vibrations on the deviation of the H-X bond in H₂X molecules

The article focuses on the study of the deviation of the chemical bond in H₂S, H₂Se, H₂Te molecules. For this purpose, the reverse spectral problem of the molecular spectroscopy was solved. The calculations were performed with the help of 3N matrices method. This method requires no use of the presuppositions of the character of the force field. Both the deviation angles and the inversion frequency through the linearization barrier of these molecules were estimated.

Key Words: chemical bond, potential barrier, inversion

Вступ

В останні роки в літературі приділено велику увагу вивченню явища монодромії для молекули води. Зокрема, широко обговорюється питання оцінки висоти бар'єру лінеаризації молекули води [1-4].

Однак, за нашими даними, в літературі не обговорюється питання оцінки частоти інверсії молекули води через бар'єр лінеаризації – феномен, що є характерним, наприклад, для молекули NH₃ [5]. Проведені в роботі [6] розрахунки показали, що в газоподібному стані частота інверсії не збудженої молекули води є помітною і становить 1.38 Гц.

З огляду на аномальні властивості води [7] постає питання, в якому ступені дані особливості характерні для найближчих аналогів молекули води – інших гідридів шостої групи. Відповідно, виникає інтерес проведення аналогічних розрахунків для молекул H₂S, H₂Se та H₂Te.

Метод

Розв'язання оберненої спектральної задачі коливальної спектроскопії у роботі [8] спирається на формулу:

$$\hat{V} = \hat{M} \hat{L} \hat{\omega} \hat{L}^T \hat{M}, \quad (1)$$

де $\hat{V}$ - силова матриця, $\hat{M}$ - діагональна матриця мас атомів, що входять до складу молекули, $\hat{\omega}$ - діагональна матриця квадратів частот, як власних, так і невластних нормальних коливань молекули, знаком тильда позначена операція транспонування.

Матриця $\hat{L}$ визначає форму власних і невластних нормальних коливань досліджуваної молекули. Форми повносиметричних коливань визначаються із міркувань симетрії не однозначно, а з точністю до «параметра форми», що введений у матрицю $\hat{L}$. Параметри форми є різними для різних ізотопних модифікацій молекули. Порядок усіх матриць, що входять в (1) – $3N$.

Матриця $\hat{V}$ є однаковою для різних ізотопних модифікацій досліджуваної молекули, однак елементи інших матриць, що входять в (1) змінюють своє значення при переході від досліджуваної молекули до її ізотопних модифікацій.

Врахування ангармонізму коливань відбувається у два етапи. На першому етапі знаходяться значення нульових частот коливань за експериментальними частотами нормальних коливань. Співвідношення (1) дозволяє знайти аналітичні вирази для всіх елементів силової матриці. З цією метою використовувалася формула [9]

$$\omega_{0i} = \omega_i (1 + u_i \omega_i), \quad (2)$$

де ω_i і ω_{0i} - частота, що спостерігається експериментально, і частота нульових коливань, відповідно.

Значення параметрів ангармонізму u_i розраховувалися окремо для кожного з нормальних коливань. З цією метою було розв'язано систему рівнянь, складених за наступною схемою. Оскільки параметри ангармонізму, що відповідають різним ізотопним модифікаціям молекул вважаються однаковими, і у силовій матриці, що відповідають двом ізотопним модифікаціям, можуть бути введені такі параметри форми, що ці елементи будуть рівними, параметри ангармонізму можуть бути знайдені шляхом розв'язання системи рівнянь для декількох елементів силової матриці, що відповідають двом ізотопним модифікаціям. Відповідно до (2) для кожної ізотопної модифікації побудовано матрицю нормальних коливань $\hat{\omega}$.

Для встановлення значення параметра форми для однієї з ізотопних модифікацій молекули, виконувалися наступні обчислення. Визначалися власні значення матриці

$$\hat{D} = \hat{M}_{iso}^{-1} \hat{V}, \quad (3)$$

де матриця $\hat{M}_{iso}$ відповідає ізотопній модифікації молекули H_2X . Власні значення матриці $\hat{D}$ дорівнюють квадратам дев'яти нульових частот ω_{0i}' нормальних коливань ізотопної модифікації молекули H_2X .

Для кількісної характеристики ступеня узгодженості між обчисленими на підставі (3) частотами ω_{0i}' та знайденими за формулою (2) значеннями ω_{0i} використовувалася величина δ – параметр розбіжності:

$$\delta = \sum_i \left(1 - \frac{\omega_{0i}'}{\omega_{0i}} \right)^2, \quad (4)$$

куди підставлялися частоти лише власних нормальних коливань ізотопної модифікації молекули H_2X . За мінімальним значенням δ в залежності від ψ визначалося шукане значення параметра форми коливань.

На другому етапі врахування ангармонізму коливань для кожної компоненти вектора $\vec{Q}$ використовується модельний потенціал $V(Q_i)$.

Залежність потенціальної енергії від повносиметричної нормальної координати Q_1 моделюється функцією Морзе:

$$V(Q_1) = D_1 (1 - e^{-\sigma_1 Q_1})^2. \quad (5)$$

Використовуючи відомий вираз для енергії коливальних станів

$$E_v = \hbar \omega_{0i} \left(v + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_{0i} \chi_i \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (6)$$

і потенціал Морзе, знаходимо параметри потенціалу (5)

$$\omega_i = \frac{E_{11} - E_{10}}{\hbar}, \quad \chi_i = \frac{\omega_{0i} - \omega_i}{2\omega_{0i}}, \quad D_i = \frac{\hbar \omega_{0i}}{4\chi_i}, \quad \sigma_i = \sqrt{2\chi_i \omega_{0i}}. \quad (7)$$

Аналіз форми коливання ω_2 показує, що за умови великих амплітуд коливань можливою є інверсія молекули води та інших гідридів шостої групи через нестабільну конфігурацію симетрії $D_{\infty h}$. Відповідно до цього, для опису коливання ω_2 є доцільним використання двоямного потенціалу. Тому у якості модельного потенціалу для нормальної координати Q_2 обрано модифікований потенціал Меннінга [5]:

$$V(z_2) = D_2 \left[\frac{b_2}{2} - \frac{1}{\cosh^2(\sigma_2 z_2)} \right]^2, \quad (8)$$

де $z_2 = z_0 - Q_2 \sqrt{\frac{2m}{M(M+2m)}} \sin \psi$, ψ – параметр форми, m – маса атому водню,

M – маса атому X молекули H_2X , z_0 – координата центру мас молекули. Координата z_2 таким чином описує зміну відстані атому X молекули H_2X від центру мас молекули.

Обчислення значень параметрів потенціалу Меннінга відбувається у два етапи. На першому етапі для другого коливання за формулами (7) знаходяться значення параметрів потенціалу Морзе.

Другий етап виконаний з наступних міркувань. Покладається, що потенціал дисоціації для кривої Меннінга має бути не меншим, ніж потенціал дисоціації для кривої Морзе. Висота бар'єра між мінімумами потенціалу Меннінга вважається такою, що не перевищує значення функції Морзе у точці, що відповідає нульовій відстані між атомом Х і центром мас молекули H_2X .

Також, другі похідні в точці мінімуму для кривої Морзе і кривої Меннінга повинні бути рівні між собою. Мінімум кривої Меннінга повинен знаходитися в точці рівноважного положення атома Х для кожної з молекул типу H_2X . Висота потенціального бар'єру визначається значенням потенціалу (8) в точці $z_2 = 0$.

У якості модельного потенціалу для нормальної координати Q_3 було обрано потенціал вигляду

$$V(Q_3) = D_3 \left[1 - \frac{1}{\cosh(\sqrt{2}\sigma_3 Q_3)} \right]. \quad (9)$$

Це пов'язано з тим, що крива залежності потенціальної енергії від нормальної координати Q_3 має бути симетричною відносно точки $Q_3 = 0$. Введення величини $\sqrt{2}$ у (9) зберігає в силі формули (7).

У даній роботі було оцінено частоту інверсії Ω_i через потенціальний бар'єр, що для i -го коливального рівня молекули розраховується за відомою формулою:

$$\Omega_i = \frac{\omega_i}{\pi} e^{-I}, \quad (10)$$

де $I = \frac{2\pi}{h} \int_{-z_i}^{z_i} \sqrt{2\mu(V(z_2) - E_{vi})} dz_2$, μ – приведена маса молекули, $V(z_2)$ –

потенціал Меннінга, E_{vi} – енергія i -го коливання, z_i – точка бар'єру, де значення потенціалу Меннінга дорівнює енергії i -го коливального рівня.

Для знаходження потенціальної енергії молекули із врахуванням модельних потенціалів для довільного вектора зсуву $\vec{X}$ використані наступні міркування. Для заданого вектора зсуву атомів із положення рівноваги $\vec{X}$ знайдемо вектор нормальних координат $\vec{Q}$:

$$\vec{Q} = \hat{L}^{-1} \vec{X}. \quad (11)$$

Потенціальна енергія молекули знаходиться як сума:

$$V = \sum_i V(Q_i), \quad (12)$$

де вектор $\vec{Q}$ заданий по даному вектору $\vec{X}$.

Для визначення кута девіації хімічного зв'язку обчислювалася полярна діаграма залежності енергії молекули від напрямку постійного по величині зсуву одного з атомів водню в площині молекули. Положення другого атома водню й атома X залишалися незмінними.

Результати і їх обговорення

У таблиці 1 наведено експериментальні значення частот нормальних коливань гідридів шостої групи. Дані частоти були виправлені на ангармонізм згідно з розрахованими константами ангармонізму, наведеними в таблиці 2.

Нам відомі значення частот нормальних коливань лише таких ізотопних модифікацій молекули $\text{H}_2\text{Te}^{130}$ як $\text{H}_2\text{Te}^{128}$, $\text{H}_2\text{Te}^{126}$, $\text{H}_2\text{Te}^{125}$, $\text{H}_2\text{Te}^{124}$, $\text{H}_2\text{Te}^{123}$, та $\text{H}_2\text{Te}^{122}$ [10–13]. У якості пари ізотопомерів була обрана пара молекул $\text{H}_2\text{Te}^{130}$ та $\text{H}_2\text{Te}^{122}$, оскільки їх частоти коливань та маси відрізняються найбільше з поміж інших можливих пар.

Виконані на парі молекул $\text{H}_2\text{Te}^{130}$ та $\text{H}_2\text{Te}^{122}$ розрахунки показали, що при спробі знайти значення параметрів ангармонізму u_i окремо для кожного з коливань виникають суттєві труднощі зі знаходженням стійкого розв'язку системи рівнянь. Оскільки для молекули H_2Te не вдалося виконати розрахунки усіх трьох параметрів ангармонізму, нульові частоти коливань цієї молекули були знайдені за методом [14].

Таблиця 1. Експериментальні частоти нормальних коливань гідридів.

Молекула	ω_1, cm^{-1}	ω_2, cm^{-1}	ω_3, cm^{-1}	Література
H_2S	2614.56	1182.68	2625	[8]
H_2Se	2344.5	1034.21	2357.8	[10]
$\text{H}_2\text{Te}^{130}$	2065.2709	860.65631(3)	2072.11014	[11–13]
D_2S	1891.6	855	1906	[8]
D_2Se	1687	741	1697	[10]
$\text{H}_2\text{Te}^{122}$	2065.7466	860.87654(1)	2072.61300	[11–13]

Таблиця 2. Константи ангармонізму частот нормальних коливань гідридів.

Молекула	$u_1 \times 10^{-5}$	$u_2 \times 10^{-5}$	$u_3 \times 10^{-5}$
H_2S	1.598	1.275	1.52736
H_2Se	2.142	1.117	1.92253
H_2Te	2.32161	2.32161	2.3216

У таблиці 3 наведені значення параметрів форми силової матриці кожної з досліджуваних молекул та молекули води у газоподібному стані для порівняння.

Для перевірки знайдених силових матриць були розраховані частоти нормальних коливань ізотопних модифікацій кожного з гідридів. Значення параметра розбіжності (4) не перевищило 10^{-6} , тобто узгодження між експериментальними та розрахованими частотами можна вважати цілком задовільним.

Таблиця 3. Параметри форми ψ , параметри розбіжності δ (порядок), величина бар'єру лінеаризації D та частоти інверсії в основному коливальному стані Ω для гідридів.

Молекула	ψ , рад	$\delta \sim$	$D, \text{cm}^{-1} \times 10^4$	$\Omega, \text{Гц}$
H ₂ O	1.02	10^{-12}	1.375	1.38
H ₂ S	0.9115	10^{-11}	1.93	1.283×10^{-16}
H ₂ Se	1.044	10^{-6}	1.141	6.352×10^{-11}
H ₂ Te	0.8055	10^{-11}	1.485	5.258×10^{-26}

Оскільки частоти коливання ω_2 та кути між напрямками H–X–H є близькими за значенням для усіх досліджуваних молекул, а також з огляду на те, що елементи силових матриць цих молекул мають однаковий порядок, варто очікувати близьких значень бар'єра лінеаризації для молекул H₂S, H₂Se та H₂Te. З цих же міркувань, найбільш ймовірно, що величина бар'єру лінеаризації цих молекул буде одного порядку з бар'єром лінеаризації молекули H₂O.

Розраховані значення величини потенціального бар'єра лінеаризації для молекул H₂S, H₂Se, H₂Te та молекули води у газоподібному стані для порівняння представлені в таблиці 3. Знайдені нами у літературі [15-16] значення бар'єру лінеаризації молекули H₂S оцінюються різними авторами від $18\,000 \text{ cm}^{-1}$ [16] до $31\,000 \text{ cm}^{-1}$ [15]. Отримане нами значення знаходиться у вказаному інтервалі і, таким чином підсилює значення [16].

У зв'язку з тим, що приведені маси молекул H₂S, H₂Se та H₂Te значно відрізняються від приведеної маси молекули води, можна очікувати, що значення частот інверсії цих молекул, будуть суттєво відрізнятися від частот інверсії отриманих для молекули води.

У таблиці 3 наведено значення частот інверсії в основному стані для молекул H₂S, H₂Se, H₂Te та молекули води у газоподібному стані для порівняння. Ці значення виявилися на багато порядків меншими, ніж для молекули води.

Однак, для високих збуджених рівнів кожної з досліджених молекул, частота інверсії, а отже й інверсійне подвоєння частот, стає помітним. У таблиці 4 наведено частоти інверсії та розщеплення для двох рівнів кожної з молекул. Ці два рівні є останнім та передостаннім рівнями, що розміщені у потенціальній ямі. Так для молекули H₂S у потенціальній ямі

вміщується 18 збуджених коливальних рівнів, тому в таблиці наведені величини розщеплення для рівнів з $v = 17$ та $v = 18$.

Таблиця 4. Частоти інверсії та величина розщеплення для двох верхніх рівнів для гідридів 6-ї групи

Молекула	Номер збудженого рівня	Величина розщеплення рівнів $\Delta\omega$, cm^{-1}
H_2S	17	19.315
	18	253
H_2Se	10	3.412
	11	163.73
H_2Te	19	1.475
	20	24.077

Зважаючи на те, що деякі фізичні об'єкти (в тому числі астрономічні) можуть містити "гарячі" молекули H_2S , H_2Se та H_2Te , видається доцільним оцінка розщеплення для високих рівнів цих молекул.

У роботі були обраховані частоти інверсії через бар'єр лінеаризації для молекул H_2S , H_2Se та H_2Te тільки у газподібному стані. У випадку води значення частоти інверсії через бар'єр лінеаризації для молекули в рідкому стані виявилось на порядок більшим за значення частоти інверсії для газоподібної води [6]. На підставі цього можна очікувати подібних результатів і для інших гідридів шостої групи.

При розгляді питання про частоту інверсії через бар'єр лінеаризації для молекул в рідкому стані стає цікавим наступний аспект. Коли молекула в рідкому стані інверсує через лінійну конфігурацію, має виникати нове розташування молекул, що є менш рівноважним. З часом ця нерівноважність має релаксувати.

Розглянемо таку ситуацію на прикладі молекули води. Для цієї молекули час релаксації має бути порядку часу осідлого життя молекули, тобто порядку 10^{-9} секунди. За

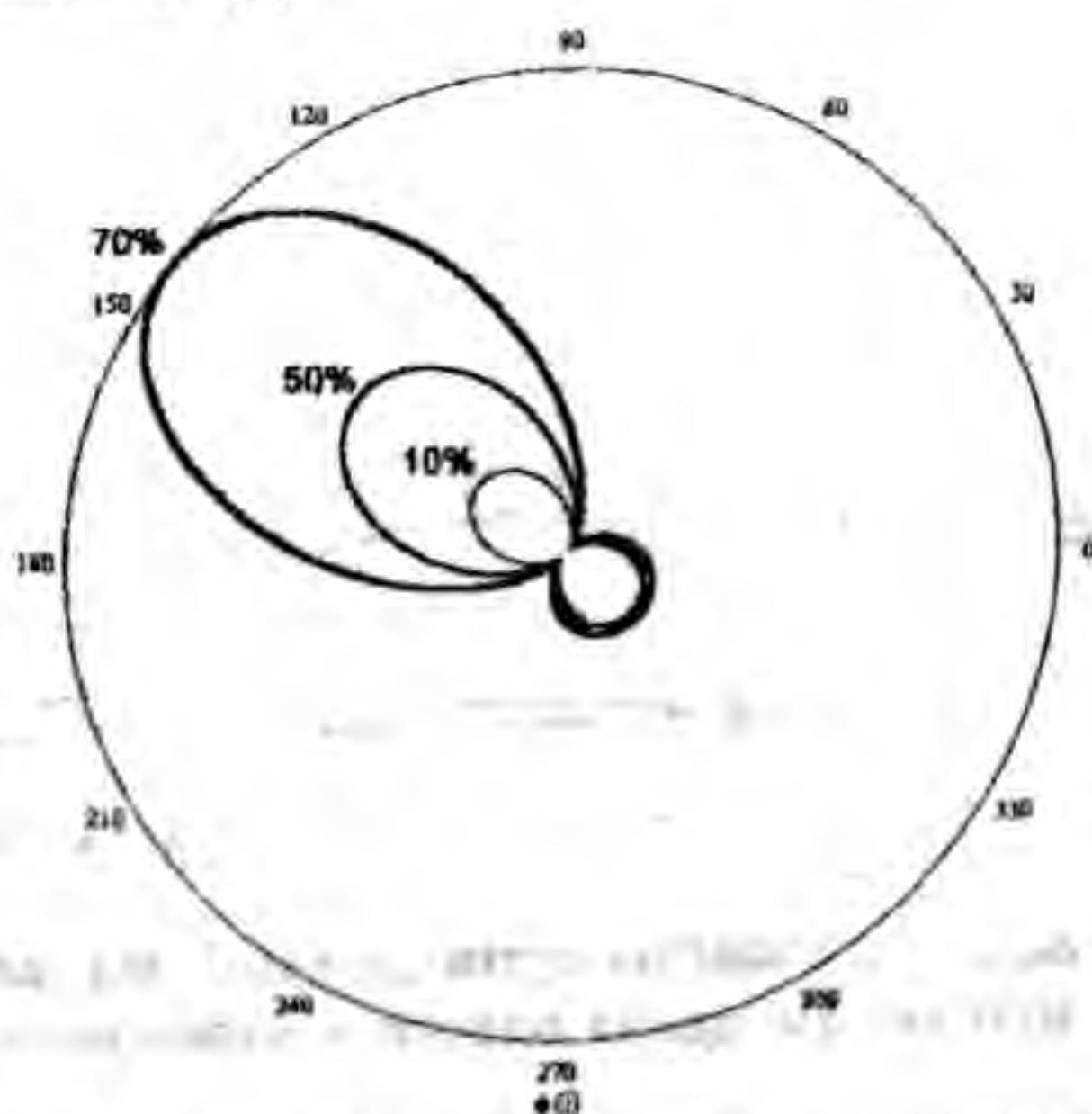


Рис.1. Вигляд петлі девіації молекули H_2O для різних за величиною зміщень атому водню.

нашими оцінками [6] частота інверсії для молекули води в рідкому стані складає 36.7 Гц. Відповідно, для молекули води значення концентрації нерівноважностей складає порядку 10^{14} см⁻³. За своєю поведінкою такі нерівноважності нагадують квазічастинки, що умовно можна назвати "інвертонами". Газ таких частинок може впливати на термодинамічні параметри води.

Подібні міркування можна застосувати і при розгляді інших гідридів шостої групи. З огляду на те, що частота інверсії через бар'єр лінеаризації для молекул H_2S , H_2Se та H_2Te в основному стані виявилася значно меншою ніж для молекули води, можна стверджувати, що концентрація "інвертонів", а отже і їх вплив, у воді має бути більшого значення, ніж для інших гідридів. Дану особливість можна розглядати як таку, що дає внесок в аномальні властивості молекули води, а також використати для пояснення відмінностей фізичних властивості дейтеревої і протієвої води.

Із загальних міркувань можна очікувати, що врахування ангармонізму, призведе до відхилення форми полярної діаграми залежності енергії молекули від напрямку постійного по величині зсуву одного з атомів водню (яку ми надалі називатимемо для зручності петлею девіації) від симетричної. Повинна також з'явитися залежність форми петлі девіації від величини зсуву. Крім того, можна очікувати зміни величини кута девіації.

Виконані розрахунки підтвердили ці очікування для кожної з молекул H_2X . Основні відмінності від результатів гармонічного наближення є наступними: девіаційна петля виявляється асиметричною; її

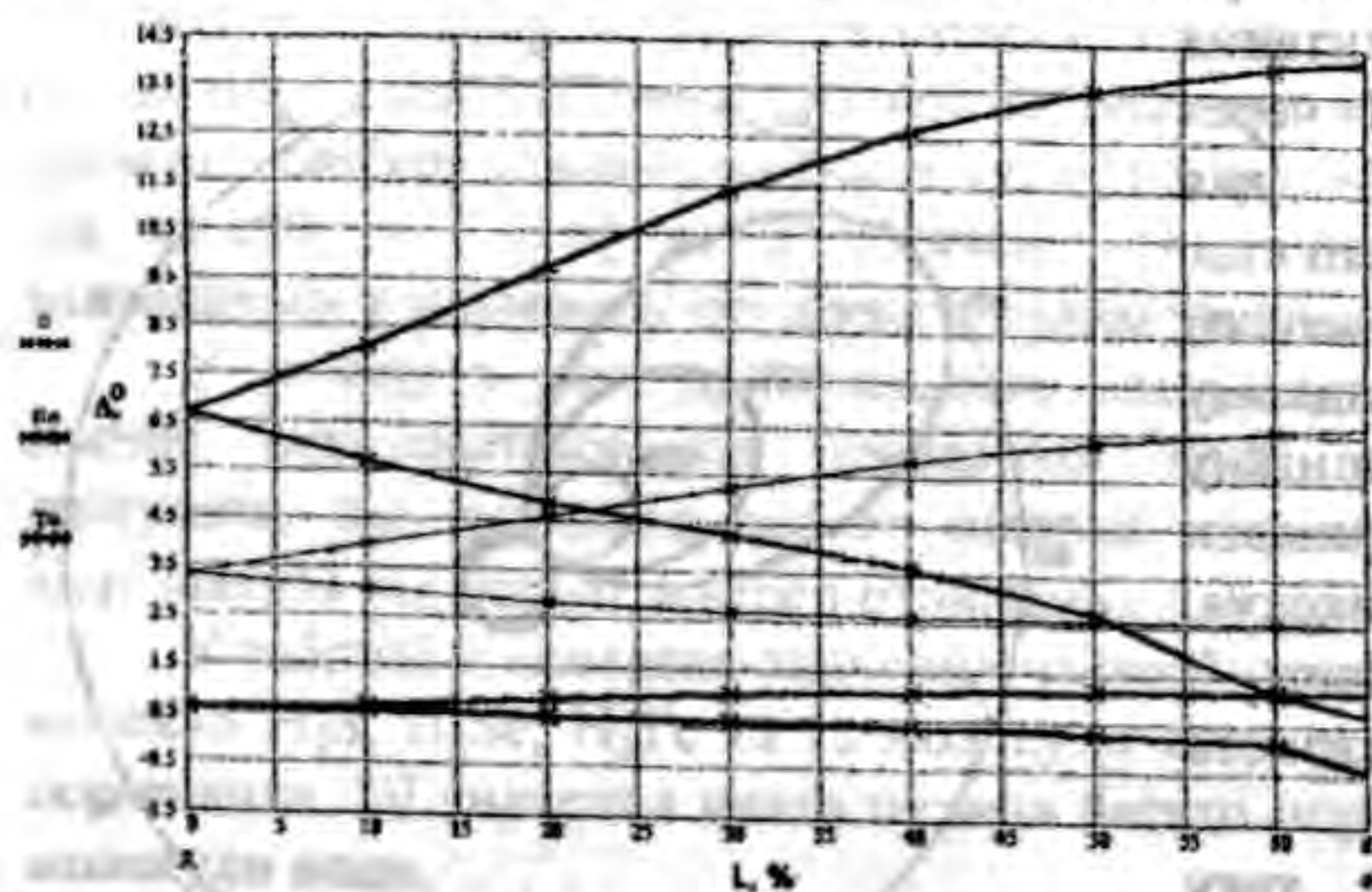


Рис.2. Залежність кутів девіації від величини та напрямку зміщення одного з атомів водню молекул H_2S . Одержані залежності нормовані на величину максимуму петлі, що відповідає розтягання зв'язку S-H молекули H_2S . Як видно з рисунку, полярна діаграма суттєво змінює свій

форма залежить від величини зсуву обраного атому; зв'язок H-X молекули H_2X характеризується двома кутами девіації хімічного зв'язку.

Так, на рис. 1 наведено три петлі девіації для зміщень, що становлять 10%, 50% та 70% від відстані між

вигляд при збільшенні зміщення атому водню з положення рівноваги. Вигляд петель девіації для молекул H_2Se та H_2Te та характер їх зміни при збільшенні амплітуди коливань є подібними до наведеної петлі для молекули H_2S .

На рис. 2 наведено залежність кутів девіації стискання (верхні криві) та розтягу (нижні криві) від величини зміщення атому X від відстані між атомами H та X молекул H_2X . З рисунку видно, що відхилення максимумів петлі девіації від напрямку, що з'єднує атоми H і X , є різними за величиною у випадку зміщення атому водню у протилежних напрямках.

У випадку малих зміщень, кут девіації для молекули H_2S склав $\Delta \approx 3.324^\circ$, для молекули H_2Se $\Delta \approx 6.68^\circ$, та $\Delta \approx 0.589^\circ$ для молекули H_2Te , що відповідає значенням, отриманим для цих молекул при розв'язку задачі у гармонічному наближенні [14, 17].

Висновки

Показано, що характер змін петлі девіації при врахуванні ангармонізму для молекул H_2S , H_2Se та H_2Te зберігає особливості, характерні для молекули води, оскільки кут девіації хімічного має різні значення для розтягу та стискання.

З'ясовано, що величини потенціального бар'єру лінеаризації молекул H_2S , H_2Se та H_2Te є однаковими за порядком з бар'єром лінеаризації молекули води.

Згідно з отриманими результатами частоти інверсії молекул H_2S , H_2Se та H_2Te через бар'єр лінеаризації є на багато порядків меншими за аналогічні значення для молекули води. Однак, зважаючи на високий рівень сучасної техніки спектральних досліджень, інверсійне подвоєння частот для високих рівнів молекул H_2S , H_2Se та H_2Te може бути зафіксовано експериментально. Отримані дані, таким чином, можуть бути використані для аналізу та інтерпретації обертально-коливальних спектрів молекул H_2S , H_2Se та H_2Te .

Оскільки частота інверсії через бар'єр лінеаризації для молекул H_2S , H_2Se та H_2Te в основному стані є на багато порядків меншою, ніж для молекули води, концентрація "інверсій", а отже і їх вплив на властивості молекул, у воді має більше значення, ніж у випадку інших гідридів.

