

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет)

Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия:

д.ф.-м.н., профессор **Мирзоев А.А.** (отв. редактор),
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (отв. секретарь),
к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.**,
д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**,
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.**,
д.ф.-м.н., профессор **Ковалев Ю.М.**,
д.ф.-м.н., профессор **Келлер А.В.**

Редакционный совет:

д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.**,
д.ф.-м.н., профессор **Карачик В.В.**,
д.ф.-м.н., профессор **Мирзаев Д.А.**,
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.**,
д.т.н., профессор **Сапожников С.Б.**,
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва),
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США),
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор, **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла),
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (Kim Kisik, ИННА-Университет, г. Инчон, Корея),
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Корея),
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)

South Ural State University

The main purpose of the series «Mathematics. Mechanics. Physics» is to promote the results of research in mathematics, mechanics and physics, as well as their applications in natural, technical and economic sciences.

Editorial Board

A.A. Mirzoev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E.V. Golubev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.I. Zalyapin, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
A.O. Chernyavskii, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
N.D. Kundikova, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
Yu.M. Kovalev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
A.V. Keller, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Editorial Council

L.D. Menikhes, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.V. Karachik, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
D.A. Mirzaev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.P. Beskachko, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
S.B. Sapozhnikov, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.I. Zhukovsky, Moscow State University, Moscow, Russian Federation
S.I. Pinchuk, Indiana University, Bloomington, United States of America
V.A. Strauss, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela
Kishik Kim, INHA-University, Incheon, Korea
Jaewan Kim, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, Korea
E.S. Puzyrev, Vanderbilt University, Nashville, USA

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

РУЗАКОВА О.А. Об управляемости одной неклассической модели математической физики 5

Физика

БАЯЗИТОВА Я.Р., ГИМАЛТДИНОВ И.К. О динамике звуковых волн в трубке с эластичными стенками, заполненной пузырьковой жидкостью 13

КОРЕНЧЕНКО А.Е., ВОРОНЦОВ А.Г., ГЕЛЬЧИНСКИЙ Б.Р. Статистический анализ столкновений атомов при нуклеации пара металла в среде инертного газа 20

КОРЕНЧЕНКО А.Е., ИСАКОВ Д.С. Численное исследование вынужденных колебаний жидкой капли на вибрирующей подложке 26

КУНДИКОВА Н.Д., ПОПКОВ И.И. Генерация неоднородно-поляризованного излучения волоконно-интерференционным методом 32

МУРАТОВ Т.Т. Вклад резонансного рассеяния носителей заряда в уширение кривой классического циклотронного резонанса в квазидвух- и трехмерных полупроводниках 36

ПЕТРОВ Ю.В., ГУРЕВИЧ С.Ю., ГОЛУБЕВ Е.В. Измерение скорости волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами 48

РИДНЫЙ Я.М., МИРЗОЕВ А.А., МИРЗАЕВ Д.А. Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в антиферромагнитном двухслойном состоянии ГЦК-железа 53

Персоналии

ЗАЛЯПИН В.И., КАРАЧИК В.В., КИМ-ТЯН Л.Р., МЕНИХЕС Л.Д., РУСАК Ю.Б. Борис Владимирович Логинов. К 75-летию со дня рождения 59

CONTENTS

Mathematics

RUZAKOVA O.A. Controllability of a Non-classical Model of Mathematical Physics	5
--	---

Physics

BAYAZITOVA Ya.R., GIMALTDINOV I.K. Sound Waves Dynamics in a Tube with Elastic Walls Filled with Bubbly Liquid	13
KORENCHENKO A.E., VORONTSOV A.G., GEL'CHINSKII B.R. Statistical Analysis of Atomic Collisions during Metal Vapour Nucleation in Nobel Gas Medium.....	20
KORENCHENKO A.E., ISAKOV D.S. Numerical Simulation of a Vibrating Sessile Droplet.....	26
KUNDIKOVA N.D., POPKOV I.I. Generation of Inhomogeneously Polarized Radiation by Fiber Interference Method.....	32
MURATOV T.T. Contribution of Charged Carriers Resonance Scattering to the Broadening of Cyclotron Resonance Absorption Curve in Quasi-two- and Three-dimensional Semiconductors.....	36
PETROV Yu.V., GUREVICH S.Yu., GOLUBEV E.V. Measurement of Velocity of Lamb Waves Excited by Laser	48
RIDNYI Ya.M., MIRZOEV A.A., MIRZAEV D.A. First Principles Calculations of the Interaction Energies of Carbon Atoms in the Antiferromagnetic Double-layer FCC-iron	53

Personalia

ZALYAPIN V.I., KARACHIK V.V., KIM-TIAN L.R., MENIKHES L.D., ROUSAK Yu.B. Boris Vladimirovich Loginov. To the 75-th Anniversary	59
--	----

Математика

УДК 517.9

ОБ УПРАВЛЯЕМОСТИ ОДНОЙ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

О.А. Рузакова¹

Получены необходимые условия ε -управляемости дифференциального уравнения первого порядка в банаховом пространстве с вырожденным оператором при производной, с относительно радиально ограниченным оператором в правой части. Показана эффективность полученных результатов на примерах исследования ε -управляемости начально-краевых задач для неклассических уравнений математической физики.

Ключевые слова: ε -управляемость; полугруппа операторов; уравнения соболевского типа.

Введение

Пусть X, Y – банаховы пространства, операторы $L \in L(X; Y)$ (т. е. линеен и непрерывен), $M \in Cl(X; Y)$ (т. е. линеен, замкнут и плотно определен), функции управления $u_i(t): [0, T] \rightarrow R$, вектор-функции $b_i(t), c(t) \in C^{p+1}([0, T]; Y)$, $1 \leq i \leq m$. Рассмотрим задачу Коши

$$x(0) = x_0 \in \text{dom} M$$

для уравнения

$$L\dot{x}(t) = Mx(t) + \sum_{i=1}^m b_i(t)u_i(t) + c(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (1)$$

Нас будет интересовать вопрос управляемости [1] (точнее, ε -управляемости [2]) уравнения соболевского типа [3] в случае, когда существует сильно-непрерывная разрешающая полугруппа однородного уравнения (1) [4]. При изучении управляемости уравнения (1) будем использовать результаты, полученные в работе [5] для уравнения

$$\dot{x} = Ax + b(t)u + c(t)$$

с замкнутым линейным оператором A , непрерывными вектор-функциями b, c со значениями в банаховом пространстве, функцией управления $u \in L_1((0, T); R)$. Заметим, что вопросы управляемости являются предшествующими для теории оптимального управления, которая активно развивается в последнее время для уравнений соболевского типа и даже нашла свое применение в задачах оптимального измерения динамически искаженных сигналов [6], а также их численного решения [7]. Автором данной работы ранее исследовалась ε -управляемость и управляемость уравнения соболевского типа [8–11]. Цель данной работы – обобщить эти результаты и результаты работы [5]. Полученные абстрактные результаты используются при исследовании ε -управляемости начально-краевых задач для неклассических уравнений математической физики.

Сильно (L, p) -радиальный оператор

Приведем необходимые для дальнейшего изложения вспомогательные результаты, доказательства которых можно найти в [3].

Пусть X, Y – банаховы пространства. Обозначим $\rho^L(M) = \{\mu \in C : (\mu L - M)^{-1} \in L(Y; X)\}$,

$$R_\mu^L(M) = (\mu L - M)^{-1} L, \quad L_\mu^L(M) = L(\mu L - M)^{-1}, \quad R_{(\lambda, p)}^L(M) = \prod_{k=0}^p R_{\mu_k}^L(M), \quad L_{(\lambda, p)}^L(M) = \prod_{k=0}^p L_{\mu_k}^L(M),$$

$$N_0 = N \cup \{0\}, \quad R_+ = \{a \in R : a > 0\}, \quad \bar{R}_+ = R_+ \cup \{0\}.$$

¹ Рузакова Ольга Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математического моделирования, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: oruzakova@gmail.com

Определение 1. Оператор M называется *сильно (L, p) -радиальным*, $p \in N_0$, если

(i) $\exists a \in R \quad \forall \mu > a \quad \mu \in \rho^L(M)$;

(ii) $\exists K > 0 \quad \forall \mu_k > a \quad k = \overline{0, p}, \quad \forall n \in N$,

$$\max \left\{ \left\| (R_{(\lambda, p)}^L(M))^n \right\|_{L(X)}, \left\| (L_{(\lambda, p)}^L(M))^n \right\|_{L(Y)} \right\} \leq \frac{K}{\prod_{k=0}^p (\mu_k - a)^n};$$

(iii) существует плотный в Y линейал \dot{Y} такой, что

$$\left\| M(\lambda L - M)^{-1} L_{(\mu, p)}^L(M)y \right\|_Y \leq \frac{\text{const}(y)}{(\lambda - a) \prod_{k=0}^p (\mu_k - a)}, \quad \forall y \in \dot{Y},$$

$$\left\{ X^t \in L(X) : t \in \bar{R}_+ \right\}, \left\| R_{(\mu, p)}^L(M)(\lambda L - M)^{-1} \right\|_{L(X; Y)} \leq \frac{K}{(\lambda - a) \prod_{k=0}^p (\mu_k - a)}$$

при любых $\lambda, \mu_0, \mu_1, \dots, \mu_p > a$.

Теорема 1. Пусть оператор M сильно (L, p) -радиален. Тогда

(i) $X = X^0 \oplus X^1, Y = Y^0 \oplus Y^1$;

(ii) $L_k = L|_{X^k} \in L(X^k; Y^k), M_k = L|_{\text{dom} M_k} \in Cl(X^k; Y^k), \text{dom} M_k = \text{dom} M \cap X^k, k = 0, 1$;

(iii) существуют операторы $M_0^{-1} \in L(Y^0; X^0)$ и $L_1^{-1} \in L(Y^1; X^1)$;

(iv) существует сильно непрерывная полугруппа, разрешающая уравнение $L\dot{x}(t) = Mx(t)$;

(v) инфинитезимальным генератором C_0 -непрерывной полугруппы $\{X_1^t = X^t|_{X^1} \in L(X^1) : t \in \bar{R}_+\}$ является оператор $S_1 = L_1^{-1}M_1 \in Cl(X^1)$;

(vi) оператор $H = M_0^{-1}L_0$ нильпотентен степени не больше p .

Через $P(Q)$ обозначим проектор вдоль $X^0(Y^0)$ на $X^1(Y^1)$.

Основной результат

Предположим, что оператор M сильно (L, p) -радиален, $p \in N_0$, тогда согласно теореме 1 уравнение (1) редуцируется к системе двух уравнений

$$\dot{x}^1 = L_1^{-1}x^1(t) + L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(t)u_i(t) + L_1^{-1}c^1(t), \tag{2}$$

$$H\dot{x}^0 = x^0(t) + M_0^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^0(t)u_i(t) + M_0^{-1}c^0(t). \tag{3}$$

Здесь $b_i^1(t) = Qb_i(t), c^1(t) = Qc(t), b_i^0(t) = (I - Q)b_i(t), c^0(t) = (I - Q)c(t), 1 \leq i \leq m$.

Решение задачи Коши для уравнения (1) имеет вид

$$x(t) = X^t x_0(t) + \int_0^t X^{t-s} L_1^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^1(s)u_i(s) + c^1(s) \right) ds - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^0(t)u_i(t) + M_0^{-1}c^0(t) \right)^k.$$

При этом первые два слагаемых дают решение уравнения (2), а последняя сумма – решение (3).

Будем использовать вектор-функции управления $u_i(t) \in V(T) = C^{p+1}([0, T]; R^m)$, а через $V_{x_0}(T)$ обозначим множество вектор-функций, удовлетворяющих условию

$$\begin{aligned} (I - P)x_0 &= - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^0(t)u_i(t) + M_0^{-1}c^0(t) \right)^k \Big|_{t=0} = \\ &= - \sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(0)u_i^l(0) - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} c^{0(k)}(0), \end{aligned}$$

которое необходимо для разрешимости задачи Коши.

Определение 1. Система (1) называется ε -управляемой из любой точки в любую за время T , если для любых точек $x_0 \in \text{dom}M, \tilde{x}_1 \in X$ и для любого $\varepsilon > 0$ существуют управления $u_i(t) \in V_{x_0}(T)$ такие, что $\|x(T; x_0, u_i(t)) - \tilde{x}_1\| \leq \varepsilon$.

Лемма 1. Пусть оператор M сильно (L, p) -радиален, вектор-функции $b_i^1(t), c^1(t) \in C([0, T]; Y^1)$, $1 \leq i \leq m$. Система (2) ε -управляема в том и только в том случае, когда для любых точек $x_0 \in \text{dom}M, \tilde{x}_1 \in X$

$$X^T x_0(t) + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} c^1(s) ds - \tilde{x}_1 \in \text{span}\{X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) : s \in [0, T], i = \overline{1, m}\}.$$

Доказательство. При $m = 1$ утверждение доказано в работе [5] на классе функций управления $L_1((0, T); Y)$. Сначала докажем необходимость. Обозначим

$$r = X^T x_0(t) + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} c^1(s) ds - \tilde{x}_1.$$

По условию существует $u(t)$, такое, что

$$\left\| r + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) ds \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Каждому разбиению $0 = s_0 \leq s_1 \leq \dots \leq s_{N-1} = T$ отрезка $[0, T]$, сопоставим такой набор чисел $\{\theta_{ji}\}_{j=0}^{N-1}$, $s_j \leq \theta_{ji} \leq s_{j+1}$, чтобы суммы $\sum_{j=1}^{N-1} |u_i(\theta_{ji})| \Delta s_j$ являлись нижними суммами Дарбу интегралов $\int_0^T |u_i(s)| ds$ для всех $i = 1, \dots, m$. В силу непрерывности подынтегральной функции можно

понимать интеграл $\int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) ds$ в смысле Римана и подобрать такие точки разбиения $\{s_{ji}\}_{j=0}^{N-1}$ отрезка $[0, T]$, чтобы было

$$\left\| \sum_{j=0}^{N-1} X^{T-\theta_{ji}} L_1^{-1} b_i^1(\theta_{ji}) u_i(\theta_{ji}) \Delta s_{ji} - \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) u_i(s) ds \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2m}$$

для всех $i = 1, \dots, m$. Тогда

$$\begin{aligned} & \left\| r + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^{N-1} X^{T-\theta_{ji}} L_1^{-1} b_i^1(\theta_{ji}) u_i(\theta_{ji}) \Delta s_{ji} \right\| \leq \left\| r + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) ds \right\| + \\ & + \left\| \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=0}^{N-1} X^{T-\theta_{ji}} L_1^{-1} b_i^1(\theta_{ji}) u_i(\theta_{ji}) \Delta s_{ji} - \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) u_i(s) ds \right) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon m}{2m} = \varepsilon. \end{aligned}$$

Получили

$$\left\| r - \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^{N-1} X^{T-\theta_{ji}} L_1^{-1} b_i^1(\theta_{ji}) [-u_i(\theta_{ji}) \Delta s_{ji}] \right\| \leq \varepsilon,$$

поэтому $r \in \text{span}\{X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) : s \in [0, T], 1 \leq i \leq m\}$.

Докажем в обратную сторону. Пусть $r \in \text{span}\{X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) : s \in [0, T], 1 \leq i \leq m\}$, тогда существуют N_i, μ_{ni}, t_{ni} , $0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq T$ такие, что

$$\left\| r - \sum_{i=1}^m \sum_{n=1}^{N_i} \mu_{ni} X^{T-t_{ni}} L_1^{-1} b_i^1(t_{ni}) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2}. \quad (4)$$

Не умаляя общности, будем считать далее $N_i \geq 2, \mu_{ni} \neq 0$. Введем функцию $\varphi(s, \alpha, \beta)$, $s \geq 0$, $0 \leq \alpha < \beta$,

$$\varphi(s, \alpha, \beta) = \begin{cases} \frac{1}{\beta - \alpha}, & s \in [\alpha; \beta], \\ 0, & s \notin [\alpha; \beta]. \end{cases}$$

Положим $\alpha_{ni} = t_{ni}$ при $n=1, 2, \dots, N_i - 1$ и $\beta_{N_i} = t_{N_i}$. Можно подобрать β_{ni} , $n=1, 2, \dots, N_i - 1$ и α_{N_i} , чтобы выполнялись неравенства

$$\left\| \frac{1}{\beta_{ni} - \alpha_{ni}} \int_{\alpha_{ni}}^{\beta_{ni}} X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) ds - X^{T-t_{ni}} L_1^{-1} b_i^1(t_{ni}) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2 |\mu_{ni}| N_i m}$$

и $[\alpha_{ni}; \beta_{ni}] \subset [0, T]$ для всех $i=1, \dots, m$. Эти неравенства можно переписать в виде

$$\left\| \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) \varphi(s, \alpha_{ni}, \beta_{ni}) ds - X^{T-t_{ni}} L_1^{-1} b_i^1(t_{ni}) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2 |\mu_{ni}| N_i m}.$$

Пусть $u_i(s) = - \sum_{n=1}^{N_i} \mu_{ni} \varphi(s, \alpha_{ni}, \beta_{ni})$ для всех $i=1, \dots, m$. Тогда

$$\begin{aligned} & \left\| \sum_{i=1}^m \sum_{n=1}^{N_i} \mu_{ni} X^{T-t_{ni}} L_1^{-1} b_i^1(t_{ni}) + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) ds \right\| \leq \\ & \leq \left\| \sum_{i=1}^m \sum_{n=1}^{N_i} \mu_{ni} \left(X^{T-t_{ni}} L_1^{-1} b_i^1(t_{ni}) - \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) \varphi(s, \alpha_{ni}, \beta_{ni}) ds \right) \right\| \leq \left\| \sum_{i=1}^m \sum_{n=1}^{N_i} |\mu_{ni}| \frac{\varepsilon}{2 |\mu_{ni}| N_i m} \right\| \leq \varepsilon, \end{aligned}$$

Вместе с (4) получаем

$$\left\| r + \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} \sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) ds \right\| \leq \varepsilon,$$

то есть $\|x(T; x_0, u_i(t)) - \tilde{x}_1\| \leq \varepsilon$.

Построенное при доказательстве достаточности управление разрывно. Учítывая, однако, что $C^{p+1}[0, T] = L_1[0, T]$, можно установить существование вектор-функций управления $v_i(t) \in V_{x_0}(T)$ таких, что $\|x(T; x_0, v_i(t)) - \tilde{x}_1\| \leq \varepsilon$.

Следствие 1. Пусть оператор M сильно (L, p) -радиален, вектор-функции $b_i^1(t), c^1(t) \in C([0, T]; Y^1)$, $1 \leq i \leq m$. Система (2) ε -управляема за время T в том и только в том случае, когда $span\{X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) : s \in [0, T], i = \overline{1, m}\} = X^1$.

Доказательство. Пусть система (2) ε -управляема из нуля. Для любого $\tilde{x}_1 \in X$ возьмем

$$\tilde{x}_2 = \tilde{x}_1 - \int_0^T X^{T-s} L_1^{-1} c^1(s) ds.$$

Тогда

$$\|x(T; 0, u_i(t)) - \tilde{x}_1\| = \left\| \int_0^t X^{t-s} L_1^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) + c^1(s) \right) ds - \tilde{x}_1 \right\| \leq \left\| \int_0^t X^{t-s} L_1^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^1(s) u_i(s) \right) ds - \tilde{x}_2 \right\| \leq \varepsilon.$$

Откуда получаем требуемое в силу произвольности \tilde{x}_1 , а значит, и $\tilde{x}_2 \in X$. Обратное утверждение сразу следует из леммы 1.

Теорема 2. Пусть оператор M сильно (L, p) -радиален, вектор-функции $b_i^0(t), c^0(t) \in C^{p+1}([0, T]; Y^0)$, $1 \leq i \leq m$. Система (3) ε -управляема за время T в том и только в том случае, когда пространство X^0 не более чем $(p+1)$ -мерно, а система векторов $\left\{ \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T), 0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m \right\}$ является в нем базисом.

Доказательство. Решение уравнения (3) имеет вид

$$\begin{aligned} x(t) &= - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} \left(\sum_{i=1}^m b_i^0(t) u_i(t) + M_0^{-1} c^0(t) \right)^k = \\ &= - \sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p u_i^l(t) \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(t) - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} c^{0(k)}(t). \end{aligned}$$

Обозначим соответствующие $\varepsilon_n = \frac{1}{n}$ функции управления через $u_n(t)$, значения $u_{in}^{(l)}(T) = \alpha_{in}^l$, $0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m, n \in N$.

Из ε -управляемости системы следует, что при всех $\tilde{x}_1 \in X^0$ и любых $n \in N$

$$\left\| \sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p \alpha_{in}^l \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T) - \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} c^{0(k)}(T) - \tilde{x}_1 \right\| < \frac{1}{n}.$$

Возьмем $\tilde{x}_1 = \sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} c^{0(k)}(T) - \tilde{x}_2$ при некотором $\tilde{x}_2 \in X^0$ и получим

$$\left\| \sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p \alpha_{in}^l \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T) - \tilde{x}_2 \right\| < \frac{1}{n}.$$

Поэтому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p \sum_{k=l}^p \alpha_{in}^l C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T) = \tilde{x}_2$$

и в силу произвольности $\tilde{x}_2 \in X^0$ имеем

$$\begin{aligned} X^0 &= \overline{\text{span} \left\{ \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T), 0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m \right\}} = \\ &= \overline{\text{span} \left\{ \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T), 0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m \right\}}, \end{aligned}$$

поскольку система векторов конечна.

Пусть для любого $x \in \text{dom} M_0$ существуют $c_i^l \in R, 0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m$, что

$$\sum_{i=1}^m \sum_{l=0}^p c_i^l \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T).$$

Взяв функции управления

$$u_i(t) = \sum_{l=0}^p c_i^l \frac{(t-T)^l}{l!}, \quad 1 \leq i \leq m,$$

получаем требуемое.

Теорема 3. Пусть оператор M сильно (L, p) -радиален, вектор-функции $b_i^1(t), c^1(t) \in C([0, T]; Y^1)$, $b_i^0(t), c^0(t) \in C^{p+1}([0, T]; Y^0)$, $1 \leq i \leq m$. Если система (1) ε -управляема за время T , тогда $\text{span} \{ X^{T-s} L_1^{-1} b_i^1(s) : s \in [0, T], i = \overline{1, m} \} = X^1$, пространство X^0 не более чем

$(p+1)$ -мерно, а система векторов $\left\{ \sum_{k=l}^p C_k^l H^k M_0^{-1} b_i^{0(k-l)}(T), 0 \leq l \leq p, 1 \leq i \leq m \right\}$ является в нем

базисом.

Замечание 1. Обратное утверждение к теореме 2 не имеет места, поскольку в данной постановке задачи одни и те же функции одновременно управляют решениями систем (2) и (3).

Пример 1. Рассмотрим алгебро-дифференциальную систему уравнений с частными производными

$$\begin{aligned} v_{1t} &= v_1 + \sum_{i=1}^m b_i^1(x,t)u_i(t) + c(x,t), \quad (x,t) \in \Omega \times R_+, \\ v_{2t} &= v_2 + \sum_{i=1}^m b_i^2(x,t)u_i(t) + c(x,t), \quad (x,t) \in \Omega \times R_+, \\ v_{3t} &= v_3 + \sum_{i=1}^m b_i^3(x,t)u_i(t) + c(x,t), \quad (x,t) \in \Omega \times R_+, \end{aligned} \tag{5}$$

$b_i^j(x,t) \in L_2(\Omega), j=1,2,3$ и начально-краевую задачу для них

$$\mu v_i + \frac{\partial}{\partial n} v_i = 0, \quad (x,t) \in \partial\Omega \times R_+, \quad i=1,2,3, \tag{6}$$

$$v_i(x,0) = v_{i0}(x), \quad x \in \Omega, \quad i=1,2,3. \tag{7}$$

Пространство $X^0 = \{0\} \times L_2(\Omega) \times L_2(\Omega)$ бесконечномерно. Поэтому необходимое условие теоремы 3 не выполняется, значит, система (5)–(7) не управляема.

Пример 2.

Пусть $P(\lambda) = \sum_{i=0}^n c_i \lambda^i$, $Q(\lambda) = \sum_{j=0}^m d_j \lambda^j$, $n \leq m$, $c_i, d_j \in R$, $c_n \neq 0$, $d_m \neq 0$, R^n – ограниченная

область с границей $\partial\Omega$ класса C^∞ , набор операторов A, B_1, \dots, B_r – регулярно эллиптический, где

$$(Av)(x) = \sum_{|\alpha| \leq 2r} a_\alpha(x) D^\alpha v(x), \quad a_\alpha \in C^\infty(\overline{\Omega}),$$

$$(B_l v)(x) = \sum_{|\alpha| \leq r_l} b_{l\alpha}(x) D^\alpha v(x), \quad b_{l\alpha} \in C^\infty(\partial\Omega), \quad l = \overline{1, r}.$$

Определим замкнутый оператор $A_1 : W_{2, \{B_l\}}^{2r}(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$, $A_1 v = Av, v \in \text{dom} A_1$ и потребуем его самосопряженности и ограниченности справа спектра $\sigma(A_1)$. Через $\{\varphi_k : k \in N\}$ обозначим ортонормированные в смысле скалярного произведения в $L_2(\Omega)$ собственные функции оператора A_1 , занумерованные по невозрастанию собственных значений $\{\lambda_k : k \in N\}$ с учетом их кратности. Положим $X = \{v \in W_2^{2rn}(\Omega) : B_l A^k v(x) = 0, k = \overline{0, n-1}, l = \overline{1, r}, x \in \partial\Omega\}$, $Y = L_2(\Omega)$, $L = P(A)$, $M = Q(A)$, $\text{dom} M = \{v \in W_2^{2rm}(\Omega) : B_l A^k v(x) = 0, k = \overline{0, m-1}, l = \overline{1, r}, x \in \partial\Omega\}$.

Рассмотрим начально-краевую задачу

$$P(A)v_t(x,t) = Q(A)v(x,t) + \sum_{i=1}^m b_i(x,t)u_i(t) + c(x,t), \quad (x,t) \in \Omega \times [0, T], \tag{8}$$

$$B_l A^k v(x,t) = 0, \quad k = \overline{0, n-1}, l = \overline{1, r}, \quad x \in \partial\Omega \times [0, T], \tag{9}$$

$$v(x,0) = v_0(x), \quad x \in \Omega. \tag{10}$$

В работе [12] показано, что если числа λ_k не являются одновременно корнями многочленов $P(\lambda)$ и $Q(\lambda)$, то оператор M сильно $(L, 0)$ -радиален. При этом система (8) имеет вид

$$0 = Q(\lambda_k)v_k(t) + \sum_{i=1}^{m'} b_{ik}(t)u_i(t) + c_k(t), \quad P(\lambda_k) = 0, \quad (11)$$

где нижний индекс k означает коэффициент Фурье соответствующей функции при разложении по базису $\{\varphi_k : k \in N\}$.

Теорема 4. Пусть числа λ_k не являются одновременно корнями многочленов $P(\lambda)$ и $Q(\lambda)$. Тогда система (11) ε -управляема за время T в том и только в том случае, когда сумма кратностей собственных значений оператора A_1 , являющихся корнями многочлена $P(\lambda)$, не превосходит числа m' и при этом нет собственных функций, соответствующих этим собственным значениям, ортогональных сразу всем функциям $b_i, 1 \leq i \leq m'$ в смысле $L_2(\Omega)$.

Доказательство. Учитывая сильную $(L, 0)$ -радиальность оператора M достаточно сослаться на теорему 2.

Следствие 2. Пусть числа λ_k не являются одновременно корнями многочленов $P(\lambda)$ и $Q(\lambda)$. Если система (8)–(10) ε -управляема за время T , то сумма кратностей собственных значений оператора A_1 , являющихся корнями многочлена $P(\lambda)$, не превосходит числа m' и при этом нет собственных функций, соответствующих этим собственным значениям, ортогональных сразу всем функциям $b_i, 1 \leq i \leq m'$ в смысле $L_2(\Omega)$.

