

# СОДЕРЖАНИЕ

Том 86, номер 11, 2022

## Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов

- Особенности модуляции состава при спинодальном распаде упругодеформированных полупроводниковых твердых растворов в условиях энергетического резонанса  
*В. В. Кузнецов, П. П. Москвин, С. И. Скуратовский* 1526
- Температурные режимы функционирования “тепловой ячейки”  
*О. В. Володина, А. А. Скворцов, Д. Е. Пионкин* 1536
- Температурная стимуляция поляризации полимеров в неоднородном температурном поле  
*Н. С. Камалова, Н. Н. Матвеев, Н. Ю. Евсикова, В. И. Лисицын* 1541
- Магнитные свойства бериллиевой бронзы БрБ-2, состаренной в постоянном магнитном поле  
*Ю. В. Осинская, А. В. Покоев, С. В. Дивинский, С. Г. Магамедова* 1545
- Эволюция микроструктуры, прочности, пластичности и электропроводности в ультрамелкозернистом сплаве Cu–0.5Cr при холодной прокатке и старении  
*Е. А. Саркеева, И. В. Александров* 1553
- Моделирование и качественная оценка процессов тепломассопереноса, обусловленных взаимодействием широких пучков заряженных частиц или электромагнитного излучения с многослойными планарными структурами  
*М. А. Степович, Д. В. Туртин, В. В. Калманович* 1560
- Влияние магнитоимпульсной обработки на гексагональные скандийзамещенные ферриты с мультиферроидными свойствами  
*М. Н. Шипко, М. А. Степович, В. В. Коровушкин, В. Г. Костишин, А. В. Труханов, М. А. Дарвиш* 1565
- Эволюция кристаллографической текстуры, микроструктуры и механических свойств при прокатке сплавов системы Cu–Zn с разным размером зерна  
*Л. И. Зайнуллина, И. В. Александров* 1570
- Деформационное поведение гидрированного мембранного сплава на основе палладия  
*О. В. Акимова, Р. Д. Светогоров, С. В. Горбунов, Н. Р. Рошан* 1579
- Подавление равновесной  $\gamma$ -фазы при кручении под высоким квазигидростатическим давлением в камере Бриджмена ферромагнитного сплава  $Fe_{50}Ni_{25}Co_{25}$   
*Л. Ф. Мурадимова, А. М. Глезер, И. В. Щетинин, А. А. Томчук, Д. Л. Дьяконов, Н. С. Перов* 1584

## Волновые явления: физика и применение

- Особенности формирования квантового фантомного изображения с учетом эффектов самовоздействия, кросс-взаимодействия и волновой расстройки  
*А. В. Белинский, Р. Сингх* 1590
- Регрессия экспериментальных кривых методом ортогонализированных полиномов  
*О. И. Топор, А. А. Белов, Л. В. Бородачев* 1593
- Методика определения состояния гетероструктуры мощного ИК диодного лазера по токовой зависимости его спектральной характеристики  
*В. В. Близнюк, В. А. Паршин, А. Г. Ржанов, О. И. Семенова, А. И. Смирнов, А. Е. Тарасов* 1598
- Фрактальные световые структуры для стимуляционной терапии в офтальмологии  
*О. М. Вохник, П. В. Короленко, Р. Т. Кубанов* 1602

Сверхмощные лазерные импульсы в фотонном кристалле с углеродными нанотрубками и полимером	
<i>Ю. В. Двужилова, И. С. Двужилов, М. Б. Белоненко</i>	1606
Применение скалярных и комбинированных приемников в задаче шумовой интерферометрии при наличии локализованных источников поля	
<i>К. В. Дмитриев</i>	1611
Свойства фрактальных спекл-полей: теория и приложения	
<i>А. М. Зотов, П. В. Короленко, Н. Н. Павлов</i>	1617
Лазерный оптико-акустический метод оценки локальной микротрещиноватости образцов минералов	
<i>Н. Б. Подымова, Ю. Г. Соколовская</i>	1622
Квадратуры со сверхстепенной сходимостью	
<i>М. А. Тинтул, В. С. Хохлачев, А. А. Белов</i>	1628
Об аналитическом описании динамики планарных импульсов, распространяющихся в режиме туннельной ионизации	
<i>В. А. Халяпин, А. Н. Бугай</i>	1634