Література

1. S. Carter, N.C. Handy A theoretical determination of the rovibrational energy levels of the water molecule // J. Chem Phys – 1987 – 87 – p. 4294-4301
2. H. Partridge, D.W. Schwenke The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio

- calculations and experimental data// J. Chem. Phys. – 1997 – 106 – p. 4618-4639
3. G. Tarczay, A. G. Csasza, W. Klopper, V. Szalay, W. D. Allen, H. F. Schaefer III The barrier to linearity of water// J. Chem. Phys. - 1999 - 110, v 24 - p. 11971-11981
 4. J. S. Kain, O. L. Polyansky, J. Tennyson The ground-state potential energy surface of water: barrier to linearity and its effect on the vibration-rotation levels// Chem Phys Let.- 2000 – 317 – p. 365-371
 5. Таунс Ч., Шавлов А., Радиоспектроскопия, пер. с англ. – М., 1959.
 6. В.А. Охрименко, К.С. Яблочкова Barrier of linearity and frequency of inversion through the linear configuration of H_2O molecule// Scientific Works, "SPO 2006 – Optics and High Technology Material Science", – 2006 – AP 58 – p. 88
 7. В.Я. Антонченко, А.С. Давыдов, В.В. Ильиню Основы физики воды, – Киев: «Наукова думка», 1991
 8. Л.М. Свердлов, М.А. Ковнер, Е.П. Крайнов Колебательные спектры многоатомных молекул – М.: «Наука», 1970.
 9. М.У. Белый, Б.А. Охрименко, С.М. Яблочков Метод решения обратной спектральной задачи // Известия вузов МВ ССО СССР, физика – 1987. – 4. – с.52-57.
 - 10.J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret, H. Burger, H. Willner. High-Resolution Analysis of the ν_2 , $2\nu_2$, ν_1 and ν_3 Bands of $H_2^{80}Se$ // Journ. Molecular Spectroscopy – 1993 – 161 – p157-169.
 - 11.J-M Flaud, H Burger, Ph Arcas, O Polanz High Resolution Study of the $3\nu_2$, $\nu_1+\nu_2$ and $\nu_2+\nu_3$ Bands of H_2Te // Journ Mol. Spectroscopy – 1997 – 182. – p.315-332.
 - 12.J-M Flaud, M Betrencourt, H Burger, Ph Arcas, O Polanz Simultaneous Analysis of the $2\nu_2$, ν_1 and ν_3 Bands of H_2Te // Journ Mol. Spectroscopy – 1997 – 182. – p.396-420.
 - 13.J-M Flaud, H Burger, Ph Arcas, O Polanz, L Halonen High Resolution Study of the ν_2 , $2\nu_1$, $\nu_1+\nu_3$ and $2\nu_3$ Bands of H_2Te // Journ Mol. Spectroscopy – 1997 – 183. – p.310-335.
 - 14.Г.І. Гайдідей, Б.А. Охріменко, М.В. Шелехова, К.С. Яблочкова Девіація Se-H та Te-H зв'язків в молекулах SeH_2 , TeH_2 // Вісник Київського Університету Серія: фіз.-мат. науки. – 2003 – 5 – с. 16-20
 - 15.G. Tarczay, A. G. Csaszar, M. L. Leininger, W. Klopper The barrier to linearity of hydrogen sulphide// Chemical Physics Letters – 2000 –322. – p.119-128
 - 16.O.L. Polyansky, P. Jensen, J. Tennyson The Potential Energy Surface of Hydrogen Sulfide// J. Mol. Spectrosc. 1996 –178. – p.184-188
 - 17.М.У. Білий, Б.А. Охріменко Девіація хімічного зв'язку S-H молекули H_2S // Укр. Фіз журн. – 2001 – т. 46, 8 – с. 825-828

Надійшла до редакції 30. 12. 2006

УДК 532.74

В. Погорелов*, д.фіз.-мат.н.,
О. Лізенгевич, к.фіз.-мат.н.,
О. Євглевський, студент, 5 к.

Структура смуг С-Н коливань в вуглеводнях: ізооктан

Досліджено широку структуровану смугу С-Н коливань ізооктану. Чисельним розрахунком проведено розділення цієї смуги на компоненти і зроблено їх віднесення. Показано, що пара вироджених коливань з частотою біля 2960 см^{-1} утворюють дублет, а не сколапсовану смугу, як це виглядає на зареєстрованих спектрах.

Ключові слова: комбінаційне розсіювання, молекулярна релаксація, ізооктан.

*E-mail: pogorelov@univ.kiev.ua

1. Вступ

В роботі досліджується природа смуг С-Н коливань в вуглеводні ізооктані. Ізооктан широко використовується в техніці як добавка до бензинів, що підвищує октанове число. Він є еталоном при визначенні детонаційної стійкості бензинів.

Формування С-Н смуг в вуглеводнях почали вивчати давно (див., наприклад, [1]), але й дотепер тут існують проблеми. Справа в тому, що спостережувані смуги є складними. Вони являють собою накладання парціальних смуг, що відповідають С-Н коливанням метильних груп CH_3 і груп CH_2 . Тут є коливання симетричні та антисиметричні, вироджені та Фермі-резонуючі. При цьому парціальні смуги є достатньо широкими, тому загальний спектр в цій ділянці (біля 2900 см^{-1}) виглядає як широка смуга (її ширина більша 100 см^{-1}) з локальними максимумами на ній. Основна маса робіт (див. [2,3] і посилання в них) присвячена виявленню частот і характеру С-Н коливань, що формують загальну смугу в вуглеводнях.

Задачею даної роботи є дослідження не тільки положення, а й форми парціальних смуг. Це є доцільним, бо, по-перше, для коректного

V. Pogorelov*, Prof.,
O. Lizengevych, Ph.D.,
A. Yevglevsky, 5 year student.

Band structure of C-H vibrations in hydrocarbons: isooctane

The wide structured band of C-H vibrations of isooctane was investigated. By a numeral calculation the division of the band on components was done. It is shown that pair of degenerate vibrations with frequency near 2960 см^{-1} form a duplicate, and not collapsed band as it looks on the registered spectra.

Keywords: Raman scattering, molecular relaxation, isooctane.

встановлення центра парціальної смуги в складному контурі потрібно знати форму цієї смуги. А по-друге, форма смуг дає можливість одержати інформацію про процеси молекулярної релаксації в об'єкті. В роботі були вивчені спектри комбінаційного розсіяння (КР) ізооктану в області $2800\text{--}3050\text{ см}^{-1}$ при кімнатній температурі. Реєструвалась інтенсивність КР як в паралельній (I_{vv}) так і в перпендикулярній (I_{vh}) геометрії аналізатора. Чисельною обробкою спектрів загальні смуги були розкладені на парціальні. Це дало змогу оцінити час коливальної та орієнтаційної релаксації С-Н коливань.

2. Експеримент

Об'єктом дослідження є ізооктан $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ (2,2,4-триметилпентан), структурна формула якого подана на рис. 1.

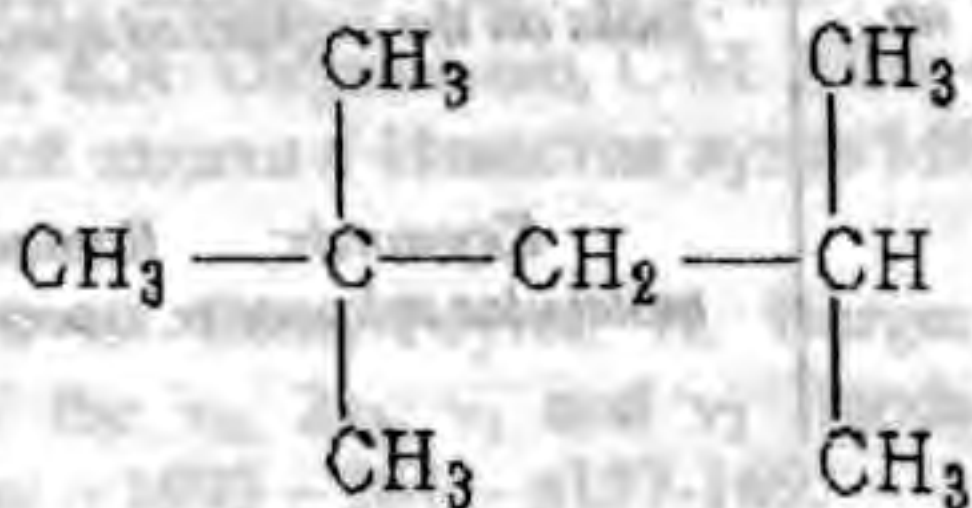


Рис 1. Молекула ізооктану.

Ізооктан являє собою безколірну рідину. Температура його плавлення $T_{\text{пл}}=165.8\text{ К}$, а температура кипіння $T_{\text{к}}=372.4\text{ К}$. Ізооктан належить групі граничних (насичених) вуглеводнів, тобто атоми вуглецю в ньому об'єднані простими зв'язками. Як видно з рисунку, в молекулі ізооктану існують С-Н зв'язки, що знаходяться в різних умовах: в метильній групі CH_3 (таких груп 5), в групі CH_2 і С-Н зв'язок на кінцевому вуглеці (на рис. 1 він справа).

Спектри комбінаційного розсіяння ізооктану було зареєстровано на автоматизованому спектрально-обчислювальному комплексі ДФС-24 у діапазоні $2800\text{--}3050\text{ см}^{-1}$. Керування скануванням спектрів та обробка спектральної інформації здійснювалась за допомогою персонального комп'ютера і спеціалізованого інтерфейсу. Як джерело збуджуючого лінійно поляризованого випромінювання було використано аргонний лазер потужністю 150 мВт , довжина хвилі випромінювання 488 нм . Спектри реєструвались з ширинами вхідної та вихідної щілин 100 мкм .

Їм відповідає ширина апаратної функції 2 см^{-1} . В експерименті вимірювались паралельна та перпендикулярна складові спектрів КР та контур спектральної смуги збуджуючого випромінювання. Всі три спектральні смуги записувались за однакових умов. За стандартною процедурою [4] було враховано апаратні спотворення при реєстрації спектрів.

3. Результати та їх обробка

Сpektри КР ізooктану зареєстровані в паралельній (I_{vv}) і перпендикулярній (I_{vh}) поляризаціях, представлені на рис. 2.

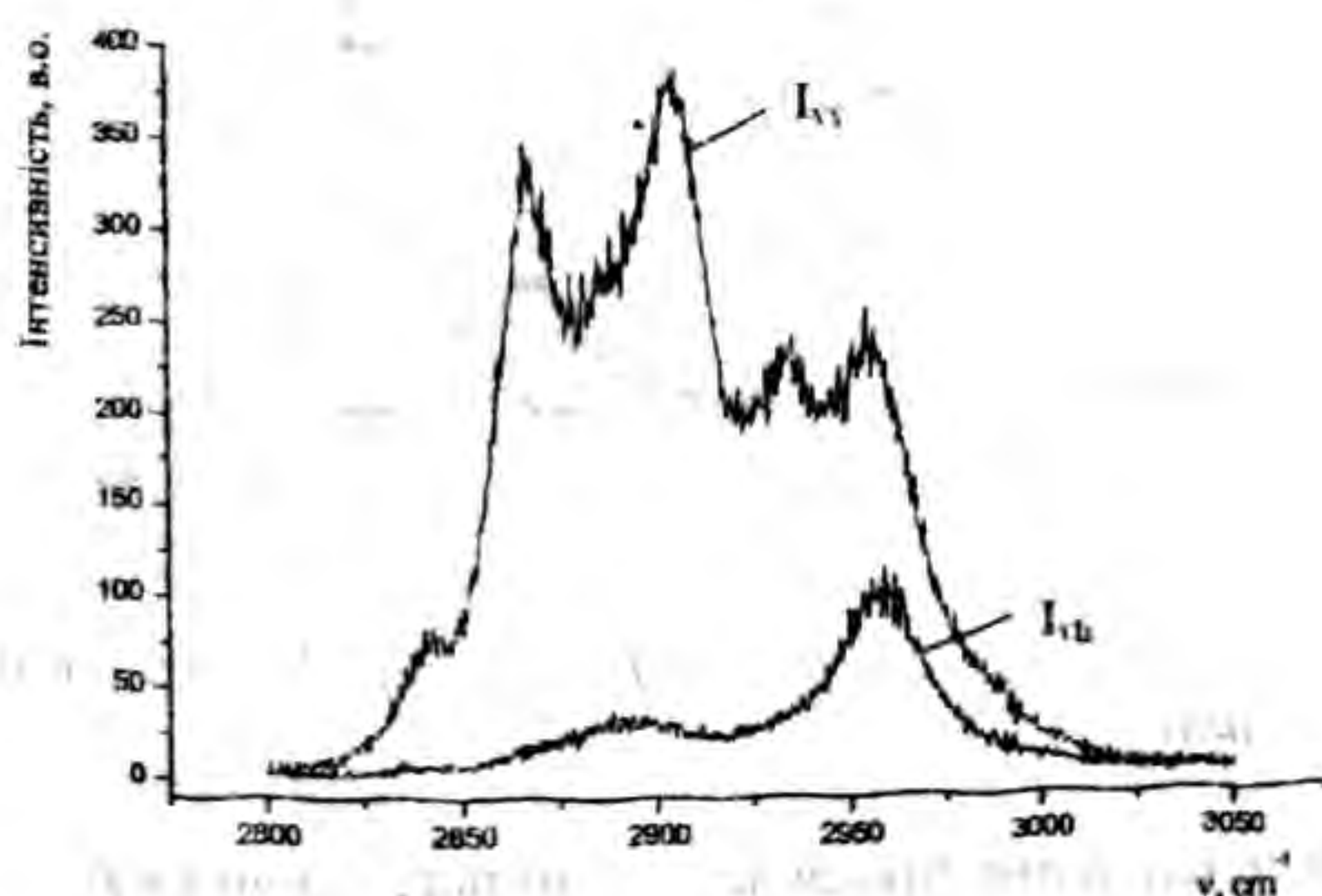


Рис. 2. Сpektри КР ізooктану в області $2800\text{-}3050 \text{ см}^{-1}$ при паралельному (I_{vv}) та перпендикулярному (I_{vh}) положеннях аналізатора.

З рисунка видно, що, як паралельна, так і перпендикулярна складові спектра КР є результатом накладання декількох смуг. Причому в спектрі I_{vh} проявляється менше смуг, ніж в спектрі I_{vv} .

Щоб виділити компоненти загальних спектрів, була проведена процедура розкладання експериментально одержаних смуг на компоненти. Парціальні смуги апроксимувались лоренцівськими кривими:

$$I = I_0 \frac{\gamma^2}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma^2},$$

де ν_0 – положення максимуму кривої на шкалі частот, γ – півширина контуру, I_0 – висота в максимумі. З вигляду спектру I_{vv} можна передбачити, що положення парціальних смуг приблизно такі 2840 см^{-1} , 2870 см^{-1} , 2880 см^{-1} , 2910 см^{-1} , 2930 см^{-1} , 2953 см^{-1} . В I_{vh} спектрі явно

проявляються два максимуми: 2880 cm^{-1} та 2963 cm^{-1} . Звертаємо увагу на незбіг положень останньої смуги (яку далі будемо називати 2960 cm^{-1}) в I_{vv} та I_{vh} спектрах.

Вище вказані частоти були вибрані як нульове наближення для положення парціальних смуг, за винятком смуги 2960 cm^{-1} , бо відомо [3], що вона породжена двома виродженими коливаннями. Тому цю смугу апроксимували двома компонентами, що відстоять на 10 cm^{-1} . Ширини і висоти лоренціанів було задано як параметри оптимізації, що далі варіювались за умов найкращого зіставлення розрахованого контуру з експериментальним.

В результаті проведених розрахунків був одержаний результат, зображений на рис. 3.

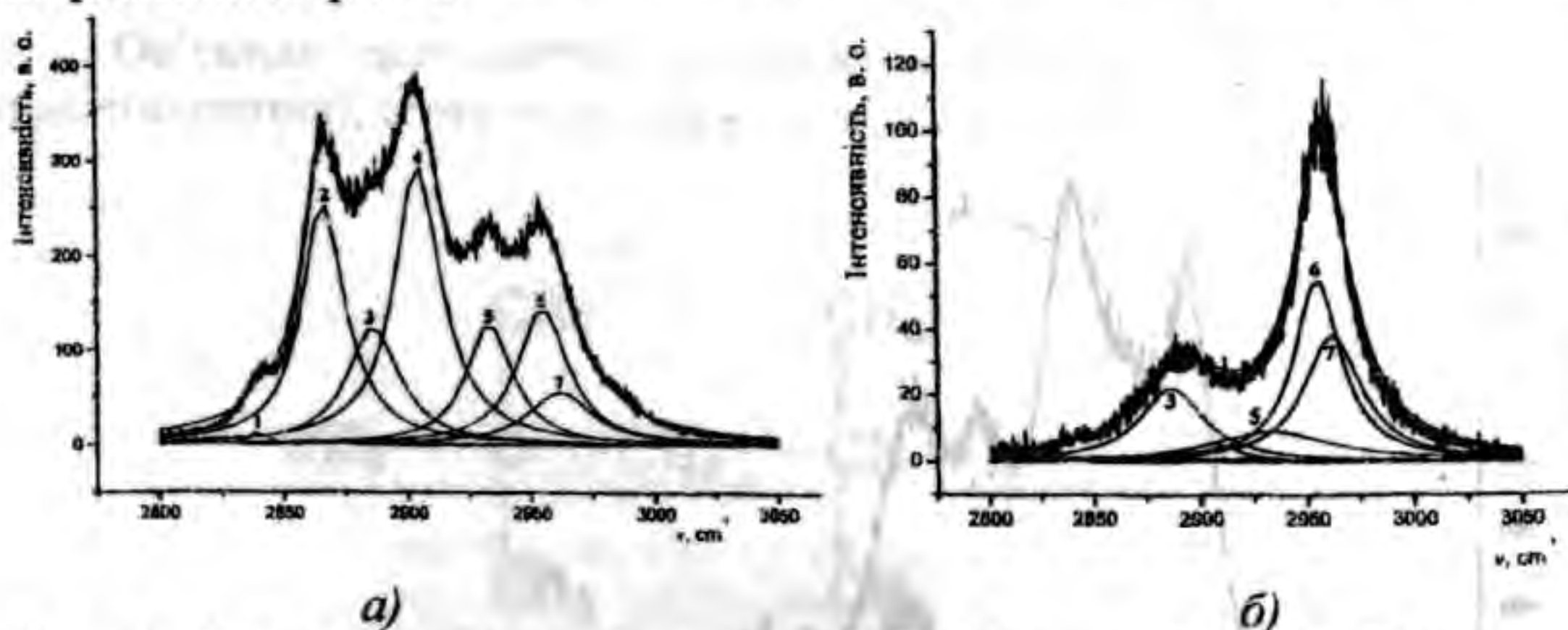


Рис. 3. Парціальні смуги спектрів I_{vv} (а) та I_{vh} (б). Номери смуг відповідають таким у таблиці 1.

А в таблиці 1 наведено чисельні данні про розраховані парціальні смуги: їх положення, інтенсивності, півширини та ступінь деполяризації.

Таблиця 1. Параметри розрахованих парціальних смуг

N	Положення смуг, см ⁻¹		Півширина		Інтенсивність максимумі (в. о.)		Ступінь деполяризації, ρ	
	Виміряне		Розраховане	I _{vv}	I _{vh}	I _{vv}		I _{vh}
	I _{vv}	I _{vh}						
1	2842	—	2839	3.5	4.5	15	1	0,1
2	2866	—	2866	10.5	119	256	1	0,0
3	—	2888	2886	12.5	18	125	2	0,2
4	2905	—	2905	11.5	14	295	6	0,0
5	2934	—	2934	11	35	129	9	0,1
6	2954	—	2955	12	13	145	56	0,4
7	—	2960	2962	16	16	55	39	0,7

Наступним кроком було проведення розрахунків по розділенню спектра КР на ізотропну та анізотропну компоненти і по одержанню коливальної та орієнтаційної кореляційної функцій. Здійснити цю відому процедуру [4] можливо тільки для смуги 2880 см^{-1} , бо вона має добре виражені I_{vv} та I_{vh} спектри. Смуга 2960 см^{-1} , хоча теж має ці компоненти, для такої цілі не підходить, оскільки є дублетом. Результати вказаних обрахунків представлені на рис. 4.

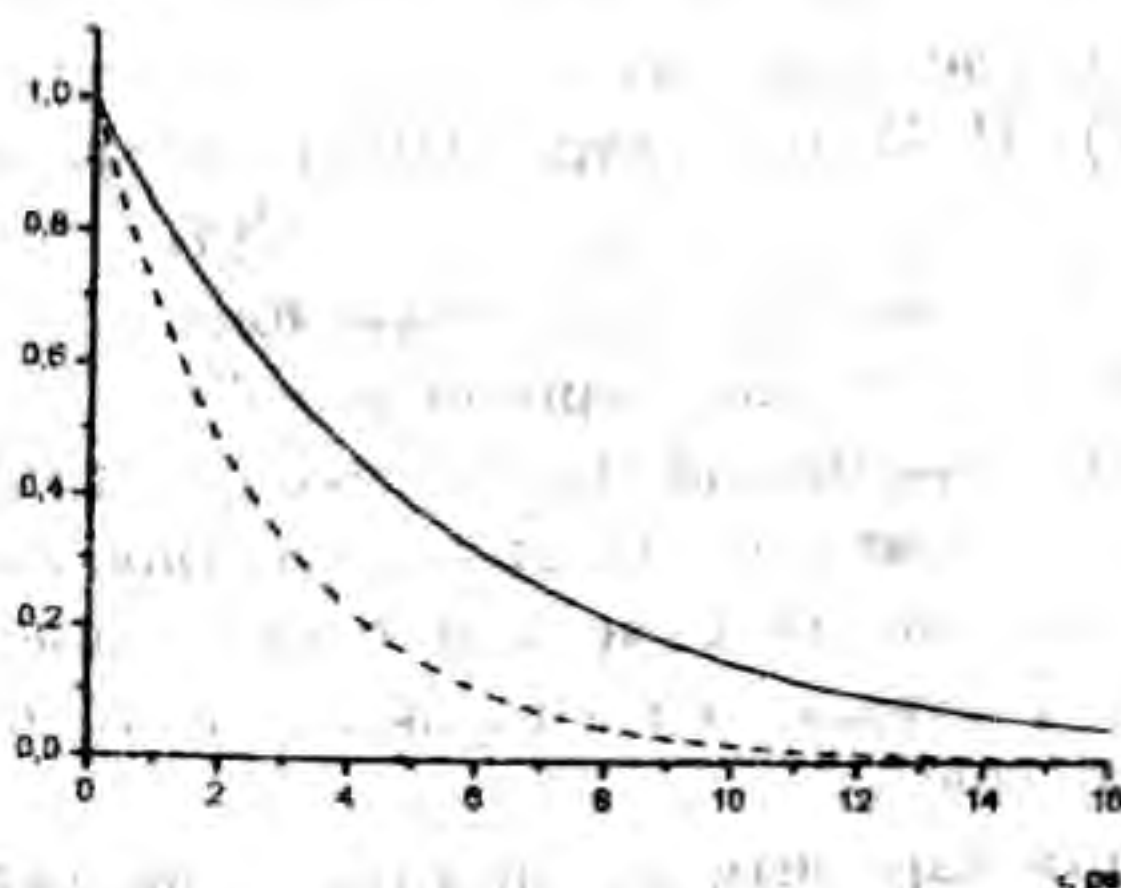


Рис. 4. Кореляційні функції коливальної (пунктирна крива) та орієнтаційної (суцільна крива) релаксації.

4. Обговорення

Відомо [1], що частоти груп CH_2 і CH_3 граничних вуглеводнів великою мірою характеристичні. Взаємодія координат C-H коливань з іншими координатами молекули доволі слабка. Це підтверджується фактом, що в області $2700\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ спектри всіх граничних вуглеводнів практично однакові. Суттєве значення має тільки взаємодія координат всередині вказаних груп. А це означає, що частоти C-H коливань в CH_2 та CH_3 групах мають бути різними. В [1] стверджується, що коливання C-H, що не входять до CH_3 та CH_2 груп, не виявляються. З цього робиться припущення, що його частота збігається з однією з частот CH_3 чи CH_2 груп, ймовірно, з 2860 см^{-1} . З літературних джерел [1-3] відомо, що спостережувані на ділянці $2800\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ смуги складаються з таких компонентів:

2870 см^{-1} – обертон антисиметричного деформаційного коливання в CH_3 групі

2910 см^{-1} – симетричне валентне коливання в CH_2 групі

2930 см^{-1} – симетричне валентне коливання в CH_3 групі

2960 см^{-1} – складається з двох вироджених антисиметричних валентних коливань в CH_3 групі.

Між коливаннями 2930 см^{-1} та 2870 см^{-1} існує резонанс Фермі [2, 5].

Порівняння I_{vv} та I_{vh} (див. рис. 2) дає основу сказати, що смуга 2840 см^{-1} відповідає симетричному, а смуга 2890 см^{-1} – антисиметричному коливанню. Можна припустити, що остання смуга породжена коливанням атома водню, що не належить групам CH_2 та CH_3 .

Окремого обговорення заслуговує подвійна смуга 2960 см^{-1} . Цю пару дійсно можна побачити як дублет при сильному охолодженні зразка (до температури, меншої 100 K) [3]. В літературі [2,3] дискутується питання про природу цього розщеплення в вуглеводнях. Суть проблеми: що викликає розщеплення смуги – внутрішньомолекулярне, чи кристалічне поле (при низькій температурі вуглеводні є кристалами)?

Експериментальну відповідь можна знайти, якщо дослідити спектр рідини. В цьому разі немає симетричного зовнішнього поля. Але в спектрі ІЧ поглинання рідких вуглеводнів (а саме цей спектр вивчався в [3]) спостерігається одна смуга. І неможливо з'ясувати, чи то є сума двох близьких смуг, чи одна сколапсована.

Принципову можливість вирішити це питання надає спектроскопія КР. Тут є надія побачити розщеплення смуги, порівнявши спектри, записані в різних поляризаціях. Якщо парціальні смуги існують і мають різний ступінь деполаризації, то розщеплення спільної смуги проявиться як незбіг її положення в спектрах I_{vv} та I_{vh} . Якщо ж смуга сколапсована, то ці частоти будуть однакові.

В проведених нами експериментах спостерігався незбіг частот смуги 2960 см^{-1} в різних поляризаціях, який складав 10 см^{-1} . Чисельний розклад цієї смуги на дві складові (див. рис. 3, 4) дозволяє, принаймні якісно, відтворити вигляд парціальних смуг дублету 2960 см^{-1} . Наявність двох смуг в спектрі рідкого ізооктану дозволяє стверджувати, що явне розщеплення смуги, яке спостерігалось в роботі [3] при низькій температурі є наслідком внутрішньомолекулярної взаємодії.

З представлених на рис. 5 кореляційних функцій видно, що коливальна релаксація відбувається приблизно в два рази швидше, ніж орієнтаційна. Молекула ізооктану досить велика і має розгалужену структуру, тому зрозуміло, що орієнтаційний рух в цій рідині значно загальмований.

5. Підсумок

В роботі був виміряний спектр КР коливань С-Н зв'язків в ізооктані. Чисельними методами широка структурована смуга була розділена на

складові. Виявилось, що загальна смуга утворена з сімох парціальних смуг. Показано, що смуга 2960 см^{-1} , яка відповідає парі вироджених коливань, являє собою дублет, хоча на зареєстрованому спектрі вона виглядає як єдина смуга. Чисельною обробкою парціальної смуги 2890 см^{-1} одержано кореляційні функції коливальної та орієнтаційної релаксації. Час коливальної релаксації – 2,5 пкс, орієнтаційної – 5,8 пкс.

6. Література

1. Волькенштейн М. В., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул. – М.-Л.: ГИТТЛ, 1949. – 600 с.
2. Hill I. R., Levin I. W. Vibrational spectra and carbon-hydrogen stretching mode assignments for series of *n*-alkyl carboxylic acids//J. Chem. Phys. – 1979. – V. 70, N2. – P. 842-851.
3. MacPhail R. A., Snyder R. G., Strauss H. L. The motional collapse of the methyl C-H stretching vibration bands// J. Chem. Phys. – 1982. – V. 77, N3. – P. 1118-1137.
4. Погорелов В. Є. Комбінаційне розсіяння світла. – К.: ВІПЦ „Київський університет”, 2004. – 135 с.
5. Atamas N.A., Yaremko A.M., Seeger T., Leipertz A., Bienko A., Latajka Z., Ratajczak H. and Barnes A.J. A study of the Raman spectra of alkanes in the Fermi-resonance region//J. Mol. Struct. – 2004. – V. 708, N1-3. – P. 189-195.

Надійшла до редакції 01.12.06.

Поперенко Л.В., Розуван К.П.¹,
Розуван С.Г.

Перетворення Лоренца для тонкої плівки.

Математичний формалізм матриць розсіяння розмірності 2×2 був використаний для обрахування багатопучкової інтерференції в тонкій плівці. Використані матриці являються одночасно членами групи Лоренца. Інтерференція в плівці в цьому випадку може бути описана як траєкторія на фазовій площині яка відповідає конкретній геометрії перетворення Лоренца. Три основні випадки тонких плівок: поглинаюча, непоглинаюча і непоглинаюча з ненульовим градієнтом показника заломлення були змодельовані та проаналізовані. Отримані результати важливі з точки зору оберненої спектральної та еліпсометричної задач.

Ключові слова: група Лоренца, тонкі плівки, інтерференція, матриці розсіяння.

Poperenko L.V., Rozouvan K.P.¹,
Rozouvan S.G.

Lorentz transformation for a thin film.

A mathematical formalism of 2×2 dimensional scattering matrices has been used to calculate multiray interference in a thin film. The matrices could be considered simultaneously as members of Lorentz transformation group. The interference in the film was proposed to be described as a trajectory on a phase plane which corresponds to a particular Lorentz geometry. Three main cases of different films: absorbing, non-absorbing and non-absorbing with nonzero refractive index gradient, were calculated and analyzed. The results are important from the point of view of inverse spectral and ellipsometric tasks.

Key words: Lorentz transformation group, thin films, interference, scattering matrices.