Литература

1. Шолохович, Ф.А. Об управляемости линейных динамических систем / Ф.А. Шолохович // Изв. УрГУ. – 1998. – № 10. – Вып. 1. – С. 103–126.
2. Куржанский, А.Б. К управляемости в банаховых пространствах / А.Б. Куржанский // Дифференц. уравн. – 1969. – Т. 5, № 9. – С. 1715–1718.
3. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht; Boston; Tokyo; Keln: VSP. – 2003. – 216 p.
4. Свиридюк, Г.А. Линейные уравнения типа Соболева и сильно непрерывные полугруппы разрешающих операторов с ядрами / Г.А. Свиридюк // ДАН. – 1994. – Т. 337, № 5. – С. 581–584.
5. Нефедов, С.А. Критерий ε -управляемости линейной системы / С.А. Нефедов, Ф.А. Шолохович // Дифференц. уравнения. – 1976. – Т. 12, № 4. – С. 653–657.
6. Шестаков, А.Л. Новый подход к измерению динамически искаженных сигналов / А.Л. Шестаков, Г.А. Свиридюк // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2010. – № 16 (192). – С. 116–120.
7. Шестаков, А.Л. Численное решение задачи оптимального измерения / А.Л. Шестаков, А.В. Келлер, Е.И. Назарова // Автоматика и телемеханика. – 2012. – № 1. – С. 107–115.
8. Федоров, В.Е. Одномерная управляемость в гильбертовых пространствах линейных уравнений соболевского типа / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Дифференц. уравнения. – 2002. – Т. 38, № 8. – С. 1137–1139.
9. Федоров, В.Е. Управляемость линейных уравнений соболевского типа с относительно радиальными операторами / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Изв. вузов. Математика. – 2002. – № 7. – С. 54–57.
10. Федоров, В.Е. Одномерная и двумерная управляемость уравнений соболевского типа в банаховых пространствах / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Мат. заметки. – 2003. – Т. 74, № 4. – С. 618–628.
11. Рузакова, О.А. Об управляемости линейных уравнений соболевского типа с относительно секториальным оператором / О.А. Рузакова, Е.А. Олейник // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 11. – № 5 (264). – С. 54–61.
12. Федоров, В.Е. Сильно непрерывные полугруппы уравнений соболевского типа в локально выпуклых пространствах / В.Е. Федоров // Неклассические уравнения математической физики. Новосибирск: Изд-во ИМ СО РАН. – 2000. – С. 32–40.

Поступила в редакцию 12 июля 2014 г.

CONTROLLABILITY OF A NON-CLASSICAL MODEL OF MATHEMATICAL PHYSICS**O.A. Ruzakova¹**

Necessary conditions of ε -controllability for the class of degenerate linear differential equations in Banach space with respect to the time derivative and with the radially bounded operator on the right side are obtained. The results are effectively applied to the research of ε -controllability of initial boundary-value problems for the non-classical equations of mathematical physics.

Keywords: controllability; semigroup of operators; equations of Sobolev type.

References

1. Sholokhov F.A. *Izvestiya Ural'skogo Gosudarstvennogo Universiteta*. 1998. no. 10. Issue 1. pp. 103–126. (in Russ.).
2. Kurzhanskiy A.B. *Differentsial'nye uravneniya*. 1969. Vol. 5, no. 9. pp. 1715–1718. (in Russ.).
3. Sviridyuk G.A., Fedorov V.E. *Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators*. Utrecht; Boston; Tokyo; Keln: VSP. 2003. 216 p.
4. Sviridyuk G.A. *DAN*. 1994. Vol. 337, no. 5. pp. 581–584. (in Russ.).
5. Nefedov S.A., Sholokhov F.A. *Differentsial'nye uravneniya*. 1976. Vol. 12, no. 4. pp. 653–657. (in Russ.).
6. Shestakov A.L., Sviridyuk G.A. Novyy podkhod k izmereniyu dinamicheski iskazhennykh signalov (A new approach to measurement of dynamically perturbed signals). *Bulletin of South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming & Computer Software"*. 2010. no. 16 (192). C. 116–120. (in Russ.).
7. Shestakov A.L., Keller A.V., Nazarova E.I. Numerical solution of the optimal measurement problem. *Automation and Remote Control*. 2012. Vol. 73. no. 1. pp. 97–104.
8. Fedorov V.E., Ruzakova O.A. *Differentsial'nye uravneniya*. 2002. Vol. 38, no. 8. pp. 1137–1139. (in Russ.).
9. Fedorov V.E., Ruzakova O.A. *Izvestiya vuzov. Matematika*. 2002. no. 7. pp. 54–57. (in Russ.).
10. Fedorov V.E., Ruzakova O.A. *Matematicheskie zametki*. 2003. Vol. 74, no. 4. pp. 618–628. (in Russ.).
11. Ruzakova O.A., Oleynik E.A. Ob upravlyaemosti lineynykh uravneniy sobolevskogo tipa s ot-nositel'no sektorial'nym operatorom (On the controllability of linear sobolev type equations with relatively sectorial operator). *Bulletin of South Ural State University. Series "Mathematical Modelling, Programming & Computer Software"*. 2012. Issue 11. no. 5 (264). pp. 54–61. (in Russ.).
12. Fedorov V.E. *Neklassicheskie uravneniya matematicheskoy fiziki* (Non-classic equations of mathematical physics). Novosibirsk, IM SO RAN Publ. 2000. pp. 32–40. (in Russ.).

Received 12 July 2014

¹ Ruzakova Olga Aleksandrovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mechanics and Mathematical Department, South Ural State University.
E-mail: oruzakova@gmail.com

О ДИНАМИКЕ ЗВУКОВЫХ ВОЛН В ТРУБКЕ С ЭЛАСТИЧНЫМИ СТЕНКАМИ, ЗАПОЛНЕННОЙ ПУЗЫРЬКОВОЙ ЖИДКОСТЬЮ

Я.Р. Баязитова¹, И.К. Гималтдинов²

Предложена теоретическая модель, описывающая динамику акустических волн в двухфазной жидкости в трубке с эластичными стенками. Учитывается радиальная инерция стенок трубки.

Ключевые слова: акустическая волна; эластичность; двухфазная жидкость; фазовая скорость; коэффициент затухания.

Введение

Первые работы по акустическому анализу двухфазных жидкостей отмечены еще в конце XX века. Советскими учеными под руководством И.С. Кольцовой были проведены экспериментальные исследования затухания ультразвуковых волн в маловязких жидкостях с газовыми пузырьками, полученными электролитическим методом, результаты исследований отражены в работе [1]. Обнаружено, что в области резонанса пузырьков концентрационная зависимость коэффициента дополнительного затухания является функцией от частоты, причем до резонансной частоты и после резонансной частоты концентрационная зависимость коэффициента дополнительного затухания линейна. Данные, полученные учеными, в дальнейшем служили ориентиром для теоретических исследователей в этой области, опубликовавших свой труд в работах [2–5] и др.

В данной статье проведен акустический анализ волн в двухфазной жидкости, распространяющихся в трубке с эластичными стенками, выявлены некоторые особенности динамики звуковых волн.

Рассмотрим одномерные волновые возмущения, распространяющиеся в трубке малого радиуса, заполненной пузырьковой жидкостью. Стенки трубки считаем эластичными.

На рис. 1 представлено схематическое изображение системы, которое иллюстрирует трубку толщиной h , длиной L и радиусом a_0 ($L \gg a_0$). Возмущения в системе возникают вследствие воздействия давлением по торцу трубки.

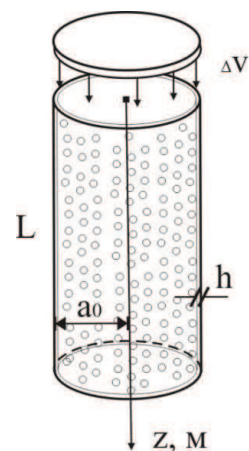


Рис. 1. Схема задачи

Основные уравнения

Запишем основные уравнения для описания движения волн в пузырьковой жидкости в трубке с эластичными стенками с учетом радиальной инерции. Макроскопические уравнения сохранения масс, числа пузырьков, импульсов в односкоростном приближении имеют вид:

$$\frac{\partial(\rho_l S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_l v S)}{\partial x} = 0, \quad i = l, g, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(n S)}{\partial t} + \frac{\partial(n v S)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho v S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^2 S)}{\partial x} = -S \frac{\partial \rho_l}{\partial x}. \quad (3)$$

Запишем кинематические соотношения для газожидкостной смеси:

$$\alpha_l + \alpha_g = 1, \quad (4)$$

¹ Баязитова Яна Раифовна – аспирант, кафедра прикладной математики и механики, Башкирский государственный университет, филиал в г. Стерлитамаке.

Е-mail: yana.bayazitova@mail.ru

² Гималтдинов Ильяс Кадирович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики и механики, Башкирский государственный университет, филиал в г. Стерлитамаке.

$$\rho_i = \rho_i^0 \alpha_i, \quad (5)$$

$$\rho = \rho_g + \rho_l,$$

$$\alpha_g = \frac{4}{3} \pi a^3 n \quad (6)$$

где S – площадь поперечного сечения, n – число пузырьков, v – скорость, a – радиус пузырьков, α_i – объемное содержание фазы, ρ_i – плотность фазы.

Жидкость считаем акустически сжимаемой, газ – калорически совершенным:

$$p_l = p_0 + C_l^2 (\rho_l^0 - \rho_{l0}^0), \quad (7)$$

$$p_g = \rho_g^0 R T_g,$$

где p_l – давление жидкости, p_0 – начальное давление жидкости, C_l – скорость звука в жидкости, p_g – давление газа, R – газовая постоянная, T_g – температура газа.

При описании радиального движения будем полагать, что жидкость несжимаема, скорость радиального движения складывается из двух слагаемых:

$$w = \frac{da}{dt}, w = w_R + w_A.$$

Компонента w_R описывается уравнением Рейля–Ламба, соответствующим пульсациям одиночного сферического пузырька в безграничной несжимаемой жидкости:

$$a \frac{dw_R}{dt} + \frac{3}{2} w_R^2 + 4\nu_l \frac{w_R}{a} = \frac{(p_g - p_l)}{\rho_l^0}, \quad (8)$$

где ν_l – кинематическая вязкость жидкости.

Добавка w_A определяется из решения задачи о сферической разгрузке на сфере радиуса a в несущей жидкости в акустическом приближении: $w_A = \frac{p_g - p_l}{\rho_l^0 C_l \alpha_g^{1/3}}$.

Уравнение для давления внутри пузырьков записывается в виде:

$$\frac{dp_g}{dt} = -\frac{3\gamma p_0}{a_0} \frac{da}{dt} - \frac{3(\gamma-1)q}{a_0},$$

где γ – показатель адиабаты для газа.

Уравнение для интенсивности межфазного теплообмена после линеаризации примет вид:

$$q = -\lambda_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial r} \right)_{a_0}.$$

Температура газа в пузырьках меняется по закону: $T_g = \frac{p_g}{p_0} \left(\frac{a}{a_0} \right)^3 T_0$.

В случае учета инерционных свойств стенок трубки считаем, что радиус трубки меняется по закону:

$$\rho_w \left((b_0 + h_0)^2 - b_0^2 \right) \frac{\partial^2 b}{\partial t^2} = b(p - p_0) - E \frac{h_0}{b_0} (b - b_0), \quad (9)$$

где ρ_w – плотность материала трубки, b_0 – начальное значение внутреннего радиуса трубки, h_0 – толщина стенки трубки, E – модуль Юнга.

В случае пренебрежения инерцией стенок трубки при относительно небольших изменениях площади сечения трубки используем формулу связи избыточного давления в трубке и площади поперечного сечения в виде:

$$\Delta p_l = \frac{Eh}{2a_0} \Delta S.$$

Начальные и граничные условия

Для иницирования волны в системе на границе $z = 0$ воздействует жесткий ударник по закону:

$$v_0(t) = \begin{cases} \Delta v_0 \exp\left(-\left(\frac{t-t_*/2}{t_*/6}\right)^2\right), & 0 < t < t_*, \\ 0, & t > t_*. \end{cases}$$

где Δv_0 – амплитуда скорости, t_* – характерная протяженность импульса.

На поверхности раздела фаз запишем уравнение теплового баланса

$$\lambda_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial r}\right)_a = \lambda_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial r}\right)_a.$$

Так же на поверхности раздела фаз ($r = a_0$) зададим следующие граничные условия для системы:

$$T_g = T_l = T_a, \quad \frac{\partial a}{\partial t} = w_l = w_g = w.$$

Кроме того

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0 (r = 0), T_l = 0 (r = \infty).$$

Линеаризованная система уравнений:

Для линеаризации уравнений будем считать, что изменение параметров по времени и координате происходит с минимальным скачком их соответственных значений.

Из уравнения масс (1) с учетом кинематических соотношений (4)–(6), условия (7) и уравнения сохранения числа пузырьков (2), после линеаризации и некоторых преобразований получено соотношение:

$$\alpha_{l0}^2 \frac{\partial \rho_{l0}}{\partial t} - \frac{3\alpha_{l0}\alpha_{g0}\rho_{l0}^0}{a_0} \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\alpha_{l0}\rho_{l0}^0}{S_0} \frac{\partial S}{\partial t} + \alpha_{l0}\rho_{l0}^0 \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (10)$$

Продифференцируем уравнение (10) по времени; уравнение импульсов (3) после линеаризации продифференцируем по координате, подставим его в (10). В результате преобразований имеем:

$$\frac{\alpha_{l0}^2}{C_l^2} \frac{\partial^2 p_l}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 p_l}{\partial x^2} - \frac{3\alpha_{l0}\alpha_{g0}\rho_{l0}^0}{a_0} \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} + \frac{\alpha_{l0}\rho_{l0}^0}{S_0} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = 0, \quad (11)$$

где $S = \pi b^2$.

Полученное уравнение при отсутствии пузырьков ($\alpha_{g0} = 0$) и неизменной площади поперечного сечения ($S = \text{const}$) совпадает с обычным волновым уравнением.

Уравнения пульсационного движения пузырька (8) и изменения радиуса трубки (9) после линеаризации принимают вид:

$$a_0\rho_{l0}^0 \frac{\partial^2 a'}{\partial t^2} + 4\frac{v_l\rho_{l0}^0}{a_0} \frac{\partial a'}{\partial t} = p_g' - p_l', \quad (12)$$

$$\rho_w \left((b_0 + h_0)^2 - b_0^2 \right) \frac{\partial^2 b'}{\partial t^2} = b_0 p_l' - \frac{Eh_0}{b_0} b'. \quad (13)$$

Уравнение состояния:

$$\frac{P_g'}{P_{g0}} = \frac{\rho_{g0}'}{\rho_{g0}^0} + \frac{T_g'}{T_{g0}}. \quad (14)$$

Уравнения теплопроводности:

$$\rho_{l0}^0 C_l \frac{\partial T_l'}{\partial t} = r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_l r^2 \frac{\partial T_l'}{\partial r} \right), \quad (r > a_0), \quad (15)$$

$$\rho_{g0}^0 C_g \frac{\partial T_g'}{\partial t} = r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_g r^2 \frac{\partial T_g'}{\partial r} \right) + \frac{\partial P_g}{\partial t}, \quad (r < a_0). \quad (16)$$

Уравнение для давления в газе:

$$\frac{\partial P_g}{\partial t} = -\frac{3\gamma p_0}{a_0} \frac{\partial a'}{\partial t} + \frac{3(\gamma-1)\lambda_g}{a_0} \left(\frac{\partial T_g'}{\partial r} \right)_a. \quad (17)$$

Результаты расчетов

Решение приведенной системы уравнений (11)–(17) ищем в виде затухающей бегущей волны

$$p_l, a, v, p_g \exp[(Kx - \omega t)i], \quad T_l = T_l(r) \exp[(Kx - \omega t)i], \quad b = b_m \exp[(\omega t)i], \quad (18)$$

$$K = k + i\sigma, \quad C_p = \frac{\omega}{k},$$

где K – волновое число, ω – частота возмущений, δ и C_p – соответственно коэффициент затухания и фазовая скорость. Подставляя (18) в приведенную выше систему уравнений (11)–(17) и сокращая на экспоненту, имеем:

$$\left(\frac{K}{w} \right)^2 = \frac{\alpha_{l0}^2}{C_l^2} + \frac{3\alpha_{l0}\alpha_{g0}a_0(P_{lm} - P_{gm})}{(a_0^2\omega^2 + 4\nu_l i\omega)P_{lm}} + \frac{2\pi b_0^2 \alpha_{l0} \rho_{l0}}{S_0 \left(\frac{Eh_0}{b_0} - \rho_w \left((b_0 + h_0)^2 - b_0^2 \right) w^2 \right)},$$

$$\left(\rho_{l0}^0 \omega^2 a_0^2 + 4\nu_l i\omega \rho_{l0}^0 \right) \frac{A_m}{a_0} = P_{lm} - P_{gm},$$

$$y_l^2 T_l = \frac{a_0^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) \quad (r > a_0),$$

$$y_g^2 T_g = \frac{a_0^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + (1 - \gamma^{-1}) \frac{y_g^2 P_g T_0}{P_{g0}} \quad (r < a_0),$$

$$y_g^2 T_0 \frac{P_g}{P_{g0}} = -3\gamma y_g^2 T_0 \frac{A_m}{a_0} - \frac{3(\gamma-1)}{a_0} \left(\frac{\partial T_g}{\partial r} \right)_{a=a_0},$$

$$y_i = (-i\omega a_0^2 / \chi_i)^{1/2}, \quad \chi_g = \frac{\lambda_g}{\rho_{g0}^0 c_g}, \quad \chi_l = \frac{\lambda_l}{\rho_{l0}^0 c_l},$$

$$\lambda_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial r} \right)_a = \lambda_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial r} \right)_a,$$

$$T_g = T_l = T_0, \quad (r = a_0),$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0, \quad (r = 0),$$

$$T_l = 0, \quad (r = \infty).$$

где c_l – теплоемкость жидкости.

Численный анализ

Расчеты проводились для следующих физико-химических параметров системы. Вода: $\nu_l = 3,6 \cdot 10^3$ м²/с, $c_l = 4200$ Дж/кг·К, $\rho_l = 10^3$ кг/м³, $\lambda_l = 0,6$ м·кг/К·с³, $C_l = 1500$ м/с, $p_0 = 10^5$ Па. Воздух: $p_g = 10^5$ Па, $\alpha_g = 0,001$, $\lambda_g = 0,026$ м·кг/К·с³, $\rho_g = 1,29$ кг/м³, $c_g = 1006$ Дж/кг·К. Труба

имеет следующие геометрические параметры: $b_0 = 2 \cdot 10^{-2}$ м, $h_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ м. Материал трубы – поликарбонат: $\rho_s = 1200$ кг/м³, $E = 2,13 \cdot 10^9$ Па.

Для случая пузырьковой жидкости результаты расчетов представлены в виде графиков, выражающих зависимость коэффициента затухания δ от частоты ω .

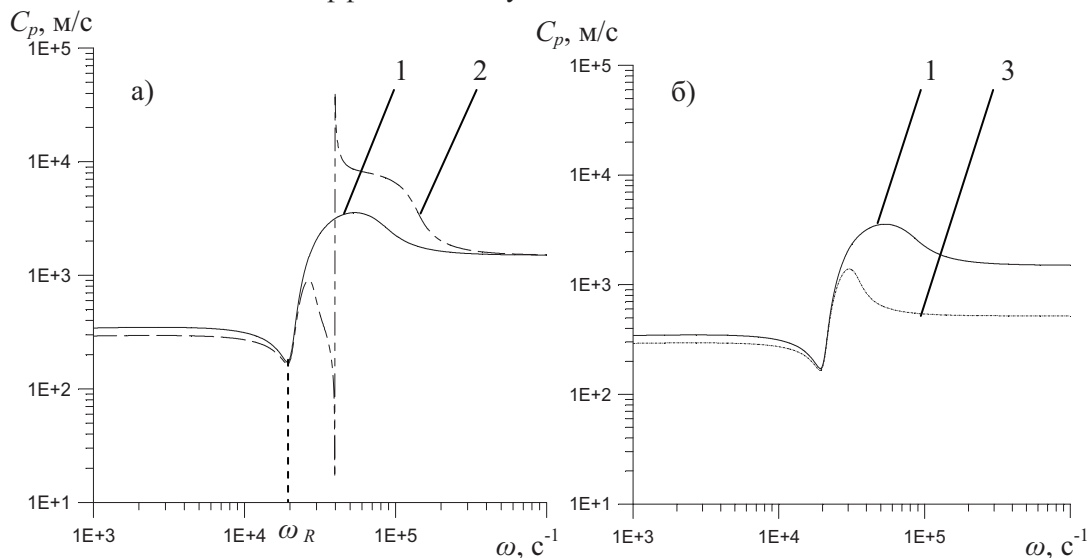


Рис. 2. Зависимость фазовой скорости C_p от частоты ω

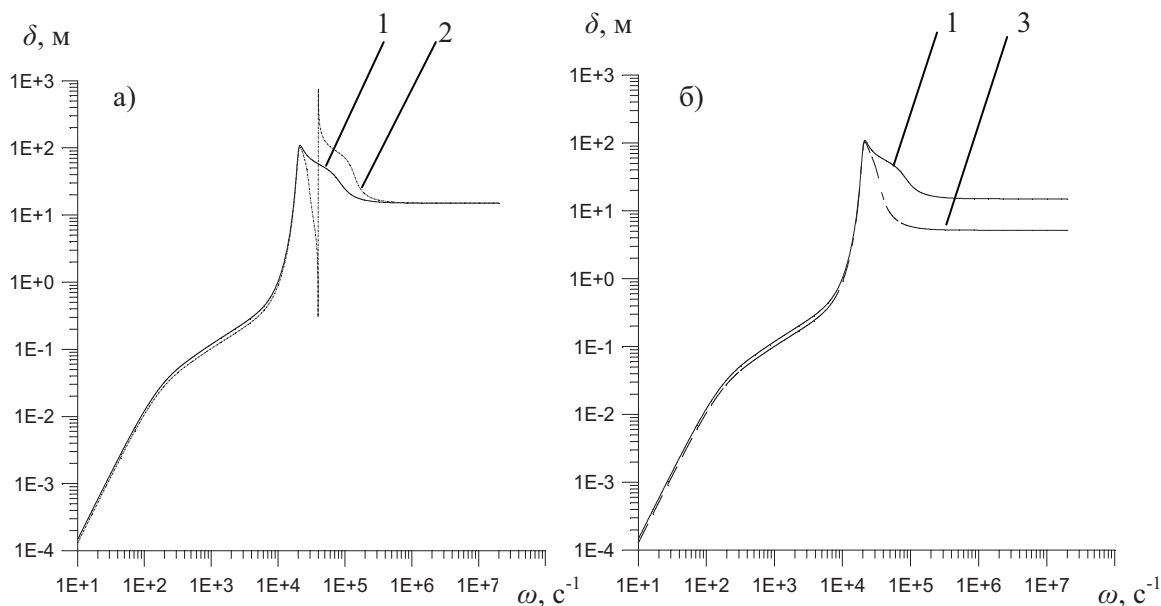


Рис. 3. Зависимость коэффициента затухания δ от частоты ω

На рис. 2. представлены зависимости фазовой скорости C_p от частоты ω для двухфазной жидкости. На рис. 2, а, б черная сплошная линия (1) соответствует случаю распространения акустических волн в трубке с «жесткими» стенками, штрихпунктирная линия (2) на рис. 2, а – случаю распространения акустических волн в трубе, стенки которой обладают инерционными и эластичными свойствами. Случаю распространения звуковых волн в безынерционной эластичной трубке соответствует пунктирная линия (3) на рис. 2, б. Видно, что в низкочастотной области ($\omega \ll \omega_R$) равновесная скорость акустических волн в пузырьковой среде (310 м/с), находящейся в трубке с «жесткими» стенками, чуть выше значения аналогичного параметра для волн в трубке с податливыми стенками, которая принимает значение 266 м/с вне зависимости от учета радиальной инерции стенок трубки. Радиальная инерция стенок трубки оказывает значительное влия-

ние на скорость и коэффициент затухания при частотах ω , превышающих частоту Минаерта ω_c : на рис. 2, а видно, что кривая (2) терпит разрыв вблизи частоты $\omega = 4,43 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$, таким образом, для акустических волн в двухфазных системах, находящихся в эластичной трубке, стенки которой обладают радиальной инерцией, свойственна полоса непропускания – диапазон частот, при которых акустические волны не распространяются. Полоса непропускания в нашем случае составляет $0,02 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Далее по рис. 2, а кривая в области высокочастотных колебаний ($\omega \gg \omega_c$) выходит на стационарное значение фазовой скорости, называемое замороженным, которое близко к скорости звука в чистой жидкости (1500 м/с). Этому же значению достигает фазовая скорость после небольшого скачка по кривой (1). Для кривой (3) значение замороженной скорости значительно ниже – достигает 490 м/с.

На рис. 3, а, б представлены графики, выражающие коэффициенты затухания акустических волн в двухфазной жидкости, находящейся в трубке с «жесткими» стенками (1), эластичными стенками, обладающими массой (2), эластичными стенками без радиальной инерции (3). Очевидно наличие полосы непропускания для пунктирной кривой (2), идентичной наблюдаемой на рис. 2, а. В случае акустических волн в двухфазной жидкости в безынерционной эластичной трубке (линия 3) коэффициент затухания при частотах, превышающих частоту Минаерта ω_c , оказывается меньше значений, соответствующих случаю акустических волн в двухфазной жидкости в «жесткой» трубке (линия 1).

По результатам исследований сформулировали следующие выводы:

1) для динамики акустических волн в двухфазных жидкостях, находящихся в трубке с эластичными стенками, обладающими радиальной инерцией, существует полоса непропускания. Значение фазовой скорости в низкочастотной области ниже аналогичного параметра для акустических волн в пузырьковой жидкости, распространяющихся в трубке с «жесткими» стенками. К тому же значения замороженных скоростей в обоих случаях едины;

2) в низкочастотной области значение фазовой скорости акустических волн в пузырьковой жидкости в трубке с эластичными стенками, не обладающими радиальной инерцией, несколько ниже, а коэффициент затухания близок по значению аналогичному параметру для акустических волн в пузырьковой жидкости в трубке с «жесткими» стенками. А в высокочастотной области фазовая скорость и коэффициент затухания акустических волн в трубке с эластичными стенками без радиальной инерции значительно ниже аналогичных параметров для акустических волн в пузырьковой жидкости в «жесткой» трубке.

Литература

1. Ослабление ультразвуковых волн в маловязких жидкостях с газовыми пузырьками / И.С. Кольцова, Л.О. Крынский, И.Г. Михайлов, И.Е. Покровская // Акустический журнал. – 1979. – Т. 25, № 5. – С. 725–731.
2. Нигматулин, Р.И. Проявление сжимаемости несущей жидкости при распространении волн в пузырьковой среде // Р.И. Нигматулин, В.Ш. Шагапов, Н.К. Вахитова / Докл. АН СССР. – 1989. – Т. 304, № 5. – С. 1077–1081.
3. Commander, K.W. Linear pressure waves in bubbly liquids: Comparison between theory and experiments / K.W. Commander, A. Prosperetti // J. Acoust. Soc. Am. – 1989. – Vol. 85, № 2. – P. 732–746.
4. Гафиятов, Р.Н. Акустические волны в двухфракционных смесях жидкости с парогазовыми пузырьками / Р.Н. Гафиятов // Труды института механики. Материалы V Российской конференции с международным участием «Многофазные системы: теория и приложения», посвященной 20-летию со дня основания Института механики им. Р.Р. Мавлютова УНЦ РАН (Уфа, 2–5 июля 2012). – 2012. – Т. 1, № 9. – С. 65–69.
5. Levitsky, S. Sound propagation in viscoelastic pipe with liquid-bubble mixture / S. Levitsky, R. Berman, J. Haddad // Acoust. Paris. – 2008. – P. 4385–4390.

Поступила в редакцию 15 сентября 2014 г.

SOUND WAVES DYNAMICS IN A TUBE WITH ELASTIC WALLS FILLED WITH BUBBLY LIQUID

Ya.R. Bayazitova¹, I.K. Gimaldinov²

The paper offers a theoretical model describing the dynamics of acoustic waves in two-phase fluid placed in a tube with elastic walls. Radial inertia of the tube walls was considered.

Stop band for the dynamics of acoustic waves in two-phase liquid placed in a tube with elastic walls having radial inertia was found. Phase velocity value in the low-frequency region is less than the phase velocity value for acoustic waves in a bubbly liquid in a tube with rigid walls. The values of frozen velocities in both cases are the same.