### **Электромагнитное поле и материалы (фундаментальные физические исследования)**

Дифракция обратной объемной спиновой волны на сквозном отверстии в ферритовой пластине	
<i>С. В. Герус, Э. Г. Локк, А. Ю. Анненков, А. Б. Хутиева, А. В. Садовников</i>	1642
Невзаимный характер спин-волнового сигнала в структуре, состоящей из связанных интерферометров Фабри–Перо с металлизированными и полупроводниковыми нагрузками на отдельно взятых плечах	
<i>Е. Н. Бегинин, А. В. Садовников</i>	1648
Оптимизация узкополосной широкоугольной фильтрации в геостационарном детекторе молний	
<i>А. Л. Филатов</i>	1654
Лазерно-электрический метод контроля дефектности высоковольтных диэлектрических элементов	
<i>В. А. Голенищев-Кутузов, А. В. Голенищев-Кутузов, А. В. Семенников, Р. И. Калимуллин, Д. А. Иванов</i>	1660
Модель определения геометрических и механических параметров линий электропередачи с учетом колебаний провода в вертикальной и горизонтальной плоскостях	
<i>Д. А. Ярославский, М. Ф. Садыков, М. П. Горячев, Н. К. Андреев</i>	1664
Теоретическое исследование слабосвязанных трехатомных систем с помощью метода представления дискретных переменных	
<i>В. А. Тимошенко, Е. А. Яревский</i>	1668

# Contents

---

---

Vol. 86, No. 11, 2022

---

---

## Crystal Physics and Mechanical Behavior of Advanced Materials

- Peculiarities of the composition modulation effect during spinodal decay of elastically deformed semiconductor solid solutions under energy resonance conditions  
*V. V. Kuznetsov, P. P. Moskvina, S. I. Skuratovskiy* 1526
- Temperature modes of the ‘heat cell’ functioning  
*O. V. Volodina, A. A. Skvortsov, D. E. Pshonkin* 1536
- Temperature stimulation of polymer polarization in an inhomogeneous temperature field  
*N. S. Kamalova, N. N. Matveev, N. Yu. Evsikova, V. I. Lisitsyn* 1541
- Magnetic properties of beryllium bronze BrB-2 aged in a constant magnetic field  
*Yu. V. Osinskaya, A. V. Pokoev, S. V. Divinsky, S. G. Magamedova* 1545
- Evolution of microstructure, strength, plasticity, and electric conductivity in ultrafine-grained Cu–0.5Cr alloy during cold rolling and aging  
*E. A. Sarkeeva, I. V. Alexandrov* 1553
- Modeling and qualitative assessment of heat and mass transfer processes due to interaction of wide beams of charged particles or electromagnetic radiation with multilayer planar structures  
*M. A. Stepovich, D. V. Turtin, V. V. Kalmanovich* 1560
- Effect of magnetic pulse treatment on hexagonal scandium-substituted ferrites with multiferroic properties  
*M. N. Shipko, M. A. Stepovich, V. V. Korovushkin, V. G. Kostishin, A. V. Trukhanov, M. A. Darvish* 1565
- Evolution of crystallographic texture, microstructure, and mechanical properties during flat rolling of the Cu–Zn alloys system with different grain sizes  
*L. I. Zaynullina, I. V. Alexandrov* 1570
- Deformation behavior of hydrogenated palladium-based membrane alloy  
*O. V. Akimova, R. D. Svetogorov, S. V. Gorbunov, N. R. Roshan* 1579
- Suppression of the equilibrium  $\gamma$ -phase by torsion under high quasi-hydrostatic pressure in the Bridgeman chamber of the ferromagnetic  $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{25}\text{Co}_{25}$  alloy  
*L. F. Muradimova, A. M. Glezer, I. V. Shchetinin, A. A. Tomchuk, D. L. D'yakov, N. S. Perov* 1584
- 

## Wave Phenomena: Physics and Applications

- Some features of the formation of quantum ghost imaging considering the effects of self-phase modulation, cross-phase modulation, and phase mismatch  
*A. V. Belinsky, R. Singh* 1590
- Regression of experimental data via the orthogonalized polynomial method  
*O. I. Topor, A. A. Belov, L. V. Borodachev* 1593
- A method for determining the heterostructure condition of a high-power IR diode laser based on the current dependence of its spectral characteristics  
*V. V. Bliznyuk, V. A. Parshin, A. G. Rzhanov, O. I. Semenova, A. I. Smirnov, A. E. Tarasov* 1598