¹ e-mail: kpr@univ.kiev.ua

Шари тонких плівок на плоскій підложці, з товщинами співрозмірними з довжиною хвилі падаючого світла, привертають увагу вже декілька десятиліть, як з теоретичної, так і з суто практичної точок зору[1,2]. Багатошарові інтерференційні покриття, які функціонують як 100% дзеркала, поляризатори, вузькополосні фільтри, просвітлюючі покриття- це важливий складовий елемент широкого набору оптичних

елементів. Тому очевидно, що так звана пряма задача теоретичного описання багатопроменевої інтерференції при заданих товщинах/показниках заломлення шарів, має очевидне практичне значення. Історично різні групи дослідників розвинули два основні формалізми розрахунку інтерференції в тонких плівках. Перший підхід базується на представленні багат шарової системи, як сукупності зв'язаних між собою інтерферометрів Фабрі-Перо[1,2]. В результаті рекурентний набір рівнянь, які фактично являють собою модифіковану формулу Ейрі, дозволяє точно розрахувати напруженість електромагнітного поля для заданої системи. Другий формалізм базується на прямому розв'язку рівнянь Максвелла з урахуванням граничних умов для кожного шару[3,4]. При цьому підході кожному шару відповідає матриця розмірності 2×2 . Хоча ці два підходи являються повністю еквівалентними з точки зору кінцевого результату, в даній роботі ми віддаємо перевагу другому, як більш методологічно прозорому.

Відсутність аналітичних рівнянь для описання інтерференції в тонких плівках унеможливорює просте рішення оберненої задачі- знаходження оптичних констант багат шарової системи по її, наприклад, оптичним спектрам пропускання чи еліпсометричним характеристикам. Для вирішення таких задач було вироблено методики, які базуються на теоремах теорії дослідження операцій, що пов'язане з деякими труднощами[2]. По-перше, практичне використання таких підходів як, наприклад, методу градієнтного спуску чи методу випадкового пошуку, потребує іноді досить значних затрат машинного часу. По-друге, що більш суттєво, такі методики не дають можливість проробити загальний аналіз задачі, що може призвести до помилкових висновків. Так, наприклад, багат шарові інтерференційні дзеркала широко використовуються при конструюванні лазерних резонаторів. При розробці лазерів, що генерують ультракороткі імпульси з тривалістю 100-200 фемтосекунд виникла потреба в лазерних дзеркалах що вносять додаткову фазу у відбитий імпульс в залежності від довжини хвилі (так званий "чірп") для подальшого редукування тривалості ультракоротких імпульсів. Такі багат шарові інтерференційні дзеркала з додатковим чірпом вдалось спроектувати і виготовити тільки використовуючи аналітичний підхід[5,6]. Ми вважаємо, що такого роду аналітичний підхід може бути перспективним і для іншого класу задач- аналізу результатів спектральних та еліпсометричних вимірювань різного роду тонких плівок.

Як відомо, поведінка оптичних характеристик тонкої плівки, при проходженні через неї електромагнітного випромінювання, описується групою перетворення Лоренца[7]. Перетворення Лоренца залишають інваріант $z^2 + y^2 + x^2 - c^2 t^2$ незмінним. Для фіксованих двох координат (x і y) з чотирьох, рівняння може бути записане у загальному вигляді:

$$\begin{bmatrix} z' \\ t' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\beta \cdot c \\ \frac{\beta}{c} & 1 \\ \sqrt{1-\beta^2} & \sqrt{1-\beta^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z \\ t \end{bmatrix} \quad (1)$$

$\beta = V/c$, де V це швидкість (c - це швидкість світла у випадку спеціальної теорії відносності).

Для розрахунку оптичних параметрів багатошарового інтерференційного покриття при проходженні світла з довжиною хвилі λ використовується матричний формалізм при якому знаходиться матриця a розмірності 2×2 як добуток $N+2$ матриць де N - це кількість шарів інтерференційного покриття [3]:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = 1/2 \begin{bmatrix} 1 & 1/U_0 \\ 1 & -1/U_0 \end{bmatrix} \left(\prod_{i=1}^N \begin{bmatrix} \cos(\Delta_i) & \frac{i \cdot \sin(\Delta_i)}{U_i} \\ i \cdot \sin(\Delta_i) \cdot U_i & \cos(\Delta_i) \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ U_{N+1} & -U_{N+1} \end{bmatrix} \quad (2)$$

Коефіцієнти U_i визначаються як $n_i / \cos(\theta_i)$ для p -поляризації та $n_i \cdot \cos(\theta_i)$ для s -поляризації. Індекси 0 та $N+1$ в рівнянні (2) позначають середовища (повітря та підложку), які обрамляють систему тонких плівок. Кути θ_i це кути заломлення у відповідному шарі а Δ_i - це фазовий набіг, який визначається через коефіцієнти заломлення n_i та товщини плівок d_i , як $2\pi n_i d_i \cos(\theta_i) / \lambda$.

Порівнюючи (1) і (2), ми можемо виявити специфічні особливості групи Лоренца для тонких плівок. Коефіцієнти c або c , для різних шарів в рівнянні (1) відповідають величинам $1/U_i$. Співвідношення (1) можна переписати по іншому:

$$\begin{bmatrix} z' \\ t' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ch(\Delta) & -c \cdot sh(\Delta) \\ -\frac{sh(\Delta)}{c} & ch(\Delta) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z \\ t \end{bmatrix} \quad (3)$$

Фазова величина $\Delta = \ln(\sqrt{(1+\beta)/(1-\beta)})$, а $sh(\Delta)$ та $ch(\Delta)$ це відповідно гіперболічні синус та косинус. Співвідношення (3) перетворюється в (2) у випадку уявного набігу фази $\Delta = i \cdot \Delta'$ ($V = i \cdot V'$). Таким чином, непоглинаючі та поглинаючі тонкі плівки відповідають різним випадкам поведінки системи з точки зору формалізма Лоренца.

1. Непоглинаюча плівка (V - уявна величина, c - дійсна величина).

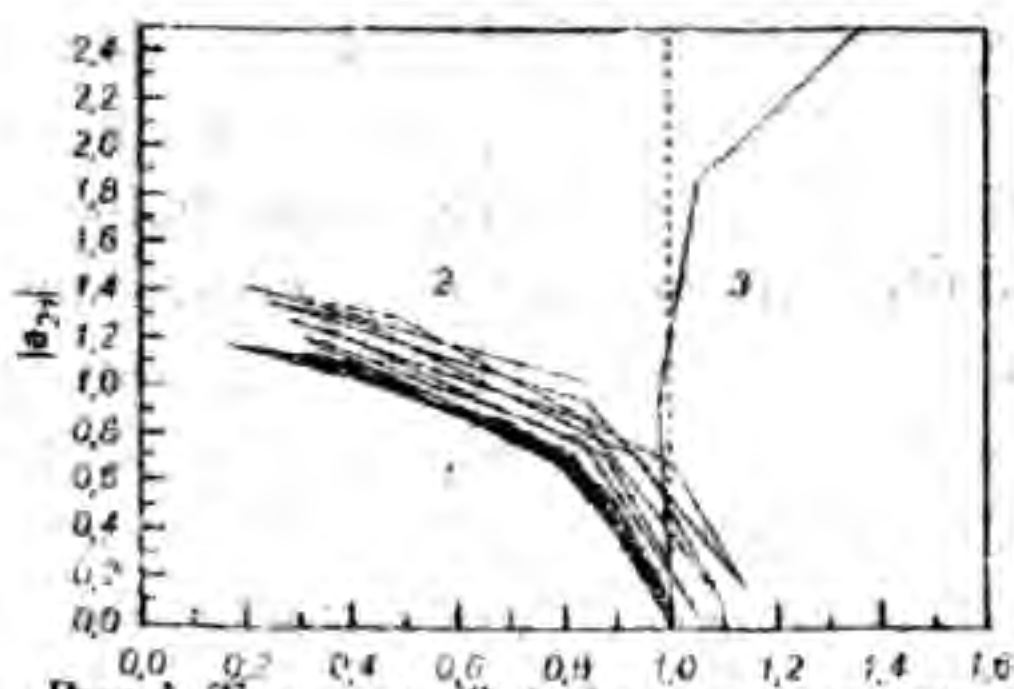


Рис.1 Траєкторії руху системи що відповідають перетворенню Лоренца для 1. непоглинаючої плівки товщиною 125 нм з показником заломлення 1.2, 2. непоглинаючої плівки товщиною 88 нм показник заломлення якої змінюється по закону $n(x) = 1.25 + 0.005x$, 3. поглинаючої плівки товщиною 96 нм з показником заломлення $1.2 + 1.05i$

чисто технічні складності отримання неоднорідних плівок, цілеспрямованого використання додаткової степені свободи, яка виникає при неперервній зміні показника заломлення інтерференційного покриття по заданому закону, неодноразово привертала увагу дослідників [8].

3. Поглинаюча плівка (V - уявна величина, c - комплексна величина).

Цьому випадку відповідає незамкнена фазова траєкторія-поступальний рух системи вздовж осі Z .

Розглянемо ці три випадки в деталях. На рисунку 1 приведені розрахунки для перетворення Лоренца для непоглинаючої, непоглинаючої плівки з ненульовим градієнтом показника заломлення та поглинаючої плівки. Фазова траєкторія в цьому випадку лежить на еліпсі, який розміщений симетрично відносно початку координат. З фізичної точки зору, випадок 1 з чисто уявною швидкістю V це обертальний рух відносно початку координат. У випадку 3 ми маємо поступальний рух системи, якому відповідає незамкнена та необмежена траєкторія. Випадок 2, у певному розумінні, можна розглядати як "проміжний". Система, як це

В цьому випадку ми маємо поворот системи навкруги початку координат. На деякій фазовій площині проходженню світла скрізь тонку плівку відповідає замкнена та обмежена траєкторія (еліпс).

2. Непоглинаюча плівка з градієнтним показником заломлення (напрямок градієнту перпендикулярний поверхні плівки). Ми маємо тут узагальнення попереднього випадку. Аналогічно до випадку 1, V - уявна величина, c - дійсна величина, але яка змінюється в напрямку градієнта показника заломлення. Фазова траєкторія в цьому випадку незамкнена аналогічно до випадку 3. Незважаючи на

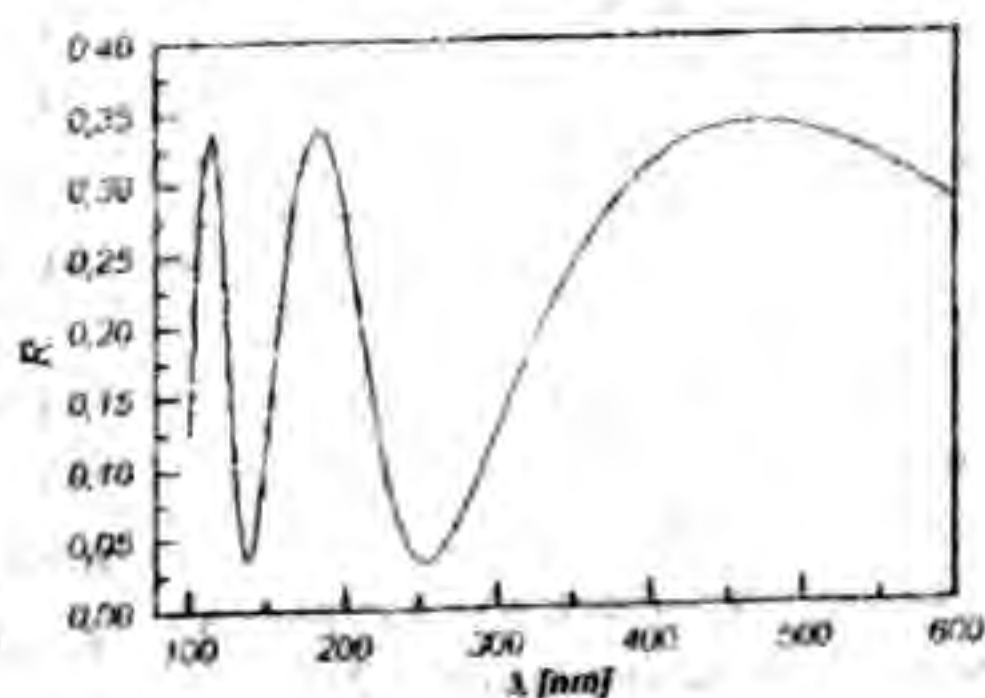


Рис.2. Спектральна залежність коефіцієнта відбиття поглинаючої плівки товщиною 96 нм з показником заломлення $1.2 + 1.05i$.

ідея

видно з рисунку 1, рухається у цьому випадку поступально-обертово. Штрихова лінія $x=1$ ділить площину на дві області, які відповідають випадкам 1 та 3. Як зрозуміло, з чисто геометричних міркувань, ліва область відповідає всім можливим еліптичним кривим симетричним відносно осей OX , OY які проходять через точку $(1,0)$. Як видно з малюнку, фазова траєкторія випадку 2 відповідає обертально-поступальному рухові з лівої в праву область, траєкторія перетинає штрихову лінію поділу. При розрахунках випадку 2 результуюча матриця неоднорідного шару знаходилась як добуток великої кількості матриць, кожна з яких відповідала частині цього шару дуже маленької товщини. Фактично при цих обчисленнях неоднорідний шар представлявся як набір дуже тоненьких шарів з постійним показником заломлення.

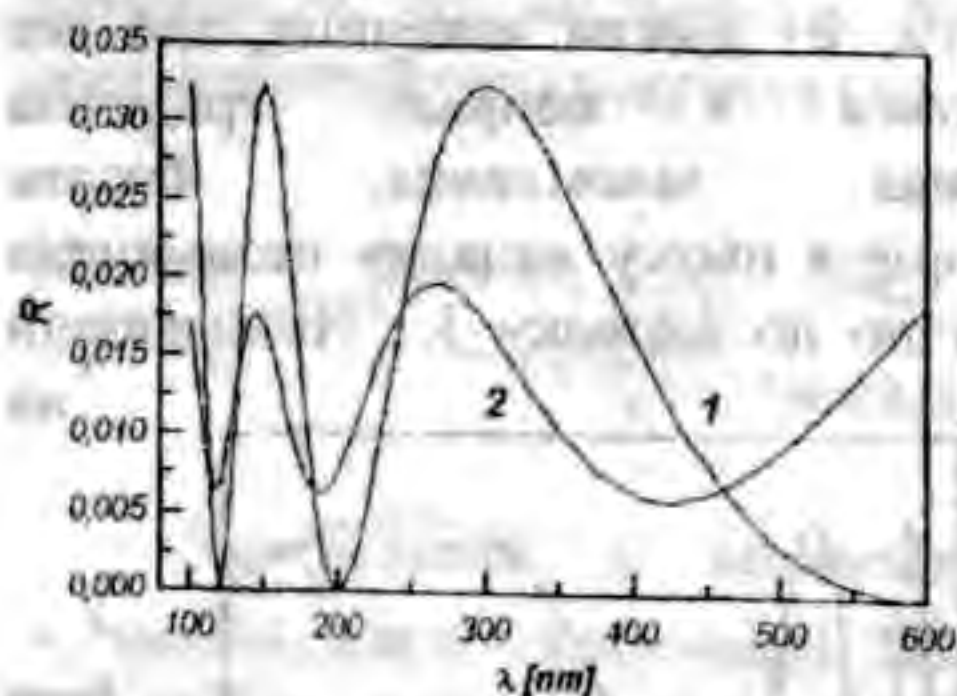


Рис.3. Спектральна залежність коефіцієнта відбиття непоглинаючої

1. плівки товщиною 125 нм з показником заломлення 1.2.

2. плівки товщиною 88 нм з показником заломлення що змінюється по закону $n(x) = 1.25 + 0.005x$.

траєкторій- відсутність нульового коефіцієнта відбиття на всьому спектральному проміжку, що характерно для поглинаючих плівок, так і водночас для плівок з досить низькими коефіцієнтами відбиття як і у випадку діелектричних плівок.

Розгляд багатопроменевої інтерференції, використовуючи формалізм перетворення Лоренца, дозволяє ввести елементи аналітичних співвідношень для оптичних характеристик тонкої плівки. Випадкам поглинаючих-непоглинаючих або неоднорідних покриттів відповідають фізично зовсім різні типи руху системи на фазовій площині. З чисто практичної точки зору, такий підхід дозволяє спрощувати обчислення при розв'язанні обернених еліпсометричної чи спектральної задач.

Цікавим являється питання співвідношення між фазовими траєкторіями які відповідають геометріям перетворення Лоренца та Галілея. Як відомо із спеціальної теорії відносності перетворення Галілея це граничний випадок перетворення Лоренца при $V \ll c$. На фазових діаграмах аналогічних рисунку 1 фазові траєкторії

геометрії Галілея це прямі лінії. Наприклад, штрихова лінія на рисунку 1 відповідає перетворенню Галілея при $V = 0$.

Розрахунки оптичних характеристик тонких плівок приведені на рисунках 2 і 3. Як видно з рисунків, неоднорідна плівка демонструє "проміжні" спектральні характеристики, як і у випадку фазових

Література.

1. Крылова Т.Н. Интерференционные покрытия. - Л.: Машиностроение, 1973.
2. Фурман Ш.А. Тонкослойные оптические покрытия. - Л.: Машиностроение, 1977.
3. Розенберг Г.В. Оптика тонкослойных покрытий. - М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1958.
4. Кард П.Г. Анализ и синтез многослойных интерференционных пленок. - Таллинн: Издательство "Валгус", 1971.
5. Szipocs R., Stingl A., Spielmann C., Krausz F. Pushing the limits of femtosecond technology: chirped dielectric mirrors// Optics and Photonics News, -1995, -vol.6 (6), -pp. 60-61.
6. Szipocs R., Ferencz K., Spielmann C., Krausz F. Chirped multilayer coatings for broadband dispersion control in femtosecond lasers// Optics Letters, -1994, -vol.19 (3), -pp. 201-203.
7. Смирнов В.И. Курс высшей математики т.3, ч.1. - М: Наука, 1953.
8. Якобсон Р. Неоднородные и совместно напыленные однородные пленки для оптических исследований// "Физика тонких пленок". т.8. - М: Мир, 1978. - С.61-106.

Надійшла до редколегії 15.11.2006

УДК 539.211

Людмила С. Семко*, д.т.н.,
Петро П. Горбик*, проф., д.ф.-м.н.,
Сергій Л. Рево**, зав. НДЛ, к.ф.-м.н.,
Людмила П. Сторожук*,
Олена І. Оранська*, к.х.н.,
Олександр І. Скрипка**

Lyudmyla S. Semko,
Petro P. Gorbyk,
Sergiy L. Revo,
Lyudmyla P. Storozhuk,
Olena I. Oranskaya,
Alexander I. Skrypka

**Структура та магнітні
властивості нанокристалічного
магнетиту і нанокомпозитів на
його основі**

**The structure and magnetic
properties of nanocrystalline
magnetite and nanocomposites on
its basis**

Одержано нанокристалічний магнетит та нанокомпозити на основі магнетиту, модифікованого діоксидом кремнію. Досліджено структуру та магнітні властивості цих матеріалів.

The nanocrystalline magnetite and the nanocomposites on a basis of the latter modified by silica were produced. The structure and magnetic properties of obtained materials were investigated.

Встановлено, що нанокомпозити Fe_3O_4/SiO_2 мають близькі магнітні характеристики до попередньо диспергованого не модифікованого магнетиту.

It was shown that the magnetic characteristics of nanocomposites Fe_3O_4/SiO_2 approached to magnetic characteristics of unmodified magnetite, dispersed before.

Ключові слова: магнетит, діоксид кремнію, структура, властивості, нанокомпозити.

Key Words: magnetite, silica, structure, properties, nanocomposites.

*Інститут хімії поверхні НАН України

**Київський національний університет імені Тараса Шевченка, revo@univ.kiev.au

Магнітні матеріали на основі заліза та його оксидів використовують при виготовленні виробів для радіотехніки, електроніки, лазерної техніки, каталізу, медицини. Створюючи магніто керовані порошкові лікарські засоби, як центральну частину (ядро) порошок застосовують магнітну основу, поверхню якої у більшості випадків покривають біосумісними полімерами (полівініловим спиртом, полівінілпіролідом, желатиною, альбуміном, декстраном), діоксидами кремнію (SiO_2) та титану (TiO_2) [1-5]. Наявність магнітної основи дозволяє керувати рухом частинок в магнітному полі, доставляти частинки в певне місце живого організму, утримувати їх, дає змогу підвищити концентрацію лікарського препарату в заданому місці, знизити токсичну дію ліків на весь організм. Поєднання в одній частинці нанокомпозиту магнітного ядра і біосумісної оболонки з різними поліфункціональними властивостями відкриває широкі можливості для створення лікарських препаратів нового покоління [6,7].

Відомо [7-9], що магнітні характеристики частинок магнетиту в ма-

гнітному полі в значній мірі залежать від їх розмірів. Особливо це стосується випадків, коли розмір частинок змінюється від мікрометричної шкали виміру до нанометричної [8,9]. Наприклад, частинки поведуть себе як феромагнетики, коли розмір зерен знаходиться в мікрометричному діапазоні та як суперпарамагнетики, коли їх розмір зменшується і становить 6-15 нм [8,9]. За даними авторів [10] розмір індивідуального домену магнетиту при кімнатній температурі складає 30... 50 нм. Отже, перехід від багатодоменної до одnodomenної структури частинок призводить до зміни магнітних характеристик магнетиту. В процесі модифікування магнітних частинок і створення нанокомпозитів, за рахунок утворення немагнітної оболонки змінюються розміри частинок, характеристики їх поверхні. Наявність поверхневого шару модифікатора може впливати і на магнітні властивості нанокомпозитів. В ряді робіт [1-4,7] повідомляється про властивості (в тому числі магнітні) нанокомпозитів на основі нанокристалічного магнетиту, модифікованого полімерами та діоксидом кремнію. Проте, структура та магнітні властивості нанокомпозитів на основі магнетиту, покритого діоксидом кремнію, недостатньо вивчені. Немає ясності щодо зміни магнітних характеристик при збільшенні товщини немагнітної зовнішньої оболонки частинок нанопорошків. Однак, такі відомості вкрай необхідні для практичного застосування розглядуваних матеріалів.

Мета роботи: встановити взаємозв'язок структури та магнітних властивостей нанокомпозитів на основі магнетиту, модифікованого діоксидом кремнію, визначити вплив маси зовнішнього покриття на його магнітні характеристики.

Основою для модифікування був обраний нанокристалічний магнетит з питомою поверхнею 99-100 м²/г і розміром частинок 30-50 нм. Магнетит одержували за реакцією співосадження солей дво- та тривалентного заліза (FeSO₄ та FeCl₃) в лужному середовищі, аналогічно описаній в [2,7]. Перед виготовленням нанокомпозитів магнетит додатково диспергували. При одержанні нанокомпозитів на основі магнетиту як модифікуючий агент використовували тетраетоксисилан (ТЕОС). Методика синтезу нанокомпозитів базується на реакції перетворення ТЕОС на поверхні магнетиту в SiO₂. При розробці цієї методики використані методи золь-гель технології [11].

Одержання нанокомпозитів включає такі основні стадії: попередній гідроліз ТЕОС в суміші етанолу та води, обробку заданої наважки магнетиту продуктами попереднього гідролізу ТЕОС і змішування в ультразвуковому диспергаторі УЗДН-2, осадження золю в магнітному полі, очистку осаду від побічних продуктів синтезу, сушку в сушильній шафі за температури 80°C, нагрівання в атмосфері аргону до 400°C і витримку при даній температурі на протязі 2 годин. Вміст SiO₂ на поверхні 1 г магнетиту змінювали від 0 до 0,6 г. Запропонована термообробка необхідна для здійснення процесів полімеризації ТЕОС, видалення побічних продуктів синте-

Раніше, за допомогою методу ІЧ-спектроскопії, проведено ідентифікацію фази SiO_2 на поверхні магнетиту в нанокompозитах (рис.2) [4]. З аналізу спектрів встановлено, що немодифікований магнетит має наступні смуги поглинання (СП): СП з максимумом на 442, 480 і 580 cm^{-1} – характеризують коливання зв'язків Fe-O оксидів заліза, що покривають поверхню частинок магнетиту [1,8]; СП при 895, 976, 1050 cm^{-1} та 1121 cm^{-1} – належать деформаційним коливанням Fe-OH груп [1,12]. Дифузна область СП в діапазоні 2800-3500 cm^{-1} відповідає коливанням гідроксильних груп поверхні магнетиту та води в рідкій фазі і вказує на наявність водневих зв'язків [1,13]. СП з максимумом на 1655 cm^{-1} зумовлена деформаційними коливаннями молекул води, адсорбованої на поверхні магнетиту.

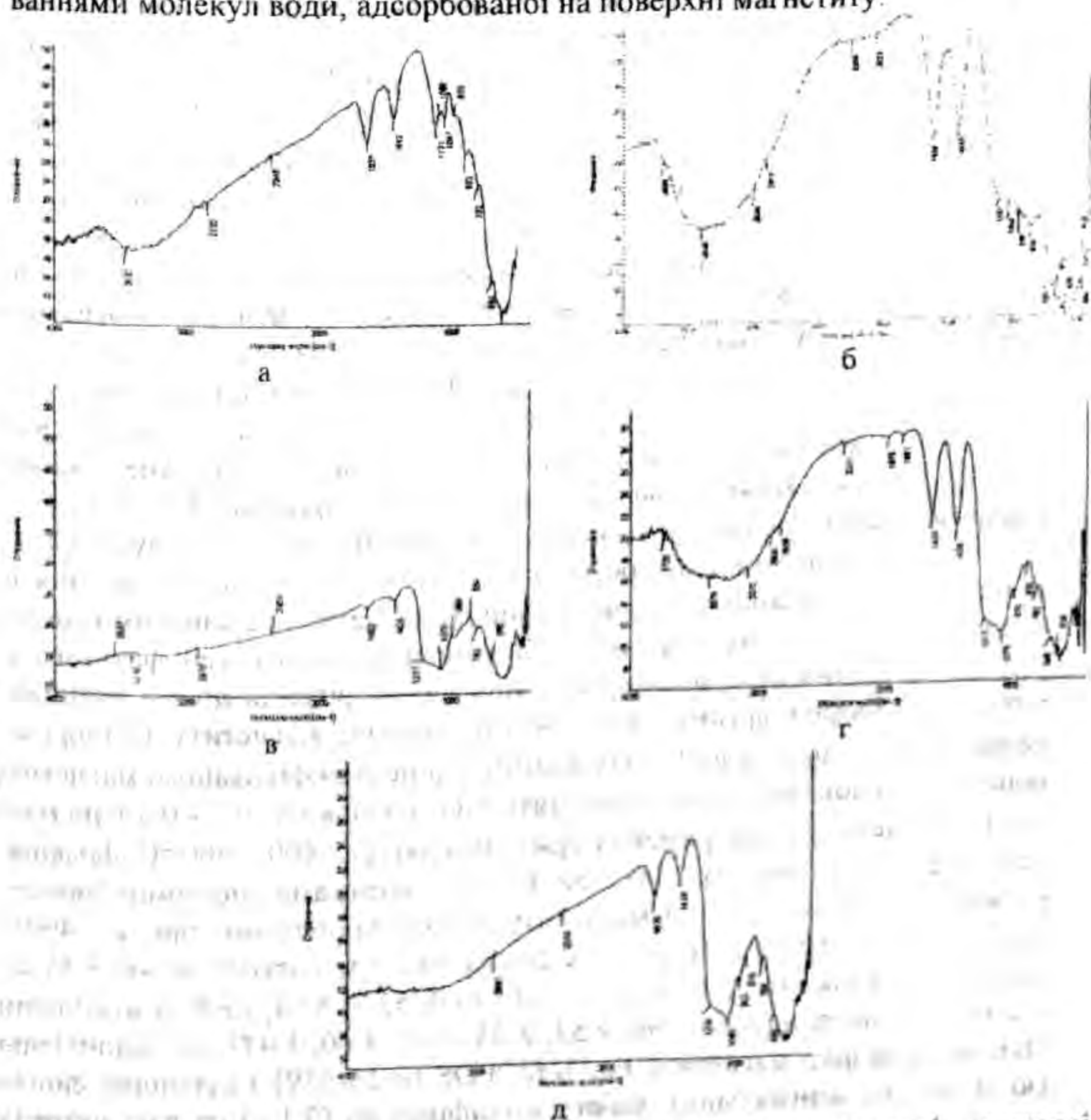


Рис. 2. ІЧ-Фур'є спектри вихідного магнетиту (а) та нанокompозитів на основі магнетиту, модифікованого SiO_2 (б, в, г, д). Вміст SiO_2 (г) на поверхні 1 г магнетиту: б – 0,1; в – 0,2; г – 0,3; д – 0,5.

Після модифікування поверхні магнетиту модифікуючим агентом ТЕОС з утворенням SiO_2 відбуваються значні зміни в спектрах відбиття наноконкомпозитів. Так, при вмісті SiO_2 0,1 г на поверхні 1 г магнетиту спостерігається зменшення інтенсивності смуг поглинання при 1121 та 1043 cm^{-1} , що відповідають деформаційним коливанням Fe-OH; СП з максимумом на 976 cm^{-1} зникає, а СП з максимумом на 895 cm^{-1} зміщується в бік більш низьких частот на 25 cm^{-1} . Ці дані свідчать про те, що OH групи продуктів гідролізу ТЕОС (олігомерів) взаємодіють з поверхнею магнетиту з утворенням водневих зв'язків.