In a low-frequency region the value of the phase velocity of acoustic waves in a bubbly liquid in a tube with elastic walls with non-radial inertia is lower. The damping coefficient is almost the same as the one for acoustic waves in a bubbly liquid in a tube with rigid walls. In a high-frequency region phase velocity and damping coefficient of acoustic waves in a tube with elastic walls without radial inertia is much lower than the ones for acoustic waves in a bubbly liquid in a tube with rigid walls.

Keywords: acoustic wave; elasticity; two-phase fluid; phase velocity; damping coefficient.

References

1. Kol'cova I.S., Krynskiy L.O., Mihajlov I.G., Pokrovskaja I.E. *Akusticheskij zhurnal*. 1979. Vol. 25, no. 5. pp. 725–731. (in Russ.).
2. Nigmatulin R.I., Shagapov V. Sh., Vahitova N.K. *Dokl. AN SSSR*. 1989. Vol. 304, no. 5. pp. 1077–1081. (in Russ.).
3. Commander K.W., Prosperetti A. Linear pressure waves in bubbly liquids: Comparison between theory and experiments. *J. Acoust. Soc. Am.* 1989. Vol. 85, no. 2. pp. 732–746.
4. Gafijatov R.N. Akusticheskie volny v dvuhfrakcionnyh smesjah zhidkosti s parogazovymi puzyr'kami (Acoustic waves in two fractional mixtures of liquid with steam bubbles). *Trudy instituta mehaniki. Materialy V Rossijskoj konferencii s mezhdunarodnym uchastiem «Mnogofaznye sistemy: teorija i prilozhenija», posvjashhennoj 20-letiju so dnja osnovanija Instituta mehaniki im. R.R. Mavljutova UNC RAN, Ufa, 2–5 ijulja 2012.* (Science papers of the Institute of Mechanics. Proceedings of the V All-Russian conference with international participation "Multiphase Systems: Theory and Applications", devoted to the 20th anniversary of the founding of the Institute of Mechanics of R.R. Mavlyutov USC RAS, Ufa city, July 2–5, 2012. Vol. 1, no. 9. pp. 65–69. (in Russ.).
5. Berman R., Haddad J. Sound propagation in viscoelastic pipe with liquid-bubble mixture. *Acoust. Paris*. 2008. pp. 4385–4390.

Received 15 September 2014

¹ Bayazitova Yana Razifovna is Post-graduate Student, Applied Mathematics and Mechanics Department, Branch of Bashkir State University, Sterlitamak, Russia.

E-mail: yana.bayazitova@mail.ru

² Gimaldinov Il'yas Kadirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General of Applied Mathematics and Mechanics Department, Branch of Bashkir State University, Sterlitamak, Russia.

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ ПРИ НУКЛЕАЦИИ ПАРА МЕТАЛЛА В СРЕДЕ ИНЕРТНОГО ГАЗА¹

А.Е. Коренченко², А.Г. Воронцов³, Б.Р. Гельчинский⁴

Предпринята попытка динамической оценки вероятности роста кластеров в пересыщенной неравновесной среде на основании статистического анализа результатов молекулярно-динамических расчетов. Произведено моделирование конденсации пара меди в атмосфере аргона. Проверена возможность использования основных соотношений молекулярно-кинетической теории для таких условий. По результатам исследования предложен способ описания вероятности роста кластеров в пересыщенной неравновесной среде.

Ключевые слова: металлические кластеры; нуклеация; молекулярная динамика.

Введение

Модель газофазного синтеза металлических порошков в любой установке, реализующей испарение металла в атмосферу инертного газа, представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных, дополненную начальными и граничными условиями в соответствии с конфигурацией установки. Уравнения содержат слагаемые, которые не могут быть вычислены из анализа движения парогазовой смеси. Это прирост массовой доли кластеров, происходящий из-за слияния или распада кластеров, и связанное с этим тепловыделение в уравнении теплопроводности [1]. Менее точный подход реализован, например, в работе [2], посвященной анализу формирования нанопорошков в потоке термической плазмы. В [2] зародышевая стадия не анализируется, а рост частиц рассматривается с появления частиц размером 1 нм.

При исследовании процессов нуклеации в среде пересыщенного металлического пара, смешанного с инертным газом, возникает необходимость вычисления вероятностей того, что частица, образованная при столкновении атомов или кластеров металла, будет продолжать расти. Термодинамический путь решения данной задачи заключается в рассмотрении термодинамического равновесия частицы в окружающей среде [3]. При этом используются равновесные параметры среды, а свойства частиц описываются свойствами объемного материала (поверхностное натяжение, химический потенциал и т.д.). Неоправданность указанных допущений для малых частиц, состоящих из нескольких атомов, стимулировала поиск новых методов.

Реалистичное моделирование роста частиц в среде можно осуществить с помощью молекулярной динамики. Однако в большинстве работ выполненных этим методом, например [4], не оцениваются вероятности результатов отдельных столкновений, а анализируется конечный результат – распределение частиц по размерам, появившихся к определенному моменту времени. Данный подход не позволяет выявить физические закономерности протекания процессов присоединения атомов к кластерам, которые позволили бы обобщить результаты моделирования на разные условия конденсации.

Непосредственное нахождение вероятности роста возможно, но оно сопряжено с необходимостью обрабатывать большое количество статистических данных, и поэтому было выполнено только для моделей одиночных кластеров. На примере аргона Брэди и др. исследовали вероятности образования комплексов A_{n+1} при столкновении комплекса A_n и мономера A [5]. В работе [6] с помощью молекулярной динамики рассматривались возможные механизмы димеризации атомов в пересыщенном паре железа.

¹ Работа поддержана программой президиума РАН.

² Коренченко Анна Евгеньевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

³ Воронцов Александр Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: sas@physics.susu.ac.ru

⁴ Гельчинский Борис Рафаилович – доктор физико-математических наук, профессор, Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург.
E-mail: brg@fmp.ru

Работы, посвященные вычислению вероятностей образования устойчивых частиц в неравновесных условиях из статистической обработки данных молекулярно-динамических расчетов, появились относительно недавно. В [1] проблема нахождения вероятностей образования устойчивой частицы была решена через рассмотрение эволюции частицы от столкновения до распада на отдельные кластеры и атомы, вероятность оценивалась сравнением начального и конечного состояния всех фрагментов столкнувшихся объектов. В [7] была приведена оценка пересыщения в рабочем объеме камеры. Динамика протекания процессов не исследована. В [8] для вычисления этих вероятностей был проанализирован рост одного кластера. В работе удалось сделать несколько предположений касательно поведения больших кластеров ($n > 50$), однако динамика образования малых кластеров не рассматривалась.

Между тем, наблюдение за движением частиц в парогазовой смеси, содержащей кластеры, методами молекулярной динамики показывает, что малые частицы, образованные при столкновениях, не успевают достичь равновесного состояния путем передачи излишней кинетической энергии атомам буферного газа. Более того, частицы чаще всего распадаются вскоре после столкновения, так ни разу и не столкнувшись с атомом инертного газа. Возможность роста в таких условиях реализуется следующим образом: если атомы и мелкие частицы в ходе развития процесса накопятся в достаточном количестве в малой области пространства, то излишняя тепловая энергия распределяется по внутренним колебательным степеням свободы. Переход в равновесное состояние путем столкновений с атомами аргона происходит медленно по сравнению с внутренней релаксацией. Если пересыщение таково, что столкновение на какой-то стадии запаздывает, то кластеры с необходимостью распадаются.

В настоящей работе предпринята попытка динамической оценки вероятности роста кластеров в пересыщенной неравновесной среде, а также проверка выполнения статистических закономерностей молекулярно-кинетической теории газов на основании статистического анализа результатов молекулярно-динамических расчетов.

Исследование формирования наночастиц из пересыщенных паров металла проводилось методом молекулярной динамики, реализованном в пакете для многопроцессорных вычислений LAMMPS [9]. Система состоит из атомов буферного газа (инертная атмосфера Ar) и атомов металла (Cu). Взаимодействие атомов меди описывается потенциалом погруженного атома (EAM-потенциалом), в котором учитываются парные и непарные взаимодействия. Данный EAM-потенциал приемлемо описывает конденсированную фазу меди, и уже успешно применялся для исследования конденсации пара металла [10]. Взаимодействия Ar–Ar и Cu–Ar описывались потенциалом типа Леннарда-Джонса с параметрами $e = 0,0123$ эВ, $a = 3,76$ Å.

Проверка выполнения молекулярно-кинетических соотношений в газовой смеси «пар металла – инертный газ»

В программах расчета динамики газа в камере как сплошной среды используются приближения молекулярно кинетической теории газов для вычисления коэффициентов переноса и числа столкновений [1], следовательно, возникает вопрос, насколько оправданы эти приближения для описания газовой смеси в неравновесном состоянии. С целью ответа на него в работе было проведено сравнение данных, полученных из молекулярно-динамических расчетов и результатов аналитических формул молекулярно-кинетической теории [11]. Помимо проверки возможности использования основных положений кинетической теории газов, в тестовой задаче можно отработать методы для статистического анализа данных МД расчетов.

На рис. 1 изображена зависимость количества столкновений между атомами Ar от их концентрации. График был получен из следующих данных: проведены и проанализированы молекулярно-динамические расчеты для кубической ячейки со стороной 174,08 нм, в которой находилось 5 000, 10 000, 15 000 и 20 000 атомов аргона. На графике приведена зависимость от плотности аргона количества столкновений Ar–Ar за одно и то же время. Как видно из рисунка, зависимость представляет собой параболу. На графике сплошной линией показана аппроксимация функцией $y = Cx^2$ и приведено значение параметра C . Аналогичные квадратичные зависимости получаются для столкновений Cu–Cu и Cu–Ar. Зная коэффициент C параболы, можно вычислить эффективное сечение столкновений по формуле [11]:

$$\sigma = \frac{CM^2}{\langle u \rangle \tau N_A^2 V},$$

где M – молярная масса аргона, $\langle u \rangle$ – средняя скорость теплового движения атома, τ – время, за которое производится подсчет числа столкновений для графика и V – объем ячейки. Полученное значение сечения рассеяния $6,5 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2$ хорошо согласуется с теоретическим $7,8 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2$, что подтверждает правомерность использования в модели соотношений кинетической теории газов [11]. Аналогичные квадратичные зависимости получаются для столкновений Cu–Cu и Cu–Ar. Как показали расчеты, дифференциальные сечения столкновений Cu–Cu для температур $T = 300 \text{ К}$ и $T = 1500 \text{ К}$ отличаются не более, чем на 10 %. Таким образом, доказана возможность применения кинетической теории газов для получения данных о количестве столкновений между атомами и кластерами в смеси.

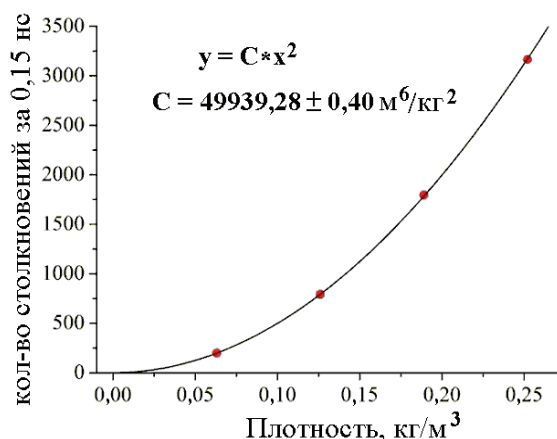


Рис. 1. Зависимость числа столкновений Ar–Ar за 0,15 нс от плотности атомов аргона в ячейке. Маркеры – данные моделирования

Определение времени жизни кластеров

Наблюдения за процессами образования кластеров методами молекулярной динамики позволяют утверждать, что образование устойчивых групп вместе движущихся атомов в сильно неравновесных условиях существенно отличается от равновесной картины. Предоставленные самим себе кластеры через некоторое время обязательно распадаются. Среднее время от столкновения до распада выбрано в модели в качестве количественного критерия «выживаемости». Этот критерий можно сформулировать так: если образованная в результате столкновения малая частица на протяжении указанного среднего времени столкнется с атомом металла или кластером, то полученная новая частица будет способна к дальнейшему росту (с тем же условием). Если частица не сталкивается на протяжении интервала большего, чем среднее время, то она распадается на составляющие.

Таким образом, зная значения средних времен жизни малых кластеров от столкновения до распада, можно определить вероятность «выживания» и дальнейшего роста кластера. Она численно равна вероятности столкновения за это время с другим атомом металла, которую можно рассчитать из кинетической теории газов по формуле [11]:

$$P = 1 - \exp(-\langle u \rangle t_c n \sigma), \quad (1)$$

где t_c – среднее время жизни, n – концентрация атомов металла, σ – эффективное сечение столкновений.

На гистограмме (рис. 2) по оси абсцисс отложено время, прошедшее от образования димера из двух мономеров до его распада, по оси ординат – число димеров с таким временем жизни. Расчет проведен для температуры 300 К. На рис. 2 видно, что среднее время жизни димера составляет около 0,6 пс. На гистограмме обнаружались пики, расположенные на одинаковом расстоянии друг от друга при $t > t_c$ (см. вставку на рис. 2). Происхождение этих пиков можно объяснить следующим образом: при образовании димера могут происходить вращение или колебания атомов друг относительно друга и отрыв происходит в момент наибольшего удаления атомов. Тогда каждый следующий пик соответствует 2, 3 и т.д. полным оборотам.

Оказалось, что среднее время жизни кластеров мало зависит от количества инертного газа в объеме и уменьшается с увеличением температуры. Зависимость среднего времени жизни димера от момента столкновения атомов до распада от температуры показана на рис. 3. Плавная сплошная линия на графике представляет собой экспоненциальную аппроксимацию функцией

$$y = y_0 + A \cdot \exp(R_0 T). \quad (2)$$

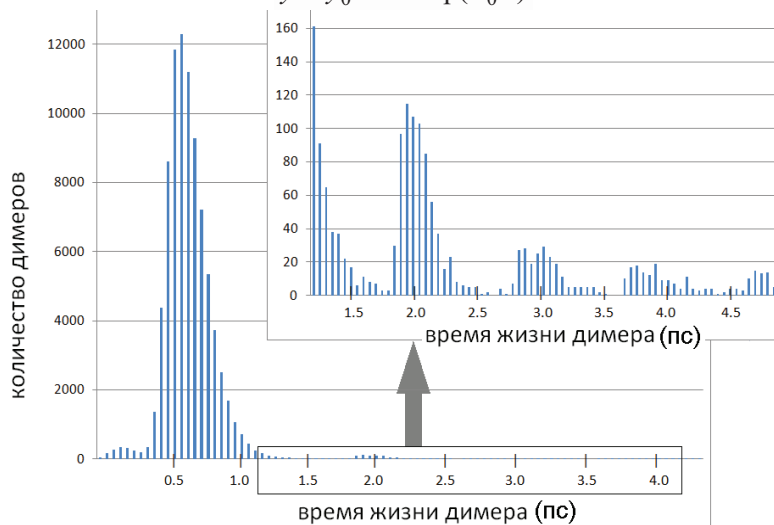


Рис. 2. Распределение димеров по времени их существования от момента столкновения до распада

Как видно из рис. 3, зависимость времени жизни димера от температуры хорошо описывается экспоненциальной функцией ($y_0 = 23,76$ пс, $A = 25,28$ пс, $R_0 = -1,53 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$). Такие же зависимости были получены для частиц, включающих до 15 атомов, их можно использовать для расчетов неизвестных параметров в уравнениях газодинамики.

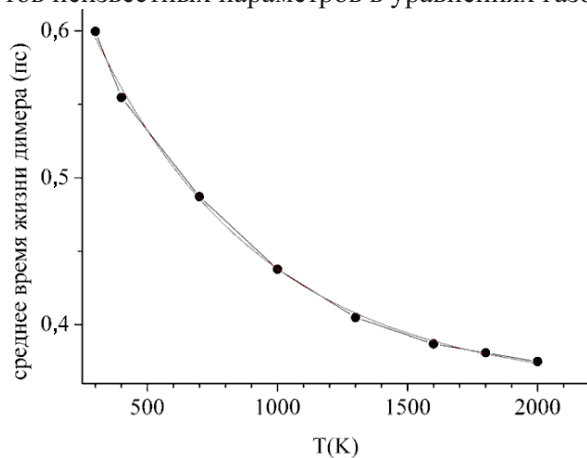


Рис. 3. Зависимость времени жизни димера от температуры среды

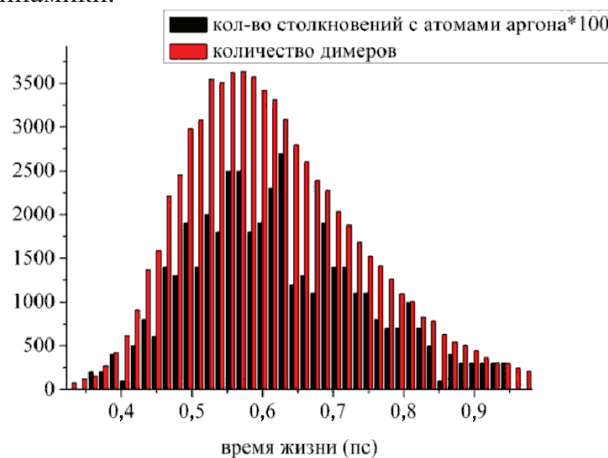


Рис. 4. Зависимость количества димеров с данным временем жизни

Столкновения с атомами инертного газа: эффективность отвода тепла от поверхности малых кластеров

Скрытая теплота должна отводиться от кластеров и рассеиваться в газовой среде путем столкновений с атомами инертного газа. На рис. 4 по оси абсцисс отложено время жизни димера от столкновения до распада, по оси ординат – количество димеров с этим временем (красным) и соответствующее полное количество столкновений с атомами аргона (черным), умноженное на 100. Расчет проделан для ячейки, содержащей 5 000 атомов Cu и 20 000 атомов Ag. Плотность меди составляла $0,3 \text{ кг/м}^3$. Как видно из рисунка, время жизни 0,6 пс наблюдалось приблизительно у 3 500 димеров, из них столкнулись за это время с аргоном около 25. Это означает, что только один димер из 140 успевает столкнуться с атомом аргона. С ростом количества атомов в кластере эта цифра растет из-за увеличения эффективного сечения столкновения, однако расчеты показали, что для кластеров с $n < 15$ число столкновений с аргоном за время существования в группе составляет в среднем 0,01 на кластер. Таким образом, для малых кластеров отвод теплоты столкновениями с атомами инертного газа неэффективен.

Заключение

По результатам исследования предлагается следующий алгоритм описания гомогенной нуклеации в неравновесных условиях:

1. Методами молекулярной динамики вычисляется среднее время жизни для малых кластеров ($n < 50$), т.е. время до распада кластера, не взаимодействующего с другими частицами. Как показали расчеты, это время не зависит от плотности паров металла, ни от плотности аргона, но зависит от температуры. Зависимость от температуры следует аппроксимировать функцией вида (2), что позволит вычислить среднее время для любой промежуточной температуры.

2. Количество столкновений N_{ij} частиц, содержащих i и j атомов металла, вычисляется из молекулярно-кинетической теории, зная концентрацию частиц и эффективное сечение столкновения.

3. Для образовавшихся кластеров рассчитывается вероятность P столкновения с атомами металла на временном интервале, равном среднему времени его жизни, используя (1). Тогда доля образованных кластеров, равная $P \cdot N_{ij}$, будет участвовать в дальнейшем росте, остальные распадутся на составляющие. На этом этапе исследования предполагается пренебречь столкновениями с другими малыми кластерами.

4. Отводом теплоты конденсации от поверхности малых кластеров на этом этапе предполагается пренебречь. Для оценки теплоотода от больших устойчивых кластеров следует провести дополнительное исследование.

Литература

1. Коренченко, А.Е. Математическое моделирование металлических наночастиц при конденсации паров расплавленного металла / А.Е. Коренченко, Б.Р. Гельчинский // Расплавы. – 2011. – № 1. – С. 60–67.

2. Моделирование процесса синтеза нанопорошков в плазменном реакторе струйного типа. I. Постановка задачи и проверка модели / А.В. Самохин, С.Н. Поляков, Н.В. Алексеев, Ю.В. Цветков // Физика и химия обработки металлов. – 2013. – № 6. – С. 40–46.

3. Becker, R. The kinetic treatment of nuclear formation in supersaturated vapors / R. Becker, W. Doring // Ann. Phys. – 1935. – Vol. 24. – P. 719.

4. Krasnochtchekov, P. Molecular dynamics simulations of cluster nucleation during inert gas condensation / P. Krasnochtchekov, R.S Averbach // The Journal of Chemical Physics. – 2005. – Vol. 122. – P. 044319.

5. Brady, J.W. Cluster dynamics: A classical trajectory study of $A + A_n \rightarrow A_{n+1}^*$ / J.W. Brady, J.D. Doll, D.L. Thompson // The Journal of Chemical Physics. – 1979. – Vol. 71, № 6. – P. 2467–2472.

6. Insepov, Z.A. The kinetics of condensation behind the shock front / Z.A. Insepov, E.M. Karatajev, G.E. Norman // Zeitschrift fur Physik D Atoms, Molecules and Clusters. – 1991. – Vol. 20. – P. 449.

7. Многомасштабное компьютерное моделирование процессов формирования металлических наночастиц / Б.Р. Гельчинский, А.Г. Воронцов, А.Е. Коренченко, Л.И. Леонтьев // Доклады Академии Наук. – 2011. – Т. 436, № 4. – С. 486–489.

8. Воронцов, А.Г. Кинетика и энергетическое состояние нанокластеров в начальной стадии процесса гомогенной конденсации при высоких степенях перенасыщения / А.Г. Воронцов, Б.Р. Гельчинский, А.Е. Коренченко // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 142, № 5. – С. 897–911.

9. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // Journal of Computational Physics. – 1995. – Vol. 117. – P. 1–19.

10. Kesala, E. Molecular dynamics simulation of pressure dependence of cluster growth in inert gas condensation / E. Kesala, A. Kuronen, K. Nordlund // Physical Review B. – 2007. – Vol. 75. – P. 174121.

11. Матвеев, А.Н. Молекулярная физика / А.Н. Матвеев. – М.: Оникс, 2006. – 360 с.

Поступила в редакцию 15 сентября 2014 г.

STATISTICAL ANALYSIS OF ATOMIC COLLISIONS DURING METAL VAPOUR NUCLEATION IN NOBEL GAS MEDIUM¹

A.E. Korenchenko², A.G. Vorontsov³, B.R. Gel'chinskii⁴

The dynamic evaluation of cluster growth probability in supersaturated non-equilibrium medium by statistical analysis of molecular-dynamics calculations was made. The molecular dynamics simulation of copper vapour condensation in argon medium was performed. The possibility of using kinetic molecular theory relations for non-equilibrium conditions was tested. The results show that the number of collisions and scattering cross section agree well with classical values for Ar–Ar, Ar–Cu and Cu–Cu pairs. It was found that the mean lifetime of small clusters ($n < 15$) does not depend on density of Cu and Ar but it depends on temperature. The research resulted in a new algorithm of cluster growth probability.

Keywords: metal clusters; nucleation; molecular dynamics.

References

1. Korenchenko A.E., Gelchinski B.R. Matematicheskoe modelirovanie protsessa obrazovaniya metallicheskih nanochastits pri kondensatsii parov rasplavlennogo metalla (Mathematical simulation of metal nanoparticles formation process at condensation of liquid metal vapors). *Rasplavi*. 2011. no. 1. pp. 60–67. (in Russ.).
2. Samokhin A.V., Polyakov S.N., Alekseev N.V., Tsvetkov Yu.V. *Fizika i khimiya obrabotki metallov*. 2013. no. 6. pp. 40–46. (in Russ.).
3. Becker R. Doring W. The kinetic treatment of nuclear formation in supersaturated vapors. *Ann. Phys.* 1935. Vol. 24. p. 719.
4. Krasnochtchekov P., Averbach R.S. Molecular dynamics simulations of cluster nucleation during inert gas condensation. *The Journal of Chemical Physics*. 2005. Vol. 122. p. 044319.
5. Brady J.W., Doll J.D., Thompson D.L. Cluster dynamics: A classical trajectory study of $A + A_n \rightarrow A_{n+1}$. *The Journal of Chemical Physics*. 1979. Vol. 71, no. 6. pp. 2467–2472. <http://dx.doi.org/10.1063/1.438653>
6. Insepov Z.A., Karatajev E.M., Norman G.E. The kinetics of condensation behind the shock front. *Zeitschrift fur Physik D Atoms, Molecules and Clusters*. 1991. Vol. 20, no. 1. pp. 449–451.
7. Gel'chinskii B.R., Vorontsov A.G., Korenchenko A.E., Leont'ev L.I. *Doklady Acad. Nauk*. 2011. Vol. 436, no. 4. pp. 486–489. (in Russ.).
8. Vorontsov A.G., Gel'Chinskii B.R., Korenchenko A.E. Kinetics and Energy States of Nano-clusters in the Initial Stage of Homogeneous Condensation at High Supersaturation Degrees. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2012. Vol. 115, no. 5. pp. 789–797. DOI: 10.1134/S1063776112100160
9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995. Vol. 117. pp. 1–19.
10. Kesala E. Kuronen A., Nordlund K. Molecular dynamics simulation of pressure dependence of cluster growth in inert gas condensation. *Physical Review B*. 2007. Vol. 75, no. 17. pp. 174121.
11. Matveev A.N. *Molekulyarnaya fizika* (Molecular Physics). Moscow: Onics Publ. 2006. 360 p. (in Russ.).

Received 15 September 2014

¹ Work is supported by program of presidium of RAS.

² Korenchenko Anna Evgenevna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Optic and Spectroscopy Department, South Ural State University.

E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

³ Vorontsov Alexander Gennadevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

E-mail: sas@physics.susu.ac.ru

⁴ Gel'chinskii Boris Rafailovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Institute of Metallurgy, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg.

E-mail: brg@fmp.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫНУЖДЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ ЖИДКОЙ КАПЛИ НА ВИБРИРУЮЩЕЙ ПОДЛОЖКЕ¹

А.Е. Коренченко², Д.С. Исаков³

Разработаны программы, позволяющие описать поведение свободной поверхности и контактной линии раздела лежащей капли. Изложены результаты численных исследований линейных вынужденных колебаний капли вязкой жидкости, лежащей на вибрирующей горизонтальной поверхности. Задача решена для случаев постоянного краевого угла и закрепленной трехфазной линии. Найдены резонансные частоты для трех первых основных мод колебаний в условиях осевой симметрии. Проведено сравнение результатов с найденными в литературе экспериментальными данными, хорошее согласие продемонстрировано.

Ключевые слова: поверхностное натяжение; межфазное натяжение; гидродинамика; лежащая капля; численное моделирование.

Введение

В последнее время повышенный исследовательский интерес наблюдается в отношении системы «капля на подложке». Эта система эффективна в медицинской диагностике, проводящейся по структуре следа, оставленного после испарения капли биологической жидкости (например, сыворотки крови) [1]. Выявлена принципиально новая возможность использования системы «микрокапля на подложке» в качестве микрореактора для реализации процесса самосборки наноструктур в процессе испарения на подложке коллоидной капли с наночастицами [2]. Остаются актуальными технологические приложения явления: в струйной печати, для охлаждения твердых поверхностей испарением помещенных на них капель, в технологиях нанесения жидких защитных покрытий. В сравнительно недавних работах изучается падение капли на жидкую пленку [3] и твердую поверхность [4], отскок капли воды от гидрофобной поверхности [5].

Кроме того, исследования вынужденных и свободных колебаний лежащей капли имеют фундаментальное значение, в частности потому, что включают два важных аспекта: поведение свободной поверхности жидкости и области трехфазного контакта. Так, в [6, 7] проведен численный анализ нелинейных вынужденных колебаний висящей капли и обнаружен гистерезис контактного угла. В [8] проведено аналитическое решение задачи о капле идеальной жидкости на вибрирующей подложке, когда условия на трехфазной границе описываются формулами Хокинга [9]. Скорость движения линии раздела в этом случае предполагается пропорциональной отклонению контактного угла от равновесного. В [8] показано, что такие условия вызывают появление трения на трехфазной границе и приводят к энергетическим потерям даже для колебаний идеальной жидкости. Капля на вибрирующей подложке подробно исследована экспериментально, например, в [10], в обоих крайних случаях постоянного краевого угла и закрепленной границы раздела. Авторы наблюдали формирование стоячих гравитационно-капиллярных волн, измерили их собственные частоты и зафиксировали положения узлов и пучностей. Результаты были интерпретированы в рамках теории одномерного осциллятора.