Fractal light structures for stimulation therapy in ophthalmology	
<i>O. M. Vokhnik, P. V. Korolenko, R. T. Kubanov</i>	1602
High-power laser pulses in a photonic crystal with carbon nanotubes and a polymer	
<i>Yu. V. Dvuzhilova, I. S. Dvuzhilov, M. B. Belonenko</i>	1606
The use of scalar and combined receivers in the noise interferometry problem in the presence of localized field sources	
<i>K. V. Dmitriev</i>	1611
Properties of fractal speckle fields: theory and applications	
<i>A. M. Zotov, P. V. Korolenko, N. N. Pavlov</i>	1617
Laser optoacoustic technique for estimating a local microcracking in mineral samples	
<i>N. B. Podymova, Yu. G. Sokolovskaya</i>	1622
Quadratures with super-power convergence	
<i>M. A. Tintul, V. S. Khokhlachev, A. A. Belov</i>	1628
On the analytical description of the dynamics of planar pulses propagating in the tunnel ionization mode	
<i>V. A. Khalyapin, A. N. Bugay</i>	1634

---

### **Electromagnetic Field and Materials (Fundamental Physical Research)**

Diffraction of backward volume spin waves on a through hole in a ferrite plate	
<i>S. V. Gerus, E. H. Lock, A. Yu. Annenkov, A. B. Khutieva, A. V. Sadovnikov</i>	1642
Non-reciprocal character of a spin-wave propagation in a structure consisting of coupled Fabry–Perot interferometers with metallized and semiconductor layers	
<i>E. N. Beginin, A. V. Sadovnikov</i>	1648
Optimization of narrow-band wide-angle filtering for geostationary lightning mapper	
<i>A. L. Filatov</i>	1654
Laser-electrical method for defect control of high-voltage dielectric elements	
<i>V. A. Golenishchev-Kutuzov, A. V. Golenishchev-Kutuzov, A. V. Semennikov, R. I. Kalimullin, D. A. Ivanov</i>	1660
Model for determination of geometric and mechanical parameters of power lines considering oscillations of the electrical wire in a vertical and horizontal planes	
<i>D. A. Yaroslavsky, M. F. Sadykov, M. P. Goryachev, N. K. Andreev</i>	1664

---

Theoretical study of weakly-bound triatomic systems using discrete variable representation method	
<i>V. A. Timoshenko, E. A. Yarevsky</i>	1668

---

# **Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов**

Редактор тематического выпуска  
докт. физ.-мат. наук **А. М. Глезер**

## ОСОБЕННОСТИ МОДУЛЯЦИИ СОСТАВА ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ УПРУГОДЕФОРМИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В УСЛОВИЯХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА

© 2022 г. В. В. Кузнецов<sup>1, \*</sup>, П. П. Москвин<sup>2</sup>, С. И. Скуратовский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
“Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет “ЛЭТИ”  
имени В.И. Ульянова (Ленина)”, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Государственный университет “Житомирська политехника”, Житомир, Украина

\*E-mail: vvkuznetsov@inbox.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Уравнение Кана–Хилларда адаптировано к процессу спиноподального распада упруго деформированных тройных и четверных твердых растворов на основе соединений  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$ . Полученная система дифференциальных уравнений применена для описания эффекта модуляции состава, обнаруженного при синтезе гетероструктур на основе твердых растворов  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$ . Определены диапазоны термодинамических параметров процесса синтеза гетероструктур, в которых проявляется энергорезонансный модуляционный эффект.

DOI: 10.31857/S0367676522110163

### ВВЕДЕНИЕ

Снижение температуры синтеза приводит многокомпонентную систему в состояние термодинамической нестабильности, с последующей релаксацией, приводящей к формированию периодической по составу структуры. Такое колебательное изменение состава под названием “эффект модуляции” [1–4] обнаружено экспериментально в тройных и четверных твердых растворах  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$ . Этот эффект модуляции состава, может приводить к формированию сверхрешетки с уникальными электрическими и оптическими свойствами [5]. Управляемый синтез релаксационных систем с модулированным составом и прогнозируемыми свойствами возможен лишь при полном понимании физико-химической сущности процессов их формирования. Для решения указанной задачи нами основополагающие уравнения Кана и Хилларда были адаптированы и применены для описания спиноподального распада тройных твердых растворов  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$ , осажденных как на ориентированную [6, 8, 9], так и на аморфную подложки [7], а также четверных систем  $A^3B^5$  изопериодных бинарной подложке [10, 11].

### ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ПРОСТЫХ РАСТВОРОВ К ОПИСАНИЮ РАСПАДА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Применение закона сохранения вещества в процессе спиноподального распада и принципов вариационного исчисления позволили получить дифференциальное уравнение для описания изменения состава распадающейся фазы. Конечное распределения состава твердого раствора после его распада вытекает из стационарного решения уравнения [12, 13]. Для этого решения в основополагающих выражениях достаточно положить  $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ . Тогда, после тривиальных преобразований получим:

$$M \cdot \nabla^2 \left[ \frac{\partial \Delta G_0}{\partial c} - \beta \nabla^2 c \right] = 0$$

или  $\left[ \frac{\partial \Delta G_0}{\partial c} - \beta \nabla^2 c \right] = \text{const},$

где  $M$  – кинетический коэффициент переноса энергии;  $\Delta G_0 = G(c) - G(\bar{c})$  – изменение свободной энергии Гиббса системы из-за появления вариаций текущего состава  $c$  твердого раствора;  $\bar{c}$  – усредненный состав матрицы твердого

раствора;  $\nabla$  – оператор набла, примененный к функции распределения состава по слою материала;  $\beta$  – коэффициент разложения в степенной ряд свободной энергии Гиббса в неоднородном по составу твердом растворе [12, 13].

Если учесть очевидное соотношение  $\frac{\partial \Delta G_0}{\partial c} = \frac{\partial G}{\partial c}$ , то последнее выражение полностью совпадает с уравнением для описания состава твердого раствора после спинодального распада, которое используется в [14]. Следует отметить, что константа, появившаяся после интегрирования уравнения Кана–Хилларда для стационарного состояния, в [14] интерпретируется как химический потенциал твердой фазы. Поэтому последнюю форму дифференциального уравнения для одномерного случая можно переписать в следующем виде:

$$\beta \frac{d^2 c}{dz^2} = \frac{dG}{dc} - \mu. \quad (1)$$

Это уравнение идентично уравнению из [12, 13]. В рамках линейной термодинамики представленные уравнения эквивалентны. Однако форма с использованием производной второго порядка, оказывается предпочтительней по сравнению с исходной в связи с меньшим порядком дифференциального уравнения (1).

Применение уравнения Кана–Хилларда (1) к описанию распределения состава в полупроводниковых твердых растворах замещения предполагает знание аналитического выражения для свободной энергии твердой фазы. Моделирование энергетического состояния ненапряженных твердых растворов на основе соединений  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$  осуществляли в рамках теории простых растворов, которая успешно использована для описания фазовых  $p$ – $T$ – $x$  диаграмм в указанных системах [15, 16].

Представим процесс спинодального распада четверного твердого раствора как процесс, происходящий в двух энергетически слабосвязанных подсистемах, сформированных металлической и металлоидной подрешетками структуры сфалерита. Согласно [15, 16] и уравнению (1) вариации состава твердого раствора в каждой подрешетке можно связать с изменением свободной энергии всей твердой фазы. Тогда окончательное (стационарное) распределение состава в каждой из подрешеток должно подчиняться системе дифференциальных уравнений, которые по своей форме соответствуют модели Кана–Хилларда:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(x, y)}{\partial x} - \beta_1 \frac{dx^2}{dz^2} - \mu_1 &= 0, \\ \frac{\partial G(x, y)}{\partial y} - \beta_2 \frac{dy^2}{dz^2} - \mu_2 &= 0, \end{aligned}$$

где  $G(x, y)$  – свободная энергия Гиббса четырехкомпонентной твердой фазы в зависимости от ее текущего состава  $x, y$ ;  $\beta_1, \beta_2$ , – соответствующие коэффициенты разложения в степенной ряд свободной энергии Гиббса в неоднородном по составу твердом растворе;  $z$  – координата вдоль выбранного кристаллографического направления в кристалле твердого раствора.

Константы  $\mu_1, \mu_2$ , появившиеся после интегрирования уравнения Кана–Хилларда для стационарного состояния, как и ранее в [14], интерпретируются как химические потенциалы в соответствующей подрешетке (подсистеме) твердой фазы, кристаллизующейся в структуре сфалерита.

Следствием спинодального распада, является появление в исходной матричной структуре когерентных включений новой фазы, период кристаллической решетки (ПКР) которых отличается от исходного ПКР. Возникающую в такой ситуации упругую энергию когерентно сопряженных фаз  $G^{el}$  необходимо учитывать в общем энергетическом балансе системы [15].