При збільшенні вмісту SiO_2 до 0,2 г на 1 г поверхні магнетиту ІЧ спектри істотно змінюються в порівнянні із спектром немодифікованого магнетиту та магнетиту, покритого 0,1 г SiO_2 . Так, СП з максимумом на 895, 1047, 1121 cm^{-1} , що пов'язані з коливаннями Fe-OH, зникають. Замість цих смуг з'являються інші: з максимумом на 980, 1079 cm^{-1} та відбувається суцільне поглинання від 1079 до 1217 cm^{-1} . З літератури відомо, що СП при 1070, 798, 465 cm^{-1} характерні для каркасних коливань та зв'язків Si-O-Si в кремнеземі, з максимумом на 960 cm^{-1} для валентних коливань зв'язків Si-O в групі Si-OX (X – в більшості випадків H або Me) [12,14]. Отже, смуги поглинання при 980, 1079, 789 cm^{-1} належать коливанням у поверхневих шарах SiO_2 , що суцільно покривають магнетит. Можна припустити, що суцільна смуга поглинання в області 1052-1108 cm^{-1} обумовлена утворенням $(\text{SiO}_2)_x$ на поверхні магнетиту, а 1180-1217 cm^{-1} відповідає хемосорбованим сполукам на його поверхні або хімічним зв'язкам між поверхнею магнетиту та SiO_2 . Отже, можна стверджувати про ідентифікацію фази SiO_2 на поверхні магнетиту та високу ймовірність утворення зв'язків типу Fe-O-Si.

Окрім вищезгаданих результатів, нами проведено порівняння термічної стійкості зразків немодифікованого магнетиту та наноконкомпозитів на основі магнетиту, покритого SiO_2 . На основі даних рентгенофазового аналізу та магнітних вимірювань показано, що нагрівання до $T = 400-470^\circ\text{C}$, навіть в атмосфері аргону, приводить до розпаду магнетиту з утворенням немагнітної фракції $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. На відміну від немодифікованого магнетиту в порошках наноконкомпозитів, що містять SiO_2 в кількості 0,2 - 0,5 г на поверхні 1 г магнетиту та витриманих при температурах 400...500 $^\circ\text{C}$, фракція $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ не утворюється (рис. 3). Так, на дифрактограмах нетермообробленого магнетиту (крива 1), та магнетиту, термообробленого при $T = 400^\circ\text{C}$ і модифікованого SiO_2 в кількості 0,2-0,5 г на 1 г магнетиту (криві 3-5), спостерігаються піки (при $2\theta = 30.1, 35.6, 44.0, 53.3, 57.4, 62.8^\circ$ з міжплощинними відстанями d (Å) = 2.96, 2.52, 2.05, 1.71, 1.60, 1.47), що відповідають кристалічній фазі магнетиту Fe_3O_4 (JCPDS № 19-629) з кубічною сингонією. За умови мінімального вмісту модифікатора (0,1 г) на дифрактограмі з'являється слабкий пік (при $2\theta = 33.1^\circ$ із міжплощинною відстанню 2,7 Å), який відповідає фазі $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (JCPDS №33-664). Розрахунки показали, що мінімальна товщина шару, яка перешкоджає окисненню частинок магнети-

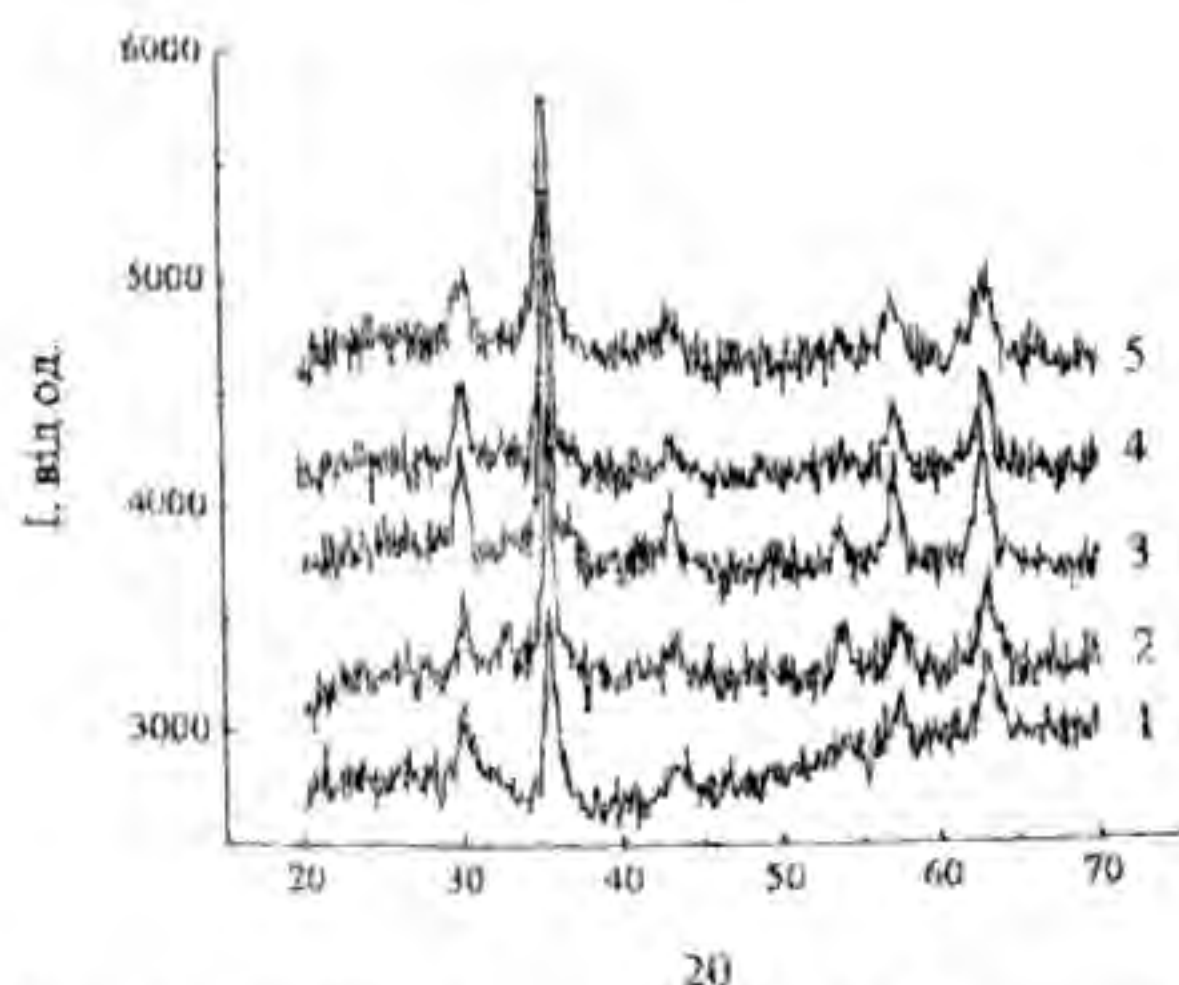


Рис. 3. Дифрактограми зразків вихідного магнетиту без термообробки (1) і нанокompозитів на основі магнетиту, модифікованого оксидом кремнію з вмістом 0,1 (2), 0,2 (3), 0,3 (4), 0,5 (5) г на 1 г поверхні магнетиту, витриманих при температурі 400 °C.

тів магнетиту в нанокompозитах. При цьому, при зміні маси покриття від 0 до 0,5 г на 1 г поверхні магнетиту відбувається збільшення питомої поверхні від 99 м²/г до 130 м²/г.

На основі одержаних даних встановлено, що оптимальний температурний режим термообробки одержаних нанокompозитів не повинен перевищувати 400-450°C. Дійсно, їх витримка в атмосфері аргону на протязі 2 год при $T = 400-450^\circ\text{C}$ не приводить до окислення магнетиту в нанокompозитах, покритих SiO₂. Проте, нагрівання цих нанокompозитів вище 400°C приводить до незворотного дегідроксилювання покриття SiO₂, що небажано для адсорбентів [13].

Розглянемо магнітні властивості одержаного нанокристалічного магнетиту та нанокompозитів Fe₃O₄/SiO₂ на його основі (рис.4). Як видно з одержаних даних, усім зразкам притаманні вузькі петлі гістерезису, що свідчить про низькі втрати енергії при перемагнічуванні зразків. Такий вигляд кривих намагнічування типовий для нанокристалічних матеріалів [15]. Стан поверхні кластерів, його форма, міжкластерна взаємодія і дефектність структури значно впливають на криві намагнічування наносистем і величину коерцитивної сили (H_c). В роботі [15] показано, що коерцитивна сила в нанокристалічних металах (Ni, Co) може бути в декілька разів більша значень H_c масивних металів. Однак, при зменшенні розміру частинок до однодомених і меншого ймовірно зменшення величини H_c для нанокompозитів. Так, для порошку магнетиту з розмірами нанокристалітів 30-50 нм значення σ_s , H_c і σ_r складають відповідно 6,15 мкТл·м³/кг, 31 кА/м і

ту, забезпечується модифікуванням 0,15-0,18 г SiO₂ на 1 г поверхні магнетиту, тобто 1,5-1,8 мг на 1 м² магнетиту. Отже, за допомогою рентгенофазового аналізу показано, що наявність суцільного покриття на поверхні магнетиту перешкоджає його окисленню.

Окрім вищенаведених результатів, з використанням формули Шерера [4] було визначено розміри кристалітів магнетиту і нанокompозитів. Ці розміри складають для немодифікованого магнетиту 20...25 нм і 10...15 нм – для нанокompозитів на основі магнетиту. Отже, модифікування поверхні у відповідності до запропонованої методики приводить до зменшення розмірів нанокристалітів

3,01 мкТл·м³/кг [1], в той час як для магнетиту з розмірами кристалітів 20...25 нм $\sigma_s=5,58$ мкТл·м³/кг, $H_c=0,58$ кА/м, $\sigma_r=0,13$ мкТл·м³/кг, тобто величини H_c зменшуються в 53 рази, величина σ_r в 23 рази.

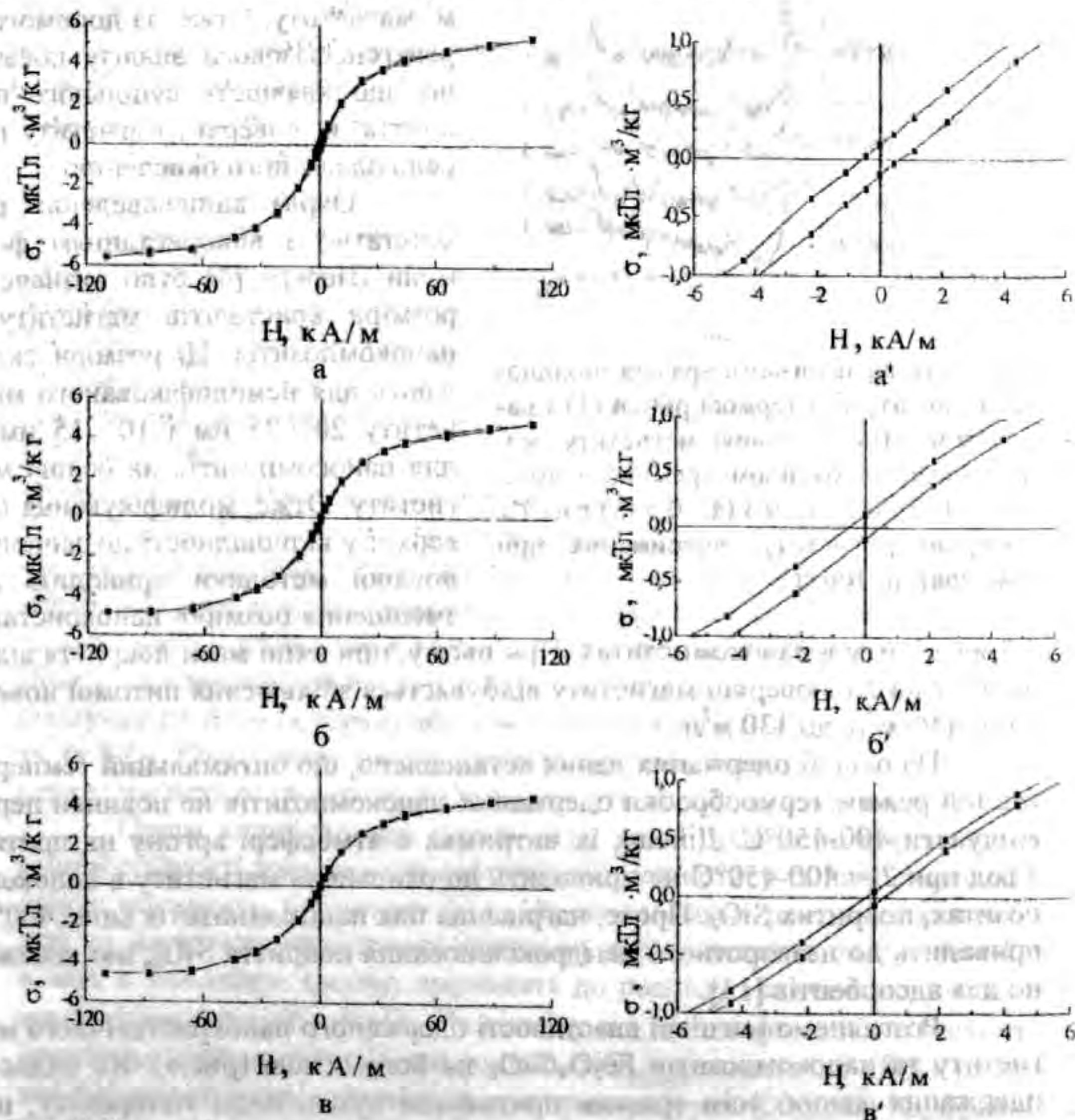


Рис. 4. Залежність питомої намагніченості σ від напруженості магнітного поля (петлі гістерезису) для зразків вихідного магнетиту (а) та нанокмполітів на основі магнетиту, модифікованого діоксидом кремнію (б,в). Вміст діоксиду кремнію на поверхні 1 г магнетиту складає (г): б – 0,3; в – 0,5. а',б',в' – фрагменти відповідних рисунків для визначення значень коерцитивної сили H_c та залишкової намагніченості σ_r .

Слід зазначити, що в залежності від розмірів частинок магнетит може знаходитися в багатодоменому, псевдодоменому, одnodоменому і суперпарамагнітному стані [10]. Значення коерцитивної сили досягає максимуму в одnodоменому стані [10]. Дійсно, згідно раніше одержаних на-

ми даних для магнетиту з розмірами частинок 30-50 нм H_c досягала 31 кА/м. Відомо [10] також, що частинки Fe_3O_4 з діаметром меншим, ніж 30 нм, знаходяться в суперпарамагнітному стані і мають $H_c \approx 0$. В даній роботі розміри нанокристалітів магнетиту складають 15...20 нм і H_c має дуже малі значення. Це дає підставу припустити, що стан частинок наближається до суперпарамагнітного. Проте, дуже важко одержати наночастинки з вузьким діапазоном розподілу за розмірами, тому з експериментальних даних визначити критичні розміри частинок, що відповідають переходу від псевдодоменового до однодоменового, від однодоменового до суперпарамагнітного стану досить складно.

Раніше [1-4,7] було показано, що наявність немагнітного покриття на поверхні магнетиту сприяє зниженню магнітних характеристик наноконкомпозитів у порівнянні з немодифікованим магнетитом. В даній роботі спостерігали аналогічну тенденцію. З рис.4 бачимо, що зростання маси покриття до 0,3 г на 1 г поверхні магнетиту приводить до зменшення питомої намагніченості σ_s від 5,58 до 4,84 мкТл·м³/кг, σ_r від 0,130 до 0,11 мкТл·м³/кг, H_c до 0,49 кА/м. Подальше збільшення маси покриття на поверхні від 0,3 до 0,5 г на 1 г магнетиту призводить до зменшення σ_s (до 4,59 мкТл·м³/кг), σ_r (до 0,057 мкТл·м³/кг), H_c до 0,28 кА/м. Слід зазначити, що на магнітні характеристики наноконкомпозитів істотно впливають не тільки маса немагнітного покриття, але й умови диспергування та процеси термообробки.

ВИСНОВКИ

Для одержаної серії наноконкомпозитів на основі магнетиту, модифікованого діоксидом кремнію, встановлено, що мінімальна товщина шару, яка перешкоджає окисленню частинок магнетиту, забезпечується модифікуванням 0,15...0,18 г SiO_2 на 1 г поверхні магнетиту, тобто 1,5-1,8 мг на 1 м² магнетиту. Показано, що покриття з вмістом SiO_2 1,5-1,8 мг та вище на 1 м² поверхні магнетиту підвищує термічну стабільність наноконкомпозитів у порівнянні з немодифікованим магнетитом. Визначено, що магнітні характеристики наноконкомпозитів з поверхневим шаром 1,5-1,8 мг на 1 м² поверхні магнетиту близькі до характеристик вихідного нанокристалічного магнетиту.

Матеріали, отримані у вигляді порошків, рекомендовано використовувати як основу для нанесення лікарських препаратів, як біоадсорбенти для очищення крові від вірусів, як модельні зразки для гіпертермії (нагрівання при перемагнічуванні) при лікуванні пухлин. Розглянуті наноконкомпозити можуть бути застосовані для сепарації клітин, діагностики, а також для виготовлення магнітних однорідних матеріалів технічного призначення.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Петрановська А.Л., Федоренко О.М., Горбик П.П. та ін. Розробка та властивості магніточутливих наноконкомпозитів для спрямованого транспорту лі-

- карських засобів // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. – 2005. – Т. 3, вип. 3. – С. 812-823.
2. Семко Л.С., Горбик П.П., Сторожук Л.П., Дубровин І.В., Чуйко А.А., Рево С.Л. Синтез и свойства нанокомпозитов на основе магнетита и полимеров // Тез. докл. международной конф. "Современное материаловедение: достижения и проблемы. – MMS-2005. – Киев, Украина. – сентябрь, 2005. – Т. II. – С. 693-694.
 3. Semko L.S., Gorbik P.P., Storozhuk L.P., Dubrovin I.V., Chuiko A.A. Magnet controllable magnetite-dextran nanoparticles // Abstracts of International Conf. "Functional Materials". – ICFM – 2005. – Ukraine, Crimea, Partenit, 2005 – P. 273 (DR-9/4).
 4. Semko L.S., Gorbik P.P., Storozhuk L.P., Dubrovin I.V. and al. // Nanocomposites based on the magnetite modified by silica // NATO advanced research workshop "Pure and applied surface chemistry and nanomaterials for human life and environmental protection". – International conference "Nanomaterials in chemistry, biology and medicine". – Book of abstracts. – Kyiv, Ukraine. – September 14-17, 2005. – P. 120.
 5. Латкин А.Т. Иммуномагнитная сепарация с последующей АТФ-метрией в экспрессиндикации шигелл Зонне. / Автореферат дис. Канд. Мед. Наук. – Москва, 2005. – 25 с.
 6. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направлений исследований / под ред. м. к. Роко, Р.С. Уильямса и П. / пер. с англ. – М: Мир, 2002. – 292 с.
 7. Gupta, A. K; Gupta, M. Synthesis and Surface Engineering of Iron Oxide Nanoparticles for Biomedical Applications // *Biomaterials*. – 2005. – Vol. 26. – P. 3995-4021.
 8. Lefebure S, Dubois V, Cabuil V, Neveu, Massart S. Monodisperse magnetic nanoparticles: preparation and dispersion in water and oils // *J. Mater Res* – 1998. – Vol. 10. – P. 2975.
 9. Bean C.P, Livingstone J.D. Superparamagnetism // *J Appl Phys*. – 1959. – Vol. 30. – P. 120-129.
 10. Биогенный магнетит и магниторецепция / под ред. Дж. Киршвика. – Москва: Мир, 1990. – Т. 1. – С. 59.
 11. Brinker C. I., Scherer C.W. Sol-Gel Science. – Boston, San Diego, New York: Academic Press. Inc. – 1990. – 908 p.
 12. Накамото К. ИК-спектры и спектры неорганических и координационных соединений – М.: Мир, - 1991. – 505 с.
 13. Лигтл Л. Инфракрасные спектры адсорбированных молекул / Перевод с англ. – М.: Мир, 1969. – 514 с.
 14. Коваленко А.С. Гринь С.В., Ильин В.Г. Особенности темплатного синтеза мезопористых материалов на основе титано-кремниевых эфиров. // *Теорет. и эксперим. химия*. – 2004. – Т. 40, №1. – С. 46-51.
 15. Суздалев И.П., Суздалев П.И. Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства // *Успехи химии*. – 2001. – Т. 70, №3. – С. 203-240.

Надійшла до редколегії 12.10.06

УДК 535.275

Олександр В. Слободянюк¹, Сергій
Г. Гарасевич, Петро І. Коренюк,
Юрій О. Мягченко

Особливості комбінаційного роз- сіяння світла в одновісних гіро- тропних кристалах

Подано короткий огляд особливостей комбінаційного розсіяння світла (КРС) в одновісних гіротропних (оптично активних) кристалах, які розглядається як прояв просторової дисперсії. Представлені відповідні експериментальні дані, пояснені "порушення" правил відбору, встановлено існування невироджених коливальних мод з ненульовим кутовим моментом та встановлено спектроскопічні прояви обміну моментом імпульсу між цими модами і нормальними світловими хвилями. Розглянуто правила відбору КРС для цього випадку.

Ключові слова: гіротропія, динаміка ґратки, КРС, поляризація світла, просторова дисперсія.

Olexander V. Slobodyanyuk¹, Sergiy
G. Garasevich, Petro I. Korenyuk,
Yuriy O. Myagchenko

Peculiarities of Raman scattering in gyrotropic uniaxial crystals

Brief overview of peculiarities of Raman scattering in uniaxial gyrotropic (optically active) crystals treated as effects of spatial dispersion is presented. Raman experiment in gyrotropic crystals, elimination of artifacts, spectroscopic manifestation of gyrotropy in phonon Raman spectra, exchange with angular momentum between light and crystal lattice excitation and corresponding selection rules are discussed.

Key Words: gyrotropy, lattice dynamics, Raman scattering, polarization of light, spatial dispersion.

¹ E-mail: slobod@univ.kiev.ua

Вступ

Незважаючи на те, що комбінаційне розсіювання світла (КРС) вперше спостерігалось в кристалічному кварці, який являв собою класичний приклад оптично активного (гіротропного) кристала, особливості КРС, обумовлені наявністю гіротропії, тривалий час не були предметом спеціальних досліджень. Це цілком зрозуміло, оскільки інформативність і застосування КРС, високотемпературних надпровідників або вуглецевих наноструктур, і метод КРС ніколи не відчував нестачу цікавих задач. Що ж стосується гіротропії, яскравим проявом якої є оптична активність, то всупереч

проявом якої є оптична активність, то всупереч широко розповсюдженому уявленню вона не становить собою якусь виняткову, екзотичну властивість, а притаманна величезному числу речовин. Якщо говорити про кристали, то, як відомо, симетрія 18 з 32 кристалічних класів припускає гіротропію [1]. Щодо порівняно невеликого числа кристалів, структура яких більш-менш вивчена, то з них 23% належать до гіротропних [2], серед них такі добре відомі і широко вживані кристали як кварц $\alpha\text{-SiO}_2$, іодат літію $\alpha\text{-LiIO}_3$, парателурит TeO_2 та багато інших. Але інтерес до вивчення гіротропних кристалів зумовлений не тільки їх поширеністю. Він виходить за межі фізики, оскільки тісно пов'язаний з давньою проблемою існування "лівого" та "правого" в природі, зокрема з винятковою роллю хіральних структур в біології, для яких характерне несиметричне щодо знаку енантіоморфізму поширення в живій природі.

Структура гіротропних речовин, зокрема енантіомерів та енантіоморфів, вивчається рентгенівськими та подібними методами і для багатьох з оптично активних речовин дзеркально симетричне розміщення атомів (іонів) встановлене з достатньою точністю. Але для обговорення питань зародження, стабільності та еволюції "лівих" і "правих" структур, необхідно вивчати і їх динаміку, а також взаємодію з всюдисущим електромагнітним полем, що і становить предмет коливальної спектроскопії. В експериментальних та теоретичних дослідженнях цих питань саме кристали можуть бути містком між відносно простими гіротропними молекулами та складними хіральними об'єктами біологічного походження. Якщо у випадку індивідуальних гіротропних молекул в газоподібній фазі або в рідині йдеться про динаміку внутрішньо молекулярного руху, то в гіротропних кристалах найбільший інтерес становлять колективні збудження, особливо в кристалах речовин, що виявляють гіротропію лише в кристалічному стані. При цьому найбільш загальним з точки зору кристалооптики і найменш дослідженим є випадок розповсюдження світла саме в анізотропних гіротропних кристалах.

Ефекти гіротропії в динаміці кристалічної ґратки можуть розглядатися як ефекти просторової дисперсії (ПД) першого порядку по хвильовому вектору колективного збудження. Тому при їх дослідженні КРС має переваги в порівнянні з інфрачервоною (ІЧ) спектроскопією, обумовлені більшою величиною хвильового вектора збуджень, що беруть участь у взаємодії з випромінюванням. Крім того область частот так званих зовнішніх коливань (порядку сотні см^{-1}) не дуже зручна для ІЧ спектроскопії, особливо при поляризаційних дослідженнях. Ефекти просторової дисперсії в спектрах КРС можна розділити на ті, що пов'язані з оптичною активністю на частотах падаючого і розсіяного світла і залежать від довжини хвильового вектора відповідних світлових хвиль, і на ті, що пов'язані з колективними збудженнями кристалічної ґратки на частотах оптичних фононів, що лежать в ІЧ області спектру і залежать від

хвильового вектора цих збуджень. Ми в основному зосередимось на розгляді другої групи ефектів, особливо тих з них, які є різними для енантіоморфних структур. Щодо перших, то вони коротко обговорюються лише в зв'язку з оптимальною постановкою експерименту по КРС в гіротропних кристалах.