Однако за границами исследованной области остаются следующие вопросы: какова фазово-частотная характеристика объекта «капля–подложка», как на фазу колебаний влияют поверхностное натяжение, межфазное натяжение, плотность и вязкость жидкости? Кроме того, все известные авторам численные исследования колебаний капли на подложке проведены для невязких жидкостей в отсутствие силы тяжести и для случая постоянного радиуса пятна смачивания.

Цель настоящей работы состоит в разработке программного пакета, способного описать поведение капли вязкой жидкости на плоской горизонтальной поверхности, вибрирующей с малой амплитудой (случай линейных колебаний) в присутствии поля тяжести и с учетом эффектов, связанных с межфазным натяжением.

¹ Работа поддержана грантом РФФИ № 13-03-00918.

² Коренченко Анна Евгеньевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

³ Исаков Денис Сергеевич – заведующий лабораторией физических исследований, Южно-Уральский государственный университет.

1. Математическая модель

В работе рассмотрена лежащая капля, помещенная на плоскую горизонтальную подложку (рис. 1). Подложка осциллирует в направлении своей нормали с частотой ω и малой амплитудой A , так что ее положение в лабораторной СО описывается как $z_s(t) = A \sin \omega t$. Приняты следующие обозначения: ρ – плотность жидкости, ν – кинематическая вязкость, σ_{lg} , σ_{gs} , σ_{ls} – коэффициенты межфазного натяжения на границах жидкость-газ, газ-твердое, жидкость-твердое соответственно. Индексами l, g и s обозначены жидкая, газовая и твердая среды.

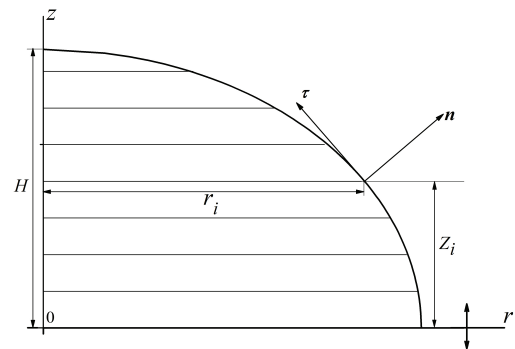


Рис. 1. Лежащая капля располагается на вибрирующей горизонтальной подложке. Показана половина осевого сечения капли

1.1. Приближения модели

Мы предполагаем верными следующие предположения о состоянии капли и течениях в ней:

- жидкость является ньютоновской и несжимаемой; практически это означает, что выполнено условие $\omega R \ll c$, где c – скорость звука в жидкости, R – радиус равновеликой сферической капли;
- влияние газа пренебрежимо мало;
- пренебрегаем испарением с поверхности капли, т.е. нет необходимости рассматривать смещение границы, связанное с потерей массы;
- форма капли имеет осевую симметрию, как и поля скорости и давления в ней;
- можно пренебречь тепловыделением внутри капли, так что жидкость можно считать изотермической.

1.2. Система уравнений сохранения и граничные условия

Введем систему координат с осями, в которой подложка неподвижна (см. рис. 1), $\vec{V} = \{V_r, V_z\}$ – вектор скорости, p есть превышение давления над гидростатическим P_0 , т.е. $p = P - P_0$, где P_0 – гидростатическое давление в равновесной капле, определяемое формулой $P_0(z) = -\sigma_{lg} \cdot K_0(z)$, $K_0(z)$ – кривизна равновесной капли.

Тогда уравнения сохранения вещества и импульса в неинерциальной системе отсчета запишутся в виде

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{V} + \frac{\vec{A}}{\omega^2} \sin \omega t, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0. \quad (2)$$

Условия на границе жидкость-газ S_{lg} запишутся как:

$$\vec{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \vec{n} \Big|_{S_{lg}} = \sigma_{lg} K, \quad (3)$$

$$\vec{n} \cdot \mathbf{T} \cdot \vec{\tau} \Big|_{S_{lg}} = 0, \quad (4)$$

здесь $T_{ij} = -P \delta_{ij} + \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ – тензор напряжений, $\vec{A} = \{0, 0, A\}$, $\eta = \nu \rho$ – динамическая вязкость. Уравнение (3) представляет собой формулу Лапласа, а (4) означает, что касательные напряжения отсутствуют. В (3) и (4) граница «жидкость-газ» предполагается бесконечно тонкой и невесомой.

Граничные условия на твердой подложке запишутся как:

$$V_r \Big|_{S_{ls}} = 0, \quad V_z \Big|_{S_{ls}} = 0. \quad (5)$$

Динамика поведения контактной линии описана в работе следующими способами

- 1) $r_1 = \text{const}$ – постоянный радиус пятна смачивания,
- 2) $\theta = \theta_0 = \text{const}$ – постоянный (равновесный) контактный угол.

Здесь r_1 – радиус пятна смачивания, θ_0 – равновесный контактный угол.

Уравнения приведены к безразмерной форме так, что все линейные размеры отнесены к радиусу R , скорости – к $u_0 = A\omega$, напряжения – к ρu_0^2 и время – к R/u_0 . Характерные значения параметров жидкости и материала подложки и безразмерных критериев задачи приведены в таблице 1 и обсуждены в секции 3.

1.3. Начальные условия

Предположим, что при $t < 0$ капля находилась в состоянии статического равновесия и в момент $t = 0$ подложка начала вибрировать:

$$t = 0: \quad p = 0, \quad S_{lg} = S_0, \quad \vec{V} = 0,$$

где S_0 – есть равновесная форма поверхности капли.

2. Численные методы

Численное решение проводилось методом конечных разностей, где использовалась неравномерная сетка. Сначала капля делилась на m равных по толщине горизонтальных слоев. Форма

Таблица 1

Значения параметров расчета и безразмерных характеристик

Радиус равновеликой сферической капли R , м	10^{-3}	Кинематическая вязкость ν , $\text{м}^2\text{с}^{-1}$	10^{-6}
Амплитуда колебаний подложки A , м	10^{-4}	Частота колебаний подложки ω , с^{-1}	400–3500
Плотность жидкости ρ , $\text{кг}\cdot\text{м}^{-3}$	1000	Число Рейнольдса $Re = \frac{u_0 L}{\nu}$	4 – 35
Поверхностное натяжение σ_{lg} , $\text{Н}\cdot\text{м}^{-1}$	0,073	Число Бонда $Bo = \frac{\rho g R^2}{\sigma_{lg}}$	0,14
Разность межфазных натяжений $\sigma_{ls} - \sigma_{gs}$, $\text{Н}\cdot\text{м}^{-1}$	0	Число Вебера $We = \frac{\rho u_0^2 R}{\sigma_{lg}}$	$10^{-4} - 10^{-2}$
Номер моды колебаний l			2, 3, 4

капли описывалась массивами $\{r_i, i = 1, m\}$ и $\{z_i, i = 2, m+1\}$ (рис. 1). Очевидно, что $r_{m+1} = 0$ и $z_1 = 0$. Затем производилось деление вертикальными линиями, при этом необходимо соблюдение условия, чтобы ширины прямоугольных ячеек разбиения не отличались более чем на 30 %, это необходимо для сходимости расчета. Уравнения (1)–(6) записывались в разностной форме. Полученная система алгебраических уравнений решалась методом Гаусса. Решение проводилось в духе метода расщепления и делилось на следующие стадии:

- давление и скорости в капле находятся решением (1)–(5). Форма капли считалась неизменной на этой стадии;
- определяется новая форма капли по формулам:

$$r_i^{t+\Delta t} = r_i^t + V_r|_{S_{lg}} \cdot \Delta t, \quad i = 2, m, \quad z_i^{t+\Delta t} = z_i^t + V_z|_{S_{lg}} \cdot \Delta t, \quad i = 2, m+1.$$

Радиус пятна смачивания определяется из условий (6) по формулам

1) $r_1 = \text{const}$;

2) $r_1^{t+\Delta t} = r_2^{t+\Delta t} + z_2 \cdot \text{ctg } \theta_0$;

- сетка перестраивается в соответствии с новой формой капли.

Расчеты проводились для различных пространственных разбиений и временных шагов, и было получено независящее от параметров сетки решение. Алгоритм был протестирован сравнением с известным аналитическим решением [11, 12]. Программы для расчета были написаны на языке Фортран и распараллелены с использованием библиотеки MPI. Вычисления проводились на суперкомпьютере ТОНАДО (ЮУрГУ).

3. Обсуждение результатов

Значения физических параметров, использованных при решении задачи, и соответствующих безразмерных критериев указаны в табл. 1. Как видно из таблицы, амплитуда колебаний подложки мала, так что ожидается только линейный отклик системы. Число Рейнольдса также мало, следовательно, в капле возникают лишь ламинарные течения. Значения числа Вебера указывают на то, что при колебаниях не будет разбрызгивания. Значения числа Бонда показывают, что и гравитационная, и поверхностная силы будут влиять на течения в капле и ее форму.

На рис. 2 приведены амплитудно-частотные характеристики вынужденных колебаний капли для случаев постоянного контактного угла и закрепленной линии контакта. Обе кривые представляют собой зависимости безразмерной амплитуды колебаний капли в вершине от частоты вибраций подложки. Как показало сравнение с результатами работы [13], абсциссы пиков на графиках совпадают с собственными частотами капли для соответствующих мод колебаний.

Резонансные частоты колебаний с постоянным контактным углом (I) получились меньшими, чем для колебаний с закрепленной линией контакта (II). В [10] такой сдвиг частот был исследован экспериментально, и для его описания была предложена формула $\omega_{II}/\omega_I = (2l-1)/(2l-2)$,

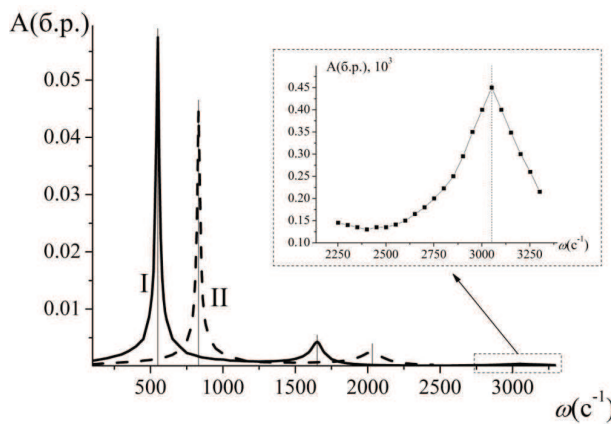


Рис. 2. Амплитудно-частотная характеристика вынужденных колебаний капли; I – постоянный контактный угол, II – закрепленная линия трехфазного контакта

Таблица 2
Отношение ω_{II}/ω_I для мод колебаний

Номер моды	$l = 2$	$l = 3$
Эксперимент [10]	1,5	1,25
Расчет [эта работа]	1,509	1,237

где ω_I и ω_{II} – есть резонансные частоты в случае свободно движущейся и закрепленной границы трехфазного контакта, l – номер моды. Номера мод колебаний капли совпадают с индексами полиномов Лежандра, которые были получены Рэлеем при решении задачи о колебаниях свободной капли в [12]. В табл. 2 представлены численные значения ω_{II}/ω_I . Как видно из таблицы, численные и экспериментальные значения близки между собой, что указывает на хорошую точность расчетной схемы.

На рис. 3 показаны мгновенные поля скоростей в осевом сечении капли, полученные при резонансе для трех мод с постоянным контактным углом. Длины векторов на рисунке масштабированы так, что относятся как 15:5:1. Как видно из рисунка, на поверхности капли существуют узлы – точки, находящиеся в покое при колебаниях (на рисунке отмечены жирным). Рассчитанные положения узлов качественно совпадают с экспериментальными, полученными в [10].

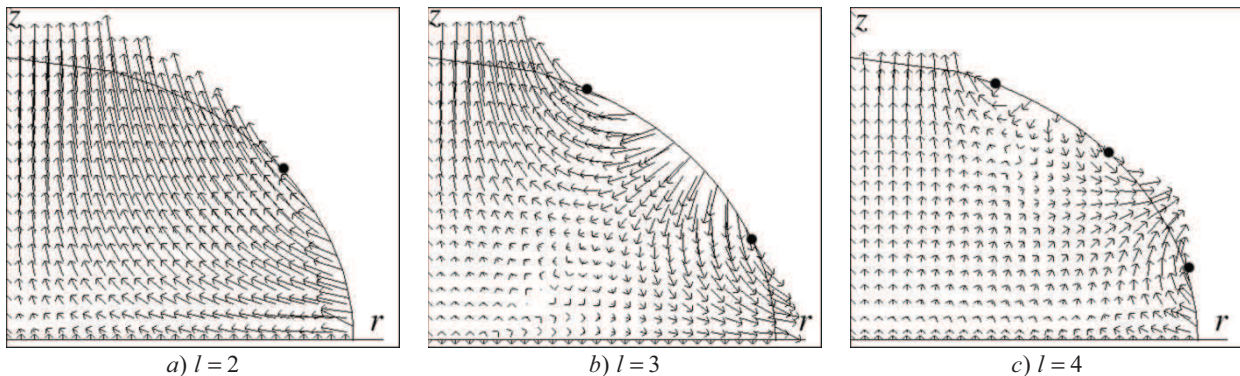


Рис. 3. Мгновенное поле скоростей для низших мод с постоянным контактным углом. Показана половина осевого сечения капли

4. Выводы

В работе проведено исследование поведения лежащей капли на вибрирующей подложке с учетом гравитации, вязкости и условий на трехфазной границе. Получены амплитудно-частотные характеристики колебаний вершины капли на подложке для режимов с постоянным контактным углом и закрепленной трехфазной границей. Резонансные частоты совпадают с собственными частотами колебаний капли для всех изученных мод колебаний. Наблюдалось формирование в капле стоячих капиллярных волн, расположение узлов и пучностей которых качественно совпадает с экспериментальными данными, найденными в литературе.

Проведенные расчеты и сравнения позволяют сделать вывод о возможности использования разработанных программ для количественного исследования характеристик системы «капля-подложка» при различных значениях физико-химических параметров жидкости и материала подложки.

Авторы благодарят проф. В.П. Бескачко за полезное обсуждения и внимание к работе.

Литература

1. Тарасевич, Ю.Ю. Механизмы и модели дегидратационной самоорганизации биологических жидкостей / Ю.Ю. Тарасевич // УФН. – 2004. – Т. 174, № 7. – С. 779–790.
2. Driving forces of the solute self-organization in an evaporating liquid microdroplet / L.V. Andreeva, A.V. Koshkin, P.V. Lebedev-Stepanov *et al.* // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2007. – Vol. 300, № 3 Spec. Iss. – P. 300–306.
3. Nikolopoulos, N.A. Normal impingement of a droplet onto a wall film: a numerical investigation / N.A. Nikolopoulos, A. Theodorakakos, G. Bergeles // Int. J. Heat Fluid Fl. – 2005. – Vol. 26. – Issue 1. – P. 119–132.
4. Fedorchenko, A.I. Effect of capillary and viscous forces on spreading of a liquid drop impinging on a solid surface / A.I. Fedorchenko, An-Bang Wang, Yi-Hua Wang // Phys. Fluids. – 2005. – Vol. 17. – Issue 9. – P. 093104.
5. Water spring: A model for bouncing drops / K. Okumura, F. Chevy, D. Richard *et al.* // Europhys. Lett. – 2003. – Vol. 62, no. 2. – P. 237–243.
6. Wilkes, E.D. Forced oscillations of pendant (sessile) drops / E.D. Wilkes, O.A. Basaran // Phys. Fluids. – 1997. – Vol. 9. – Issue 6. – P. 1512–1528.
7. Wilkes, E.D. Hysteretic response of supported drops during forced oscillations / E.D. Wilkes, O.A. Basaran // J. Fluid Mech. – 1999. – Vol. 393. – P. 333–356.
8. Lyubimov, D.V. Behavior of a drop on an oscillating solid plate / D.V. Lyubimov, T.P. Lyubimova, S.V. Shklyaev // Phys. Fluids. – 2006. – Vol. 18. – Issue 1. – P. 012101.
9. Hocking, L.M. The damping of capillary-gravity waves at a rigid boundary / L.M. Hocking // J. Fluid Mech. – 1987. – Vol. 179. – P. 253–266.
10. Noblin, X. Vibrated sessile drops: transition between pinned and mobile contact line oscillations / X. Noblin, A. Buguin, F. Brochard-Wyart // Eur. Phys. J. E – 2004. – Vol. 14. – Issue 4. – P. 395–404.
11. Korenchenko, A.E. Oscillations of a sessile droplet in open air / A.E. Korenchenko, V.P. Beskachko // Phys. Fluids. – 2013. – Vol. 25. – Issue 11. – P. 112106.
12. Rayleigh, Lord On the capillary phenomenon of jets / Lord Rayleigh // Proceedings of the Royal Society of London. – 1879. – Vol. 29. – P. 71–79.
13. Коренченко, А.Е. Численное исследование свободных колебаний лежащей капли / А.Е. Коренченко, А.Ж. Илимбаева, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 72–76.

Поступила в редакцию 30 августа 2014 г.

NUMERICAL SIMULATION OF A VIBRATING SESSILE DROPLET

A.E. Korenchenko¹, D.S. Isakov²

The software enabling the description of behavior of a free surface and a contact line of a sessile droplet was developed. Linear forced oscillations of a viscous liquid droplet placed on a horizontal vibrating substrate were investigated numerically. The problem was solved: (1) for the pinned contact line; (2) for cases with constant contact angle. Resonant frequencies for the three first basic modes were found. The numerical results showed good agreement with the ones found in the literature.

Keywords: surface tension; interphase tension; hydrodynamics; sessile droplet; computer simulation.

References

1. Tarasevich Yu.Yu. Mechanisms and models of the dehydration self-organization in biological fluids. *Physics-Uspeski*. 2004. Vol. 47, no. 7. pp. 717–728. DOI: 10.1070/PU2004v047n07ABEH001758
2. Andreeva L.V., Koshkin A.V., Lebedev-Stepanov P.V., Petrov A.N., Alfimov M.V. Driving forces of the solute self-organization in an evaporating liquid microdroplet. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2007. Vol. 300, no. 3. Spec. Iss. pp. 300–306.
3. Nikolopoulos N.A., Theodorakakos A., Bergeles G. Normal impingement of a droplet onto a wall film: a numerical investigation. *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2005. Vol. 26. Issue 1. pp. 119–132. DOI: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2004.06.002
4. Fedorchenko A.I., Wang An-Bang, Wang Yi-Hua Effect of capillary and viscous forces on spreading of a liquid drop impinging on a solid surface. *Phys. Fluids*. 2005. Vol. 17. Issue 9. pp. 093104. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2038367>
5. Okumura K., Chevy F., Richard D., Quéré D., Clanet C. Water spring: A model for bouncing drops. *Europhys. Lett*. 2003. Vol. 62, no. 2. pp. 237–243. <http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2003-00340-1>
6. Wilkes E.D., Basaran O.A. Forced oscillations of pendant (sessile) drops. *Phys. Fluids*. 1997. Vol. 9. Issue 6. pp. 1512–1528. <http://dx.doi.org/10.1063/1.869276>
7. Wilkes E.D., Basaran O.A. Hysteretic response of supported drops during forced oscillations. *J. Fluid Mech*. 1999. Vol. 393. pp. 333–356. DOI: <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112099005819>
8. Lyubimov D.V., Lyubimova T.P., Shklyaev S.V. Behavior of a drop on an oscillating solid plate. *Phys. Fluids*. 2006. Vol. 18. Issue 1. pp. 012101. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2137358>
9. Hocking L.M. The damping of capillary-gravity waves at a rigid boundary. *J. Fluid Mech*. 1987. Vol. 179. pp. 253–266. DOI: <http://dx.doi.org/10.1017/S0022112087001514>
10. Noblin X., Buguin A., Brochard-Wyart F. Vibrated sessile drops: transition between pinned and mobile contact line oscillations. *Eur. Phys. J. E*. 2004. Vol. 14. Issue 4. pp. 395–404. DOI 10.1140/epje/i2004-10021-5
11. Korenchenko A.E., Beskachko V.P. Oscillations of a sessile droplet in open air. *Phys. Fluids*. 2013. Vol. 25. Issue 11. p. 112106. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4829025>
12. Rayleigh, Lord On the capillary phenomenon of jets. *Proceedings of the Royal Society of London*. 1879. Vol. 29. pp. 71–79.
13. Korenchenko A.E., Ilimbaeva A.G., Beskachko V.P. Chislennoe modelirovanie svobodnykh kolebaniy lezhashchey kapli. (The numerical simulation of sessile drop free oscillations). *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2011. Issue 4. no. 10(227). pp. 72–76. (in Russ.).

Received 30 August 2014

¹ Korenchenko Anna Evgenievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Optics and Spectroscopy Department, South Ural State University.

E-mail: korenchenko@physics.susu.ac.ru

² Isakov Denis Sergeevich is Head of the Laboratory of Physics Research, South Ural State University.

ГЕНЕРАЦИЯ НЕОДНОРОДНО-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВОЛОКОННО-ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫМ МЕТОДОМ¹

Н.Д. Кундикова², И.И. Попков³

Экспериментально доказана возможность генерации излучения с управляемым аксиально несимметричным распределением поляризации в поперечном сечении.

Ключевые слова: спин; орбитальный момент; оптическое волокно; топологический заряд; неоднородно-поляризованное излучение.

Введение

Активный интерес исследователей к пучкам с неоднородным аксиально симметричным распределением линейной поляризации стал проявляться после работ [1, 2], в которых было теоретически показано, что сфокусированные пучки с радиальным распределением поляризации имеют минимальный размер фокального пятна. Дальнейшие работы показали, что изменение распределения состояния поляризации в поперечном сечении световых пучков позволяет изменять размер перетяжки [1, 2] и форму фокального пятна [3].

Однако свойства пучков с аксиально несимметричным распределением поляризации по сечению пучка не рассматривалось.

Целью данной работы является экспериментальная реализация метода получения лазерного пучка с управляемым аксиально несимметричным распределением поляризации в поперечном сечении пучка.

Теоретическое обоснование метода генерации неоднородно-поляризованного излучения

Для генерации неоднородно-поляризованного в поперечном сечении пучка в настоящей работе используется метод интерференционного сложения полей.

При интерференционном сложении двух пучков с одинаковой интенсивностью, разными по знаку топологическими зарядами и ортогональной циркулярной поляризацией итоговое поле будет аксиально симметрично [4]. При добавлении третьего пучка в схему интерференционного сложения будет наблюдаться более сложная картина распределения поляризации в поперечном сечении пучка. В этом случае результирующий пучок в поперечном сечении становится асимметрично неоднородно поляризованным.

Пусть комплексные амплитуды интерферирующих полей описываются выражениями:

$$E_1 = E_{01}(e_x + ie_y)e^{-i\varphi}e^{i\Gamma}, \quad E_2 = E_{02}(e_x - ie_y)e^{i\varphi}, \quad E_3 = E_{02}(e_x + ie_y)e^{i\varphi}.$$

Здесь e_x, e_y – единичные вектора, составляющие ортонормированный базис, Γ – разность фаз одного пучка относительно двух других, E_{01}, E_{02}, E_{03} – амплитуды пучков, множитель $\exp(i\varphi)$ указывает на присутствие топологического заряда со знаком $l = \pm 1$. Для описания состояния поляризации результирующего поля достаточно знать значение комплексного параметра χ :

$$\chi = \frac{2E_{01}E_{02} \sin(2\varphi - \Gamma) + i \left[2E_{01}E_{03} \cos(2\varphi - \Gamma) + (E_{03}^2 - E_{02}^2 + E_{01}^2) \right]}{E_{01}^2 + (E_{02} + E_{03})^2 + 2E_{01}(E_{02} + E_{03}) \cos(2\varphi - \Gamma)}. \quad (1)$$

Величина χ позволяет найти угол наклона большей оси эллипса поляризации θ и угол эллиптичности поляризации ξ (эллиптичность $e = \tan \xi$) [5].

¹ Исследование выполнено в рамках работы по госзаданию Минобрнауки РФ 888 по теме №2014102-ГЗ.

² Кундикова Наталья Дмитриевна – доктор физико-математических наук, профессор, декан физического факультета, Южно-Уральский государственный университет, заведующий лабораторией нелинейной оптики, Институт электрофизики УрО РАН.

E-mail: kundikovand@susu.ac.ru

³ Попков Иван Игоревич – кандидат физико-математических наук, ассистент, кафедра оптики и спектроскопии, Южно-Уральский государственный университет, младший научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики, Институт электрофизики УрО РАН.

E-mail: popkovii@susu.ac.ru

Из выражения (1) следует, что поляризационные свойства полученного пучка будут зависеть от четырех параметров – E_{01}, E_{02}, E_{03} и Γ , которые могут изменяться независимо друг от друга.

Экспериментальная реализация метода генерации неоднородно-поляризованного излучения

Для получения неоднородно поляризованного пучка методом интерференционного сложения трех световых полей использовалась экспериментальная установка, схема которой представлена на рис. 1.

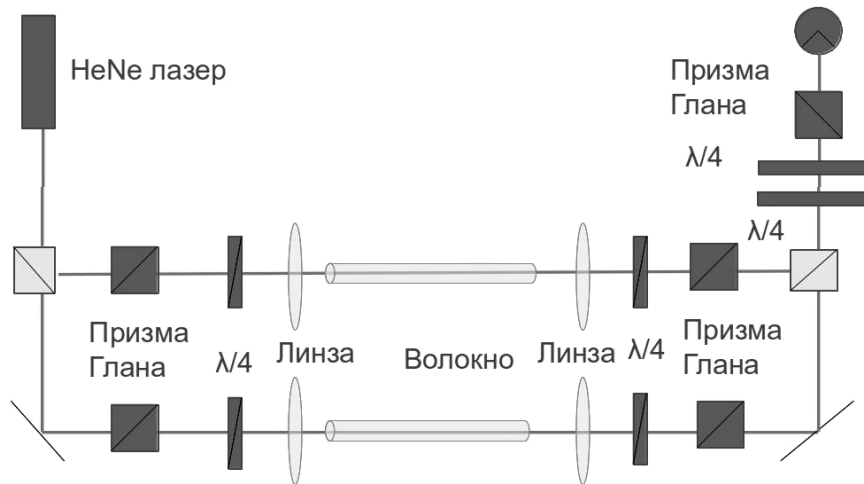


Рис. 1. Схема установки для получения неоднородно поляризованного излучения

Пучок с топологическим зарядом $l = \pm 1$ генерировался после прохождения циркулярно поляризованного пучка Гаусса через оптическое волокно методом, описанном в работе [4]. Использовалось маломодовое оптическое волокно со ступенчатым профилем показателя преломления, радиусом сердцевины волокна $r = 4,5$ мкм, разница между показателем преломления сердцевины и оболочки $\Delta n = 1,7 \cdot 10^{-3}$.

Линейно поляризованное излучение He-Ne лазера с длиной волны $\lambda = 632,8$ нм с помощью делительных кубиков было разделено на два пучка, которые пропускались через поляризаторы (призмы Глана). Призмы Глана были ориентированы таким образом, чтобы в первом и втором плече обеспечить ортогональность линейных поляризаций. Каждый из пучков Гаусса проходил через составную фазовую пластинку $\lambda/4$. Азимут падения линейной поляризации был настроен таким образом, чтобы при прохождении составной четвертьволновой пластинки излучение приобретало циркулярную поляризацию, для первого пучка $\sigma = +1$, а для второго $\sigma = -1$. Далее излучение фокусировалось микрообъективом с фокусным расстоянием $f = 1,5$ мм на торец оптического волокна. Выходной микрообъектив имел фокусное расстояние $f = 6$ мм и позволял получить коллимированное излучение, которое затем пропускалось через поляризационную систему (циркулярный анализатор), состоящую из составной четвертьволновой пластинки и поляризатора. Данная поляризационная система выделяла излучение с «чужой» поляризацией, содержащее единичную дислокацию и позволяла полностью гасить излучение со «своей» поляризацией. После прохождения поляризационной системы излучение, вышедшее из волокна, становилось линейно поляризованным и имело единичный топологический заряд.