Совместное рассмотрение указанных энергетических составляющих – энергии смещения и упругой энергии когерентно сопряженных фаз [15] – позволяет прийти к следующим стационарным уравнениям для анализа концентрационных полей после спинодального распада:

$$\begin{aligned} \beta_1 d^2 x / dz^2 &= RT [x \ln x + (1-x) \ln (1-x)] + \\ &+ \alpha_{12}^s x (1-x) + \alpha_c^s x + \\ &+ \lambda_{ijk} \frac{N_0 a (a - a_s)^2}{4} - \mu_1 = F_1(x, y); \\ \beta_2 d^2 y / dz^2 &= RT [y \ln y + (1-y) \ln (1-y)] + \\ &+ \alpha_{34}^s y (1-y) + \alpha_c^s y + \\ &+ \lambda_{ijk} \frac{N_0 a (a - a_s)^2}{4} - \mu_2 = F_2(x, y). \end{aligned} \quad (2)$$

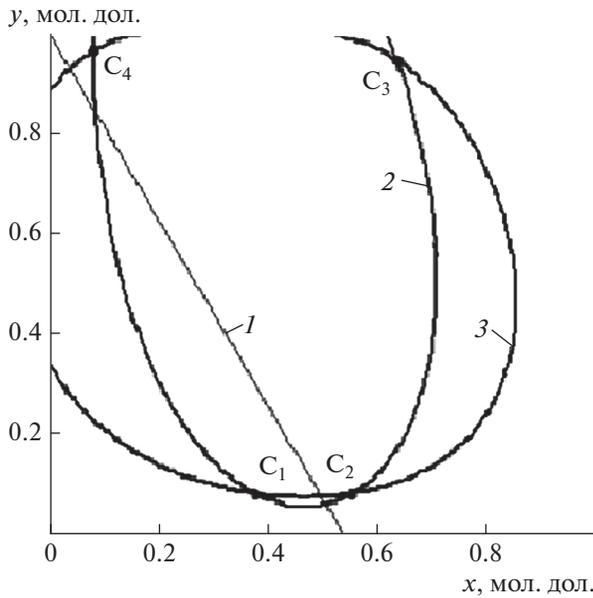
Необходимую информацию о средней концентрации каждого из компонентов в соответствующей подрешетке четверного твердого раствора получают из решений дифференциальных уравнений (2) методом численного интегрирования по выражениям:

$$\bar{x} = \frac{1}{L} \int_0^L x(z) dz, \quad \bar{y} = \frac{1}{L} \int_0^L y(z) dz, \quad (3)$$

где  $L$  – период колебаний состава.

Последние из представленных уравнений вытекают из условия сохранения массы при перераспределении компонентов после распада пересыщенной твердой фазы.

Выбор начального содержания компонента в твердом растворе задает концентрационный интервал, в котором будет осуществляться поиск ре-



**Рис. 1.** Изотермы энергетических функций при температуре 873 К в квадрате составов твердого раствора  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$ , когерентно сопряженного с подложкой  $\text{InP}(111)$ .  $\mu_1 = -2300$  Дж/моль,  $\mu_2 = -2340$  Дж/моль. Точки  $C_i$  соответствуют одновременному нахождению двух взаимосвязанных колебательных систем в состоянии  $F_1(x, y) = F_2(x, y) = 0$ . 1 – Линия изопериодического замещения с  $\text{InP}$ ; 2 –  $F_1(x, y)$ ; 3 –  $F_2(x, y)$ .

шения краевой задачи. Что касается величин производных  $\frac{dx_i^s}{dz_{z=0}}$ , то, если положить, что величины искомым производных равны нулю, то это будет означать, что на границе задается максимально возможное отклонение состава твердого раствора от его усредненного значения. Следуя вышесказанному соображениям, окончательная формулировка краевой задачи вмещает в себя следующие дополнительные условия:

$$\begin{aligned} x_{\text{гран}}^s &= x_0 = \text{const}, & \frac{dx}{dz_{z=0}} &= 0, \\ y_{\text{гран}}^s &= y_0 = \text{const}, & \frac{dy}{dz_{z=0}} &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом, дифференциальные уравнения (2) с краевыми условиями (4) и условиями сохранения вещества (3) формируют краевую задачу, которая характеризует распределение состава в твердых растворах на основе как  $A^3B^5$ , так и  $A^2B^6$ , получаемых в термодинамических условиях, близких к границе их спинодального распада. Для применения представленных уравнений к описанию процесса распада тройных твердых растворов в выражениях достаточно положить  $x = 0$

(или  $y = 0$ ) и взять для вычислений только одно из них.