Оптична активність та особливості вимірювання спектрів КРС в гіротропних кристалах

Ускладнення постановки та інтерпретації результатів вимірювань КРС в гіротропних кристалах, зумовлені так званим "обертанням" площини поляризації падаючого та розсіяного світла відзначались багатьма дослідниками [3,4]. Так, наприклад, Шаліро та Аксе [4] були вимушені відмовитись від вимірювань інтенсивності деяких ліній КРС в кварці, оскільки "... на жаль, такі виміри по суті неможливі із-за складностей, що їх вносить оптична активність". В роботах [5,6] було показано, що основна причина подібних складностей полягає в традиційному використанні в експериментах по КРС світла лінійної поляризації, яка не співпадає з поляризацією нормальних хвиль (НХ) в гіротропному середовищі, і що так звані "порушення" правил відбору КРС як в середовищах з природною так і з індукованою (наприклад зовнішнім магнітним полем, [7]) гіротропією насправді не мають місця, а пов'язані з інтерференційними ефектами, які залежать від фазових співвідношень між різними НХ збуджуючого лазерного та детектованого в точці $\mathbf{r}_0$ розсіяного світла і описуються отриманою в роботі [6] формулою для обчислення інтенсивності світла, розсіяного фізично малим об'ємом V , який містить достатньо велике число розсіюючих центрів

$$I(\vec{r}_0) = c \sum_{ij} (E^i)(E^j)^* = c \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} |E_{\alpha\beta}^i| |E_{\alpha\beta}^j| \times \quad (1)$$

$$\times \exp \left\{ i \left[\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i - \vec{k}_j \cdot \vec{r}_j + \vec{k}_i^s \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i) - \vec{k}_j^s \cdot (\vec{r} - \vec{r}_j) + \varphi_i - \varphi_j + \varphi_i^s - \varphi_j^s + \Phi_i - \Phi_j \right] \right\}$$

де індекси з тильдою "i" та без тильди означають в загальному випадку різні розсіюючі центри (i та j) і різні НХ збуджуючого лазерного ($\vec{r}, \nu$), та розсіяного ($\vec{r}', \nu'$) світла, φ та Φ - початкові фази НХ та нормальних коливань розсіюючих центрів відповідно. Множник $|E_{\alpha\beta}^i| = \left| \sum_{\mu} a_{\mu}(\mathbf{e}_{\alpha})_i A_{\mu}^i a_{\mu}(\mathbf{e}_{\beta})_i \right|$ описує внесок в амплітуду НХ ν' розсіяного світла, що зумовлений розсіянням ν -тої НХ падаючого лазерного світла, яка має вектор поляризації $\mathbf{e}_{\alpha}$ на μ -тому коливанні i -ої елементарної комірки (або молекули), якому відповідає тензор КРС з компонентами A_{μ}^i , причому

враховано, що детектується лише світло з вектором поляризації $\mathbf{e}_d$. Радіуси-вектори $\mathbf{r}_l$ та $\mathbf{r}_r$ задають положення розсіюючих центрів. Нехтуючи просторовою когерентністю, що відповідає реальним умовам спостереження спонтанного розсіяння в кристалах та рідинах, тобто залишивши лише доданки з $l = r$, вираз для інтенсивності можна подати у вигляді

$$I_r(\mathbf{r}_0) = c' \left\{ \sum_{\nu, \nu'} |E_{\nu\nu'}|^2 + 2 \sum_{\nu, \nu'} |E_{\nu\nu'}| |E_{\nu\nu}| \cos[(\mathbf{k}_{\nu'} - \mathbf{k}_{\nu})\mathbf{r}_l + \varphi_{\nu'} - \varphi_{\nu}] + \right. \\ \left. + 2 \sum_{\nu, \nu'} |E_{\nu\nu'}| |E_{\nu\nu}| \cos[(\mathbf{k}_{\nu'} - \mathbf{k}_{\nu})\mathbf{r}_r + \varphi_{\nu'} - \varphi_{\nu}] + \right. \\ \left. + 2 \sum_{\nu, \nu'} |E_{\nu\nu'}| |E_{\nu\nu}| \cos[(\mathbf{k}_{\nu'} - \mathbf{k}_{\nu})\mathbf{r}_l + (\mathbf{k}_{\nu'} - \mathbf{k}_{\nu})\mathbf{r}_r + \varphi_{\nu'} - \varphi_{\nu} + \varphi_{\nu'} - \varphi_{\nu}] \right\} \quad (2)$$

Оптимальним є вибір таких поляризацій падаючого на кристал та детектованого розсіяного світла, які збігаються з поляризаціями НХ, що можуть розповсюджуватись в кристалі у відповідних напрямках. Тоді (2) набирає вигляду добре відомої формули для інтенсивності КРС

$$I = c |\sum \mathbf{e}_l^i A_{ij} \mathbf{e}_r^j|^2, \quad (3)$$

де тепер, однак, під $\mathbf{e}_l^i$ та $\mathbf{e}_r^j$ необхідно розуміти компоненти векторів поляризації НХ, що розповсюджуються у відповідних напрямках $\mathbf{k}^l$ та $\mathbf{k}^r$ в кристалі, а під A_{ij} відповідні компоненти тензора КРС визначені в тому ж базисі. В усіх інших випадках необхідно враховувати інтерференційні члени, роль яких істотна, коли розміри S області зразка, з якої розсіяне світло потрапляє в спектрометр, близькі до так званої "когерентної довжини" $L_{coh} = \lambda / (2\Delta n)$, де λ - довжина хвилі в вакуумі, а Δn різниця показників заломлення двох НХ лазерного або розсіяного світла, що розповсюджуються в одному напрямку. Саме тоді з'являються згадані труднощі та позірні "порушення правил відбору для КРС" в гіротропних кристалах. Наприклад, другий доданок в (2) описує інтерференцію внесків в одну й ту ж саму НХ розсіяного світла ν' , зумовлених різними НХ падаючого світла, що підтверджено спеціальними експериментами та детально обговорено в [6,8]. В загальному випадку поляризація НХ в гіротропних кристалах еліптична [1,2,9], і лише при поширенні світла в ізотропних кристалах та вздовж оптичних осей анізотропних кристалів вона переходить в кругову. Тому циркулярно поляризоване світло в експериментах по КРС в гіротропних кристалах відіграє надзвичайно важливу роль, яка не обмежується радикальним усуненням артефактів, зумовлених оптичною активністю. Саме завдяки застосуванню циркулярно

поляризованого світла вдається дістати додаткову спектроскопічну інформацію, зокрема про елементарні збудження середовища, що мають ненульовий момент імпульсу, і можуть бути використані для здійснення селективного збудження "лівих" або "правих" структур електромагнітним випромінюванням.

Ефекти, зумовлені особливостями динаміки кристалічної ґратки гіротропних кристалів

Традиційний розгляд динаміки кристалічної ґратки без врахування просторової дисперсії приводить до фононних станів з лінійною поляризацією, які не мають кутового моменту. При цьому стани з еліптичною або циркулярною поляризацією, що мають відмінний від нуля кутовий момент, можуть бути утворені лише внаслідок тривіальної суперпозиції лінійних поляризацій для напрямів високої симетрії хвильового вектора фонона q , що відповідають виродженим фононним станам.

Більш глибокий фізичний зміст має існування невироджених колективних збуджень кристалічної ґратки з еліптичними поляризаціями та відмінним від нуля кутовим моментом, які, як виявляється, можливі в гіротропних кристалах для довільного напрямку хвильового вектора q . Нами проведено відповідний теоретико-груповий аналіз зміщень атомів в кристалі з симетрією, що відповідає групі D_3 [10]. В роботі подано загальний метод побудови та зведення представлення над простором довільних лінійних зміщень всіх атомів кристалу. В групі D_3 представлення зводиться при переході до власного базису оператора представлення, що відповідає операції C_3 . Такий перехід перетворює простір представлення в лінійний простір з комплексними векторами. При деяких значеннях фазового параметра в матриці перетворення, при яких зведення можливе, комплексні вектори зміщення двовимірних мод постають еліптичними векторами, а отже, рухами з відмінним від нуля кутовим моментом. При цьому сумарний кутовий момент еквівалентних атомів комірки також відмінний від нуля. Цей розв'язок представляє амплітуду Блоха, отже, не залежить від хвильового вектора.

Основною спектроскопічною ознакою фононних станів з ненульовим кутовим моментом є залежність інтенсивності відповідної лінії КРС від знаку циркулярної поляризації падаючого або розсіяного світла, що реєструється спектрометром. Ми будемо називати це явище циркулярним дихроїзмом комбінаційного розсіяння світла (ЦД КРС) і за його міру приймемо відношення

$$\gamma = (I_R - I_L) / (I_R + I_L), \quad (4)$$

де R означає праву, а L - ліву циркулярну поляризацію падаючого або зареєстрованого розсіяного світла.

Вперше ЦД КРС спостерігали Пайн та Дрессельхауз для ліній E -дублету 127 см^{-1} в стоксовому спектрі α -кварцу в геометрії розсіяння "назад" при $q \parallel c$, в зв'язку з вивченням так званого лінійного по q зсуву ліній в спектрі КРС [11]. Існування такого лінійного зсуву, як вказано ними в тій же роботі, можливе лише в кристалах аксіальних класів, що мають поворотні осі третього та більш високого порядку, причому лише для напрямів q вздовж таких осей в одноосних кристалах та для довільних напрямів q в кубічних кристалах.

Ці два ефекти: циркулярний дихроїзм та залежність положення ліній від q і є основними ефектами просторової дисперсії першого порядку в спектрах КРС гіротропних кристалів. Вони взаємно пов'язані: перший є проявом впливу гіротропії на форму нормальних коливань (власні вектори), а другий - на частоти (власні значення) відповідної динамічної задачі.

Максимальна зареєстрована величина лінійного по q зсуву компонент E -дублету 127 см^{-1} в спектрі КРС α -кварцу не досягала 0.1 см^{-1} і він спостерігався як залежність симетричного розщеплення дублету від довжини хвилі падаючого лазерного випромінювання. Подібні залежності спостерігались для E -дублетів 92 см^{-1} та 141 см^{-1} в спектрах КРС телуру [12], що належить до того ж самого класу симетрії $32 (D_3)$, що і $\alpha\text{-SiO}_2$. Лінійний по q зсув також спостерігався в кубічних кристалах BGO ($\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$) як симетричне розщеплення лінії поперечних коливань TO LO - TO -дублету $207 - 208.5\text{ см}^{-1}$ на компоненти TO_+ та TO_- , які відповідають круговим поляризаціям оптичних фононів з протилежними напрямками обходу [13]. Залежно від довжини хвилі падаючого лазерного світла та геометрії експерименту це розщеплення змінювалось в межах $0.2 - 0.8\text{ см}^{-1}$ пропорційно модулю q , що в стоксовому процесі є різницею хвильових векторів падаючого та розсіяного світла.

Всі ці експерименти виконувались виключно при гелієвих температурах з застосуванням інтерферометрів Фабрі-Перо для підвищення роздільної здатності і тривалий час прояви ПД, що в них спостерігались, сприймалися як дещо екзотичне. Відмінність постановки задачі в роботі полягає в тому, що вивчаються ефекти ПД в КРС на полярних коливаннях в найбільш загальному випадку: для довільного напрямку q і при наявності анізотропії короткодійних сил та довгохвильового кулонівського поля. Результати наших досліджень не обмежених напрямками високої симетрії q , виконаних на ряді одновісних гіротропних кристалів, дозволяють твердити про широке поширення ефектів ПД в спектрах КРС гіротропних кристалів і про необхідність їх врахування при розгляді динаміки кристалічної ґратки поряд з анізотропією короткодійних сил та далекодіючим кулонівським полем [14-17].

При дослідженні ЦД КРС в одновісних гіротропних кристалах [14] застосовувались два основних типи поляризаційних геометрій: так звана "пряма", коли реєструють лише одну НХ розсіяного світла при направленні вздовж оптичної осі ліво- або правополяризованого лазерного світла (Рис. 1а), та "обернена", коли лінійна поляризація падаючого світла незмінна, а з розсіяного вздовж оптичної осі світла за допомогою циркулярного аналізатора виділяється та реєструється право- (R) або ліво- (L) поляризована НХ (Рис. 1б). На Рис. 1в та 1г показані фрагменти стоксового та антистоксового спектрів КРС тетрагонального дифосфіду цинку $\alpha\text{-ZnP}_2$, отримані на стандартному дифракційному спектрометрі при кімнатній температурі відповідно в "прямій" та "оберненій" геометріях при різних поляризаціях падаючого та розсіяного світла [14]. Кожна компонента дублета, який за фактор-груповим аналізом відповідає двократно виродженій в центрі зони Бріллюена E -моді, виявляє ЦД з $\gamma \approx 1$ або -1 . На Рис. 2 наведено відповідні векторні діаграми, що ілюструють процеси КРС на невироджених елементарних збудженнях ґратки гіротропних кристалів, що мають ненульовий кутовий момент і які задля стислості ми будемо називати гіронами. При непружному розсіянні світла за участю гіронів крім обміну енергією та імпульсом між електромагнітним полем та ґраткою також має місце і обмін кутовим моментом. В прямій геометрії в стоксовому (Рис. 2а) процесі момент імпульсу падаючого циркулярно поляризованого світла успадковується гіронами, що народжуються, і розсіяне лінійно поляризоване світло не несе кутового моменту. В антистоксовому процесі для тієї ж геометрії (Рис. 2б) протилежно направлені кутові моменти гірона і падаючого фотона компенсуються і результатом знову є лінійно поляризоване світло.

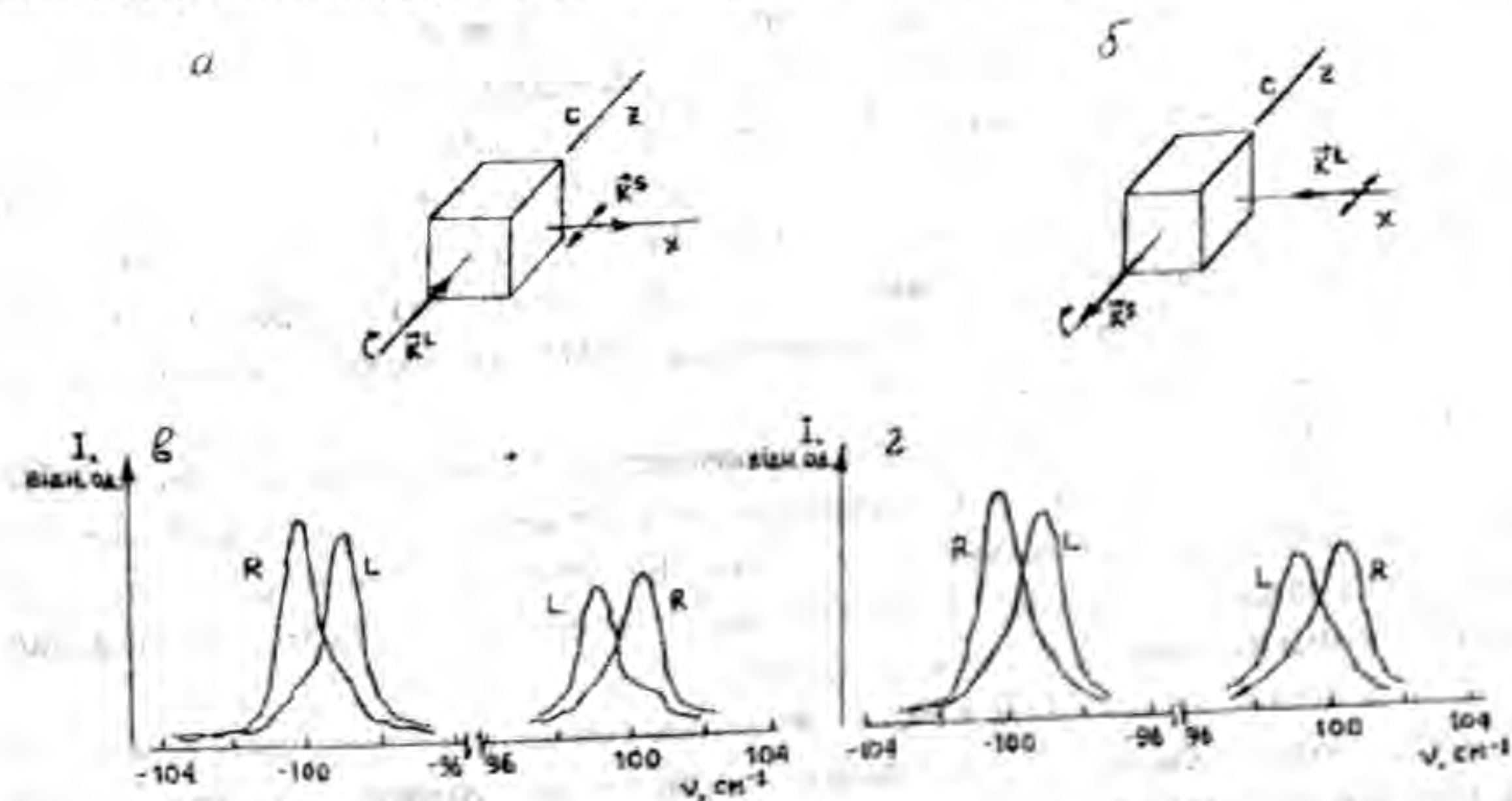


Рис. 1. Циркулярний дихроїзм КРС в одновісних кристалах $\alpha\text{-ZnP}_2$ при

$T = 300 \text{ K}$. а – “пряма”, б – “обернена” геометрія експерименту; в – Е-дублет в стоксовому та антистоксовому спектрах КРС кристала $\alpha\text{-ZnP}_2$ в “прямих” геометріях $z(Lz)x$ та $z(Rz)x$, г – те ж саме в “обернених” геометріях $\bar{x}(zL)\bar{z}$ та $\bar{x}(zR)\bar{z}$. R позначає праву, а L – ліву циркулярну поляризацію [14].

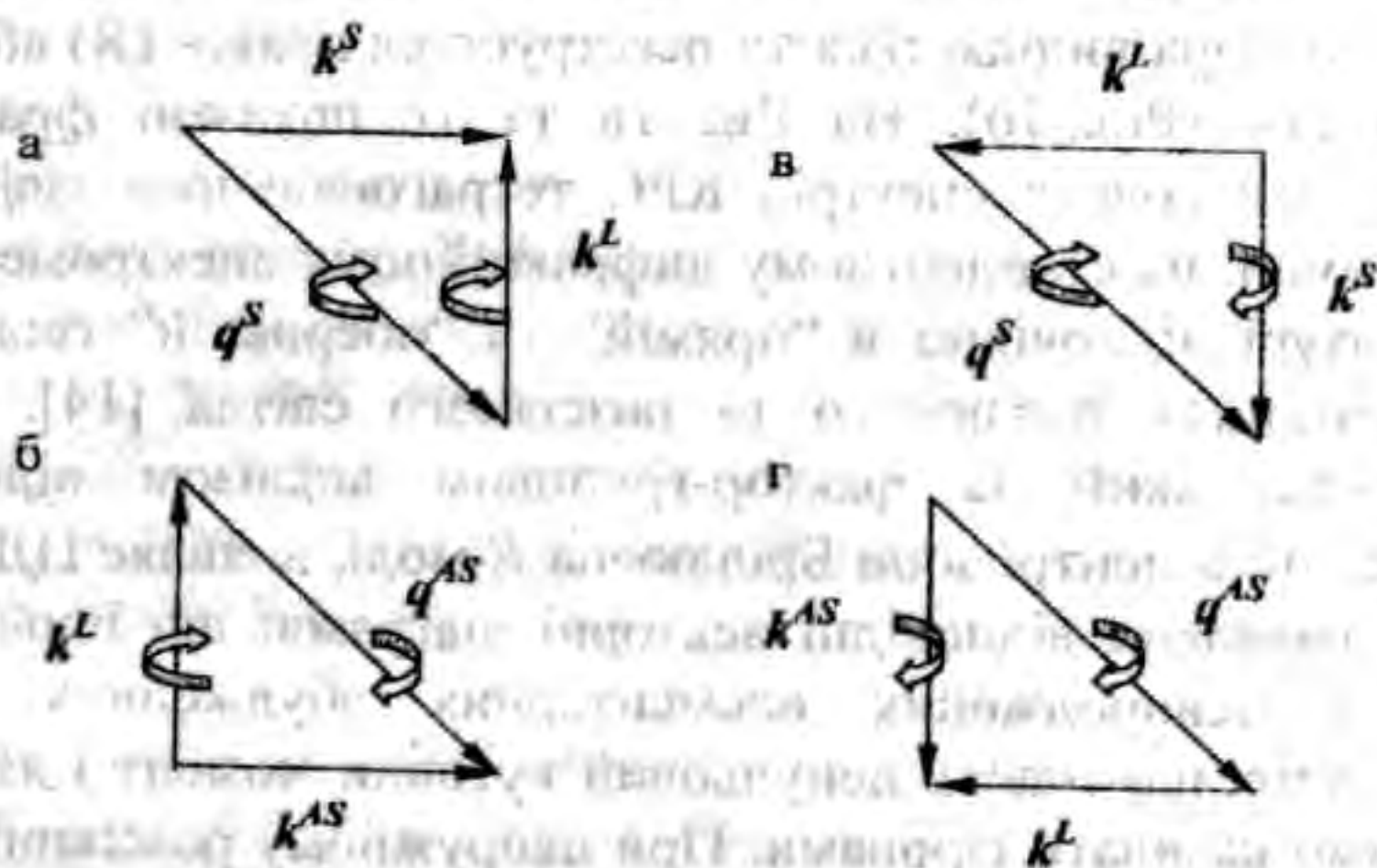


Рис. 2. Векторні діаграми непружного розсіяння світла на гіронах. а і б – стоксів та антистоксів процеси в “прямій” геометрії; в і г – те ж саме в “оберненій” геометрії.

В “оберненій” геометрії в стоксовому процесі (Рис. 2в) лінійно поляризоване світло породжує гірони і НХ циркулярно поляризованого світла, що розповсюджується вздовж оптичної осі і несе момент імпульсу протилежний моменту імпульсу гіронів. Зауважимо, що за умови відсутності зовнішнього магнітного поля стоксовий процес в “прямій” геометрії (Рис. 2а) є спряжений відносно операції інверсії часу до антистоксового процесу в “оберненій” геометрії (Рис. 2г), а стоксовий процес в “оберненій” геометрії (Рис. 2в) є оберненим в часі до антистоксового процесу в “прямій” геометрії (Рис. 2б). З цим повністю узгоджуються знаки циркулярних поляризацій НХ, що беруть участь в цих процесах розсіяння.

Слід наголосити, що при використанні наведених геометрій спостерігається розсіяння на елементарних збудженнях, хвильовий вектор яких q займає загальне положення в зоні Бріллюена. Група симетрії для таких q складається лише з одиничного елементу і йому відповідає невідроджений коливальний стан ґратки.

Аналогічні прояви ІД КРС у вказаних геометріях спостерігались ще на ряді одновісних гіротропних кристалів різної симетрії: на тетрагональних кристалах дифосфіду кадмію CdP_2 [15] ізоструктурних до кристалів дифосфіду цинку $\alpha\text{-ZnP}_2$ [14,16,18] та на кристалах парателуриту

TeO_2 [19], що належать до того ж самого аксіального енантіоморфного класу 422; на гексагональних кристалах іодату літія $\alpha\text{-LiIO}_3$ [20] аксіального енантіоморфного класу 6.

Вивчення ІЦД КРС на різних кристалах показало, що величина ІЦД не залежить від температури, а також від величини зовнішнього магнітного поля, принаймні до $B = 8\text{Т}$. Для антистоксових ліній КРС спостерігається ІЦД того ж знаку і величини, що і стоксових ліній з тим самим частотним зсувом відносно релесівської лінії. Цим ІЦД фононного КРС принципово відрізняється від ІЦД КРС, пов'язаного зі змішуванням близьких за енергіями електронних та фононних станів в присутності зовнішнього магнітного поля або з переходами електронів з перевертанням спіну.

В спектрах КРС енантіоморфних модифікацій одного кристалу для ліній КРС однаково зсунутих по частоті відносно релесівської лінії спостерігається ІЦД протилежних знаків [16].

Протилежні знаки ІЦД відповідно низько- та високочастотних компонент можуть спостерігатись також і для різних E -дублетів в спектрі КРС кристалу однієї і тієї ж самої енантіоморфної модифікації. Наприклад, перерозподіл інтенсивності між компонентами дублету поблизу 230 см^{-1} в спектрі КРС кристалу ZnP_2 при зміні знаку циркулярної поляризації падаючого світла є протилежним до перерозподілу між компонентами дублету поблизу 100 см^{-1} [14].

Для всіх досліджених кристалів спостерігається тенденція зменшення ІЦД при переході від низькочастотних E -дублетів до більш високочастотних. Детальне співставлення величини ІЦД з даними про поляриність відповідних E -мод, отриманими з ІЧ спектрів, показує, що для ліній КРС на модах з більшою силою осцилятора, як правило, ІЦД менший. Спеціальні дослідження, проведені на кристалах парателуриту, в яких спектри КРС реєструвались з малої ділянки зразка, показали, що для тих E -дублетів, для компонент яких ІЦД відсутній, спостерігається лінійна анізотропія КРС характерна для $LO\text{-}TO$ розщеплення в нецентросиметричних кристалах [19,20].

Положення ліній, на яких може спостерігатись ІЦД в спектрах КРС одновісних гіротропних кристалів в загальному випадку залежить від напрямку та величини хвильового вектора фонона q . Оскільки виявлені лінії з ІЦД утворюють E -дублети, то найпростіше вивчати розщеплення цих дублетів $\Delta\omega$ від q . В кубічних гіротропних кристалах таке розщеплення постійної величини спостерігається для довільного напрямку q і можна очікувати залежність тільки від величини хвильового вектора фонона $q = |q|$ [13]. Найбільш складний випадок реалізується в одновісних гіротропних кристалах, до яких відносяться досліджувані кристали ZnP_2 та CdP_2 , в котрих допускається залежність розщеплення як від модуля, так і від напрямку q . Для довільного напрямку розповсюдження фононів внесок

в величину розщеплення полярних E -дублетів в таких кристалах дають анізотропія короткодійних сил, далекодіючі електростатичні сили та гіротропія, причому ці внески по різному залежать від орієнтації q [21]. Вимірювання розщеплення низькочастотних E -дублетів в кристалах ZnP_2 та CdP_2 проводилось в трьох 90-градусних геометріях, які забезпечували кут θ між напрямком вектора q та оптичною віссю c , відповідно: 0 ($q \parallel c$), $\pi/4$ та $\pi/2$ ($q \perp c$). При цьому змінювалась орієнтація зразка при незмінних в просторі напрямках хвильових векторів збуджуючого лазерного випромінювання k_i та розсіяного випромінювання в напрямку спостереження k_s , що забезпечувало незмінність довжин та напрямків в просторі хвильових векторів фононів, які беруть участь в процесі розсіювання.

Залежності розщеплень низькочастотних E -дублетів 99 см^{-1} в ZnP_2 (Рис. 3) та 93 см^{-1} в CdP_2 , на яких спостерігається ЦД КРС, від кута θ подібні і повністю протилежні типовій залежності LO - TO розщеплення E -дублета 116 см^{-1} в CdP_2 (Рис. 4). Розщеплення E -мод для $q \perp c$ може бути, як за рахунок просторової дисперсії, так і далекодіючої кулонівської взаємодії. Ці два внески не компенсують один одного. Відсутність розщеплення E -мод 99 см^{-1} в ZnP_2 та 93 см^{-1} в CdP_2 в спектрах КРС обох кристалів при $q \perp c$ свідчить, що обидва ці внески нульові для даного напрямку. Оскільки для цього напрямку внесок далекодіючого кулонівського поля повинен бути максимальним і зменшуватись для інших напрямків q , то можна говорити про повну відсутність розщеплення за рахунок LO - TO взаємодії. Максимального значення розщеплення E -дублетів 99 см^{-1} в ZnP_2 та 93 см^{-1} в CdP_2 досягає для геометрії $q \parallel c$.¹ "Аномальна" для моделі LO - TO розщеплення залежність величини $\Delta\omega$ цих дублетів від кута θ знаходить своє просте пояснення як прояв просторової дисперсії першого порядку, якій відповідає один з можливих для класу 422 типів псевдотензора гірації, вказівна поверхня якого показана на Рис. 3. Для цього псевдотензора $G_1 = G_2 = 0$, а головне значення $G_3 = G_{zz} \neq 0$ [22,23].

Відповідно до нашої інтерпретації залежність розщеплення E -дублетів від модуля хвильового вектора q в геометрії $q \parallel c$ має бути лінійною з нульовим розщепленням при $q = 0$. Ця теза підтверджується при порівнянні спектрів КРС та ІЧ-поглинання в кристалах CdP_2 в геометрії $q \parallel c$, де на частоті 93 см^{-1} в поляризації $E \perp c$ для обох геометрій $q \perp c$ та $q \parallel c$ спостерігається тільки одна лінія,

¹ Пізніше групою з університету Марії Кюрі (Париж) за подібною програмою було виконано дослідження розщеплення низькочастотних E -дублетів в спектрах одновісних гіротропних кристалів α - $GaPO_4$ та α - $AlPO_4$ тригональної сіткої зі структурою кварцу і отримано аналогічні результати [24], які інтерпретовано на основі запропонованого нами підходу

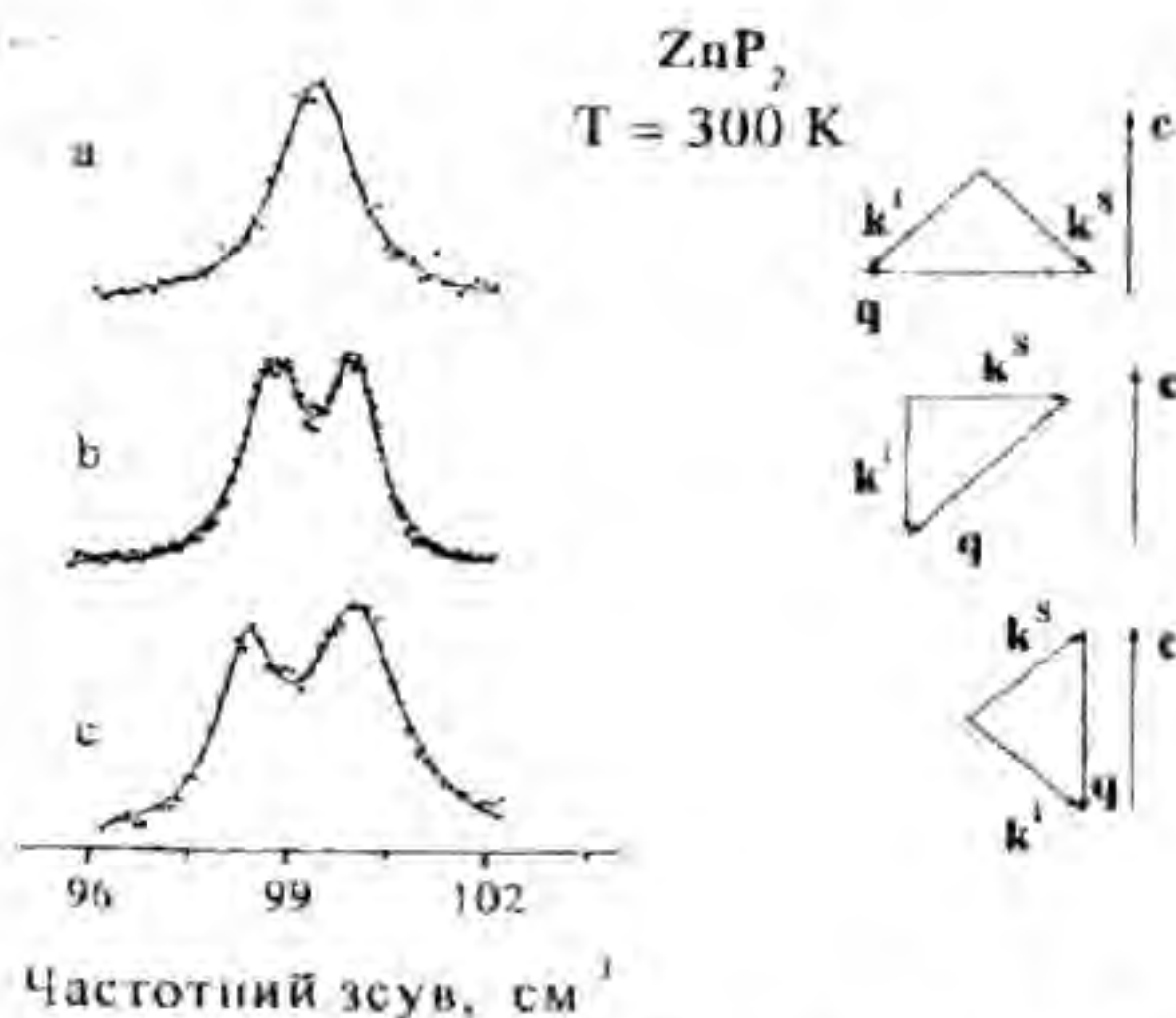


Рис. 3. Низькочастотний E -дублет 99 см^{-1} спектра КРС кристала ZnP_2 при $T = 300\text{ К}$ та геометрії розсіяння: а) $\bar{x}z(y, z+x)\bar{x}\bar{z}$: $q \perp c$; б) $z(L+R, z)x$: $\angle(q, c) = \pi/4$; в) $\bar{x}z(y, z+x)\bar{x}\bar{z}$: $q \parallel c$.