Таким образом, были получены два пучка с единичным топологическим зарядом противоположного знака и ортогональной линейной поляризацией. Для получения неоднородно-поляризованного излучения оба пучка пропускались через составную пластинку $\lambda/4$. Так как линейные поляризации первого и второго пучка были ортогональными, то после прохождения пластинки $\lambda/4$ пучки приобретали циркулярную поляризацию разных знаков. При интерференционном сложении таких пучков результирующий пучок должен иметь осесимметричную неоднородно распределенную поляризацию. Для получения асимметричной неоднородной поляризации изменялся угол α ориентации циркулярного анализатора во втором плече, что позволяло

получать эллиптически поляризованный пучок, который является суперпозицией двух циркулярных ортогонально поляризованных пучков различной интенсивности. Изменение угла α позволяло изменять относительные интенсивности этих пучков. Разность фаз между первым пучком и двумя пучками, полученными во втором плече интерферометра, задавалась изменением оптической длины пути первого пучка.

Распределение интенсивности, полученное в результате интерференции трех циркулярно поляризованных пучков различной интенсивности, представлено на рис. 2. На распределение интенсивности нанесены рассчитанные эллипсы поляризации (рис. 2).

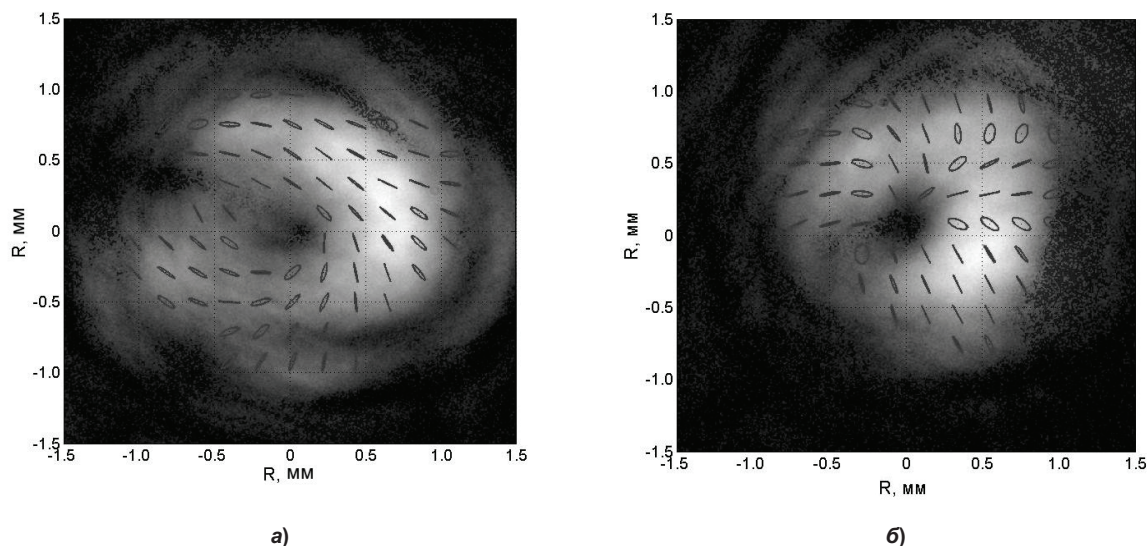


Рис. 2. Распределение интенсивности и поляризации в поперечном сечении исследуемого лазерного пучка:
а) $\Gamma = 6\pi/5, E_1 = 1, E_2 = 1, E_3 = 0$; **б)** $\Gamma = 0, E_1 = 1, E_2 = 0,8, E_3 = 0,2$

Таким образом, экспериментально продемонстрирована возможность создания лазерных пучков с управляемым аксиально несимметричным распределением поляризации в поперечном сечении.

Литература

1. Focusing light into a tighter spot / S. Quabis, R. Dorn, M. Eberler *et al.* // Opt. Commun. – 2000. – Vol. 179. – P. 1–7.
2. Kozawa, Y. Sharper focal spot formed by higher-order radially polarized laser beams / Y. Kozawa, S. Sato // JOSA A. – 2007. – Vol. 24, № 6. – P. 1793–1798.
3. Zhan, Q. Focus shaping using cylindrical vector beams / Q. Zhan, J. Leger // Opt. Express. – 2002. – Vol. 7, № 10. – P. 324–331.
4. Волоконно-интерференционный метод получения неоднородно поляризованного пучка / М.В. Большаков, А.В. Гусева, Н.Д. Кундикова, И.И. Попков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 128–132.
5. Азам, Р. Эллипсометрия и поляризованный свет / Р. Азам, Н. Башара. – М.: Мир, 1981. – 583 с.

Поступила в редакцию 15 октября 2014 г.

GENERATION OF INHOMOGENEOUSLY POLARIZED RADIATION BY FIBER INTERFERENCE METHOD

N.D. Kundikova¹, I.I. Popkov²

Experimentally implemented method for generating radiation with controlled distribution of the polarization beam cross section. The method is based on the addition of the interference of three circularly polarized laser beams of varying intensity with unit topological charges. Generation method of inhomogeneously polarized radiation allows to control the distribution of polarization of the beam cross section. Basic advantage of this method is the ability to generate an axially asymmetric polarization distribution in the cross section of the beam.

Keywords: spin; orbital momentum; optical fiber; topological charge; inhomogeneously polarized radiation.

References

1. Quabis S., Dorn R., Eberler M., Gleckl O., Leuchs G. Focusing light into a tighter spot. *Opt. Commun.* 2000. Vol. 179. pp. 1–7.
2. Kozawa Y., Sato S. Sharper focal spot formed by higher-order radially polarized laser beams. *JOSA A.* 2007. Vol. 24, no. 6. pp. 1793–1798.
3. Zhan Q., Leger J. Focus shaping using cylindrical vector beams. *Opt. Express.* 2002. Vol. 7, no. 10. pp. 324–331.
4. Bolshakov M.V., Guseva A.V., Kundikova N.D., Popkov I.I. Volokonno-interferentsionnyy metod polucheniya neodnorodno polyarizovannogo puchka (Fiber and interferential method of obtaining non-homogeneous polarized beam). *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2013. Vol. 5, no. 2. pp. 128–132. (in Russ.).
5. Azzam R., Bashara N.M. *Ellipsometriya i polyarizovanny svet* (Ellipsometry and Polarized Light). Moscow, Mir Publ., 1981. 583 p. (in Russ.). [Azzam R.M.A., Bashara N.M. *Ellipsometry and Polarized Light*. Amsterdam, North-Holland, 1977. 653 p.]

Received 15 October 2014

¹ Kundikova Nataliya Dmitrievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor; Dean of Physics Faculty, South Ural State University, Joint Nonlinear Optics Laboratory, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the RAS.

E-mail: kundikovand@susu.ac.ru

² Popkov Ivan Igorevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant, Department of Optics and Spectroscopy, South Ural State University, Junior Research Fellow, Nonlinear Optics Laboratory, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the RAS.

E-mail: popkov.iv@gmail.com

ВКЛАД РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В УШИРЕНИЕ КРИВОЙ КЛАССИЧЕСКОГО ЦИКЛОТРОННОГО РЕЗОНАНСА В КВАЗИДВУХ - И ТРЕХМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Т.Т. Муратов¹

Получены асимптотические формулы для уширения кривой поглощения классического циклотронного резонанса (ЦР) в условиях резонансного рассеяния электронов на атомах примеси. Расчеты проведены с учетом распределения Максвелла. Оценки показывают, что возможный резонансный уровень ($\sim 0,06$ мэВ) в квазидвумерных полупроводниках на порядок и два меньше чем в объемных (порядка мэВ). Это указывает на то, что область преобладания резонансного рассеяния в квазидвумерных полупроводниках менее 1 К. Зафиксировано температурное «плато» $5 \div 12$ К в 2D спектре поглощения, соответствующее «области непрозрачности». Обсуждаются пределы применимости полученных результатов.

Ключевые слова: циклотронный резонанс; уширение; резонансное рассеяние; асимптотические формулы.

Введение

При очень низких ($T < 10$ К) температурах в полупроводниках часто реализуются условия, когда основным механизмом рассеяния свободных электронов (дырок) становится рассеяние на нейтральных атомах примеси. Мелкая примесь имеет целый спектр возбужденных s -состояний и если один отщепленный s -уровень примыкает к дну зоны проводимости E_C , то возможно резонансное рассеяние носителей тока [1]. В принципе, это позволяет заменить атом мелкой примеси некоторым модельным потенциалом. Для объемных полупроводников таким модельным потенциалом может быть трехмерная прямоугольная потенциальная яма, для квазидвумерных – двумерная прямоугольная яма.

S -резонансный уровень, локализованный вблизи E_C , оказывает существенное влияние на процессы переноса энергии и заряда носителями при различных внешних условиях [2], например, при наличии слабого магнитного поля электронная проводимость невырожденного полупроводника достигает максимума ($T \geq 1$ К, $H \leq 200$ Э), причем слабое H -поле учитывается своеобразно – как приращение радиуса резонансного центра [3]. Подход, развитый в работе [3], в принципе позволяет исследовать влияние резонансного рассеяния носителей тока на электронные явления переноса и при условиях классического предела циклотронного резонанса (ЦР). Однако в работах [2, 3] s -резонансный уровень строго фиксирован и имеет статичный характер, что затрудняет зондирование произвольных примесных глубин в условиях классического ЦР. Эта трудность устранена в работе [4], в которой получены формулы для полуширины кривой поглощения ЦР, причем они выражены через длину рассеяния и, следовательно, справедливы для произвольного потенциала примеси конечного радиуса действия. Формулы для времени релаксации также выражены через длины 2D- и 3D рассеяния.

В невырожденных полупроводниках длина волны электрона $\lambda \propto 1/\sqrt{T}$ и при сверхнизких температурах существенны квантово-статистические поправки. В области температур, соответствующих резонансным глубинам примесного потенциала, можно ограничиться квазиклассическим рассмотрением (см. прим. 1), но и здесь следует учесть статистику. Дело в том, что время релаксации τ есть среднее время свободного пробега, т.е. время между двумя актами рассеяния. Оно определяется длиной свободного пробега и полной скоростью электрона, но не скоростью дрейфа в магнитном поле. Полная скорость зависит от E – кинетической энергии электрона. Тем самым $\tau = \tau(E)$. Эта зависимость усложняется в том случае, когда длина свободного пробега

¹ Муратов Темур Ташкабаевич – соискатель, кафедра методики преподавания физики, Ташкентский государственный педагогический университет имени Низами, Узбекистан.

E-mail: tgpu_info@edu.uz, temur-muratov@yandex.ru

также зависит от E . Поэтому для нахождения $\delta\omega = |\omega - \omega_C|$ – уширения линии ЦР, как и множества других параметров, необходимо усреднять как $\tau(E)$, так и $1/\tau(E)$, а также и другие величины, с учетом функции распределения электронов по энергии. Однако в работе [4] время релаксации, а вслед за этим и полуширина линии поглощения $\delta\omega_{Nd}(E) = 1/\tau_{2d,3d}(E)$ лишь оцениваются характерным параметром $\tilde{k} = \sqrt{2m^*k_B T}/\hbar$ (m^* – эффективная масса электрона, k_B – константа Больцмана). Такой подход, на наш взгляд, является не вполне корректным и требует проведения более детального расчета.

Как следует из классической статистики, нет необходимости, чтобы энергия электрона была близка к резонансному уровню модельного потенциала. Игнорирование этого факта [4] может привести к неточным выводам. Вывод о том, что $\delta\omega_{3d} \propto T^{-1/2}$ [4], сомнителен и требует тщательного анализа. Замена волнового числа тепловым параметром не позволяет учесть более быстрые и более медленные электроны, а ведь именно они формируют хвост распределения Максвелла в области очень низких и высоких температур. Представление о невзаимодействующих электронах также крайне упрощенное [4]. При таком подходе теряет смысл перераспределение энергии между степенями свободы при различных механизмах рассеяния носителей.

В предлагаемой работе производится расчет полуширины кривой поглощения при резонансном рассеянии электронов на нейтральных примесях в квазидвух- и трехмерных полупроводниках путем усреднения с максвелловским весом. Уточняются пределы применимости полученных формул. Частота внешнего электрического поля весьма близка к циклотронной частоте, так что влияние нейтральных примесей, ионов примеси и акустических фононов сводится, как правило, к нарушению (размытию) спектра поглощения, т.е. как если бы не было заряженных и нейтральных примесей, фононов и т.д., то и не было бы уширения. Ясно, что в рамках вычислений, проводимых с использованием формулы Эргинсо [5], нельзя получить формулу для уширения кривой классического ЦР ($\tau = \text{const}$). Анализируются особенности в спектре поглощения.

1. Расчет асимптотики уширения линии циклотронного резонанса

Циклотронный резонанс имеет простой физический смысл. Электрон в H -поле движется по окружности с циклотронной частотой ω_C . Если в плоскости этой окружности включить электрическое поле, причем изменять его направление так, чтобы оно совпадало с направлением движения электрона, то электрон все время будет забирать энергию от поля. В этом случае, как и при движении в постоянном E -поле, электрон ускоряется до тех пор, пока не столкнется с атомом примеси. Поэтому в обоих случаях частота соударения электрона с атомом порядка $1/\tau$. Если $\omega \neq \omega_C$, т.е. оптимальные условия резонанса с полем не выполняются, проводимость значительно ниже. При точном резонансе с полем проводимость достигает статического режима. Именно в этом режиме существенно влияние резонансного рассеяния носителей на уширение линии ЦР. Электроны, выбывшие из резонанса с E -полем, уже резонируют на примесных атомах. При этом предполагается, что мощности потенциала мелкой примеси недостаточно для образования связанного состояния, причем тепловое размытие примесных уровней на порядок и два меньше их кулоновских расстояний.

Рассмотрим q2D- и 3D-полупроводник, находящийся в скрещенных однородном магнитном H и резонансном электрическом $E(t) = E_0 \exp(i\omega t)$ полях. Пусть невырожденный газ слабозадействующих между собой электронов рассеивается на хаотически расположенных нейтральных центрах в условиях классического ЦР. Концентрацию примесей считаем малой, т.е. одновременное рассеяние носителей на двух и более центрах не учитываем, что соответствует обычному газовому приближению [6]. Амплитуды и сечения резонансного двух- и трехмерного рассеяния медленного электрона ($kr \ll 1$) определяются стандартно [7, с. 638–639]:

$$f_{2d}^{m=0}(k) = -\sqrt{\frac{\pi}{2k}} \frac{1}{\ln\left(\frac{2i}{\gamma k a_{2d}}\right)}, \quad \sigma_{2d}(k) = 2\pi \left| f_{2d}^{m=0}(k) \right|^2 = \frac{\pi^2}{k} \frac{1}{\frac{\pi^2}{4} + \ln^2 \frac{2}{\gamma k a_{2d}}}, \quad (1)$$

$$f_{3d}^{l=0}(k) = -\frac{1}{ik + 1/a_{3d}}, \quad \sigma_{3d}(k) = 4\pi \left| f_{3d}^{l=0}(k) \right|^2 = \frac{4\pi}{k^2 + (1/a_{3d})^2}. \quad (2)$$

Здесь $\gamma = e^C$, C – постоянная Эйлера, $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$, a_{2d} и a_{3d} – длины двух и трехмерного рассеяния. В области температур, соответствующих резонансным глубинам: $a_{2d}^{\text{res}} = r_0 \times \exp\left(-\frac{2U_0}{\Delta U}\right)$, $a_{3d}^{\text{res}} = r_0 \frac{2U_0}{\Delta U}$ (это и есть размеры волновых функции резонансных уровней)

[4], где r_0 – радиус 2- и 3D модельного потенциала примеси; $U_0 = \hbar^2/(2m^*r_0^2)$, $\Delta U = U - U_{\text{res}}$ – расстройка потенциала от U_{res} , U – глубина трехмерной (двумерной) ямы.

Если $\Delta U > 0$ рассеяние происходит на резонансном уровне, при $\Delta U < 0$ – на виртуальном уровне. Тогда на основе формул (1) и (2) для полуширины линии поглощения $\delta\omega = |\omega - \omega_C| \ll \omega_C$ имеем

$$\begin{aligned} \langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle &= \left\langle \frac{1}{\tau_{3d}(k)} \right\rangle = \frac{n_i^{3d} \hbar}{m^*} \langle k \sigma_{3d}^{\text{tr}}(k) \rangle = \frac{n_i^{3d} \hbar}{m^*} \cdot \left\langle \frac{4\pi \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar}}{\left(\frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{\Delta U}{r_0 2U_0}\right)^2} \right\rangle_E \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left[\varepsilon_{3d} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(\Delta U)^2}{4U_0} \right] = \frac{2\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{(m^*)^{3/2}} \left\langle \frac{\sqrt{E}}{E + \varepsilon_{3d}} \right\rangle_E \Rightarrow \\ &= \frac{2\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{(m^*)^{3/2}} \frac{\int_0^\infty E \frac{\sqrt{E}}{E + \varepsilon_{3d}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \sqrt{E} dE}{\int_0^\infty E \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \sqrt{E} dE} = \frac{2\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{(m^*)^{3/2}} \frac{4(k_B T)^2}{3\sqrt{\pi}(k_B T)^{5/2}} \times \\ &\times \int_0^\infty \frac{x^2 \exp(-x)}{x + \varepsilon_0} dx = \frac{8\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{3(m^*)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{k_B T}} \left[1 - \varepsilon_0 L(\varepsilon_0) \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

Здесь n_i^{3d} – концентрация атомов примеси, измерения показывают что $n_i^{3d} \leq 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [2], $\varepsilon_0 = \varepsilon_{3d}/k_B T$, ε_{3d} – эффективный резонансный уровень.

$$L(\varepsilon_0) = 1 - \varepsilon_0 \exp(\varepsilon_0) \left[-\text{Ei}(-\varepsilon_0) \right], \quad \text{Ei}(\varepsilon_0) = - \int_{\varepsilon_0}^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx.$$

Пользуясь разложением в ряд и асимптотическим выражением для $\text{Ei}(-\varepsilon_0)$ можно показать, что [1]

$$L(\varepsilon_0) \approx 1/\varepsilon_0 - 2/\varepsilon_0^2 + \dots \quad (\varepsilon_0 \gg 1), \quad (4)$$

$$L(\varepsilon_0) \approx 1 + \varepsilon_0 \ln \varepsilon_0 + \dots \quad (\varepsilon_0 \gg 1). \quad (5)$$

Подставляя (4) и (5) в точную формулу (3) получаем предельные формулы:

$$\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle \approx \frac{8\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{3(m^*)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{k_B T}} \frac{2k_B T}{\varepsilon_{3d}} \propto \sqrt{T}, \quad (\varepsilon_{3d} \gg k_B T); \quad (6)$$

$$\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle \approx \frac{8\sqrt{2}\pi \hbar^2 n_i^{3d}}{3(m^*)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{k_B T}} \propto 1/\sqrt{T}, \quad (\varepsilon_{3d} \gg k_B T). \quad (7)$$

Как и следовало ожидать, в области «высоких температур» ($\varepsilon_{3d} \ll k_B T$) влияние резонансных центров (на фоне других механизмов рассеяния) на уширение кривой поглощения ЦР исчезающе мало. Аналогичные зависимости получаются и в квантовом пределе ЦР [8]. Отличие состоит лишь в том, что в работе [8] усреднение проводилось на основе равновесной функции распределения в квантующем магнитном поле. Дело в том, что в условиях квантующих H -полей невырожденные электроны расположены на нулевом уровне Ландау, в пределах которого плотность состояний $\propto 1/\sqrt{E}$; вследствие этой зависимости вместо формулы (3) мы получим $\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle \propto L(\varepsilon_0)/\sqrt{k_B T}$. Соответственно, правомерны и зависимости (6) и (7). Примерно при 2 К на нулевом уровне Ландау можно наблюдать вполне четкий резонанс ($\delta\omega \rightarrow 0$) (см. математическое дополнение). Следовательно, и в классическом пределе ЦР, в определенной области температур и глубины ямы, можно ожидать появления максимума полуширины линии поглощения.

Следует отметить, что под «высокими температурами» мы здесь понимаем область выше области температур, соответствующих резонансным глубинам. Таким образом, профиль полуширины линии поглощения: $\langle \delta\omega_{3d} \rangle_{T \rightarrow 0} \propto T^{1/2}$. Эту асимптотику можно интерпретировать так: кривая поглощения резонансно уширяется за счет слишком «быстрых» или слишком «медленных» электронов, из-за распределения Максвелла. Из (6) следует, что окрестность абсолютного нуля якобы идеально соответствует ЦР (см. прим. 2). Именно из-за распределения Максвелла и учета слабого взаимодействия между электронами не происходит разогрева электронов. Они успевают дерезонировать, т.е. выбывать из резонанса только путем рассеяния друг на друге, до нарушения закона Ома. Ясно, что в промежутке между двумя ветвями: $\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_{T \rightarrow 0} \propto \sqrt{T}$ и $\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_{T \rightarrow \infty} \propto 1/\sqrt{T}$, как уже отмечалось, где-то должен быть максимум, в противном случае мы просто не получим кривую, характерную для ЦР (рис. 1). В области температур $T \geq 30$ К начинает также давать вклад в уширение рассеяние на акустических фононах $\langle \delta\omega_{3d} \rangle_{AL} \propto T^{3/2}$ [1]. Начиная с $T \geq 17$ К необходим учет рассеяния на заряженных примесях, точечных дефектах, дислокациях, границах кристаллитов и т.д., так что полное уширение

$$\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_{T \rightarrow \infty}^{\text{tot}} = \sum_i \left\langle \frac{1}{\tau_i} \right\rangle_E = \sum_i \left\langle \frac{1}{\tau_i(E)} \right\rangle = \frac{1}{\tau_N} + \frac{1}{\tau_I} + \frac{1}{\tau_{AL}} + \frac{1}{\tau_D} + \dots$$

Здесь следует уточнить, что подразумевается под каждым слагаемым: первый член соответствует уширению за счет остатка резонансного рассеяния на нейтральных примесях (асимптотика (7)), второй – за счет рассеяния на ионах примеси, третий обусловлен акустическими фононами. При очень низких температурах достаточно ограничиться (в нашем случае) резонансным рассеянием электронов; асимптотика (6).

Учет акустических фононов (в рамках метода деформационного потенциала) вблизи абсолютного нуля не имеет смысла, так как формула для длины свободного пробега $l_{AL} = A/k_B T$ [1] при температурах, близких к абсолютному нулю, неприменима. Соответствующий расчет [6] дает для $\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_I$ две ветви: $\propto T^{-3/2}$ и $T^{1/2}$ (рис. 1), откуда доопределяется асимптотика (7):

$$\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_{T \rightarrow \infty} \propto c_1 T^{-1/2} + c_2 T^{-3/2} + c_3 T^{3/2} + \dots, \quad (7a)$$

$$\langle \delta\omega_{3d}(k) \rangle_{T \rightarrow \infty} \propto c_1 T^{-1/2} + c_2 T^{1/2} + c_3 T^{3/2} + \dots. \quad (7b)$$

Оценки показывают, что уширение линии ЦР в объемных образцах можно наблюдать в ИК-диапазоне частот (субмиллиметровый диапазон, $T_{\max} \approx 11$ К (см. прим. 2)).

В том случае, когда столкновения носят мгновенный характер, в определенном интервале температур профиль контура поглощения приобретает характерную прямоугольную форму, края которой спадают по мере удаления от максимума $\propto (\omega - \omega_{\max})^{-2}$, что соответствует $\tau = \text{const}$.

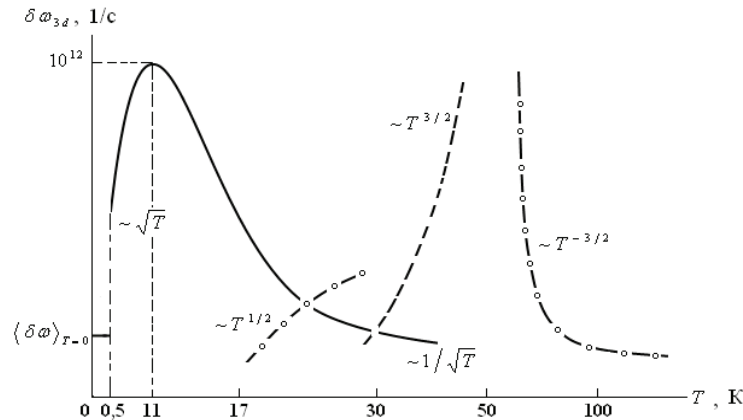


Рис. 1. Температурный ход полуширины линии поглощения ЦР при различных механизмах рассеяния. Сплошной кривой соответствует резонансное рассеяние на нейтральных примесях, штрихам и кружочкам, соответственно, рассеяние на тепловых колебаниях решетки и на ионах примеси. Окрестность нулевой температуры: $0 \div 0,05$ К приближенно описывается формулой (16) (см. прим. 2)

В квазидвумерном случае (q2D)

$$\begin{aligned} \langle \delta \omega_{2d}(k) \rangle &= \left\langle \frac{1}{\tau_{2d}(k)} \right\rangle = \frac{n_i^{2d} \hbar}{m^*} \langle k \sigma_{2d}^{\text{tr}}(k) \rangle = \frac{n_i^{2d} \hbar}{m^*} \left\langle k \frac{\pi^2}{k} \frac{1}{\frac{\pi^2}{4} + \ln^2 \frac{2}{\gamma k a_{2d}}} \right\rangle_E \Rightarrow \\ &= \frac{n_i^{2d} \pi^2 \hbar}{m^*} \left\langle \frac{1}{\frac{\pi^2}{4} + \ln^2 \frac{2}{\gamma k a_{2d}}} \right\rangle = \frac{4 n_i^{2d} \hbar}{m^*} \frac{\pi^2}{(k_B T)^2} \int_0^\infty \frac{E \exp(-E/k_B T) dE}{\pi^2 + \ln^2 \left(\gamma^2 m^* a_{2d}^{\text{res}2} E / 2 \hbar^2 \right)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left[\varepsilon_{2d} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2 \hbar^2 \exp(4U_0/\Delta U)}{\gamma^2 m^* r_0^2} \right] = \frac{4 n_i^{2d} \hbar}{m^*} \frac{\pi^2}{(k_B T)^2} \int_0^\infty \frac{E \exp(-E/k_B T) dE}{\pi^2 + \ln^2(E/\varepsilon_{2d})}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь E – энергия движения в плоскости (ρ, φ) , n_i^{2d} – поверхностная концентрация примесей, обычно $n_i^{2d} \approx 2 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$. В формуле (8) под ε_{2d} подразумевается эффективный виртуальный и/или резонансный уровень в зависимости от знака расстройки потенциала. Интеграл в формуле (8) выражается через специальные функции [9, с. 588]:

$$\langle \delta \omega_{2d}(k) \rangle = \frac{4 n_i^{2d} \pi^2 \hbar}{m^*} \left(\frac{\varepsilon_{2d}}{k_B T} \right)^2 \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_{2d}}{k_B T} \right) - \nu''\left(\frac{\varepsilon_{2d}}{k_B T} \right) \right], \quad (9)$$

где $\nu(\mu) = \int_0^\infty \frac{\mu^x dx}{\Gamma(x+1)}$. Исследуем наиболее актуальный и интересный для ЦР случай – уширение

при низких температурах. Для этого выделим в $\nu''(\mu)$ асимптотическую экспоненту

$$\nu''(\mu) = \int_0^\infty \frac{\mu^{x-2} dx}{\Gamma(x-1)} = \int_1^\infty \frac{\mu^{x-1} dx}{\Gamma(x)} + \int_0^2 \frac{\mu^{x-2} dx}{\Gamma(x-1)} \propto \exp(\mu) + \int_0^2 \frac{\mu^{x-2} dx}{\Gamma(x-1)},$$

($\mu = \varepsilon_{2d}/(k_B T)$; $\mu \rightarrow \infty$), [10, с.117]. Тогда разность (с учетом множителя μ^2) в формуле (9)

равна $\int_0^2 \frac{(-\mu^x) dx}{\Gamma(x-1)}$, откуда $\langle \delta \omega_{2d}(k) \rangle \propto \frac{4 n_i^{2d} \pi^2 \hbar^2}{m^*} \int_0^2 \frac{(-\mu^x) dx}{\Gamma(x-1)}$. Оценку последнего инте-

грала нетрудно найти, предварительно сводя его к виду $\mu \cdot \int_{-1}^{+1} \frac{(-\mu^x) dx}{\Gamma(x)}$, (с учетом $|1/\Gamma(x)| \leq 1$):

$$\mu \cdot \left| \int_{-1}^{+1} \frac{(-\mu^x) dx}{\Gamma(x)} \right| \leq \mu \int_{-1}^{+1} \left| \frac{1}{\Gamma(x)} \right| \mu^x dx \leq \mu \cdot \int_{-1}^{+1} \mu^x dx = \mu \cdot \frac{\mu - 1/\mu}{\ln \mu} \approx \frac{\mu^2}{\ln \mu}, \quad (\mu \gg 1).$$

В результате получаем низкотемпературную оценку уширения:

$$\langle \delta \omega_{2d}(k) \rangle \propto \frac{4 n_i^{2d} \pi^2 \hbar (\varepsilon_{2d}/k_B T)^2}{m^* \ln(\varepsilon_{2d}/k_B T)}, \quad (\varepsilon_{2d} \gg k_B T). \quad (10)$$

Целесообразно обсудить вопрос о пределах применимости полученной формулы.

Для квазидвумерного образца число свободных электронов в приповерхностном атомном слое по порядку величины равно $n_s \approx n_V^{2/3} \approx (10^{15})^{2/3} \text{ см}^{-2} = 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Вырождение q2D

электронного газа наступает при $T \approx \frac{\pi \hbar^2 n_s}{m^* k_B}$, что соответствует температуре 0,3 К. Этим значе-

нием и определяется нижний предел применимости формулы (10). Из структуры формулы (10)

никак не следует ограничение на высоту пика: $(\delta \omega)_{\max} \approx \frac{4 n_i^{2d} \hbar}{m^*} \propto 10^{11} \text{ с}^{-1}$ (рис. 2), объясня-

ется это тем, что асимптотический режим (10) формируется из числа электронов, энергия которых сильно зашкаливает от некоторого среднего значения. Хотя вероятность возникновения такого особого режима в ансамбле частиц, с максвелловским распределением по скоростям, весьма мала, но в принципе ею нельзя пренебречь. Она является следствием поглощения E -волны резонансными частицами, число которых при очень низких температурах пренебрежимо мало.

Очевидно, что в подобных ситуациях $\delta \omega > (\delta \omega)_{\max}$. Требуемое для наблюдения резонанса

H -поле определяется из условия $\omega_C \approx (\delta \omega)_{\max}$ и составляет примерно $5 \cdot 10^3$ Э.

В области высоких температур процедура вычислений реализуется по схеме:

$$\begin{aligned} \mu^2 [\exp(\mu) - \nu''(\mu)] &= \mu^2 \exp(\mu) - \mu^2 \int_0^{\infty} \frac{\mu^{x-2} dx}{\Gamma(x-1)} = \mu^2 \exp(\mu) - \int_0^{\infty} \frac{\mu^x dx}{\Gamma(x-1)} \Rightarrow \\ &= \mu^2 \exp(\mu) - \int_{-1}^{\infty} \frac{\mu^{x+1}}{\Gamma(x)} dx = \left[\mu^2 \exp(\mu) - \mu \cdot \left(\int_0^{\infty} \frac{\mu^x}{\Gamma(x)} dx + \int_{-1}^0 \frac{\mu^x}{\Gamma(x)} dx \right) \right]_{\mu \ll 1} \Rightarrow \\ &\stackrel{[10, \text{с. } 117]}{\infty} \mu \cdot \left[\int_{-1}^0 \mu^x dx - \frac{\text{Rg}'(0)}{\ln^2 \mu} \right] \approx \mu \cdot \frac{1 - 1/\mu}{\ln \mu} \approx -\frac{1}{\ln \mu}. \end{aligned}$$

$$\text{Здесь } \text{Rg}(x) = \frac{1}{\Gamma(x)}, \quad \text{Rg}'(0) = -\left. \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma^2(x)} \right|_{x \rightarrow 0} \propto -\frac{(1/x)'}{(1/x)^2} = 1.$$

В результате для высокотемпературной асимптотики уширения получаем формулу

$$\langle \delta \omega_{2d}(k) \rangle \propto \frac{4 n_i^{2d} \hbar}{m^*} \frac{\pi^2}{\ln(k_B T / \varepsilon_{2d})}, \quad (\varepsilon_{2d} \ll k_B T). \quad (11)$$

Как видно, уширение в высокотемпературной области, слабо зависит от температуры. Физический смысл этого вывода очевиден: при высоких температурах (например, комнатных и выше) число быстрых электронов несравнимо больше чем медленных (резонирующих), число которых исчезающе мало, но опять же, из-за распределения Максвелла, они дают определенный вклад в уширение. Перефразируя, можно сказать так: особый режим (11) представляет собой «парциальный остаток» резонансного рассеяния в области высоких температур. Вероятность наблюдения такого режима всегда близка к нулю, так как он обычно быстро затушевывается другими механизмами уширения. Таким образом, в теоретическом отношении формула (11) представляет

меньше интереса, чем (10). Для уточнения пределов оценки (10) необходимо оценить резонансный уровень.

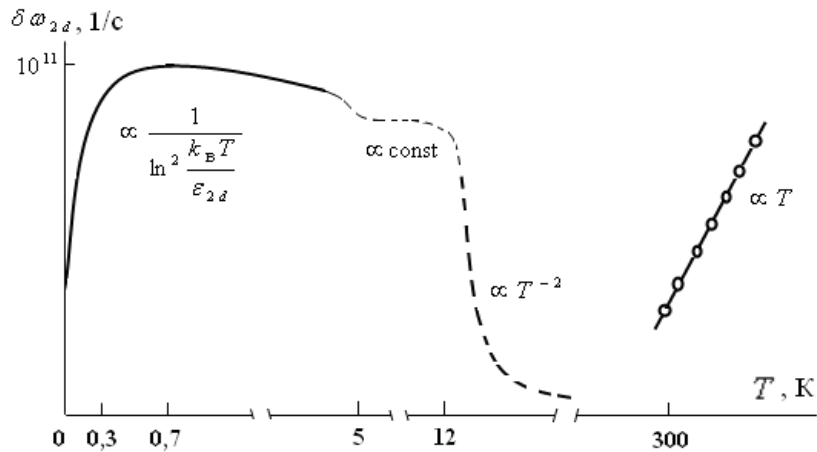


Рис. 2. Температурный ход полуширины линии поглощения ЦР при различных механизмах рассеяния. Сплошной линии соответствует резонансное рассеяние на нейтральных примесях [4], пунктирной линии – рассеяние на ионах примеси [11, с. 62]. Кружочки соответствуют рассеянию на приповерхностных акустических фононах. Температурный интервал 0,3÷0,7 К – соответствует пределам выполнимости асимптотики (10). Приблизительно при температуре 5 К происходит плавная смена механизма рассеяния, в связи с включением рассеяния носителей на ионах примеси. Промежуток 0÷0,3 К соответствует вырождению электронного газа. В пределах 5 ÷ 12 К q2D – рассеяние носит столкновительный характер (плато): $\tau_{2d}^1 = \text{const}$ (q2D рассеяние учитывается в приближении медленных частиц; при более высоких температурах ($T > 12$ К) $\tau_{2d}^1 \propto E^2$ и более строгое рассмотрение приводит к зависимости $\langle \delta\omega_{2d}^1 \rangle_{T \rightarrow \infty} \propto \frac{1}{(k_B T)^2} \ln \frac{\epsilon k_B T}{e^2 \sqrt{3} n_1^{3d}}$ вместо T^{-2} , где ϵ – диэлектрическая постоянная кристалла)

длит к зависимости $\langle \delta\omega_{2d}^1 \rangle_{T \rightarrow \infty} \propto \frac{1}{(k_B T)^2} \ln \frac{\epsilon k_B T}{e^2 \sqrt{3} n_1^{3d}}$ вместо T^{-2} , где ϵ – диэлектрическая постоянная кристалла)

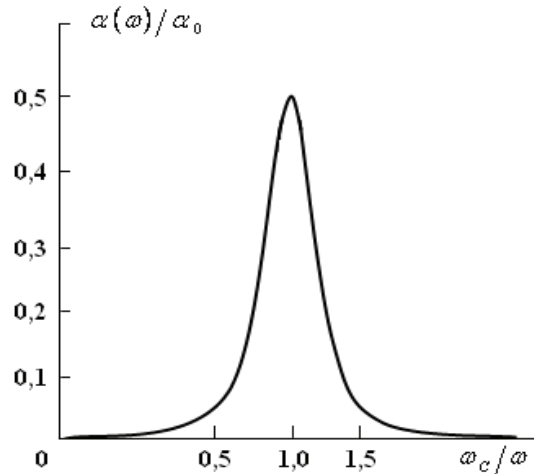


Рис. 3. 2D спектр поглощения. Окрестность максимума соответствует интервалу 5 ÷ 12 К

2. Оценка резонансного уровня в двумерной яме

Для оценки резонансного уровня воспользуемся формулой $\Delta U = \pm 0,5 U_0$ [4], которая достаточно хорошо аппроксимирует зависимость расстройки потенциала от глубины мелкой примеси. Этой формулы вполне достаточно чтобы оценить порядок ϵ_{2d} . Полагая, что ϵ_{3d} порядка мэВ

[2], из определения (3) т.е. из $\epsilon_{3d} = \frac{(\Delta U)^2}{4U_0} = \frac{U_0}{16}$, получаем $U_0 = 16$ мэВ и $\Delta U = \pm 8$ мэВ.

Энергия резонансного s -состояния должна быть экспоненциально малой по сравнению с глубиной ямы [7, с. 201], тогда следует выбрать убывающую ветвь определения (8) из двух

$$\epsilon_{2d} = \frac{2 \hbar^2}{\gamma^2 m^* r_0^2} \exp\left(-\frac{4U_0}{|\Delta U|}\right) = \left(\frac{2}{\gamma}\right)^2 U_0 \exp\left(-\frac{4U_0}{|\Delta U|}\right).$$

Подставляя значения U_0 и ΔU в исходную формулу, находим что $\varepsilon_{2d} = 192 \times e^{-8} \approx 0,06$ мэВ, что соответствует области температур $\propto 0,7$ К. Данная оценка согласуется с нижним пределом асимптотики (10). Радиус потенциала мелкой водородоподобной примеси примерно равен $r_0 = \hbar / \sqrt{2m^*U_0} \approx 1,5 \times 10^{-7}$ см. С учетом значений r_0 и $2U_0/|\Delta U|$ определяем размеры волновых функции резонансных состояний: $a_{2d} \approx 8,2 \times 10^{-6}$ см, $a_{3d} \approx 6 \times 10^{-7}$ см; которые фиксируют область локализации электронов проводимости. В условиях резонансного рассеяния $a_{2d} \propto \lambda$ и $a_{3d} \propto \lambda$, где $\lambda \propto \hbar / \sqrt{m^*k_B T}$, откуда следуют значения $T_{2d} \propto 1$ К и $T_{3d} \propto 10$ К.

Если методами молекулярно-лучевой или металлоорганической газофазной эпитаксии «уменьшить» диаметр d q2D- и/или 3D образца до такой степени что $a_{Nd} \propto d$ ($N=2,3$), то следует учитывать эффекты размерного квантования. Мы же предполагаем, что $d \propto 10^{-4}$ см [3].

3. Расчет времени релаксации

В квазидвумерной ситуации $u_{2d} = \frac{e \langle \tau_{2d} \rangle}{m^*}$ и $a_{2d} \ll d$, тогда

$$\begin{aligned} \langle \tau_{2d} \rangle &= \frac{m^*}{n_i^{2d} \hbar} \left\langle \frac{(\pi/2)^2 + \ln^2 \left(\frac{2}{\gamma a_{2d}} \sqrt{2m^* E} \right)}{\pi^2} \right\rangle_E = \frac{m^*}{4 n_i^{2d} \hbar} \frac{1}{(k_B T)^2} \times \\ &\times \int_0^\infty \left[1 + \frac{1}{\pi^2} \ln^2 \left(\frac{\gamma^2 m^* E a_{2d}^2}{2 \hbar^2} \right) \right] \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right) E dE \Rightarrow \\ &= \frac{m^*}{4 n_i^{2d} \hbar} \left[1 + \frac{1}{\pi^2} \left(\ln^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_{2d}} + 2(1-\gamma) \ln \frac{k_B T}{\varepsilon_{2d}} + (1-\gamma)^2 - \frac{\pi^2 - 6}{6} \right) \right] \Rightarrow \\ &= \frac{m^*}{4 n_i^{2d} \hbar} \left[\frac{1}{\pi^2} \left(\ln \frac{k_B T}{\varepsilon_{2d}} + (1-\gamma) \right)^2 + \frac{5\pi^2 + 6}{6\pi^2} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

$$u_{2d}(T) = \frac{e}{4 n_i^{2d} \pi^2 \hbar} \left[\ln^2 \frac{k_B T \exp(1-\gamma)}{\varepsilon_{2d}} + \frac{5\pi^2 + 6}{6} \right], \quad u_{2d} \propto u_0 \ln^2 \frac{k_B T}{\varepsilon_{2d}}. \quad (13)$$

Температурная зависимость подвижности (13) имеет суперслабо выраженный минимум при

$$T_{\min} = \frac{\varepsilon_{2d} \exp[-(1-\gamma)]}{k_B} \approx \frac{2 \varepsilon_{2d}}{3 k_B}, \quad u_{\min} = \frac{e}{4 n_i^{2d} \hbar} \frac{5\pi^2 + 6}{6\pi^2} = 5,3 \times 10^6 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}. \quad (14)$$

Отметим, что значения подвижности $\propto 10^6$ см²/В·с при $T < 1$ К вполне достижимы [11].

В отличие от объемного случая [2], минимум u_{2d} не зависит от резонансного уровня a , следовательно, и от расстройки потенциала. С учетом значения $\varepsilon_{2d} \approx 0,06$ мэВ из (14) находим что $T_{\min} \approx 0,5$ К (рис. 4). Минимум температуры локализован в пределах применимости (10) и вполне соответствует верхнему пределу выполнения асимптотики (10). Таким образом, как и ожидалось, особый режим уширения (10) имеет узкий интервал проявления $0,3 \div 0,7$ К (рис. 2).

Как видно, подвижность квазидвумерного невырожденного электронного газа в области $0,3 \div 12$ К, весьма слабо зависит от температуры, напротив, в окрестности абсолютного нуля имеет место резко выраженный рост (рис. 4). Графики на рис. 2 и 4 находятся во взаимно обратной связи между собой, что является следствием взаимно обратной пропорциональности между уширением и подвижностью. Это важная деталь позволяет заключить, что пику уширения и минимуму подвижности примерно соответствует температура порядка $0,5$ К (рис. 2).

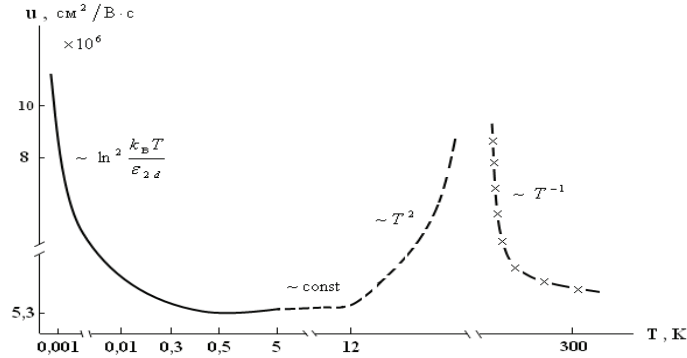


Рис. 4. Температурная зависимость 2D подвижности. Сплошной линией указана теоретическая зависимость (13). Штрихам соответствует рассеяние на ионах примеси, крестикам - рассеяние на акустических фонах [11, стр.62].

В окрестности 5 К происходит смена механизма рассеяния, который учитывается в приближении медленных частиц. В интервале 5 ÷ 12 К (плато) преобладает рассеяние на ионах примеси, сечение которого в низкоэнергетическом пределе имеет корневую зависимость от энергии: $\sigma_{2d}^I \propto 1/\sqrt{E}$. При $T \geq 12$ К также преобладает рассеяние на ионах примеси, однако, сечение рассеяния $\propto E^{-1}$.

Для определения температуры перехода следует рассмотреть двумерный аналог задачи о движении электрона в поле иона примеси. Как и в 3D случае смену механизма рассеяния будем учитывать в приближении медленных частиц. Известно что $\frac{\tau_{2d}^I}{\tau_{3d}^I} = \gamma \frac{\sqrt{2 m^* E}}{\hbar} a$ [11, с.61], где γ – числовой множитель порядка единицы, a – ширина мелкой q2D ямы, $a \approx r_0$.

При $E \rightarrow 0$ $\tau_{3d}^I = \frac{\sqrt{m^*}}{\pi \sqrt[3]{n_1^{3d}} \sqrt{2}} E^{-1/2}$ [6], в результате получим $\tau_{2d}^I = \frac{\gamma a m^*}{\pi \hbar \sqrt[3]{n_1^{3d}}} = \text{const}$.

Смена механизма уширения предполагает: $\delta \omega_{2d}^{\text{res}} \approx \delta \omega_{2d}^{\text{ion}}$, $E \propto k_B T$. Ясно, что при очень низких (10), также как и при очень высоких (11), температурах, «переход» не может быть реализован, но с учетом формулы $\delta \omega_{2d}^{\text{res}} \approx \frac{4 n_i^{2d} \hbar}{m^*} \frac{\pi^2}{\ln^2(k_B T / \epsilon_{2d})}$ [4] и $\delta \omega_{2d}^{\text{ion}} = \frac{\pi \hbar \sqrt[3]{n_1^{3d}}}{\gamma a m^*}$, находим

что $T_{\text{пер}} \approx \frac{\epsilon_{2d}}{k_B} \times \exp \left[\sqrt{\frac{4 \pi a \gamma n_i^{2d}}{\sqrt[3]{n_1^{3d}}}} \right]$ (15).

Экспоненциальный множитель не может быть слишком велик, поэтому, не нарушая общности, можно считать что $T_{\text{пер}} \approx 5$ К (рис. 4). Так как асимптотика (10) имеет верхним пределом значение 0,7 К, то остается предположить, что формула (11) работает в пределах 0,7 ÷ 5 К. Тогда значение 0,7 К примерно соответствует пику уширения ($\delta \omega$)_{max} (рис. 2).

Для инверсионных слоев [$\propto (10^{-7} \div 10^{-6})$ см] формула (15) лучше соблюдается, чем для квазидвумерных структур, причем $n_i^{2d} = 2 \times 10^{10}$ см⁻², $n_1^{3d} = 10^{12}$ см⁻³, $a \approx 1,5 \times 10^{-7}$ см. При этом размер двумерной волновой функции резонансного состояния на порядок превышает a и условие преобладания s -волны, хорошо соблюдается. Во всяком случае, температура перехода весьма чувствительна к концентрации мелкой донорной примеси.

По мере разогрева ($v_E \approx v_T$) время релаксации начинает зависеть от энергии частиц и столкновительное (аналогичное столкновению упругих шаров) рассеяние сменяется рассеянием электронов в кулоновском поле иона примеси. Из равенства средней тепловой энергии и потенциальной энергии можно оценить температуру смены специфики рассеяния. Оценка показывает, что смена происходит примерно при 12 К. Именно с этого значения кулоново поле ионов примеси начинает эффективно влиять на процесс рассеяния электронов (рис. 4).

Выводы

В объемных образцах при очень низких температурах вдали от области температур, соответствующих резонансному рассеянию электронов (левое крыло) кривая поглощения резонансно уширяется $\propto \sqrt{T}$, а при «высоких температурах» (правое крыло) $\propto 1/\sqrt{T}$. Асимптотика (6) эффективно работает в пределах $0,5 \div 10$ К (в указанных пределах все ещё не нарушается квазиклассичность: $\lambda < (n_e^{3d})^{-1/3}$), при более низких $0,05 \div 0,5$ К температурах требуется учет частичного вырождения электронного газа. Асимптотики (7) и (11) по сути, являются парциальным остатком резонансного рассеяния в области «высоких температур», на фоне других доминирующих механизмов рассеяния: (7a), (7б).

Значение возможного резонансного уровня в q2D образцах примерно составляет 0,06 мэВ.

Пределы применимости асимптотики (10) $0,3 \div 0,7$ К. В интервале $5 \div 12$ К двумерное рассеяние электронов на ионах примеси, носит в основном, столкновительный характер (контур Лоренца, жесткая решетка, плато на рис. 2 и 4).

Примечание 1

Эксперименты показывают, что возможный резонансный уровень в ковалентных полупроводниках порядка мэВ [2], что соответствует нескольким кельвинам. При этих условиях длина волны электрона гораздо меньше его длины свободного пробега: $\lambda \ll \ell \propto 1/n_i^{3d} \propto 10^{-4}$ см [3]. Классический предел ЦР предполагает выполнение условия $\lambda < \ell_H$, а для наблюдения ЦР необходимо по крайней мере один оборот, так что $\ell_H \propto \ell$ и энергия электрического поля расходуется на расширение циклотронной орбиты. Число квантовых состояний в кристаллах порядка 10^{22} В типичных полупроводниках концентрация носителей заряда колеблется в пределах $10^{10} \div 10^{18}$ см⁻³, и соответственно чему энергия электрона $\propto k_B T$ ($\lambda < (n_e^{3d})^{-1/3}$, $n_e^{3d} < 10^{15}$ см⁻³).

В дальнейшем, для упрощения различных оценок мы полагаем $m^* \approx m_e = 9,1 \times 10^{-28}$ г и используем систему СГС, как предпочтительную.

Примечание 2

Границы применимости асимптотики (6) однозначно определяются температурным ходом химпотенциала в области примесной проводимости: при $T = 0$ К уровень химпотенциала проходит посередине между дном E_C и примесными уровнями, а затем начинает подниматься. С учетом того что $\Delta E_D \propto 0,01$ эВ, а n_D велико, то уровень химпотенциала может приблизиться к дну зоны проводимости и даже пересечь его, так что неравенство $f_0 \ll 1$ нарушится и все прежние выводы, основанные на нем, будут по крайней мере не точны. Учет частичного вырождения требует больших трудоемких вычислений, однако можно попытаться оценить нижний температурный предел асимптотики (6): $N_C = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m^* k_B T}{(2\pi \hbar)^2} \right)^{3/2}$; концентрация электронов в зоне про-

водимости ($n_e^{3d} < 2 \cdot 10^{15}$ см⁻³; перебросы из V-зоны в С-зону за счет межзонной подсветки; при концентрациях $n_i^{3d} > 2 \times 10^{15}$ см⁻³ следует учитывать интерференцию от отдельных D⁻-центров) сравнивается с эффективной плотностью состояний в последней при температуре 0,5 К. Примерно при 0,05 К уровень химпотенциала пересекает E_C и газ становится полностью вырожденным. Для оценки верхнего температурного предела следует учесть смену механизмов рассеяния. Ясно, что при более высоких температурах (от возможного верхнего предела) сечение рассеяния не зависит от энергии рассеиваемых частиц: $\sigma_I \approx (n_I^{3d})^{-2/3}$ (приближение медленных частиц), где σ_I – эффективный поперечник иона примеси, n_I^{3d} – концентрация ионов примеси. Смена механизма рассеяния предполагает $\overline{\ell_{res}} \approx \overline{\ell_I}$. Оценка показывает что $\overline{\ell_{res}} \approx 4 \times 10^{-4}$ см [3]. Примерно то же значение длины свободного пробега достигается при концентрации ионов

$n_1^{3d} \approx 10^{12} \text{ см}^{-3}$, с учетом того что $n_1^{3d}/n_i^{3d} = e^{-\Delta E_D/k_B T} \approx 10^{-3}$, получим $T_{\text{пер}} \approx 16,7 \text{ К}$. Пик уширения примерно соответствует температура $T_{\text{max}} \propto \varepsilon_{3d}/k_B \approx 11,6 \text{ К}$ (определение T_{max} на основе точной формулы (3) требует решения сложного трансцендентного уравнения), именно при этой температуре нарушается аппроксимация $\varepsilon_0 \gg 1$.

Таким образом, в качестве верхнего предела асимптотики (6) целесообразно взять 10 К.

В окрестности $T=0 \text{ К}$ $\lim_{T \rightarrow 0} f_0 \approx 1$, ($E_F - E > E_C$). Из-за сильного перекрытия примесных

волновых функции примесные уровни вырождаются в примесную полосу с шириной $\Gamma(0)$ при нулевой температуре. Соответствующий расчет на основе формулы Брейта-Вигнера приводит в этом случае к приближенной формуле (формально это соответствует случаю $U=0$)

$$\langle \delta \omega_{3d}(k, T=0) \rangle \approx \frac{5 \pi n_i^{3d} \hbar^2 E_{\text{res}}}{\sqrt{2} (m^*)^{3/2} E_F^{5/2}} \Gamma(0) \propto \Gamma(0), (T \in 0 \div 0,05 \text{ К}). \quad (16)$$

Здесь $E_F(0) = \frac{E_C + E_D}{2}$, E_{res} – резонансный уровень, E_D – энергия связи D-уровня.

При отсутствии перекрытия (перехода Мотта) ($r < 1/\sqrt[3]{n_i^{3d}}$, где r – радиус локализации свободного электрона); $\langle \delta \omega_{3d}(k, T=0) \rangle \propto 1/\sqrt{\varepsilon_{3d}} \propto |\Delta U|^{-1}$, ($T \in 0 \div 0,05 \text{ К}$).

Математическое дополнение

В промежутке между двумя асимптотиками (6) и (7) можно выделить переходную область:

$$-\text{Ei}(-\varepsilon_0) = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt \approx \begin{cases} \exp(-\varepsilon_0)/\varepsilon_0, & \varepsilon_{3d} > 5 \cdot k_B T \\ -\gamma + \ln(1/\varepsilon_0), & \varepsilon_{3d} < k_B T/5 \end{cases}.$$

Данная аппроксимация удобна для общего анализа профиля уширения в окрестности пика когда аппроксиманты (10) и (11) не вполне приемлемы (в пределах нулевой зоны Ландау).

Подставляя $\exp(-\varepsilon_0)/\varepsilon_0$ в $L(\varepsilon_0) = 1 - \varepsilon_0 \exp(\varepsilon_0)[-Ei(-\varepsilon_0)]$ автоматически получим нуль, соответственно чему $\delta \omega_{n=0}^{3d} \propto 0$. Разумеется, полученный результат следует рассматривать как некоторую o -символику более общих теоретических формул [8].

Литература

1. Ансельм, А.И. / А.И. Ансельм // ЖЭТФ. – 1953. – Т. 24. – Вып. 1. – С. 83–89.
2. Имамов, Э.З. / Имамов, Э.З., Колчанова Н.М., Крещук Л.Н., Ясиевич И.Н. // ФТТ. – 1985. – Т. 27. – Вып. 1. – С. 69 – 76.
3. Муратов, Т.Т. // Вестн. НГУ. Серия: Физика. – 2013. – Т. 8. – Вып. 3. – С. 142–158.
4. Андреев, С.П. / С.П. Андреев, Т.В. Павлова, В.А. Небогатов // Труды научной сессии НИЯУ МИФИ. 2010. – Т. 3. Современные проблемы физики конденсированного состояния. – С. 89–92.
5. Erginsoy, C. / C. Erginsoy // Phys. Rev. – 1950. – Vol. 6. – P. 1013–1014.
6. Блатт, Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. – М., Мир, 1971. – 470 с.
7. Ландау, Л.Д. Квантовая механика: Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М., Наука, 1989. – 767 с.
8. Andreev, S.P. / S.P. Andreev, A.S. Andreev, Yu.A. Gurvich // Laser Physics. – 1998. – Vol. 8, № 1. – P. 159–163.
9. Градштейн, И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – М., Наука, 1971. – 1108 с.
10. Олвер, Ф. Введение в асимптотические методы и специальные функции / Ф. Олвер. – М., Наука, 1978. – 376 с.
11. Борисенко, С.И. Физика полупроводниковых наноструктур / С.И. Борисенко. – Изд-во Томского политехнического университета, Томск, 2010. – 115 с.

Поступила в редакцию 19 мая 2014 г.