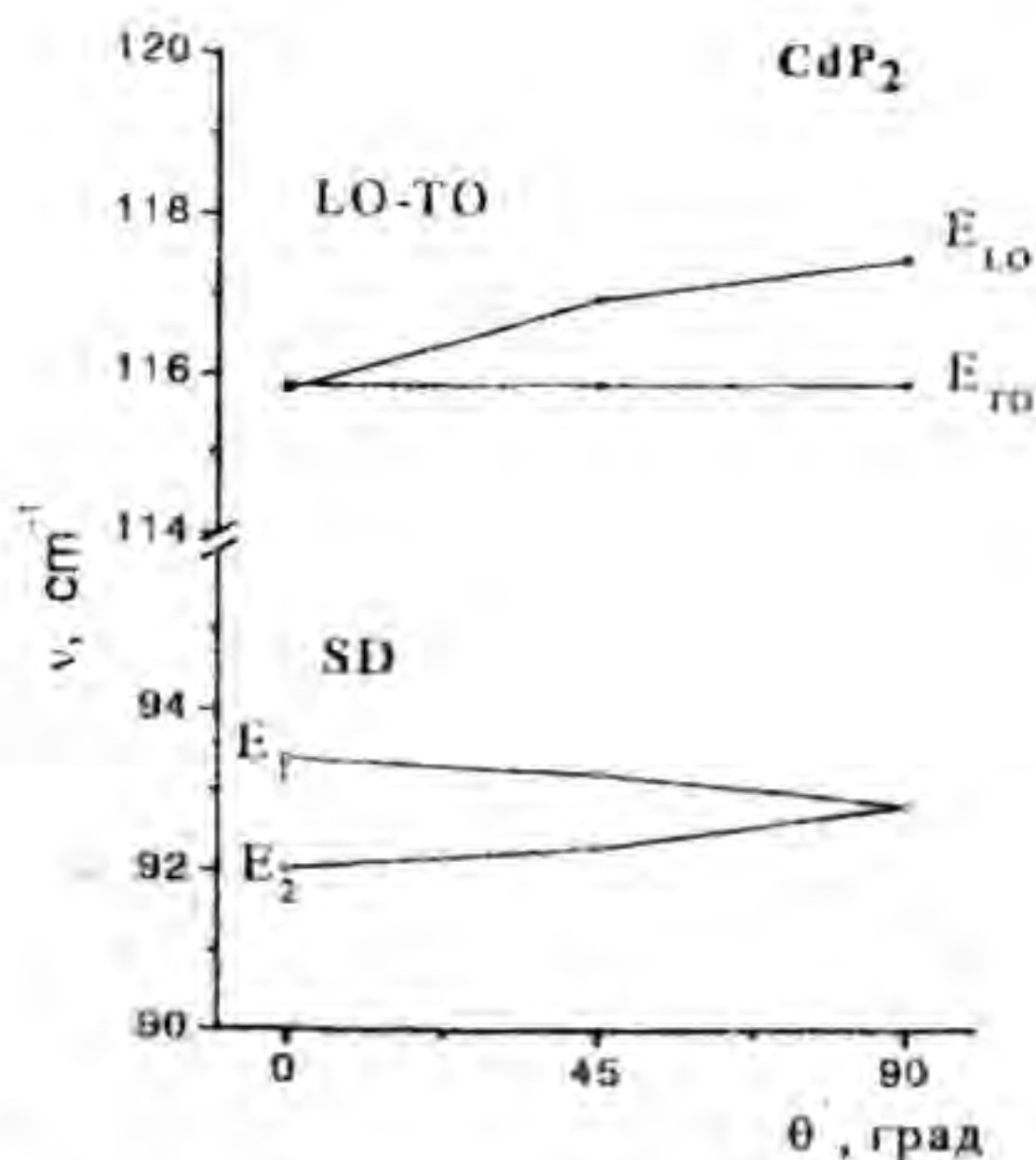


Рис. 4. Залежність частот компонент E -дублетів 93 см^{-1} та 116 см^{-1} в спектрах КРС кристала CdP_2 від кута θ .

півширина якої не перевищує 0.5 см^{-1} , і яка навіть при гелієвій температурі не виявляє дублетної структури. Хід дисперсії фононних гілок поблизу Γ -точки (Рис. 6) повністю пояснює, несподівану на перший погляд, відсутність розщеплення лінії 93 см^{-1} в спектрах ІЧ-поглинання. Довжина хвильового вектора фононів, що беруть участь в процесі КРС, у

90-градусній геометрії, визначена з врахуванням відповідних показників заломлення нормальних хвиль падаючого та розсіяного світла в CdP_2 :
 $q^{KPC} = \sqrt{k_l^2 + k_s^2} = 2\pi\sqrt{n_o^2/\lambda_l^2 + n_e^2/\lambda_s^2} \approx 4.8 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$. При $q = q^{KPC}$ розщеплення становить 1.4 см^{-1} і ми можемо спостерігати дві лінії. В той же час довжина хвильового вектора фононів, що народжуються в процесі ІЧ-поглинання: $q^{IQ} = 2\pi m_0^{II} \tilde{\nu} \approx 10^3 \text{ см}^{-1}$, тобто при $q = q^{IQ}$ можна очікувати розщеплення на два порядки менше ($\approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$) ніж при $q = q^{KPC}$. Безпосередньо спостерігати такі малі розщеплення навряд чи можливо, з огляду на скінчену природну півширину ліній поглинання, яка як мінімум на порядок більша. Тому в спектрах ІЧ-поглинання спостерігається тільки одна лінія.

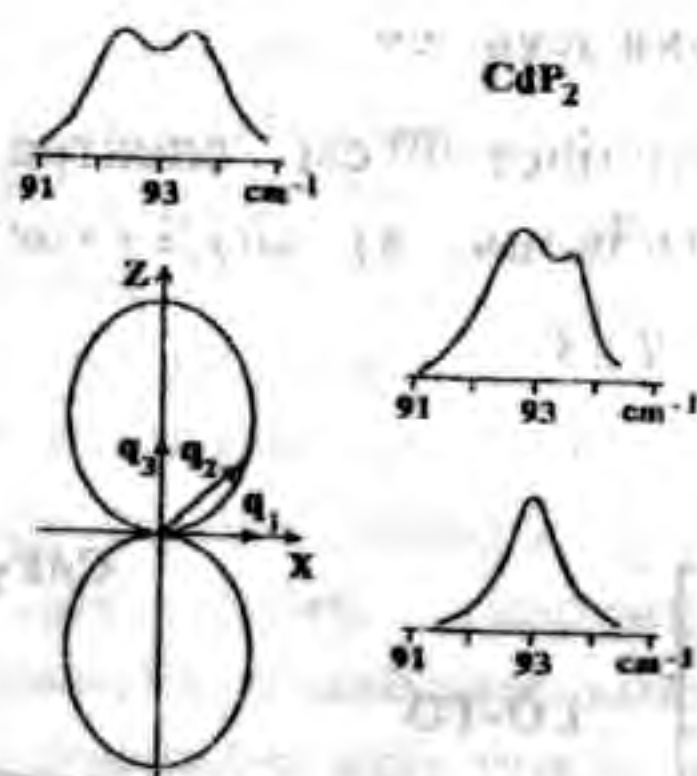


Рис. 5. Переріз вказівної поверхні псевдотензора гірації та розщеплення E -дублета 93 см^{-1} в кристалах CdP_2 при різних напрямках розповсюдження фононів: $q_1 \perp c$, $\angle(q_2, c) = \pi/4$, $q_3 \parallel c$.

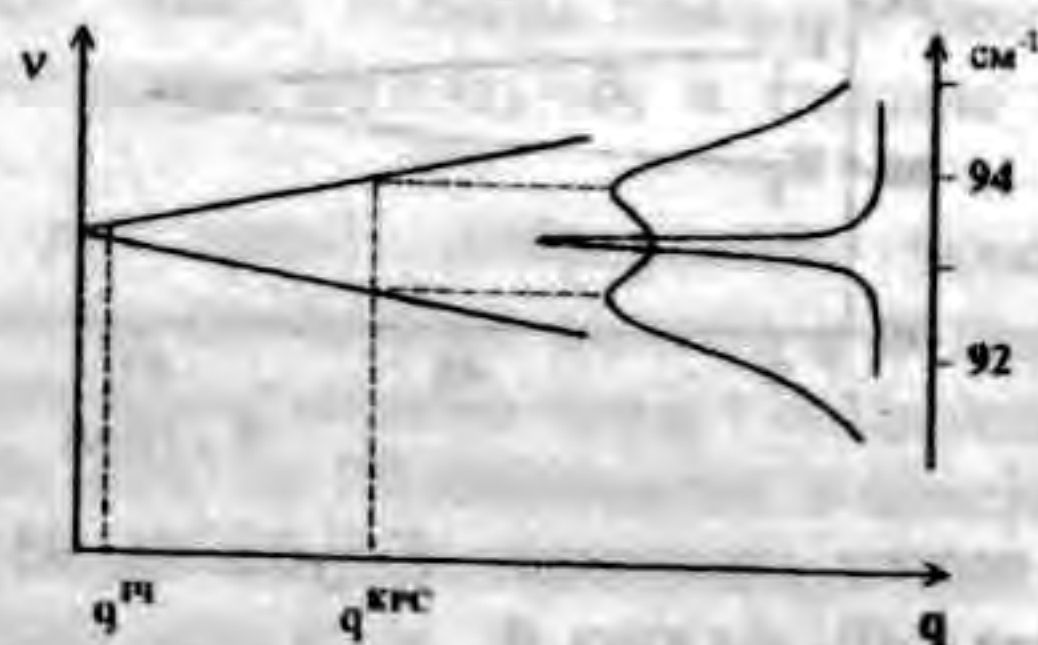


Рис. 6. Схема дисперсії E -моди 93 см^{-1} в кристалі CdP_2 поблизу $q = 0$ для $q \parallel c$ та оригінальні ІЧ та КРС спектри.

Таким чином, розщеплення E -дублетів 99 см^{-1} в ZnP_2 та 93 см^{-1} в CdP_2 для всіх напрямків q спричинене тільки просторовою дисперсією.

Останнє добре узгоджується з значною величиною ЦД КРС, яка практично дорівнює 1 при $\theta = \pi/4$.

За одержаними в роботі даними КРС зроблено оцінку внеску мод, на яких спостерігається ЦД, в обертаючу здатність в ІЧ області. Для випадку дифосфіду кадмію нижня межа величини повороту площини поляризації ІЧ випромінювання з хвильовим числом 93 см^{-1} , що розповсюджується вздовж оптичної осі кристала, складає 42 кутові мінути на товщині зразка 80 мкм. Виявлення такого обертання в принципі можливе, наприклад, за допомогою розробленого нами поляриметра [25], але вимагає постановки спеціального експерименту. В той же час, вимірювання циркулярного дихроїзму ІЧ поглинання для цієї моди практично неможливе, оскільки розщеплення дуже мале. Остання обставина зумовлює перевагу методу КРС перед ІЧ спектроскопією при дослідженні ефектів ПД в динаміці ґратки гіротропних кристалів. З огляду на неї селективна дія електромагнітного поля на кристалічну ґратку визначеного знаку енантіоморфізму через збудження гіронів певної частоти і знаку циркулярності не може бути досягнута безпосередньо опромінюванням на відповідній резонансній частоті в ІЧ області. Більш перспективним є застосування бігармонійної накачки в області прозорості з частотами ω^L та ω^S та поляризаціями НХ, що приймають участь в КРС на гіронах, яка може забезпечити ефективний обмін енергією та моментом імпульсу між електромагнітним полем та ґраткою, причому в усьому об'ємі зразка.

Всі ефекти, про які йшлося вище, можуть бути отримані з простої моделі ізольованої полярної моди в одновісному гіротропному кристалі, застосованій до тетрагональних кристалів. В цій моделі розглядається початково трикратно вироджена в центрі зони Брілюєна кубічного гіротропного кристалу полярна мода достатньо віддалена по частоті від інших мод, яка внаслідок довгохвильової кулонівської взаємодії, деформації вздовж однієї з осей 4-го порядку, що моделює реально існуючу в кристалі анізотропію короткодійних сил, та ПД першого порядку розщеплюється на три невироджених стани. Частоти та власні вектори коливальних мод, що виникають, можуть бути отримані в процесі діагоналізації матриці гамільтоніана розмірності 3×3

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{CT}} + \hat{V}_s + Gq\hat{I} \quad (4)$$

де $\hat{H}_0$ – матриця гамільтоніана ізольованої, тобто незв'язаної з іншими модами та з далекодіючим електростатичним полем полярної моди кубічного кристала, $\hat{V}_{\text{CT}}$ враховує вплив далекодіючого кулонівського поля, що призводить до LO-TO розщеплення, $\hat{V}_s$ – вплив анізотропії короткодійних сил (деформації), а останній доданок, в якому $G(q/|q|)$ – нормальна складова псевдотензора гірації в напрямі хвильового вектора q ,

а $\hat{I}$ - оператор моменту імпульсу, враховує просторову дисперсію першого порядку.

У випадку $\mathbf{q} \parallel \mathbf{OZ}$, що був досліджений Пайном та Дресельхаузом [11], маємо одне чисто повздовжнє коливання з власною частотою $\omega_0 = \omega_{LO}$ і власним вектором $\psi_0 = z$, та два чисто поперечних коливання з власними частотами $\omega_{1,2} = \omega_{TO} \pm Gq/h$ і власними векторами

$$\psi_{1,2} = (x \pm iy)/\sqrt{2}, \quad (5)$$

яким відповідають колові рухи в площині XY . Тензори КРС, що описують розсіяння на частотах ω_1 та ω_2 , можуть бути записані, як лінійні комбінації виду (5), де x та y замінено на тензори КРС $\hat{A}_1$ та $\hat{A}_2$, що відповідають лінійним рухам вздовж осей OX та OY [26-28]. Таким власним векторам відповідає ІЦД КРС з $\gamma = 1$ і лінійне по $\mathbf{q}$ розщеплення ліній.

Для інших напрямів $\mathbf{q}$ розщеплення також зростає зі збільшенням q , але нелінійно із-за присутності внеску $LO-TO$ розщеплення, а власним векторам відповідають лінійні комбінації загального вигляду $\psi_i = ax + by + cz$, в яких коефіцієнти a_i, b_i, c_i ($i=1,2,3$) також є комплексні числа. Це означає, що рух будь-якого атома (іона) ґратки гіротропного одновісного кристалу, який відповідає невиродженому коливальному стану з частотою ω_i в загальному випадку відбувається по еліптичній траєкторії. Проекції цієї траєкторії на координатні площини також являють собою еліпси. Тензори КРС, які правильно описують інтенсивність компонент E -дублетів, мають вигляд

$$\begin{aligned} \hat{A}_1 &= (\hat{A}_x + i\beta(q)\hat{A}_y)/(1+\beta^2)^{1/2} \\ \hat{A}_2 &= (i\beta(q)\hat{A}_x - \hat{A}_y)/(1+\beta^2)^{1/2} \end{aligned} \quad (6)$$

де параметр β характеризує еліптичність кожної з невироджених мод. Між величиною ІЦД КРС γ та еліптичністю β існує зв'язок $\gamma = 2\beta/(1+\beta^2)$. Еліптичність залежить від співвідношення внесків в спостережуване розщеплення E -дублетів просторової дисперсії з одного боку та анізотропії короткодіючих сил і довгохвильового кулонівського поля з іншого.

Висновки

Результати досліджень проявів ПД в КРС на полярних коливаннях, виконаних на ряді одновісних гіротропних кристалів, дозволяють твердити про їх широке поширення в спектрах КРС гіротропних кристалів і про необхідність врахування ПД при розгляді динаміки кристалічної ґратки поряд з анізотропією короткодіючих сил та далекодіючими

електростатичними силами. В той же час послідовна теорія КРС в гіротропних кристалах, яка б від самого початку враховувала просторову дисперсію відсутня.

При обговоренні правил відбору для непружного розсіяння світла на фонах в кристалах завжди наголошують на необхідності врахування законів збереження енергії та імпульсу, але не згадують про закон збереження моменту імпульсу, хоч для замкненої системи кристал електромагнітне поле він безперечно має виконуватись. Наприклад в широко відомому огляді Уілкінсона по КРС в кристалах [29] серед трьох факторів, які треба врахувати при формулюванні правил відбору названо закони збереження енергії, квазіімпульсу та величини похідних тензору поляризованості. З нашого аналізу випливає, що закон збереження моменту імпульсу враховується саме в спеціальному вигляді тензорів КРС (6), які адекватно описують ЦД КРС в гіротропних кристалах [26, 30].

Нарешті з наших результатів випливає можливість цілеспрямованого впливу світлом на гіротропні структури певного знаку енантіоморфізму, що може бути корисним при продукуванні хіральних чистих речовин.

Література

1. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. – М: Наука. – 1979.
2. Кизель В.А., Бурков В.И. Гиротропия кристаллов. – М.: Наука. – 1980.
3. Scott J.E., Porto S.P.S. Longitudinal and transverse optical lattice vibrations in quartz // Phys. Rev. – 1967. – V.161. – N3. – p. 903-910.
4. Shapiro S.M., Axe J.D. Raman scattering from polar phonons.// Phys. Rev. B: Solid State. – 1972. – V.6, N6. – p. 2420-2427.
5. Грищук В.П., Слободянюк А.В. Об учете фазовых соотношений в комбинационном рассеянии света в кристаллах // Укр. Физ. Журнал. – 1982. – Т.27. – с. 1816-1822.
6. Slobodyanyuk A.V., Schaack G. Measurement of Raman Scattered Intensities in Media with Natural or Field-Induced Optical Activity // Journ. of Raman spectroscopy. – 1987. – N18. – p. 561-568.
7. Zhang-Peng-Xiang, Tu An. Influence of Faraday Rotation on the Selection Rule of Phonon Raman Scattering in Magnetic Materials // Journ. Raman Spectrosc. – 1983. – V.14, N5. – p. 326-329.
8. Авакянц Л.П., Гвоздкова И.А., Наулик Л.Р., Слободянюк А.В. Особенности измерений поляризационной анизотропии КРС в гиротропных кристаллах // Журнал прикл. спектроскоп. – 1991. – Т.54, №6. – с. 991-995.

9. Агранович В.М., Гинзбург В.Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. - М: Наука, 1979.
10. Коренюк П.І. Представлення груп напрямків і симетрія кристалів та молекул. УФЖ. 2002. Т. 47, № 9, с.867-872.
11. Pine A.S., Dresselhaus G. Linear wave-vector shifts in the Raman spectra of -quartz and infrared optical activity.// Phys. Rev. - 1969. - vol.188. - N3. - p. 1489-1496.
12. Pine A.S., Dresselhaus G. Raman spectra and lattice dynamics of tellurium.// Phys. Rev. B: Solid State. - 1971.-v.4, N2.- p. 356-371.
13. Imaino W., Ramdas A.K., Rodriguez S. Linear wave-vector dependence of optical phonons frequencies in bismuth germanium oxide in the vicinity of the Brillouin zone center // Phys. Rev. B: Condensed Matters. - 1980. - V.22, N12. - p. 5679-5696.
14. Слободянюк А.В. Эффекты пространственной дисперсии в комбинационном рассеянии света в гиротропных кристаллах дифосфида цинка // ФТТ. - 1986. - Т.28, №11. - с. 3275-3285.
15. Слободянюк А.В. Циркулярная анизотропия комбинационного рассеяния света на полярных колебаниях в гиротропном кристалле дифосфида кадмия // Оптика и спектроскопия. - 1986. - 61, №3. - с. 1002-1008.
16. Грищук В.П., Слободянюк А.В., Янчук З.З. Особенности анизотропии комбинационного рассеяния света на полярных колебаниях в кристаллах CdP_2 // ФТТ. - 1982. - Т.24, N10. - с. 3122-3125.
17. Авакянц Л.П., Гвоздкова В.А., Наулик Л.Р., Слободянюк А.В. Поляризационная анизотропия комбинационного рассеяния света кристаллов TeO_2 и KH_2PO_4 // Оптика и спектроскопия. - 1991. - Т.70. - N6. - с. 1253-1258.
18. Авакянц Л.П., Гвоздкова И.А., Слободянюк А.В. О форме нормальных колебаний в гиротропных кристаллах тетрагональной сингонии // Кристаллография. - 1991. - Т.26, N5. - с. 1311-1312.
19. Гарасевич С.Г., Слободянюк О.В. Прояви просторової дисперсії в спектрах КРС тетрагональних гіротропних кристалів TeO_2 // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат науки. - 2001. - В.2. - с. 416-430.
20. Грищук В.П., Наулик Л.Р., Слободянюк А.В. Циркулярная анизотропия спектров КРС гиротропных кристаллов парателлурита и иодата лития // В сб.научн.труд.- Инст. физики АНУ "Оптическая спектроскопия". - Киев. - 1993. - с. 70-72
21. Garasevich S.G., Slobodyanyuk A.V., Yanchuk Z.Z. Anomalous angular dependence of E-modes splitting in Raman spectra of uniaxial gyrotropic crystals // Physics Letters A. - 1995. - V.197. - p. 238-242.

22. Garashevich S.G., Slobodyanyuk A.V., Angular behaviour of E-doublets in Raman spectra of tetragonal gyrotropic crystals // *Proceedings of SPIE*. - 2002. - V.4938. - p. 34-71.
23. A.V.Slobodyanyuk, S.G.Garashevich Two opposite kinds of E-doublet splitting anisotropy in Raman spectra of tetragonal gyrotropic crystals // *Proc. XVIII International Conf. on Raman Spectroscopy (ICORS)*. - Budapest (Hungary). - 2002
24. J.-P.Pinan-Lucarre, R.Ouillon, P.Ranson, Linea wave vector dependence of low-frequency Raman modes in two uniaxial gyrotropic quartz-type materials: α -GaPO₄ and α -AlPO₄ // *Chemical Physics Letters*. - 1999. - 302. - p. 164-170.
25. Garashevich S.G., Myagchenko Yu.A., Osipov S.I., Slobodyanyuk A.V. Classical polarimeter optimization // *Proc. SPIE*. - 1994. - V.2161. - p. 161-165.
26. Гришук В.П., Кострицкий С.М., Семенов А.Е., Слободянюк А.В. О форме тензора комбинационного рассеяния света в гиротропных кристаллах с учетом пространственной дисперсии // *ФТТ*. - 1983. - Т.27, N10. - с. 3001-3004.
27. Гришук В.П., Слободянюк А.В. Об определении компонент тензора комбинационного рассеяния в гиротропных кристаллах // *Оптика и спектроскопия*. - 1984. - Т.5, N4. - с. 681-686.
28. Гришук В.П., Слободянюк А.В. Об учете фазовых соотношений между нормальными волнами излучений, возбуждающими комбинационное рассеяние в гиротропных кристаллах // *Оптика и спектроскопия*. - 1983. - Т.4, N6. - с. 901-903.
29. Уилкинсон Г.Р. Спектры комбинационного рассеяния ионных, ковалентных и металлических кристаллов. В кн. "Применение спектров комбинационного рассеяния" под ред. А. Андерсена. - Москва: Мир. - 1977. - с. 408-578.
30. Slobodyanyuk A.V., Garashevich S.G., Peculiarities of Raman scattering in gyrotropic crystals // *Proceedings of SPIE*. - 2000. - V.4069. - p. 76-82.

Надійшла до редакції 23.10.2006

УДК 621.316.72

Анатолій А. Щерба¹,
Олександр Д. Подольцев, Євген П.
Удалов², Юрій А. Хомич³

Anatoliy A. Sherba¹,
Alexander D. Podol'tsev, Evgen P.
Udalov², Yuri A. Khomich³

Електроімпульсний спосіб деструкції відпрацьованих автомобільних шин з металокордом і кінцево-елементне моделювання виникаючих у них механічних напружень

Electropulse way destruction the fulfilled automobile trunks with metal cord and finite-element modelling of mechanical stress in them arising

Було проведено електромагнітне і механічне моделювання ефектів впливу імпульсного електричного струму на провідник металокорду відпрацьованої шини. Було з'ясовано оптимальні параметри процесу руйнування шини з високою ефективністю.

Electromagnetic and mechanical model for analysis of the effect of pulsed electric current on the wire in the volume of rubber type has been developed. The optimal parameters of the process characterized by high efficiency of the destruction have been determined.

Ключові слова: електроімпульсні технології, деструкція резинової шини, кінцево-елементний метод.

Key Words: electric pulsed technology, rubber tire destruction, finite-element method.

¹ E-mail: shlch@ied.org.ua

WWW: <http://www.kar.net/~res-ua/ied/ied.html>

² E-mail: udalov@univ.kiev.ua

WWW: <http://univ.kiev.ua/ua/>

³ E-mail: homich@univ.kiev.ua

WWW: <http://www.dffd.gov.ua/index.php?nn=5>

Аналіз режимів і підвищення ефективності електроімпульсної обробки зношених автомобільних шин з металокордом для їхньої утилізації.

Вступ

Електроімпульсний спосіб руйнування автомобільної шини з відділенням при цьому металокорду [1], на сучасному етапі розглядається, як альтернативний стосовно способу механічного здрібнювання шини з наступним відділенням металевої фракції на електромагнітних сепараторах [2]. Перспективність застосування електроімпульсного способу обумовлена такими показниками як екологічна чистота, висока якість одержуваної гуми, а також висока продуктивність переробки шин при малих енерговитратах. Автомобільна шина представляє композит, що складається з масивної гуми із включеннями з металокорду. У зв'язку із цим, поряд з важливим практичним застосуванням цієї технології, дана проблема

становить великий інтерес із погляду розвитку фундаментального напрямку - фізики процесів руйнування композиційних структур при впливі сильних імпульсних магнітних полів [3,4].

Для реалізації електротехнологічного імпульсного процесу обробки шини з високими питомими характеристиками, необхідне попереднє теоретичне оброблення основних особливостей процесу й пошук оптимальних режимів впливу на композиційну структуру.