**CONTRIBUTION OF CHARGED CARRIERS RESONANCE SCATTERING
TO THE BROADENING OF CYCLOTRON RESONANCE ABSORPTION CURVE
IN QUASI-TWO- AND THREE-DIMENSIONAL SEMICONDUCTORS**T.T. Muratov¹

Asymptotic formulas for the broadening of absorption curve of cyclotron resonance (CR) by the resonance scattering of electrons on atomic impurities were obtained with Maxwell's distribution being taken into account. The estimations show that the possible resonance level ($\sim 0,06$ meV) in quasi two-dimensional semiconductors is one or two orders less than in three-dimensional semiconductors (~ 1 meV). This fact shows that the area of predominant resonance scattering in quasi-two-dimensional semiconductors is less than 1 K. The temperature plateau equal to $5 \div 12$ K was found in 2D absorption spectrum. The applicability of the results obtained is under discussion.

Keywords: cyclotron resonance; broadening absorption curve; resonance scattering; asymptotic formulas.

References

1. Ansel'm A.I. *ZhETF*. 1953. Vol. 24. Issue 1. pp. 83–89. (in Russ.).
2. Imamov E.Z., Kolchanova N.M., Kreshchuk L.N., Yassievich I.N. *FTT*. 1985. Vol. 27. Issue 1. pp. 69–76. (in Russ.).
3. Muratov T.T. *Vestn. NGU. Seriya: Fizika*. 2013. Vol. 8. Issue 3. pp. 142–158. (in Russ.).
4. Andreev S.P., Pavlova T.V., Nebogatov V.A. *Trudy nauchnoy sessii NIYaU MIFI* (Proceedings of the scientific session of National Research Nuclear University «MEPHI»). T. 3. *Sovremennye problemy fiziki kondensirovannogo sostoyaniya* (Vol. 3. Modern problems of condensed matter physics). 2010. pp. 89–92. (in Russ.).
5. Erginsoy C. *Phys. Rev.* 1950. Vol. 6. pp. 1013–1014.
6. Blatt F. *Fizika elektronnoy provodimosti v tverdykh telakh* (Physics of electronic conduction in solids). Moscow, Mir Publ., 1971. 470 p. (in Russ.).
7. Landau L.D., Lifshits E.M. *Kvantovaya mekhanika: Nerelyativistskaya teoriya* (quantum mechanics: Nonrelativistic Theory). Moscow, Nauka Publ., 1989. 767 p. (in Russ.).
8. Andreev S.P., Andreev A.S., Gurvich Yu.A. *Laser Physics*. 1998. Vol. 8, no. 1. pp. 159–163.
9. Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M. *Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedeniy* (Table of integrals, sums, series and compositions). Moscow, Fizmatlit Publ., 1962. 1100 p. (in Russ.).
10. Olver F. *Vvedenie v asimptoticheskie metody i spetsial'nye funktsii* (Introduction to Asymptotics and Special Functions). Moscow, Nauka Publ., 1978. 375 p. (in Russ.). [Olver F.W.J. *Introduction to Asymptotics and Special Functions*. N.Y., L: Academic press, 1974. 297 p. (in Eng.).]
11. Borisenko S.I. *Fizika poluprovodnikovykh nanostruktur* (Physics of semiconductor nanostructures). Tomsk, Izdatel'stvo Tomskogo politekhnicheskogo universiteta Publ., 2010. 115 p. (in Russ.).

Received 19 May 2014

¹ Muratov Temur Tashkabayevich is Candidate, Department of Teaching Methods in Physics, Tashkent State Pedagogical University, Tashkent, Uzbekistan.

E-mail: tgpu_info@edu.uz, temur-muratov@yandex.ru

ИЗМЕРЕНИЕ СКОРОСТИ ВОЛН ЛЭМБА, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ЛАЗЕРНЫМИ НАНОИМПУЛЬСАМИ

Ю.В. Петров¹, С.Ю. Гуревич², Е.В. Голубев³

Проведено экспериментальное исследование зависимости основных параметров у.з. импульсов волн Лэмба, возбуждаемых оптико-термическим излучателем круглой формы, от его диаметра. Обнаружено, что начиная с диаметра 3,0 мм, происходит разделение у.з. импульса на два. Считается, что источниками разделенных импульсов являются диаметрально противоположные края ОТ-излучателя. Из результатов эксперимента следует, что зависимость времени распространения максимумов разделенных импульсов от диаметра ОТ-излучателя является линейной. Исходя из этого, предложен графический метод локального измерения групповой средней скорости волн Лэмба.

Ключевые слова: ультразвуковые волны Лэмба; оптико-термический излучатель; лазерное возбуждение; широкополосный ЭМА-приемник.

Введение

Известны методы оценки физико-механических свойств металлоизделий, основанные на измерении скоростей у.з. волн различных видов [1–3]. При этом ввод и прием ультразвука в изделие осуществляется, как правило, пьезопреобразователями через контактные среды. В данной работе рассматривается метод измерения групповой скорости ультразвуковых волн Лэмба в листовых металлоизделиях, генерируемых и регистрируемых бесконтактным способом с помощью лазерных наноимпульсов и широкополосного (ш.п.) ЭМА-приемника [4].

Описание экспериментальной установки

Для проведения измерений использовалась установка, схема которой показана на рис. 1. Она состоит из импульсного лазера 1, диафрагмы 2, исследуемых образцов 3, ЭМА-приемника волн Лэмба 4, усилителя тока 5, усилителя напряжения 6, цифрового осциллографа 7.

Генерация волн Лэмба осуществляется импульсным лазером Nd: YAG «Brilliant В» фирмы QUANTEL с модулируемой добротностью. Длина волны лазерного излучения 1064 нм, длительность и энергия световых импульсов равны соответственно 4–6 нс и 0,85 Дж. Диаметр светового пучка 9,5 мм. Образцами служили металлические пластины размерами 270х60 мм и толщиной от 0,6 до 2,5 мм.

При лазерном облучении тонких металлических пластин металл в зоне действия наносекундных световых импульсов нагревается и становится источником у.з. волн. Эффективность такого оптико-термического источника (в дальнейшем ОТ-излучатель) определяется не только мощностью лазерного излучения и теплофизическими свойствами металла, но и зависит от его формы и размеров. Возбуждаемые

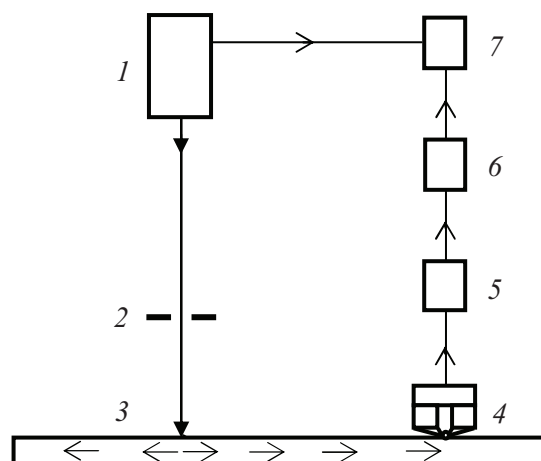


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:
1 – лазер, 2 – диафрагма, 3 – металлическая пластина,
4 – ЭМА-приемник, 5 – усилитель тока, 6 – усилитель
напряжения, 7 – цифровой осциллограф.

¹ Петров Юрий Владимирович – кандидат технических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

² Гуревич Сергей Юрьевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: sergur@susu.ac.ru

³ Голубев Евгений Валерьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ev_golubev@mail.ru

ОТ-излучателем у.з. импульсы обладают достаточно широким спектром излучаемых частот и распространяются в пластине с различными скоростями.

Регистрируются у.з. волны Лэмба ш.п. ЭМА-приемником, который практически без искажений преобразует акустические импульсы в электромагнитные. После усиления электромагнитные импульсы поступают на вход ш.п. осциллографа, где происходит цифровое запоминание, автоматическая установка размеров изображения, автоматическое измерение амплитудно-временных параметров с выводом результатов измерений на экран дисплея.

Методика проведения исследований

Предлагаемый в настоящей статье метод измерения скорости у.з. волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами, является следствием результатов экспериментальных исследований зависимости основных характеристик у.з. импульсов от размеров ОТ-излучателя.

Эксперимент проводился следующим образом. Лазерное излучение максимальной мощности направляется на образец через диафрагму с круглым отверстием. В результате на поверхности пластины начинает действовать ОТ-излучатель у.з. волн в форме правильного круга. В ходе эксперимента диаметр отверстия диафрагмы, а значит и диаметр ОТ-излучателя, изменялся от 1,0 до 9,0 мм с шагом 0,5 мм. Форма и результаты измерения амплитудно-временных параметров у.з. импульсов, преобразованных ЭМА-приемником, выводились на экран дисплея.

Из анализа полученных осциллограмм следует, что для ОТ-излучателей, диаметр которых не превышает 3,0 мм, форма, максимальная амплитуда, длительность и частота колебаний у.з. импульсов существенно не изменяются. Количественно эти параметры (кроме амплитуды) можно оценить из приведенной на рис. 2, а осциллограммы у.з. импульса, возбуждаемого ОТ-излучателем диаметром 1,0 мм в пластине толщиной 0,6 мм.

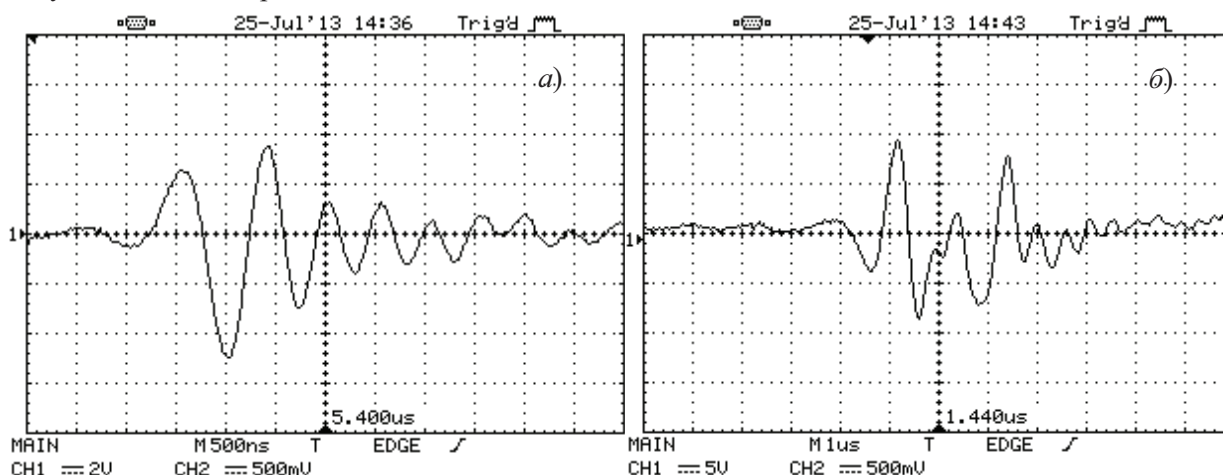


Рис. 2. Импульсы у.з. волн Лэмба от «оптико-термического» излучателя диаметром: а) 1,0 мм, б) 9,0 мм

По мере увеличения диаметра ОТ-излучателя форма у.з. импульса и его параметры изменяются. Так на рис. 2, б приведена осциллограмма у.з. импульса, возбуждаемого ОТ-излучателем диаметром 9,0 мм. Видно, что произошло его разделение на два импульса, каждый из которых имеет свою максимальную амплитуду, длительность и частоту колебаний.

Причина такого разделения заключается в следующем. При лазерной генерации ультразвука его интенсивность определяется в основном градиентом температуры. А поскольку у ОТ-излучателя градиент температуры максимален на его границах, то они и вносят основной вклад в возбуждаемое акустическое поле. Если рассматривать диаметрально противоположные границы ОТ-излучателя, то возбуждаемые ими у.з. импульсы проходят до ЭМА-приемника разные расстояния. Максимум импульса от дальней границы регистрируется позднее, чем максимум импульса от ближней. «Время запаздывания» определяется расстоянием между границами ОТ-излучателя, то есть его диаметром, и скоростью распространения ультразвука. По результатам проведенного эксперимента была найдена зависимость «времени запаздывания» у.з. импульсов волн Лэмба от диаметра ОТ-излучателя. На рис. 3 построен график этой зависимости. Видно, что она является линейной и тогда по коэффициенту k экспериментальной прямой нетрудно найти среднее значение скорости $\langle v \rangle$ распространения у.з. волн Лэмба.

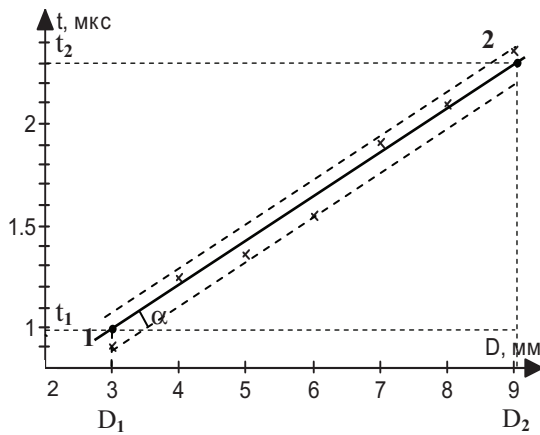


Рис. 3. Зависимость «времени запаздывания» импульсов волн Лэмба, излучаемых диаметрально противоположными границами ОТ-излучателя, от его диаметра.

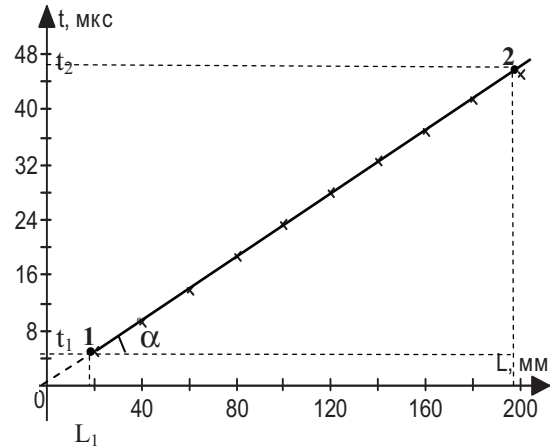


Рис. 4. Зависимость времени распространения волн Лэмба от расстоянием между ОТ-излучателем и ЭМА-приемником.

Проведем по предложенной методике оценку величины средней скорости. По графику, приведенному на рис. 3, находим угловой коэффициент

$$k = \operatorname{tg} \alpha = \frac{t_2 - t_1}{D_2 - D_1}.$$

Тогда

$$\langle v \rangle = \frac{1}{k} = \frac{9 - 3}{2,36 - 0,95} = 4,26 \text{ (мм / мкс)}.$$

Оценим погрешность измерения этой скорости. Доверительные границы относительной E_v и абсолютной Δ_v суммарной погрешностей при многократных косвенных измерениях скорости оцениваются стандартным методом [5]. При этом систематическая погрешность γ определяется в основном максимальной погрешностью измерительных приборов (осциллограф и микрометр), а случайная погрешность ε оценивается графическим методом с доверительной вероятностью $p = 0,95$.

Итак, предел допускаемой суммарной погрешности:

относительной $E_v = \sqrt{\gamma^2 + \varepsilon^2} = \sqrt{(1\%)^2 + (6,0\%)^2} = 6,1\%,$

абсолютной $\Delta_v = E_v \% \cdot \langle v \rangle \frac{1}{100\%} = \frac{6,1 \cdot 4,26}{100} = 0,26 \text{ (} \frac{\text{мм}}{\text{мкс}} \text{)}.$

Окончательно

$$v = (4,26 \pm 0,26) \frac{\text{мм}}{\text{мкс}}, E_v = 6,0\% \text{ при } p = 0,95.$$

Таким образом, разделение импульсов у.з. волн Лэмба, генерируемых ОТ-излучателем вследствие увеличения его диаметра, можно использовать для измерения их средней скорости. При этом длина участка изделия, на котором производится измерение, не превышает диаметра ОТ-излучателя (диаметра лазерного пучка).

Если измерения производятся на участке изделия, длина которого значительно превышает максимальный диаметр ОТ-излучателя, то средняя скорость $\langle v \rangle$ у.з. волн Лэмба рассчитывается по угловому коэффициенту k экспериментального графика зависимости времени распространения максимума у.з. импульса от расстояния между ОТ-излучателем и ЭМА-приемником. Диаметр ОТ-излучателя в этом случае необходимо выбирать не более 3,0 мм.

Проведем оценку величины $\langle v \rangle$ для пластины, которая использовалась в первом эксперименте. Для этого воспользуемся приведенным на рис. 4 экспериментальным графиком упомянутой выше зависимости. Перемещение ЭМА-приемника относительно ОТ-излучателя контролировалось по миллиметровой шкале оптической скамьи. Из графика находим угловой коэффициент

$$k = \operatorname{tg} \alpha = \frac{t_2 - t_1}{L_2 - L_1}.$$

Тогда

$$\langle v \rangle = \frac{1}{k} = \frac{200 - 20}{45,20 - 4,80} = 4,46 \text{ (мм/мкс)}.$$

Оценим погрешность измерения $\langle v \rangle$. Как следует из графика на рис. 4, случайная погрешность измерения скорости практически равна нулю. Тогда предел допускаемой суммарной погрешности будет определяться только систематической погрешностью измерительных приборов:

$$\text{относительной} \quad \gamma_v = 1\%,$$

$$\text{абсолютной} \quad \theta v = \gamma_v \% \cdot \langle v \rangle \frac{1}{100\%} = \frac{1 \cdot 4,46}{100} \approx 0,05 \left(\frac{\text{мм}}{\text{мкс}} \right).$$

Окончательно

$$v = (4,46 \pm 0,05) \frac{\text{мм}}{\text{мкс}}, \quad \gamma_v = 1\%.$$

Следует заметить, что предложенные методики могут быть успешно применены и для измерения скорости поверхностных ультразвуковых волн.

Выводы

1. При лазерном облучении тонких металлоизделий источником у.з. волн Лэмба является нагретая в зоне действия светового луча поверхность металла (оптико-термический излучатель). Считается, что за счет градиента температуры основной вклад в акустическое поле такого излучателя вносят его границы.

2. Исследования зависимости основных параметров импульса волны Лэмба от диаметра ОТ-излучателя показали, что начиная с диаметра 3,0 мм происходит его разделение на два импульса. При этом зависимость времени распространения максимумов этих импульсов от диаметра ОТ-излучателя является линейной.

3. Считая, что источниками разделенных импульсов являются диаметрально противоположные границы ОТ-излучателя, предложен графический метод расчета средней скорости волн Лэмба. При этом длина участка изделия, на котором производится измерение, не превышает диаметра ОТ-излучателя (лазерного пучка).

4. По предложенной методике проведен расчет средней скорости волн Лэмба для металлической пластины толщиной 0,6 мм. Предел допускаемой суммарной относительной погрешности при многократном косвенном измерении скорости не превышает 6 %.

Авторы выражают искреннюю благодарность А.А. Шульгинову за обсуждение результатов работы.

Литература

1. Ермолов, И.Н. Теория и практика ультразвукового контроля / И.Н. Ермолов. – М.: Машиностроение, 1981. – 230 с.

2. Методы акустического контроля металлов // под ред. Н.П. Алешина. – М.: Машиностроение, 1989. – 210 с.

3. Спекл-интерферометрическая установка для бесконтактного измерения скорости ультразвуковой волны Релея / А.П. Владимиров, Э.С. Горкунов, П.С. Еремин и др. // Приборы и техника эксперимента. – 2010. – № 1. – С. 128–131.

4. ЭМА-регистрация ультразвуковых волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, Е.В. Голубев, А.А. Шульгинов // Дефектоскопия. – 2013. – № 8. – С. 4–8.

5. Зайдель, А.Н. Ошибки измерений физических величин / А.Н. Зайдель. – Л.: Наука, 1986. – 108 с.

Поступила в редакцию 14 июля 2014 г.

MEASUREMENT OF VELOCITY OF LAMB WAVES EXCITED BY LASER**Yu.V. Petrov¹, S.Yu. Gurevich², E.V. Golubev³**

The experimental investigation of the dependence of ultrasound pulse parameters of Lamb waves excited by a round shaped optical-thermal emitter on its diameter was carried out. It was found that the ultrasound pulse is divided into two parts when the diameter is 3,0 mm or more. The sources of the separated pulses are considered to be the opposite edges of the optical-thermal emitter. The results show that the dependence of the propagation time of the maximum values for separated pulses on the diameter of the optical-thermal emitter is linear. Thus, the graphical method for the measurement of the group mean velocity of Lamb waves was offered.

Keywords: ultrasound Lamb waves; optical-thermal emitter laser excitation; broadband EMAT receiver.

References

1. Ermolov I.N. *Teoriya i praktika ul'trazvukovogo kontrolya* (Theory and practice of ultrasonic testing). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1981. 230 p. (in Russ.).
2. Aleshin N.P. *Metody akusticheskogo kontrolya metallov* (Methods of acoustic testing of metals). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1989. 210 p. (in Russ.).
3. Vladimirov A.P., Gorkunov E.S., Eremin P.S., Zadvorkin S.M., Shadrin M.V., Solov'ev K.E. *Pribory i tekhnika eksperimenta*. 2010. no. 1. pp. 128–131. (in Russ.).
4. Gurevich S.Yu., Petrov Yu.V., Golubev E.V., Shulginov A.A. EMA Recording of Ultrasound Lamb Waves Excited by Laser Nanopulses. *Russian Journal of Nondestructive Testing*. 2013. Vol. 49, no. 8, pp. 431–435. DOI: 10.1134/S1061830913080056.
5. Zaydel' A.N. *Oshibki izmereniy fizicheskikh velichin* (Measurement errors of physical quantities). Leningrad, Nauka Publ., 1986. 108 p. (in Russ.).

Received 14 July 2014

¹ Petrov Yuriy Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

² Gurevich Sergei Yurevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.
E-mail: sergur@susu.ac.ru

³ Golubev Evgeniy Valerievich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

E-mail: ev_golubev@mail.ru

РАСЧЁТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ЭНЕРГИЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АТОМАМИ УГЛЕРОДА В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ ДВУХСЛОЙНОМ СОСТОЯНИИ ГЦК-ЖЕЛЕЗА¹

Я.М. Ридный², А.А. Мирзоев³, Д.А. Мирзаев⁴

Проверена возможность использования модели антиферромагнитного двухслойного (АФМД) состояния для описания свойств парамагнитного ГЦК-железа. С использованием программного пакета WIEN2k проведены вычисления энергий взаимодействия между 2 атомами углерода, расположенными в четырех ближайших октаэдрических порах решетки ГЦК-железа. Обнаруженное притяжение между атомами углерода в первой и второй координационных сферах противоречит экспериментальным результатам, что говорит о том, что модель АФМД-состояния недостаточно точно описывает свойства парамагнитного ГЦК-железа. Впервые получена прямая зависимость между значением тетрагональности системы и средним магнитным моментом атома железа.

Ключевые слова: ГЦК-железо; первопринципное моделирование; примеси углерода; WIEN2k; метод LAPW.

Мартенситное превращение (переход ГЦК-железа в ОЦК-железо) – это основной механизм упрочнения железоуглеродистых сплавов и сталей. Наиболее известная трактовка этого превращения связана с трансформацией Бейна (рис. 1), при которой ГЦК-решётку железа (аустенит, γ -железо) представляют как несколько растянутую ОЦК-решётку железа (мартенсит, α -железо). Предполагается, что мартенситный переход состоит в непрерывной трансформации сжатия, при которой получается ОЦК-решётка, причём атомы углерода будут располагаться в ней также в ГЦК-решётке. Очевидно, что мартенсит наследует расположение атомов углерода в аустените, которое, в свою очередь, зависит от характера их взаимодействия в матрице железа. В связи с этим вопрос о распределении атомов углерода в ГЦК-решётке железа и их упорядочении является очень важным для теории мартенсита и физики процессов упрочнения в сталях.

Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе можно вычислить экспериментально, используя обработку данных Мессбауэровских спектров [1–4], экстраполяцию экспериментальных результатов функциями Грина [2] или методы термодинамического эксперимента [5–10]. Данные, полученные экспериментальными методами, представлены в табл. 1.

Таблица 1

Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе, эВ

Номер коор. сферы	1	2
Мессбауэр. спектр. [1–4]	0,036–0,115	0,075–0,169
Термодинамический эксп. [5–10]	0,065–1,55	–
Функции Грина [2]	0,15	0,4

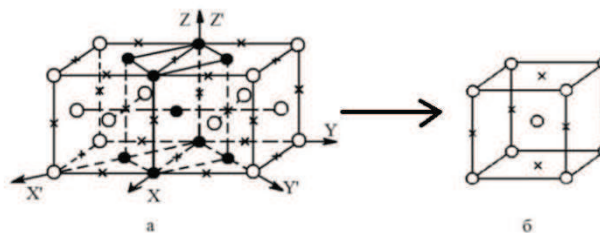


Рис. 1. Деформация Бейна а) ГЦК-решётка, б) ОЦК-решётка. Кругами обозначены атомы железа, крестами октапоры (в этих порах могут располагаться атомы углерода).

¹ Работа поддержана грантом РФФИ № 14-03-00618-а.

² Ридный Ярослав Максимович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: yaroslav@physics.susu.ac.ru

³ Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

⁴ Мирзаев Джалал Аминулович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физического металловедения и физики твердого тела, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: mirzayev@physmet.susu.ac.ru

Экспериментальные методы дают качественную оценку возможных энергий взаимодействия между атомами углерода в октапорах ГЦК-железа и позволяют рассмотреть только первые две координационные сферы относительно двух атомов углерода (расстояние между атомами углерода не превышает периода решётки). Методы компьютерного моделирования позволяют вычислить энергии взаимодействия между атомами углерода, находящимися на большем расстоянии друг от друга в ГЦК-железе, т.е. в следующих координационных сферах. В данной работе были рассмотрены первые четыре координационные сферы между атомами углерода (рис. 2). Расчёт проводился в программном пакете WIEN2k [11]. Обсуждение выбора параметров моделирования проведено в работе [12]. Указанный выбор параметров позволил достичь точности при вычислении энергии в 1 мРб.

В предыдущей работе [12] моделирование проводилось в немагнитном (НМ) и антиферромагнитном двухслойном (АФМД) состояниях, причём АФМД-состояние лучше воспроизводило экспериментальные результаты для энергии растворения углерода в ГЦК-железо и для изменения параметра решётки от концентрации углерода. При определении энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе не были учтены особенности магнитного порядка в АФМД-матрице. Появляются три возможных позиции взаимного расположения атомов углерода в первой координационной сфере и два во второй (рис. 2). Также не был учтен тот факт, что в АФМД-состоянии кубическая гранецентрированная (ГЦК) решётка перестраивается в тетрагональную гранецентрированную (ГЦТ) решётку. Такие расчёты были проведены в работе Хэпбурна [13]. В его работе использовались псевдопотенциальные методы. Несомненно, что эти методы обеспечивают меньшую точность расчётов, чем полнопотенциальные, так как учитывают только валентные электроны. Поэтому целью данной работы является проверка значений энергии полученных в работе Хэпбурна и оценка возможности использования АФМД-состояния для моделирования парамагнитного ГЦК-железа.

В отличие от ферромагнитного ОЦК-железа, в котором магнитные моменты атомов железа сонаправлены, моделирование ГЦК-железа представляет проблему. Это связано с тем, что при температурах выше точки Нееля, оцениваемой в 70 К, γ -железо существует в парамагнитном состоянии. В этом состоянии спины атомов разориентированы, и его моделирование зонными методами затруднено тем, что в них можно задать только коллинеарные магнитные состояния. В настоящее время существует два основных подхода к моделированию парамагнитного состояния. Во-первых, это использование для моделирования вместо парамагнитного беспорядка упорядоченных магнитных состояний типа антиферромагнитного однослойного (АФМ1) или антиферромагнитного двухслойного [13–16], обладающих нулевым суммарным моментом. Во втором подходе (т.н. DLM-методы, которые начали развиваться последние несколько лет), магнитные моменты атомов железа ориентируются случайным образом так, чтобы в сумме они давали результирующий момент, равный нулю [17–18]. Точку зрения, что АФМД-состояние лучше всего подходит для описания парамагнитного ГЦК-железа, поддерживают авторы работ [14–16]. В работах Медведевой [16] и Херпера [14] получено, что в ГЦК-железе основным состоянием является тетрагональное АФМД. В данной работе моделирование тетрагональности проводилось минимизацией энергии по параметру c/a (рис. 3). Расчёты проводились при фиксированном объёме, который был получен при минимизации полной энер-

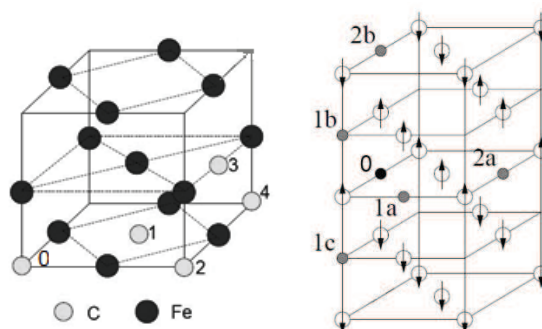


Рис. 2. Слева показаны положения атомов углерода, расположенных в первых четырех координационных сферах (1 – 4) от атома углерода «0». Справа показана АФМД матрица ГЦТ-железа. Прозрачные круги – атомы железа, непрозрачные – атомы углерода, находящиеся в первой (1а, 1б, 1с) и второй (2а, 2б) координационных сферах от атома углерода «0». Стрелочками показаны направления спинов атомов железа.

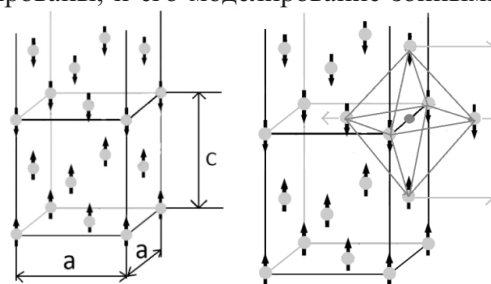


Рис. 3. АФМД матрица ГЦТ-железа до и после растворения атома углерода. Круги со стрелочками – атомы железа с их спинами, без стрелочек – атом углерода

гии кубического ГЦК-железа. Для аппроксимации результатов использовались полиномы четвёртого порядка. Производились вычисления полных энергий системы при различной тетрагональности системы в пяти и более точках. Данные параметров решётки, значений тетрагональности и магнитного момента АФМД ГЦТ железа, до и после растворения атомов углерода (рис. 3) представлены в табл. 2 и 3.

Таблица 2
Значение параметра решётки, тетрагональности и магнитного момента в АФМД-матрице ГЦТ-железа, до и после растворения углерода

Статья	Система	Значение параметра решётки a , Å	Тетрагональность, c/a	Средний магнитный момент атома Fe, μ_B
[16]	Fe32	3,46	1,08	2,0
[19]	Fe32	3,54	1,056	1,61
[20]	Fe32	3,47	1,08	1,7
Данная работа	Fe32	3,44	1,087	1,96
[16]	Fe32C	3,48	1,08	–
Данная работа	Fe32C	3,47	1,077	1,88

Таблица 3
Значение параметров решётки, тетрагональности и магнитного момента после растворения второго атома углерода в АФМД ГЦТ-железе. Положения атомов углерода соответствуют рис. 2.

Взаимное расположение атомов углерода	Значение параметра решётки, Å	Тетрагональность, c/a	Средний магнитный момент атома Fe, μ_B
0-1a	3,51	1,058	1,74
0-1b	3,495	1,075	1,84
0-1c	3,495	1,065	1,77
0-2a	3,49	1,086	1,82
0-2b	3,49	1,088	1,93
0-3	3,495	1,067	1,79
0-4	3,535	1,034	1,64

Из табл. 2 видно, что при растворении углерода в АФМД-матрице ГЦТ-железа тетрагональность системы понижается. Поскольку возникновение тетрагональности чистого γ -железа в АФМД-состоянии, по-видимому, связано с анизотропией магнитной структуры, то величина тетрагональности должна быть связана с магнитной энергией суперячейки. Поэтому понижение степени тетрагональности можно связать со снижением среднего магнитного момента на атом железа в суперячейке с $1,96\mu_B$ до $1,88\mu_B$. Этот вывод подтверждается и рассмотрением табл. 3. При растворении второго атома углерода происходит дальнейшее снижение тетрагональности и среднего магнитного момента для всех позиций, кроме 0-2b. Это связано с тем, что в позиции 0-2b атомы углерода внедряются в октапоры, расположенные с противоположных сторон от атома железа вдоль оси тетрагональности, в связи с чем расталкивают атомы железа в направлении данной оси, что препятствует снижению тетрагональности. Таким образом, значение тетрагональности системы и среднего магнитного момента атома железа непрерывно связаны.

Значения энергий взаимодействия между атомами углерода в АФМД ГЦТ-железе представлены в табл. 4.

Таблица 4
Значения энергий взаимодействия между атомами углерода в тетрагональном АФМД ГЦТ-железе. Положения атомов углерода соответствуют рис. 2.

Взаимное расположение атомов углерода	E , эВ [13]	E , эВ [Данная работа]
0-1a	1,04	0,36
0-1b	1,06	0,08
0-1c	0,034	–0,01
0-2a	0,174	0,97
0-2b	–0,023	–0,03
0-3	–	0,07
0-4	–	0,23

Из анализа данных табл. 4 видно, что в тетрагональном АФМД-железе атомы углерода отталкиваются в первых четырёх координационных сферах для всех позиций, кроме 0-1с и 0-2b. Полученные результаты качественно согласуются с результатами работы Хэпбурна. Однако существует и важное отличие от них: в позиции 0-1с между атомами углерода вместо отталкивания обнаружено притяжение. Отметим, что полученное притяжение между атомами углерода в первой и второй координационных сферах резко противоречит данным работ [1–10]. Это противоречие свидетельствует о том, что модель АФМД-состояния все же недостаточно реалистично описывает парамагнитное состояние ГЦК-железа.

Литература

1. Надутов, В.М. Межатомное взаимодействие и распределение атомов внедрения в железо-азотистых и железо-углеродистых сплавах: автореферат дис. д-ра физ.-мат. наук / В.М. Надутов. – Киев: ИМФ НАН Украины им. Г.В.Курдюмова, 1997. – 55 с.
2. Гаврилюк, В.Г. Распределение углерода в стали / В.Г. Гаврилюк. – Киев: Наукова Думка, 1987. – С. 208.
3. Oda, K. Local interactions in carbon-carbon and carbon-M (M: Al, Mn, Ni) atomic pairs in FCC γ -iron / K. Oda, H. Fujimura, H. Ino // *Physical: Condensed Matter*. – 1994. – Vol. 6. – P. 679492.
4. Blanter, M.S. Interaction of interstitial carbon atoms in austenite / M.S. Blanter // *Acta Metallurgica*. – 1999. – Vol. 41. – P. 7–8.
5. Shiflet, G.J. Further considerations on the thermodynamics of the proeutectoid ferrite reaction in Fe-C alloys / G.J. Shiflet, J.R. Bradley, H.I. Aaronson // *Metallurgical Transactions A*. – 1984. – Vol. 15. – P. 1287–1288.
6. Могутнов, Б.М. Термодинамика железо-углеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, Н.А. Томилин, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – 328 с.
7. Mou, Y. The carbon-carbon interaction energy in alpha Fe-C alloys / Y. Mou, H.I. Aaronson // *Acta Metallurgica*. – 1989. – Vol. 37. – Issue 3. – P. 757–765.
8. Кожеуров, В.А. К термодинамике растворов внедрения / В.А. Кожеуров // *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. – 1965. – № 2. – С. 10–16.
9. Dunn, W.W. The Application of Quasi-chemical Solid Solution Model to Carbon Austenite / W.W. Dunn, R.B. McLellan // *Metall Trans*. – 1970. – Vol. 1, № 5. – P. 1263–1265.
10. McLellan, R.B. The C-C interaction energy in iron-carbon solid solutions / R.B. McLellan // *Acta Metallurgica*. – 1987. – Vol. 35, № 8. – С. 2151–2156.
11. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147. – P. 71–76.
12. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энергию их растворения в ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 108–116.
13. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel / D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 88. – P. 024115.
14. Herper, H.C. Ab initio full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron / H.C. Herper, E. Hoffmann, P. Entel // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 60. – P. 3839–3848.
15. Magnetism and Local Distortions near Carbon Impurity in γ -Iron / D.W. Boukhvalov, Y.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99. – P. 247205.
16. Medvedeva, N.I. Magnetism in bcc and fcc Fe with carbon and manganese / N.I. Medvedeva, D.V. Aken, J.E. Medvedeva // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2010. – Vol. 22. – P. 316002.
17. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование энергии растворения атома углерода в парамагнитном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2013. – Т. 6, № 3. – С. 86–91.
18. Ponomareva, A.V. Ab initio calculation of the solution enthalpies of substitutional and interstitial impurities / A.V. Ponomareva, Yu.N. Gornostyrev, I.A. Abrikosov // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 90. – P. 014439.

19. Wang, J. Finite-temperature magnetism of tetragonal iron / J. Wang, D. Wang, Y. Kawazoe // Applied Physics Letters. – 2006. – Vol. 88. – P. 132513.

20. Qiu, S.L. Tetragonal equilibrium states of Mn and Fe / S.L. Qiu, P.M. Marcus, H. Ma // Journal of Applied Physics. – 2000. – Vol. 87, № 9. – P. 36–41.

Поступила в редакцию 8 сентября 2014 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2014, vol. 6, no. 4, pp. 53–58

FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF THE INTERACTION ENERGIES OF CARBON ATOMS IN THE ANTIFERROMAGNETIC DOUBLE-LAYER FCC-IRON

Ya.M. Ridnyi¹, A.A. Mirzoev², D.A. Mirzaev³

The possibility of using a model of the antiferromagnetic double-layer state (AFMD) to describe the properties of the paramagnetic FCC iron was tested by WIEN2k software package. The interaction energies of carbon atoms in FCC iron for the first four octahedral sites were calculated. The presence of attraction between the carbon atoms in the first and second coordination spheres contradicts the experimental results. The conclusion can be drawn that the model of AFMD state describing the paramagnetic FCC iron is not valid.

Keywords: FCC iron; first principle simulation; carbon impurity; WIEN2k; LAPW method.

References

1. Nadutov V.M. *Mezhatomnoe vzaimodeystvie i raspredelenie atomov vnedreniya v zhelezo-azotistyykh i zhelezo-uglerodistyykh splavakh. Avtoreferat na soiskanie uchyenoy stepeni doktora fiziko-matematicheskikh nauk* (Interatomic interaction and distribution of interstitial atoms in iron-nitrogenous and iron-carbon alloys. Dr. phys. and math. sci. synopsis of diss.). Kiev: IMF NAN Ukrainy im. G.V. Kurdyumova, 1997. 55 p. (in Russ.).

2. Gavriilyuk V.G. *Raspredelenie ugleroda v stali* (Carbon distribution in steel). Kiev: Naukova Dumka. 1987. p. 208. (in Russ.).

3. Oda K., Fujimura H., Ino H. Local interactions in carbon-carbon and carbon-M (M: Al, Mn, Ni) atomic pairs in FCC γ -iron. *Physical: Condensed Matter*. 1994. Vol. 6. p. 679492.

4. Blanter M.S. Interaction of interstitial carbon atoms in austenite. *Acta Metallurgica*. 1999. Vol. 41. pp. 7–8.

5. Shiflet G.J., Bradley J.R., Aaronson H.I. Further considerations on the thermodynamics of the proeutectoid ferrite reaction in Fe-C alloys. *Metallurgical Transactions A*. 1984. Vol. 15. pp. 1287–1288.

6. Mogutnov B.M., Tomilin N.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika zhelezo-uglerodistyykh splavov* (Thermodynamics of iron-carbon alloys). Moscow, Metallurgiya Publ. 1972. 328 p. (in Russ.).

7. Mou Y., Aaronson H.I. The carbon-carbon interaction energy in alpha Fe-C alloys. *Acta Metallurgica*. 1989. Vol. 37. Issue 3. pp. 757–765.

8. Kozheurov V.A. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya*. 1965. no. 2. pp. 10–16. (in Russ.).

9. Dunn W.W., McLellan R.B. The Application of Quasi-chemical Solid Solution Model to Carbon Austenite. *Metall Trans*. 1970. Vol. 1, no. 5. pp. 1263–1265.

10. McLellan R.B. The C-C interaction energy in iron-carbon solid solutions. *Acta Metallurgica*. 1987. Vol. 35, no. 8. pp. 2151–2156.

¹ Ridnyi Yaroslav Maksimovich is Post-graduate Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.
E-mail: yaroslav@physics.susu.ac.ru

² Mirzoev Aleksander Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

³ Mirzaev Dzhahalal Aminulovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Physical Metallurgy and Solid State Physics, Southern Ural State University.

E-mail: mirzayev@physmet.susu.ac.ru

11. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science. *Computer Physics Communications*. 2002. Vol. 147. pp. 71–76.
12. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Ab-initio modelirovanie vliyaniya blizhnego okruzheniya primesey ugleroda na energiyu ikh rastvoreniya v GTsK-zheleze (Ab-initio simulation of influence of short-range ordering carbon impurities on the energy of their dissolution in the FCC-iron). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2013. Vol. 5, no. 2. pp. 108–116. (in Russ.).
13. Hepburn D.J., Ferguson D., Gardner S., Ackland G.J. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel. *Physical Review B*. 2013. Vol. 88. p. 024115.
14. Herper H.C., Hoffmann E., Entel P. Ab initio full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron. *Physical Review B*. 1999. Vol. 60. pp. 3839–3848.
15. Boukhalov D.W., Gornostyrev Y.N., Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I. Magnetism and Local Distortions near Carbon Impurity in γ -Iron. *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99. p. 247205.
16. Medvedeva N.I., Aken D.V., Medvedeva J.E. Magnetism in bcc and fcc Fe with carbon and manganese. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2010. Vol. 22. p. 316002.
17. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Ab-initio modelirovanie energii rastvoreniya atoma ugleroda v paramagnitnom GTsK-zheleze (Ab-initio simulation of dissolution energy of carbon atom in the paramagnetic state of FCC-iron). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2013. Vol. 6, no. 3. pp. 86–91. (in Russ.).
18. Ponomareva A.V., Gornostyrev Yu.N., Abrikosov I.A. Ab initio calculation of the solution enthalpies of substitutional and interstitial impurities. *Physical Review B*. 2014. Vol. 90. P. 014439.
19. Wang J., Wang D., Kawazoe Y. Finite-temperature magnetism of tetragonal iron. *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 88. p. 132513.
20. Qiu S.L., Marcus P.M., Ma H. Tetragonal equilibrium states of Mn and Fe. *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 87, no. 9. pp. 36–41.

Received 8 September 2014

Персоналии

УДК 518:51(09)

БОРИС ВЛАДИМИРОВИЧ ЛОГИНОВ. К 75-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ

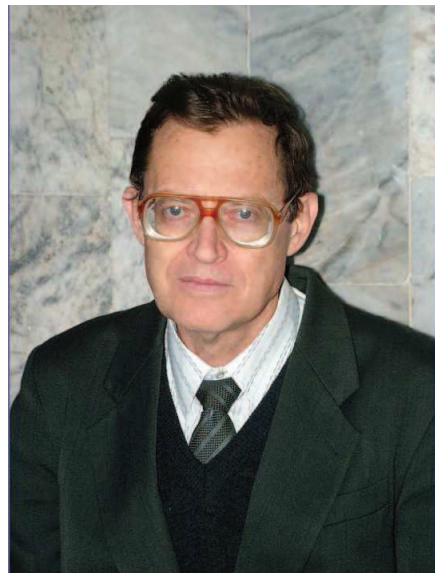
В.И. Заляпин¹, В.В. Карачик², Л.Р. Ким-Тян³, Л.Д. Менихес⁴, Ю.Б. Русак⁵

14 ноября 2013 года исполнилось 75 лет доктору физико-математических наук, профессору кафедры «Высшая математика» УлГТУ Борису Владимировичу Логинову. Заслуженный деятель науки Российской Федерации, доктор физ.-мат. наук, профессор Б.В. Логинов – широко известен не только у нас в стране, но и за рубежом. Развиваемые им научные направления и методы оказали значительное и плодотворное влияние на развитие как чистой математики, так и её приложений в задачах механики, физики и вычислительной математики.

Ключевые слова: персоналии; юбилей; творческая биография.

Борис Владимирович Логинов родился в 1938 году в г. Термез Узбекской ССР. Отец Бориса Владимировича, – Владимир Георгиевич Логинов, инженер–диспетчер Минводхоза, уроженец Тамбовской губернии. Анна Онуфриевна Горбатенко, мать Бориса Владимировича, уроженка города Шклова (Белоруссия), окончила фармацевтический институт и до войны работала по специальности, а после войны – бухгалтером.

В 1940 году семье Логиновых пришлось переехать в г. Ташкент. За образованием Бориса Владимировича в Ташкенте следила его теть, Наталия Георгиевна, работавшая школьной учительницей. Она много сделала для его воспитания и образования, сумела привить племяннику любовь к учению, ответственность, трудолюбие. До сих пор Борис Владимирович с теплотой и благодарностью вспоминает своих школьных наставников: учительницу физики Миру Моисеевну Русак, учителей математики Владимира Михайловича Русских и Петра Ивановича Тетенева, учительницу русского языка и литературы Анну Степановну Коваленко, преподавателя химии Веру Дмитриевну Галкину.



В 1956 году Борис Владимирович окончил с золотой медалью школу № 32 г. Ташкента и поступил на физическое отделение физико-математического факультета Среднеазиатского государственного университета им. В.И. Ленина, созданного в 1924 г. и впоследствии переименованного в Ташкентский государственный университет. Через три недели занятий, поняв, что его место не там, Борис Владимирович переводится на математическое отделение. В 1959 г. факультет разделили на два – физический и механико-математический. На 3 курсе всех студентов мехмата ТашГУ решили специализировать как вычислителей – в СССР создавалась вычислительная матема-

¹ Заляпин Владимир Ильич – кандидат физико-математических наук, профессор, кафедра математического и функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: vzal@susu.ac.ru

² Карачик Валерий Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: karachik@susu.ru

³ Ким-Тян Луиза Ревмировна – доцент, кафедра математики, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва.

E-mail: kim-tyan@rambler.ru

⁴ Менихес Леонид Давидович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

⁵ Русак Юрий Борисович – кандидат физико-математических наук, APS 6, department of Social Services, Australia.

Персоналии

тика и кибернетика, но трое студентов, в том числе и Б.В. Логинов, решили остаться в теоретической математике. Борис Владимирович был одним из лучших студентов на курсе, с высоким интеллектом, независимым мышлением, огромным трудолюбием и работоспособностью.

Он заинтересовался проблемами теории дифференциальных уравнений и математической физики и стал работать с проф. И.С. Аржаных. Ивана Семеновича Аржаных, который руководил его дипломной работой и кандидатской диссертацией, он считает своим главным учителем и до сих пор обращается к его научному наследию.

В 1961 году Борис Владимирович Логинов с отличием окончил механико-математический факультет Ташкентского государственного университета по кафедре математического анализа и был оставлен в аспирантуре. Его кандидатская диссертация «Оценки точности метода возмущений в теории функциональных уравнений» была успешно защищена в 1965 году. После окончания аспирантуры (ноябрь 1964 г.) Борис Владимирович Логинов два года работал ассистентом кафедры математического анализа ТашГУ. Осенью 1966 г. по рекомендации академика С. Х. Сираждинова его переводят на должность старшего научного сотрудника в Институт математики АН Узбекской ССР им. В. И. Романовского в отдел дифференциальных уравнений, возглавляемый чл.-корр. АН УзССР М.С. Салахитдиновым. В это время он стал заниматься спектральной теорией линейных операторов.

Во время годичной стажировки (сентябрь 1967 г. – май 1968 г.) на кафедре вычислительной математики Ленинградского государственного университета (заведующий – проф. М.К. Гавурин), Б.В. Логинов заинтересовался некорректными задачами и написал статью «О решении операторных уравнений первого рода».

Знакомство с молодым доктором наук В.А. Треногиным и совместная работа по изучению групповой симметрии в задачах теории дифференциальных уравнений положили начало их последующему многолетнему сотрудничеству и сыграли большую роль в научном становлении Б. В. Логинова. Впоследствии В.А. Треногин вместе с Б.В. Логиновым и Н.А. Сидоровым стали основателями известной в СССР и за рубежом научной школы по теории ветвления нелинейных операторов, в том числе и в условиях групповой симметрии.

В своих работах Б.В. Логинов рассматривает различные приложения групповой симметрии в теории ветвления. В это же время у него появляются первые ученики, продолжающие и развивающие его исследования – Д.Г. Рахимов, защитивший в 1977 г. кандидатскую диссертацию по методу ложных возмущений в задачах на собственные значения, и Ю.Б. Русак, любимый ученик Бориса Владимировича, защитивший кандидатскую диссертацию «Роль жордановой структуры в задачах теории ветвления».

Начало глубоким и интересным приложениям теории ветвления с симметрией положили работы Б.В. Логинова по аэроупругости (1979 г.), о капиллярно гравитационных волнах над ровным дном (1975) и о фазовых переходах в статистической теории кристалла (1979–1980).

В октябре 1982 г. Б.В. Логинов защитил докторскую диссертацию «Теория ветвления решений нелинейных уравнений в условиях групповой инвариантности» на факультете ВМиК в МГУ. Позднее (1985 г.) докторская диссертация была опубликована в качестве монографии в издательстве «Фан» (г. Ташкент).

В 1985 году Борис Владимирович был назначен заведующим отделом «Прикладная математика» Института математики Узбекистана, у него появились новые аспиранты, он активно участвует в международных конференциях. Под его руководством в Ташкенте защитили кандидатские диссертации 8 аспирантов.

В январе 1992 г. Б. В. Логинову присвоено ученое звание профессора по специальности 01.01.02 – дифференциальные уравнения, а с декабря 1993 г. он приступает к работе в Ульяновском государственном техническом университете в должности профессора кафедры «Высшая математика».

В 1995 году Б.В. Логинов, В.А. Треногин, Н.А. Сидоров и П.А. Вельмисов участвуют в международной конференции ICIAM-95, где состоялось их знакомство с выдающимся румынским математиком, создателем и президентом румынского общества прикладной и промышленной математики (ROMAI) профессором Аделиной Джорджеску. С этого времени Б.В. Логинова связывают самые тесные научные связи с румынскими математиками.

Одновременно не прерываются и контакты проф. Б.В. Логинова с математиками Узбекистана.

Борис Владимирович обладает замечательным даром – умением видеть и ставить новые проблемы. Его увлеченность наукой всегда привлекала большое число учеников. Им создана научная школа нелинейных явлений в вузах Ульяновска и Саранска – интенсивно работающий научный коллектив. Он всегда был и остается научным лидером, обладает высочайшим профессиональным авторитетом. Борис Владимирович всегда предъявляет очень высокие требования к качеству и своим научным результатам, и к результатам своих сотрудников и учеников. Его требовательность сочетается с отзывчивостью, желанием и умением прийти на помощь, поддержать своих учеников, коллег и сотрудников. Он, не жалея собственного времени и здоровья, готов не только консультировать своих учеников, но и выполнять, наряду с ними рутинную техническую работу. Коллега и соавтор Бориса Владимировича В.А. Треногин в одном из своих последних выступлений на международной конференции в Суздале по дифференциальным уравнениям и динамическим системам, докладывая результаты совместных с Б.В. Логиновым и Л.Р. Ким-Тян исследований, заметил: «Такие расчеты способны делать только японцы, женщины и Борис Владимирович, и он делает эту черную работу наравне со своими сотрудниками».

Многолетний цикл исследований Б.В. Логинова в области нелинейных явлений, нелинейного анализа и спектральной теории линейных операторов отражен в 485 научных работах, из них 270 статей в республиканских, центральных и зарубежных журналах, сборниках трудов конференций различного ранга, 4 монографии (см., например, Библиографический указатель трудов / сост. О. В. Горшенина. – Ульяновск : УлГТУ, 2008. – 52 с. – (Серия «Ученые УлГТУ»). Эти работы получили международное признание, цитируются в математической литературе. О широте научных интересов юбиляра можно судить по тематике диссертаций, защищенных его аспирантами, обширному списку опубликованных работ.

Профессор Б.В. Логинов является членом ряда отечественных и зарубежных научных обществ – Академии естествознания, Академии нелинейных наук, СВМО (Средневожское математическое общество), AMS (Американское математическое общество, США), IFNA (Международная федерация нелинейного анализа, США), GAMM (Общество прикладной математики и механики, Германия), ROMAI (Румынское общество прикладной и индустриальной математики). Он – член редколлегий журналов СВМО, ROMAI Journal (Румыния), «Известия Иркутского государственного университета. Серия Математика», «Вестник УлГТУ», трудов УлГТУ и УлГПУ. Б.В. Логинов – референт таких авторитетных изданий, как РЖ «Математика», «Mathematical Reviews», «Zentralblatt für Mathematik» (2043 рефератов), постоянный рецензент нескольких центральных научных журналов в том числе журнала «Дифференциальные уравнения».

Борис Владимирович принимает активное участие во многих всесоюзных, всероссийских и международных математических конференциях, симпозиумах и конгрессах. Он многократно был организатором работы секций и мини-симпозиумов в рамках этих форумов, приглашался в качестве пленарного докладчика. Б.В. Логинов являлся руководителем и исполнителем научных грантов и федеральных целевых программ правительства РФ, неоднократно получал гранты оргкомитетов международных конференций.

Б.В. Логинов является членом диссертационных советов при УлГТУ, Самарском и Мордовском университетах. Он неоднократно принимал участие в работе диссертационных советов ведущих университетов страны в качестве официального оппонента. Тесные контакты и научное сотрудничество связывают Бориса Владимировича с научными школами многих университетов и научно-исследовательских институтов как в нашей стране, так и за рубежом.

За высокие научные достижения в 1987 г. Б.В. Логинов награжден орденом «Знак Почета», имеет отраслевые награды, неоднократно поощрялся руководством Института Математики АН УзССР и УлГТУ. С 1998 г. имеет звание «Ветеран труда». 1 февраля 2007 года ему присвоено звание «Заслуженный деятель науки РФ». Широта научных интересов, прикладная направленность исследований, творческая активность, обширные научные контакты в России, СНГ и дальнем зарубежье характеризуют Б.В. Логинова как ученого международного класса.

Борис Владимирович Логинов на протяжении многих лет сохраняет творческую активность, он живет в науке и в профессии. Многие поколения коллег и учеников благодарны ему – замечательному ученому, педагогу и человеку.

Мы желаем Борису Владимировичу Логинову крепкого здоровья, долгих лет активной жизни и новых творческих достижений!

Поступила в редакцию 30 сентября 2014 г.

BORIS VLADIMIROVICH LOGINOV. TO THE 75-TH ANNIVERSARY

V.I. Zalyapin¹, V.V. Karachik², L.R. Kim-Tian³, L.D. Menikhes⁴, Yu.B. Rousak⁵

Boris Vladimirovich Loginov, Doctor of Physical and Mathematical sciences, Professor of the Chair of Higher Mathematics at UISTU celebrated his 75th anniversary on the 14th of November, 2013. Honored Scientist of the Russian Federation, professor Loginov is widely known not only in our country but also abroad. He has contributed a lot to the development of both pure and applied mathematics in the spheres of mechanics, physics and computational mathematics.

Keywords: personalia; anniversary; creative biography.

Received 30 September 2014

¹ Zalyapin Vladimir Illich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical and Functional analysis Department, South Ural State University.

E-mail: vzal@susu.ac.ru

² Karachik Valeriy Valentinovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical and Functional Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: karachik@susu.ru

³ Kim-Tyan Luiza Revmirovna is Associate Professor, Mathematical Department, National University of Science and Technology MISIS, Moscow.

E-mail: kim-tyan@rambler.ru

⁴ Menikhes Leonid Davidovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical and Functional Analysis Department, South Ural State University.

E-mail: leonid.menikhes@gmail.com

⁵ Rousak Yuriy Borisovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), APS 6, Department of Social Services, Australia.

СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНИТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», Е29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Если рисунок создан не средствами MS Office, то желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору Мирзоеву Александру Аминулаевичу [Prof. Mirzoev Aleksander Aminulaevich, General and Theoretical Physics Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: vestnik@physics.susu.ac.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. www.vestnik.susu.ac.ru/mmph.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, <http://vestnik.yourgpu.rf/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

Редактор А.Ю. Федерякин

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 31.10.2014. Формат 60×84 1/8. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 7,44. Тираж 500 экз. Заказ 397/538.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.