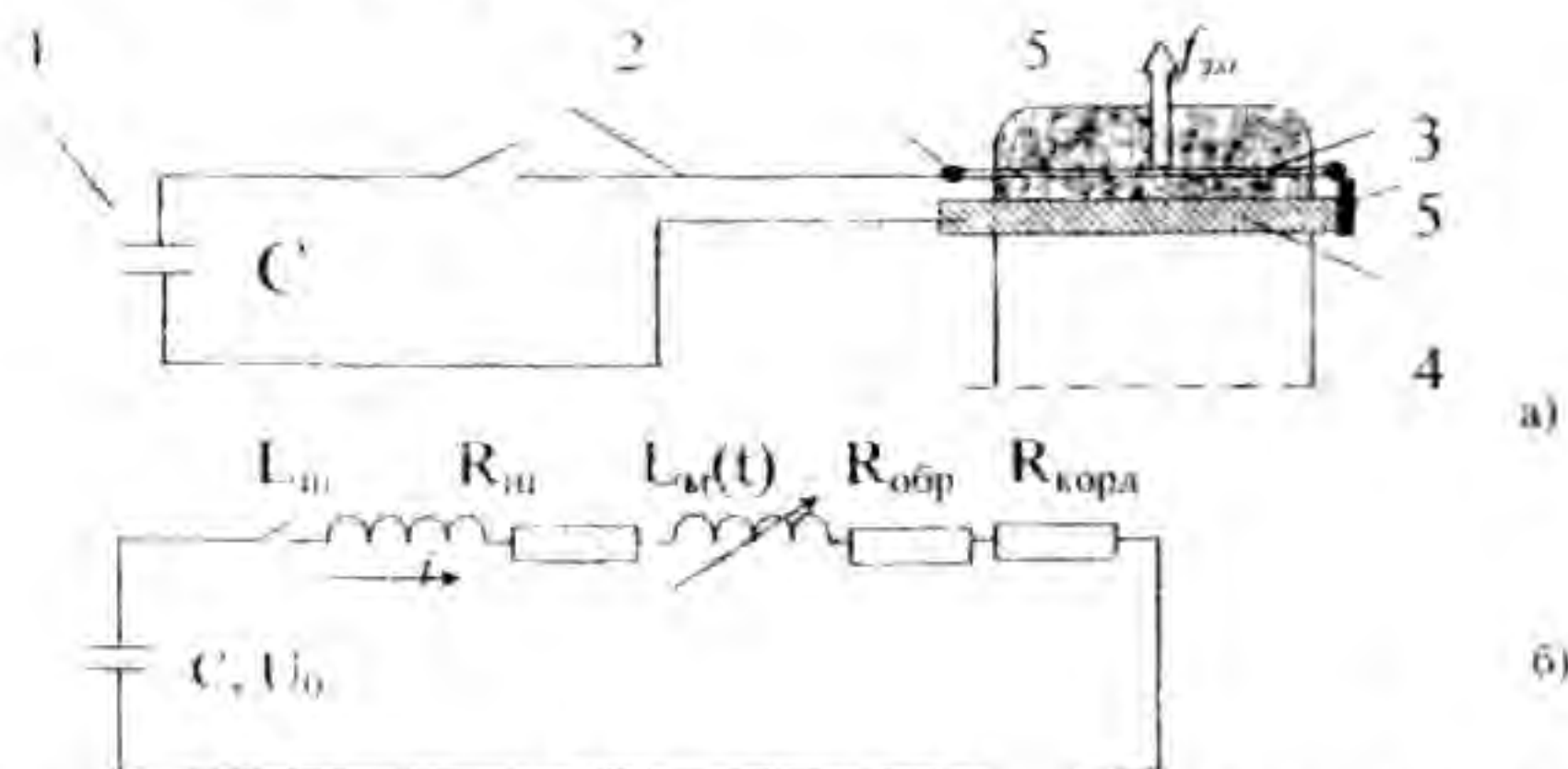


Рис. 1. Схематичне зображення електроімпульсної установки для силового впливу на металокорд (а) і еквівалентна електрична схема заміщення розрядного ланцюга (б). 1 – ємнісний накопичувач, 2 – токопровід, 3 – металокорд з виведеними після зачищення кінцями, 4 – зворотний провідник, 5 – роз'ємні контакти.

Аналіз електромагнітних і механічних перехідних процесів у шині під дією зовнішнього імпульсу електричного струму виконувалося в роботі [1]. При цьому розгляд проводився на простій моделі - розглядалася електрична схема з постійними параметрами, а шина була представлена у вигляді системи двох осереджених мас із пружним зв'язком. Метою цієї роботи є подальший розвиток досліджуваної моделі за рахунок обліку руху металокордового провідника шини й більш детальний аналіз напружено-деформованого стану матеріалу шини при імпульсному впливі електромагнітної сили.

Математична модель і аналіз результатів

Технологічна установка, що реалізує процес руйнування шини як композиційної структури під дією імпульсного магнітного поля, схематично показана на мал. 1 а. Вона містить ємнісний накопичувач 1, що розряджається в розрядний контур, утворений токопровідною частиною шини 2, з попередньо зачищеними провідниками

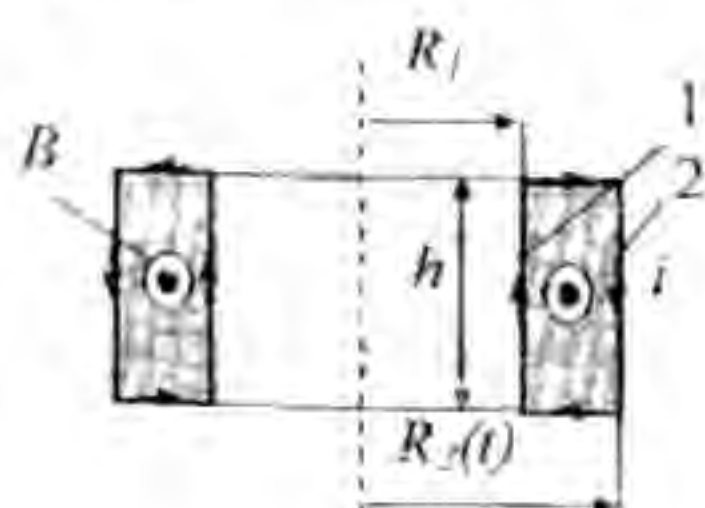


Рис. 2. Основні геометричні розміри контуру, утвореного металокордом 1 і зворотним провідником 2

металокорду 3 і зворотним провідником 4. За допомогою роз'ємних контактів 5 забезпечується підключення провідників металокорду в розрядний ланцюг. Еквівалентна електрична схема такої установки наведена на мал. 1 б. Її особливістю є індуктивність системи металокорд - зворотний провідник $L_M(t)$, що змінюється в часі, яка обумовлена переміщенням кордового провідника під дією електромагнітної сили.

Для комп'ютерного моделювання імпульсних електромагнітних і механічних перехідних процесів у розглянутій установці в роботі використовувалася математична модель, що включає на першому етапі опис електромеханічного перехідного процесу в розрядному контурі й визначення залежності від часу імпульсної електромагнітної сили, прикладеної до металокорду. На другому етапі аналізувався напружено-деформований стан шини під дією цієї сили. Зокрема, найбільший інтерес представляє напруження на границі з металокордом, від величини якого залежить інтенсивність руйнування шини.

Електромагнітний перехідний процес описується наступною системою диференціальних рівнянь:

$$L(t) \frac{di}{dt} + i \frac{dL}{dt} + iR + U_C = 0; \frac{dU_C}{dt} = \frac{i}{C} \quad (1; 2)$$

с початковими умовами: $U_C(0) = U_{C0}$; $i(0) = 0$. Тут i - струм у розрядному контурі,

$L(t) = L_{ш} + L_M(t)$ - повна індуктивність контуру, що включає індуктивність шини й індуктивність, що змінюється в часі, системи металокорд - зворотний провідник, R - повний опір розрядного контуру, C - ємності накопичувача.

Одержимо далі вираз для розрахунку індуктивності системи металокорд - зворотний провідник $L_M(t)$, використовуючи просту модель у вигляді тороїда, показану на мал. 2.

Магнітна енергія, запасена в обсязі цього тороїда, визначається як

$$W_m = \int_{R_1}^{R_2(t)} \frac{B^2}{2\mu_0} \cdot h \cdot 2\pi r dr = \frac{\mu_0}{4\pi} h i^2 \ln \frac{R_2(t)}{R_1} \quad (3)$$

Тут величина магнітної індукції обчислювалася як $B = \mu_0 i / (2\pi r)$. Виходячи з рівності $W_m = 0,5 L_M(t) i^2$, одержимо використовуючи (3) вираз для розрахунку $L_M(t)$ у вигляді

$$L_M(t) = \frac{\mu_0}{2\pi} h \ln \frac{R_2(t)}{R_1} \quad (4)$$

Інтегрування системи (1), (2) виконувалося за допомогою пакета програм для розрахунку електронних схем **PSpice**. Електрична схема заміщення розрядного контуру, розроблена засобами цього пакета, наведена на мал. 3. Відзначимо, що поряд із традиційними елементами, у цій схемі використовується кероване джерело напруги - блок 1, що моделює спадання напруги на змінній індуктивності $L_M(t)$. Тимчасова залежність радіуса $R_2(t)$, що визначає положення металокорду, апроксимувалася в даній роботі у вигляді $R_2(t) = R_0 + kt$, де R_0 - положення металокорду в початковий момент часу, а емпіричний коефіцієнт k підбирався в

ході ітераційного процесу так, щоб $R_2(t)$ описувала приблизно рух металокорду, одержуване із чисельного рішення механічної задачі, розглянутої далі.

Характерні результати розрахунку електромагнітного перехідного процесу в розрядному контурі показані на мал. 4.

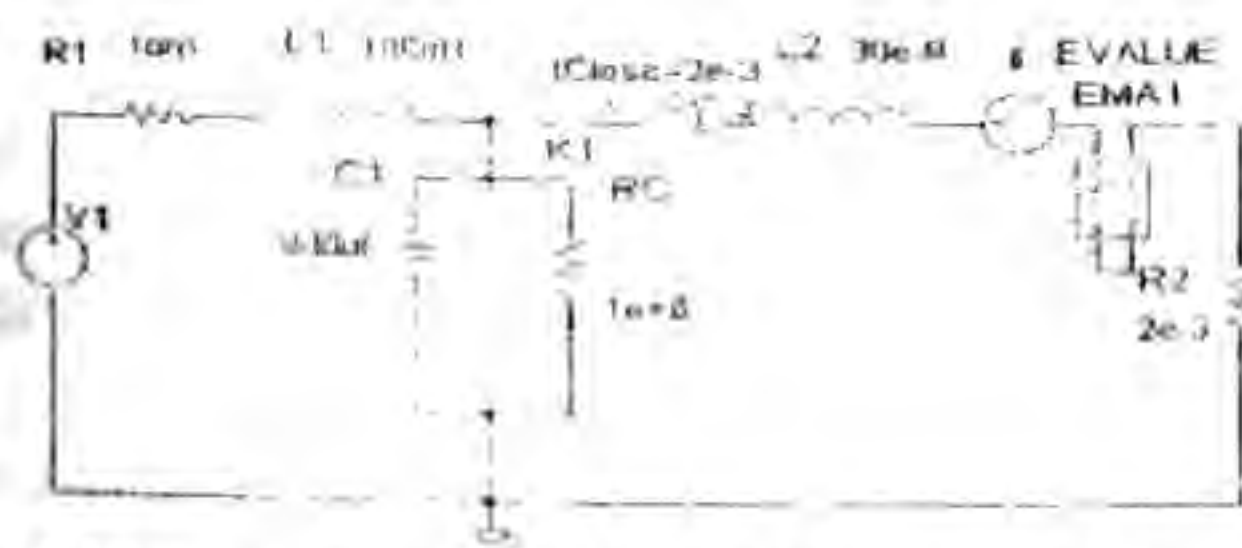
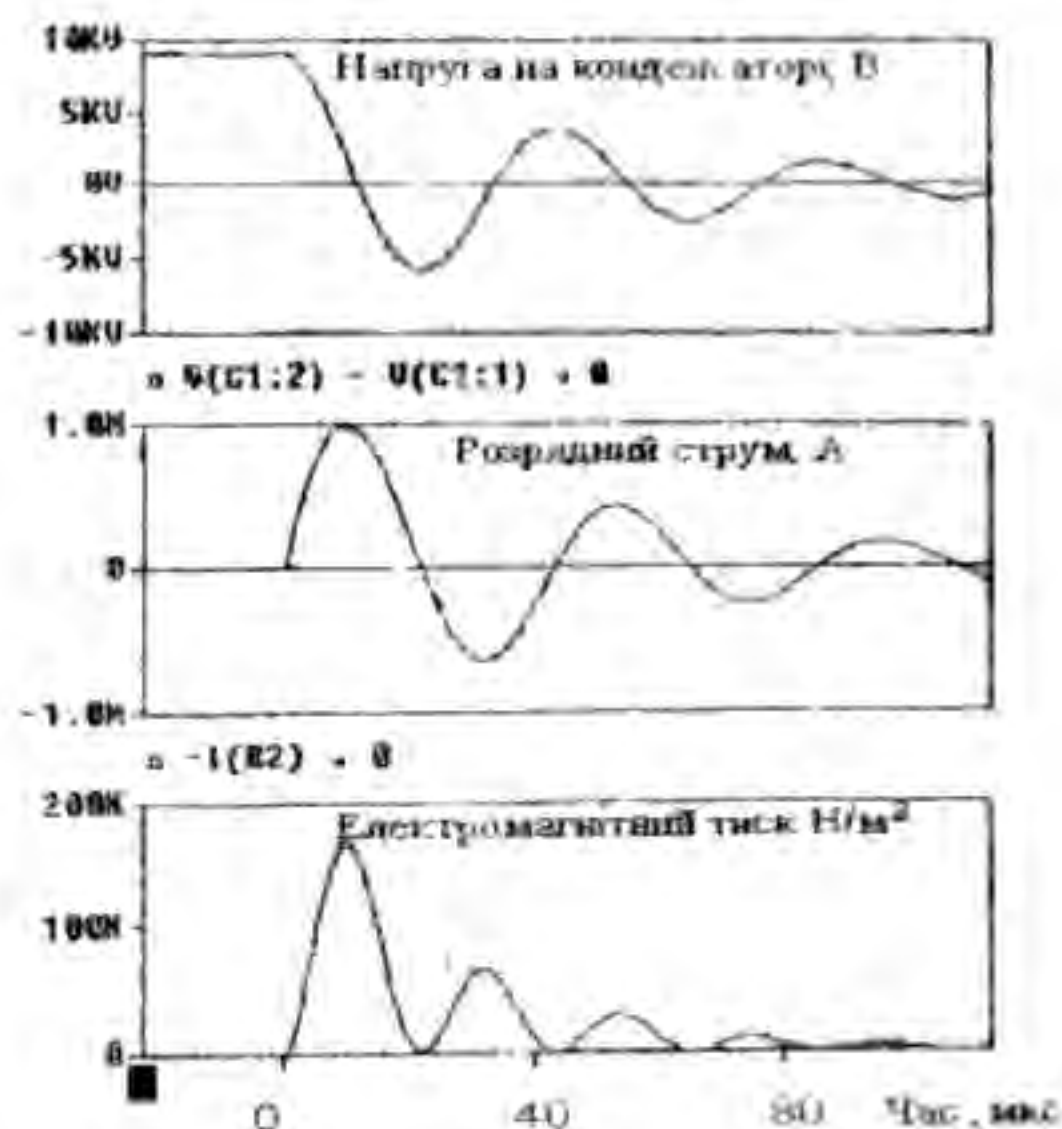


Рис. 3. Електрична схема зарядного і розрядного контурів, яка була змодельована у пакеті *PSpice*. EMA1 – блок моделючий змінну індуктивність.

Рис. 4. Характеристики електромагнітного перехідного процесу у розрядному контурі.



Тут використовувалися наступні вихідні дані: $C = 900 \text{ мкФ}$, $U_{co} = 10 \text{ кВ}$, повний опір ланцюга $R = 2 \text{ мОм}$, $L_{ш} = 30 \text{ нГн}$, $L_M(0) = 20 \text{ нГн}$. На мал. 4 також показана величина електромагнітного тиску на металокорд, обумовлена як

$$P_{\text{эм}}(t) = \frac{B^2}{2\mu_0} \bigg|_{r=R_2(t)} = \frac{\mu_0 I^2}{8\pi^2 R_2^2(t)}, \quad (5)$$

де відповідно до закону повного струму використовувалася рівність $i = 2\pi R_2 B / \mu_0$.

З результатів мал. 4 видно, що загасання струму відбувається за час порядку 100 мкс . Отримана залежність $P_{\text{эм}}(t)$ використовується далі при рішенні задачі деформування шини.

Напружено – деформований стан шини розглядався в циліндричній системі координат (r, θ, z) з урахуванням осової симетрії, коли всі величини залежать тільки від радіальної r й осової координати z . При цьому використовувалися наступні диференціальні рівняння й визначальні співвідношення [5,6]:

рівняння руху:

$$\rho \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} + f_r \quad (6, 7)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\tau_{rz}}{r} + f_z$$

співвідношення напруження - деформація:

$$\begin{bmatrix} \sigma_r \\ \sigma_\theta \\ \sigma_z \\ \tau_{rz} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \frac{1-\nu}{\nu} & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{1-\nu}{\nu} & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \frac{1-\nu}{\nu} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2\nu} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_r \\ \varepsilon_\theta \\ \varepsilon_z \\ \gamma_{rz} \end{bmatrix} \quad (8)$$

співвідношення деформація-зсув:

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad \varepsilon_\theta = \frac{u_r}{r}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_{rz} = \varepsilon_{zr} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right)$$

Тут позначено $\bar{u} = (u_r, 0, u_z)$ - вектор зсуву,

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_r & 0 & \tau_{rz} \\ 0 & \sigma_\theta & 0 \\ \tau_{rz} & 0 & \sigma_z \end{bmatrix} - \text{тензор напруги}, \quad (10)$$

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_r & 0 & \varepsilon_{rz} \\ 0 & \varepsilon_\theta & 0 \\ \varepsilon_{zr} & 0 & \varepsilon_z \end{bmatrix} - \text{тензор деформації}, \quad (11)$$

а також $\lambda = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$, де E - модуль Юнга, ν - коефіцієнт Пуассона.

Величина об'ємної електромагнітної сили $\bar{f}_{\text{ем}} = (f_r, 0, f_z)$, прикладеної до області з кордовим дротом, яка стоїть в правій частині рівнянь (6), (7), обчислювалася як $f_z = 0$, $f_r = p_{\text{ем}} / \Delta$, де $\Delta = 1 \text{ мм}$ - товщина шару з металокорду.

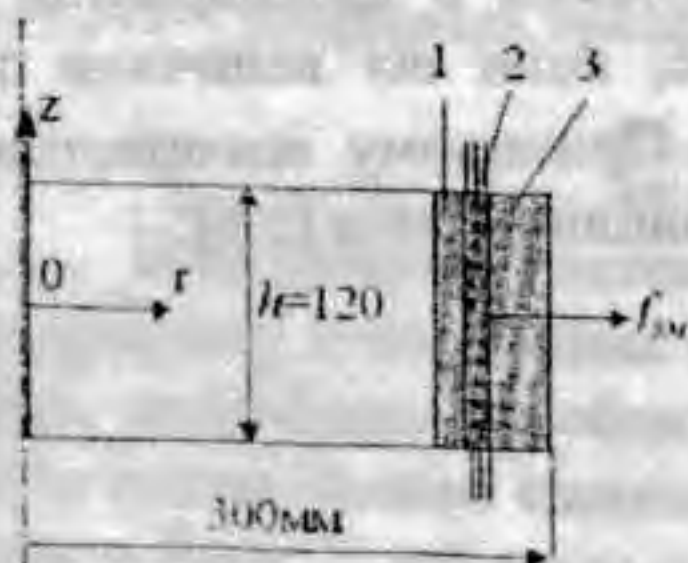


Рис.5. Базові розміри віссиметричної розрахункової моделі шини:

- 1 – внутрішня область шини товщиною 2мм, 2 – область з металокордом товщиною 1мм,
- 3 – зовнішня область шини (протектор) товщиною 6мм.

Основні геометричні розміри розрахункової моделі, що складається із трьох областей, показані на рис. 5. Як початкові умови покладалось нульове значення зсуву векторів, а граничних – всі границі області є вільними границями (за винятком випадку із закріпленою внутрішньою границею). Сформоване початково-крайова задача вирішувалась методом кінцевих елементів за допомогою пакета FEMLAB 2.3.

Розрахунок напружень у перетині шини виконувався для двох випадків – коли: 1) внутрішня поверхня шини є вільною й коли 2) ця поверхня жорстко закріплена, наприклад, за допомогою бічних штирів, які вводяться в обсяг гуми при установці електричних контактів.

Результати розрахунків поля, що змінюється σ_r в часі, напружень у перетині шини для випадку вільної внутрішньої границі (випадок 1) наведені на мал. 6. Із цього малюнка видно, що під впливом імпульсної електромагнітної сили в обсязі шини виникають зони розтягу (внутрішня область із величиною напруження ($\sigma_r > 0$)) і зони стиску (зовнішня область із величиною напруження ($\sigma_r < 0$)). Причому, максимальне напруження, що розтягує, досягається на границі металокорду із внутрішньою областю в центральній частині шини. Це найбільш чітко видно з мал. 6 г, де показано розподіл напружень σ_r по товщині шини в момент часу $t = 10 \text{ мкс}$, при якому електромагнітна сила досягає свого амплітудного значення. На мал. 6 а – в, також показана деформація шини в різні моменти часу – тут контурна лінія відзначає початкову конфігурацію шини, а зона, зображена в кольорі – поточну для даного моменту часу. Видно, що при вільній внутрішній границі перетин шини переміщується практично як тверде тіло (форма перетину слабо змінюється в часі).

Результати розрахунків для випадку 2, коли внутрішня поверхня шини жорстко закріплена (у розрахунках як гранична умова покладалось, що величина зсуву на внутрішній границі дорівнює нулю) наведені на мал. 7, для тих же моментів часу, що й випадку 1. Видно, що при закріпленні внутрішньої поверхні істотно міняється характер деформації шини – перетин не переміщається як тверде тіло у випадку 1, а як би обжимається з бічних сторін, стоншуючись у зоні закріплення. При цьому відстань, на яку переміщується кордовий провідник, значно зменшується, що приводить до збільшення діючої на нього електромагнітної сили. Також, характер розподілу напружень в об'ємі шини істотно змінюється (див. мал. 7 г) – максимум досягається в місці закріплення внутрішньої області шини. Важливо відзначити, що напруження на границі металокорду із внутрішньою областю шини виявляються в другому випадку значно більші – приблизно в 4 рази по порівнянням з випадком 1. Ця обставина дозволяє, порівнюючи два режими обробки зробити висновок, що при імпульсному впливі в режимі із жорстко закріпленою внутрішньою поверхнею шини при однаковому силовому навантаженні (або параметрах розрядного ланцюга) ступінь руйнування шини буде вище (за рахунок чотириразового збільшення напружень в критичній зоні руйнування).

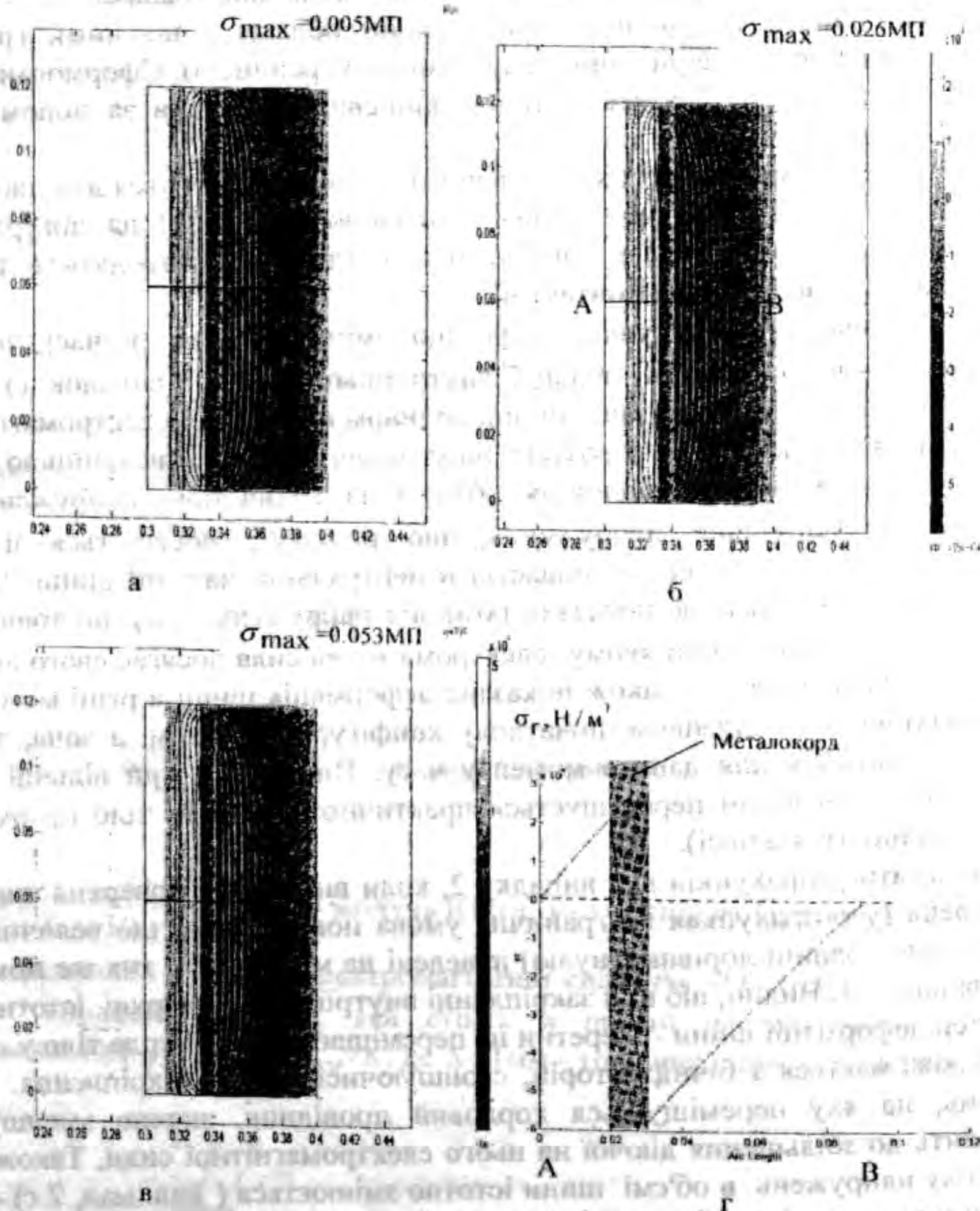


Рис. 6. Розподіл напружень σ_r в перетині шини в різні моменти часу: а) $t=5\mu\text{с}$; б) $t=10\mu\text{с}$; в) $t=20\mu\text{с}$, а також, розподіл цього напруження по товщині шини (уздовж прямої А-В) у момент часу $t=10\mu\text{с}$ (г). Розглядається випадок І, коли внутрішня поверхня шини не закріплена.

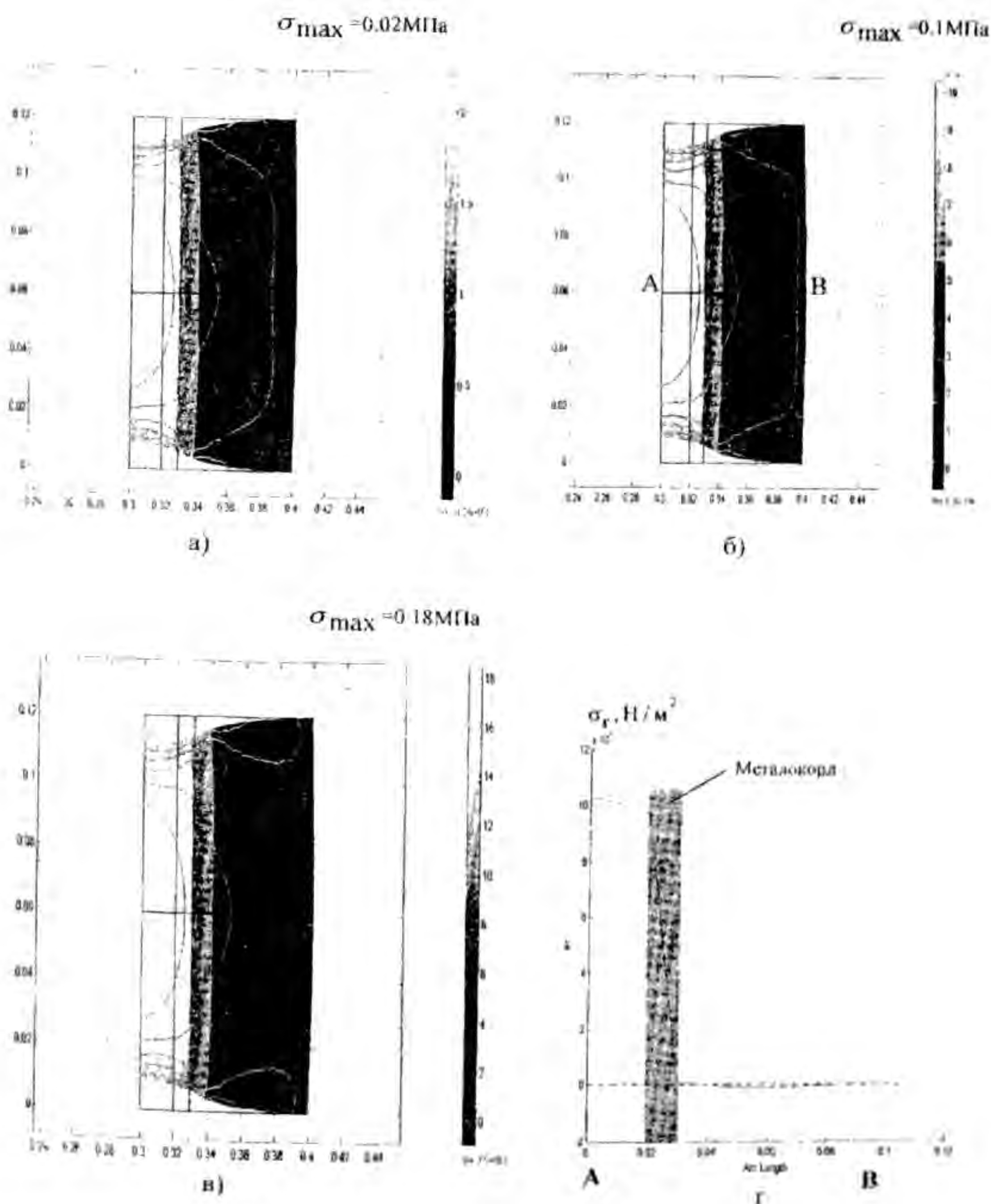


Рис. 7. Розподіл напружень σ_r в перетині шини в різні моменти часу: а) $t = 5 \mu\text{s}$; б) $t = 10 \mu\text{s}$; в) $t = 20 \mu\text{s}$, а також, розподіл цього напруження по товщині шини (уздовж прямої А-В) у момент часу $t = 10 \mu\text{s}$ (г). Розглядається випадок 2, коли внутрішня поверхня шини жорстко закріплена.

Надійшла до редакції 06.04.2006

Висновок

1. У роботі розроблена методика розрахунку перехідних процесів в установці електроімпульсного руйнування автомобільної шини з металокордом, що включає розрахунок електромагнітних процесів у розрядному ланцюзі й динамічних напружень у матеріалі шини з металокордом. При цьому використовуються підходи, що реалізують розрахунок електромагнітного процесу в пакеті *PSpice*, і розрахунок напружено-деформованого стану на основі методу кінцевих елементів у пакеті FEMLAB.
2. Розглянуто два випадки деформації шини, коли її внутрішня поверхня залишається в процесі імпульсного впливу вільною і коли вона жорстко закріплена.
3. Результатів моделювання впливає, що при реалізації другого випадку із закріпленою внутрішньою поверхнею шини, величина напруження в області металокорду, що визначає ступінь руйнування шини, приблизно в 4 рази перевищує аналогічне напруження для випадку із внутрішньою поверхнею, що вільно переміщується.

Література

- [1] А.Р.Бедюх, В.Н.Склеповой, А.А.Щерба, А.Д.Подольцев, С.А.Козак, А.Д.Блащенко. Электроимпульсный способ и установка деструкции металлического корда и резины автомобильных шин, Техн. электродинамика, Тематический выпуск, Силовая электроника и энергоэффективности, 2002, Ч. 2. с.120-124.
- [2] <http://www.koprokon.ru/sh.html>.
- [3] Подольцев А.Д., Кучерявая И.Н. Элементы теории и численного расчета электромагнитных процессов в проводящих средах. Киев, Институт электродинамики, 1999, 360 с.
- [4] Г.Кнопфель. Сверхсильные импульсные магнитные поля. М. Мир, 1972, 392 с.
- [5] Ю.А.Амензаде. Теория упругости., М. Высшая школа, 1976, 160 с.
- [6] Ю.Н.Работнов. Механика деформируемого твердого тела., М.Наука, 1988, 712.

УДК 535.39

Макара В.А., проф., д. ф.-м. н.
Дуб С.М., с.т.с., к.ф.-м.н.,
Весна Г.В., н.с., к.ф.-м.н.,
Горячова В.Ю., аспірант

Поведінка механічних характеристик нанооб'ємів іонних кристалів

Проведені дослідження специфіки пружно-пластичного переходу при деформуванні нанообластей кристалів KCl та NaCl методом наноіндентування. Вивчено вплив густини дислокацій на основні механічні характеристики. Експериментально встановлено зміну параметрів критичного навантаження, нанотвердості та модуля пружності.

Ключові слова: наноіндентування, пружно-пластичний перехід, механічні характеристики

Makara V.A., Prof., Dr. Sc.,
Dub S.M., PhD,
Vesna G.V., PhD,
Goryacheva V.U., Post graduate student

The mechanical behavior of nanovolumes of ionic crystals

The specific character of transition from elasticity to plasticity during deformation in crystals of KCl and NaCl were investigated using the method of nanoindentation. The influence of dislocations' density on fundamental mechanical properties was explored. The changing of values of parameters critical load, hardness and elastic modulus were found for these materials.

Key words: nanoindentation, the transition from elasticity to plasticity, mechanical properties

E-mail: vesna@univ.kiev.ua;

1. Вступ

Дослідженню фізичних процесів, що визначають перехід від пружної деформації до пластичної течії кристалів присвячені за минулі десятиріччя багато робіт. Проте всі дослідження цих процесів проводились в основному в макромасштабах деформації, тобто в мікронних, міліметрових та більших областях. При таких умовах є можливим застосування основних концепцій механіки, ізотропності, гомогенності та ін [1]. Але якщо розглядати масштаби малих розмірів, то вірність цих положень може бути піддана сумніву і потребувати нового концептуального розуміння. Це особливо необхідно враховувати при дослідженні таких матеріалів, як тонкі плівки, а також для поверхонь і малих об'ємів, де ефекти стиснення та градієнт напружень може значно змінювати процес деформування. Наноіндентування монокристалів – це тема, яка знедавна є центром інтенсивного дослідження. По-перше, це викликано тим, що цей метод є

принципово новим методом дослідження на твердість – по глибині відбитку і в якому твердість інтерпретується як середній контактний тиск (твердість по Мейеру), по-друге, цей метод дозволяє вивчати фізико-механічні властивості і механізми деформації в малому об'ємі локально-деформованої області, це одиниці-десятки нм³.

Численні експерименти з використанням цієї методики [2-4] показали, що нанооб'єми різних матеріалів деформуються пружно до величин контактних напружень порядку теоретичної межі міцності на зсув $\tau \approx \frac{G}{15}$, де G – модуль зсуву. Викликано це тим, що в добре відпалених монокристалах середня відстань між дислокаціями набагато менше розміру контакту при наноіндентуванні, тому напруження прикладається до вільної від дефектів області. В силу відсутності в такій області джерел дислокацій в цьому випадку дислокаціям важко утворюватись і в результаті в контакті відбувається дуже різкий перехід від пружної до пружно-пластичної деформації за рахунок їх гомогенного зародження. Цей момент проявляється на кривій індентування у вигляді відхилення від рівномірного переміщення індентора, а саме в різкому збільшенні глибини відбитку і утворенні сходинок на кривій навантаження або розвантаження ("pop-in"). Так як, багато сучасних елементів нанотехнологічних пристроїв працюють в умовах наноконтактної взаємодії (наприклад, зонди скануючих атомно-силових мікроскопів), можна очікувати можливість значного підвищення несучої здатності матеріалу в цих умовах.

Проте досі лишається мало дослідженим вплив на пружно-пластичний перехід багатьох чинників таких як початкова густина дислокацій, концентрація радіаційних дефектів, тощо. Тому метою даної роботи було дослідження специфіки пружно-пластичного переходу в умовах локального деформування нанообластей наднизькими навантаженнями іонних монокристалів NaCl і KCl, що мали різну вихідну густину дислокацій та різну дозу опромінення рентгенівським випромінюванням.

2.Методика експерименту.

В роботі досліджували монокристали KCl і NaCl вирощені методом Кіронулоса. Густина ростових дислокацій в яких не перевищувала 10^3 см^{-2} . Ці кристали використовували як модельні, так як на них відпрацьована методика введення та контролю дислокацій.

Введення дислокацій у кристали здійснювали методом чотирьохточкового згину. Густину дислокацій контролювали вибіркоким травленням. Насичений розчин PbCl_2 в етиловому спирті використовували як повільний травник для обох типів кристалів, а як швидкий травник для KCl використовували розчин PbCl_2 в метиловому спирті, а для NaCl-

крижану оцтову кислоту. Після травлення зразки промивали в ізоаміловому спирті та сушили в струмені сухого повітря.

Дослідження механічних характеристик проводили на свіжих відколах попередньо відпалених зразків при малих навантаженнях на індентор Берковича (P до $0,2$ мН). за допомогою високочутливого приладу MTS "Nano Indenter II". Радіус притуплення індентора, який використовували для нанесення відбитків нанотвердості дорівнював $R=500$ нм, що було встановлено декількома незалежними способами.

Наноіндентування зразків проводили при кімнатній температурі з постійною швидкістю навантаження, яка дорівнювало для зразків KCl та NaCl - 10 мкН/с потім зразки розвантажували. Значення швидкості підбирали таким чином, щоб час навантаження складав близько 20 секунд. Після чого зразки розвантажували. Щоб уникнути впливу ефектів деформаційного старіння відбитки наносили на свіжі сколи, які готували безпосередньо перед навантаженням зразків.

Введення дислокацій у кристали здійснювали методом чотирьохопорного згину. Густина дислокацій ρ в підготованих зразках складала від 10^5 до 10^7 см $^{-2}$ в для NaCl та KCl.

3.Отримані результати та їх обговорення.

На рис.1 наведені отримані криві залежностей навантаження-переміщення для NaCl при різній густині дислокацій в зразках та величині навантаження $P = 0,2$ мН. Аналізуючи отримані діаграми можна бачити спонтанне відхилення переміщення індентора при навантаженні $P=17\pm 2$ мкН для зразків NaCl з $\rho=10^5$ см $^{-2}$, $P=28\pm 5$ мкН ($\rho=10^6$ см $^{-2}$), та $P=34\pm 2$ мкН ($\rho=10^7$ см $^{-2}$). Слід зазначити, що скачки на межі пружності мають не чіткий характер, що можливо свідчить про особливу поведінку іонних кристалів при індентуванні, а також через те, що для даних кривих деформації характерні множинні скачки деформування, які пов'язані з дією різних механізмів [6]. Також, не виключено, що скачки на межі пружності були здрібнені вібраційним фоном установки. Проте видно, що параметр критичного навантаження, при якому відбувається гомогенне зародження дислокацій, для зразків з різною густиною дислокацій відрізняється в $0,5$ рази. Похибка для даних результатів була отримана по результатам п'яти вимірювань.

Пояснити появу pop-in можна із загальної теорії гомогенного зародження дислокацій під індентором [2-6]. При глибинах відбитка менших 20 нм середня відстань між дислокаціями стає набагато меншою за розмір контакту при наноіндентуванні, тому для спеціально підготовленої поверхні (свіжий скол, травлення, електрополірування) зародження дислокацій в наноконтакті дуже затруднене. В результаті, пружні напруження наближуються до теоретичної міцності матеріалів на

зсув і в контактi виникає дуже різкий перехід від пружної до пружно-пластичної деформації, внаслідок гомогенного зародження дислокацій.

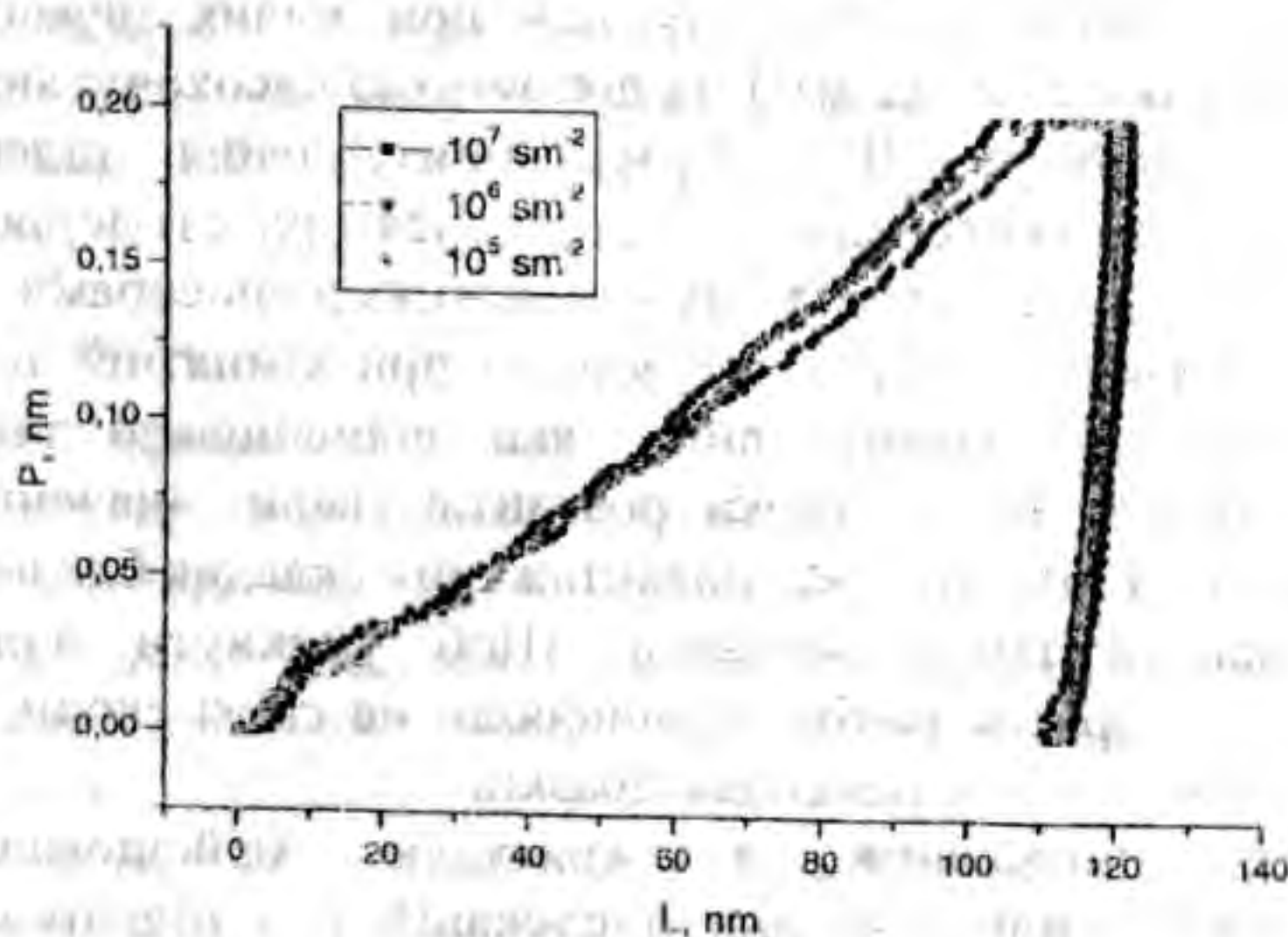


Рис.1 Порівняльна діаграма занурення індентора Берковича в зразки NaCl з різною густиною дислокацій.

Збільшення критичного навантаження для даних зразків можливо пов'язано із взаємодією дислокацій зі стопорами. Експериментальні дані з динаміки дислокацій в іонних кристалах, при різних умовах деформування, вказують на існування в цих кристалах як мінімум двох типів стопорів, а саме диполів, які складаються із іону домішки та катіонної вакансії і некомпенсованих полів внутрішніх напружень. Причому ефект, що спостерігається обумовлено головним чином далеко діючими полями внутрішніх напружень, які були створені дислокаційними системами [1]. Останні проявляють колективні властивості, що виражаються в формуванні жорстко зв'язаних дислокаційних ансамблів. Додаткова попередня деформація зразків викликає більш високий рівень напружень в матеріалі, які накладаються на напруження від дислокаційних джерел при індентуванні, що призводить, як і у випадку мікроіндентування до деформаційного зміцнення досліджуваного матеріалу.

На рис.2 наведені аналогічні криві залежності навантаження-переміщення для зразків KCl. Поверхні відколів даних зразків також навантажували до $P = 0,2$ мН, витримували при максимальному навантаженні протягом 20 с і розвантажували.

Рис.2 показує отримані криві залежності навантаження-переміщення для KCl. Для цього було виконане навантаження поверхні відколів даних зразків до $P = 0.20$ мН, витримування при максимальному навантаженні протягом 20 с і розвантаження. Розбіг для даних результатів отримувався також по п'яти вимірюванням.

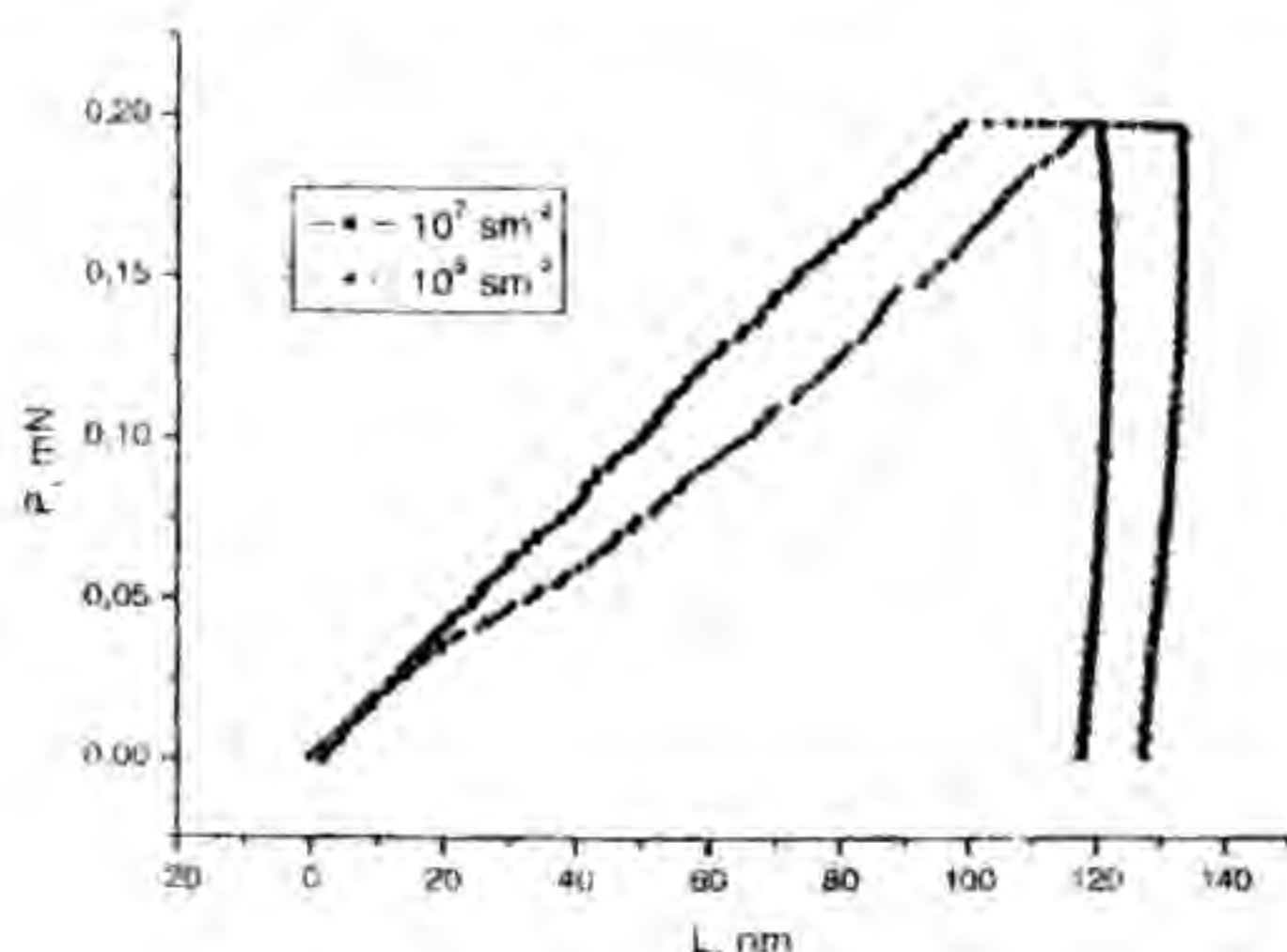


Рис.2 Порівняльна діаграма занурення індентора Берковича в зразки KCl з різною густиною дислокацій.

На відміну від NaCl, в зразках KCl pop-in ефект не спостерігається (відсутня сходинка на кривій навантаження індентора). Але не виключена можливість, що стрибки на межі пружності мали місце і в цьому випадку при малих h , але були замасковані і зменшені вібраційним фоном приладу до рівня шуму [2].

Однак, слід відмітити, що криві навантаження демонструють особливу поведінку, показують високу чутливість матеріалу до швидкості деформації. Так для зразка KCl з $\rho = 10^7 \text{ cm}^{-2}$ глибина відбитка при зниженні навантаження стає меншою і дорівнює $h \approx 117$ нм, що свідчить про збільшення твердості зразка ($H = 0.36 \pm 0.01$ ГПа), тоді як для KCl з $\rho = 10^5 \text{ cm}^{-2}$, глибина відбитка складає $h \approx 127$ нм, і твердість в цьому випадку знижується до величини $H = 0.30 \pm 0.01$ ГПа (похибка для даних результатів отримана для п'яти вимірювань). Отже, швидкість деформації досліджуваних зразків KCl різна і змінюється швидше для кристалів з більшою густиною дислокацій.

Метод наноіндентування дозволяє також знайти модуль пружності E зразків по кривій розвантаження індентора [5] та нанотвердість матеріалу H . Отримані дані наведені в таблиці.

Як видно з таблиці, збільшення густини дислокацій після попередньої пластичної деформації зразків зсуває проявлення pop-in

ефекту в сторону менших відбитків і викликає додаткове збільшення нанотвердості, хоча і не суттєве. Модуль пружності зростає приблизно на 5-23 %.

Таблиця .Узагальнені значення критичних параметрів NaCl

Матеріал	H, ГПа	P кр, мкН	E, ГПа
NaCl ($\rho=10^3 \text{ см}^{-2}$)	$0,32 \pm 0,04$	17 ± 2	$48,0 \pm 6,6$
NaCl ($\rho=10^5 \text{ см}^{-2}$)	$0,36 \pm 0,01$	17 ± 2	$48,4 \pm 6,6$
NaCl ($\rho=10^6 \text{ см}^{-2}$)	$0,37 \pm 0,03$	28 ± 5	$50,6 \pm 9,9$
NaCl ($\rho=10^7 \text{ см}^{-2}$)	$0,37 \pm 0,01$	34 ± 2	$60,0 \pm 8,4$
KCl ($\rho=10^5 \text{ см}^{-2}$)	$0,30 \pm 0,02$	-	$49,2 \pm 4,4$
KCl ($\rho=10^7 \text{ см}^{-2}$)	$0,36 \pm 0,01$	-	$52,1 \pm 5,4$

Також в даному експерименті були побудовані діаграми залежності середнього контактного тиску у відбитку (СКТ) для KCl від переміщення індентора, що дозволяє отримати залежність твердості від глибини контакту по результатам одного вимірювання використовуючи криву навантаження індентора (рис.3). Для здійснення цих розрахунків використовували методику запропоновану в роботі [5].

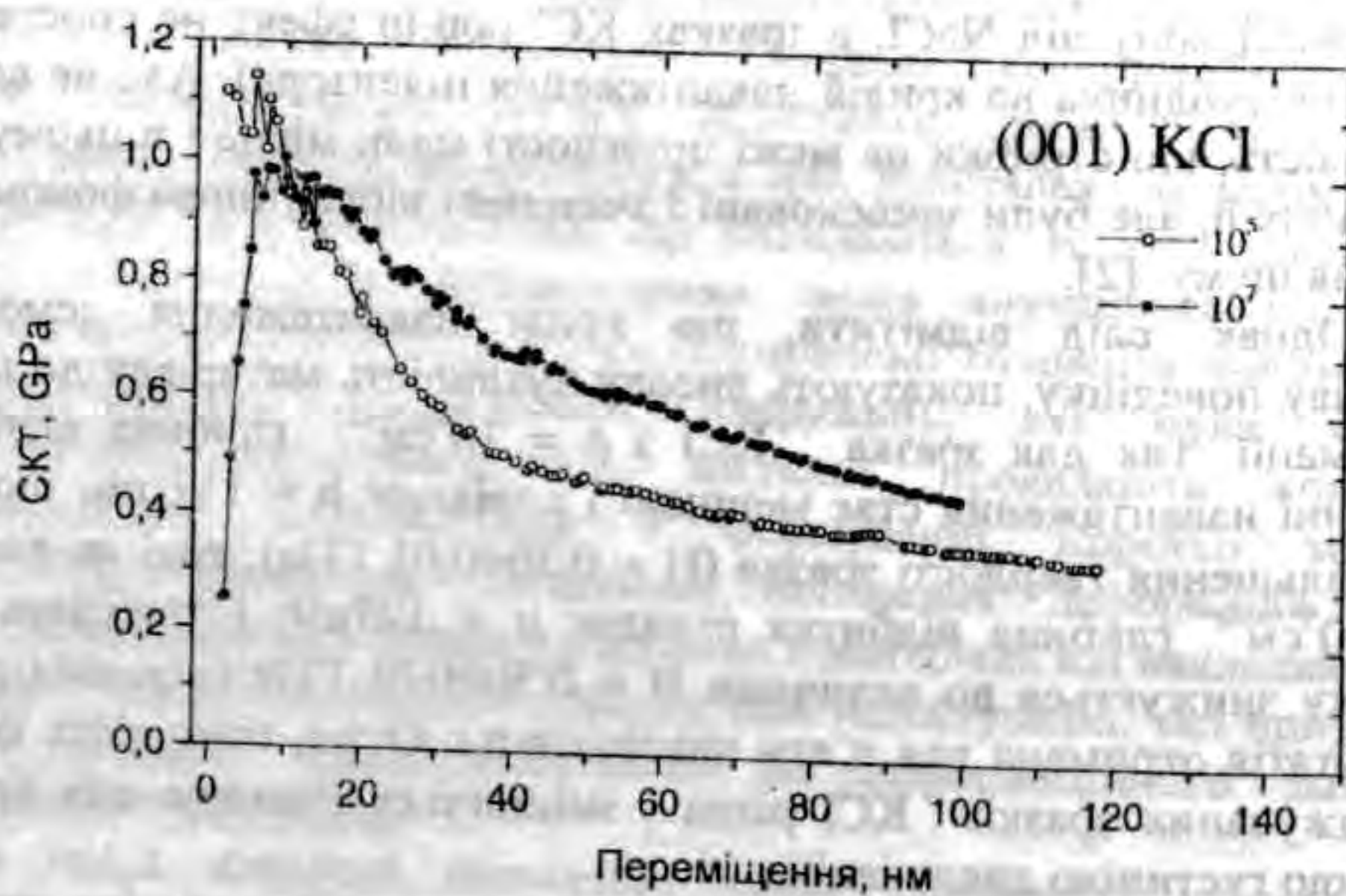


Рис.3 Зміна середнього контактного тиску в залежності від переміщення індентора для кристалів KCl з різною густиною дислокацій.

можливим контроль твердості даних зразків. Тиск починає швидко знижуватись і по досягненню деяких величин нанотвердсть стає постійною. Чітко видно, що твердість для зразка з густиною дислокацій $\rho=10^7 \text{ см}^{-2}$ вища ніж для зразка з $\rho=10^5 \text{ см}^{-2}$, тобто ефект деформаційного зміцнення чітко проявляється і на нанорівнях. Крім того, пружні ділянки кривих не накладаються одна на одну, що свідчить про зміну модуля пружності.

Висновки:

Таким чином на основі вищевикладеного можна зробити наступні висновки.

1. Ефект деформаційного зміцнення чітко проявляється і на нанорівнях. Збільшення густини дислокацій зсуває проявлення pop-in ефекту в сторону менших відбитків і викликає додаткове збільшення нанотвердості, причому модуль пружності також зростає.
2. Параметр критичного навантаження, при якому відбувається гомогенне зародження дислокацій збільшується зі збільшенням густини дислокацій, при цьому швидкість деформації також зростає.

ЛІТЕРАТУРА

1. Булычев С.И., Алехин В.П. Испытание материалов непрерывным вдавливанием индентора. - М.: «Машиностроение», 1990. - С.224.
2. Головин Ю.И., Дуб С.Н. Скачкообразный переход от упругого к упругопластическому деформированию на начальной стадии наноиндентирования. // Доклады академии наук. - 2003. - 393, №2. - С.1-4.
3. Michalke T.A., Houston J.E. Dislocation nucleation at nano-scale mechanical contacts// *Fcta mater.* - 1998. - 46, N2. - P.391-396.
4. Kramer D.E., Yoder K.B., Gerberich W.W. Surface constrained plasticity: oxide rupture and the yield point process. // *Philosophical Mag.* - 2001. - 81, N8. - H.2033-2058.
5. Дуб С.Н. Испытание тонких пленок на нанотвердость // Сб. Докл. IX междуна. Симпозиума «Тонкие пленки в оптике и электронике», Харьков, 2003, с.343-349.
6. Головин Ю.И., Дуб С.Н. и др. Нестабильность пластической деформации твердых тел в микро- и нанообъемах // *Изв РАН. Сер. Физ.* 2004. - т.68, №10. - С.1428-1435.
7. Новиков Н.Н. Структура и структурно-чувствительные свойства реальных кристаллов. - Киев: Вища школа, 1987. - 264 с.
8. Смирнов Б.И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. - Л.: Наука, 1981. - 236 с.

Надійшла до редакції .11.06.

В. В. Виноградов, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Институт физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва.

В. В. Виноградов, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Институт физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва.

В. В. Виноградов, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Институт физики им. Л. Д. Ландау РАН, Москва.

ЛИТЕРАТУРА

Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.
Виноградов В. В. // Журнал физики. 1990. С. 124.

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12910JB

45 - чит зап періодики та дисерт Ц: 10.00