Распределение компонентов по слою твердого раствора после его спинодального распада определяется избыточной энергией смешения в твердой фазе  $\alpha_{ij}^S$  и упругими константами  $C_{ij}$ . Упругие параметры твердых растворов и ПКР для его текущего состава находили с использованием соответствующих линейных аппроксимаций. Данные о термодинамических параметрах систем заимствованы из [15, 16]. Принципиально важным является выбор величин параметров твердофазного взаимодействия  $\alpha^S$  между основными компонентами рассматриваемых твердых растворов. Эти параметры, характеризующие избыточную энергию смешения в твердой фазе, являются определяющими не только при описании распределения состава в уравнениях (2). Их величина тесно связана с критической температурой спинодального распада и положением границ абсолютно нестабильных и метастабильных областей на диаграмме состав–температура [15, 16]. Положение указанных границ и задает интервалы термодинамических параметров, где применение настоящего анализа обосновано и его результаты наиболее информативны. Высказанным соображениям удовлетворяют параметры из [15], которые и использовались в расчетах.

## ПОИСК ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ РАСПАДА

Нелинейность представленных уравнений (2) связана с использованием в правой части уравнений не только энергий смешения, связанных с взаимодействием компонентов в различных под решетках структуры сфалерита (компоненты, содержащие множители  $\alpha_C^S, \alpha_{12}^S, \alpha_{34}^S$ ), но достаточно сложной комбинации линейных выражений, которые описывают взаимосвязи между составом материала и его термодинамическими и упругими свойствами. Решить такую систему уравнений возможно только с использованием численных методов.

На рис. 1, представлен типичный вид изотермических сечений для твердого раствора  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$  когерентно сопряженного с подложкой  $\text{InP}$ .

Как видно (рис. 1), для рассматриваемых уравнений распада четырехкомпонентного материала существует четыре стационарные точки, в которых одновременно выполняются условия  $F_1(x, y) = F_2(x, y) = 0$  (для трехкомпонентного твердого раствора таких точек две). Эти точки на рис. 1 отмечены как  $C_i$ . Анализ поведения указанных функций в окрестностях точек  $C_1$  и  $C_4$  (рис. 1) показал, что знак первой производной от этих

функций по составу твердого раствора оказывается положительным. В такой ситуации появление колебаний состава твердого раствора, т.е. условий возникновения эффекта модуляции состава, отсутствуют. Поэтому эти состояния системы не рассматривали.

Иная ситуация складывается, когда система находится в состояниях близких к точкам  $C_2$  и  $C_3$ . Для этих состояний величина знака производных отрицательна. Таким образом, при отклонении системы от своего равновесного состояния в ней возникают термодинамические силы, которые стремятся в исходное состояние ее вернуть. Эти силы связаны с появлением упругих деформаций, которые возникают во вновь образующихся включениях твердой фазы. При рассмотрении эволюции системы, которая находится в окрестности точки  $C_3$ , необходимо отметить, что для этого состояния характерно очень существенное отклонение состава, а соответственно и ПКР твердой фазы от ПКР подложки. Величина этого несоответствия достигает единиц процентов, что очень много. Надеяться на то, что при таких величинах несоответствия ПКР в гетероструктуре сохранится когерентное сопряжение фаз, нет никаких оснований [15]. Поэтому состояние системы в точке  $C_3$  не может быть реализовано на практике, и оно должно также быть исключено из рассмотрения. Следовательно, состояние системы в окрестности точки  $C_2$  представляет наибольший интерес и здесь следует искать периодические решения системы уравнений (2).

Необходимо отметить и следующую важную особенность взаимного расположения изоэнергетических зависимостей  $F_1(x, y)$  и  $F_2(x, y)$  (рис. 1) со спинодалями и бинадалями распада твердого раствора  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  [15]. Положение спинодалей и бинадалей задается только величиной химической компоненты избыточной энергии твердой фазы, тогда как процесс спинодального распада предполагает участие во взаимодействии упругодеформированных включений новой фазы. В этом отношении положение нулей функций  $F_1(x, y)$  и  $F_2(x, y)$  в большей степени претендуют на описание положений когерентных спинодалей системы [15]. Отсюда следует, что интервалы составов, где должны наблюдаться колебания состава твердого раствора, т.е. проявляться эффект модуляции, расположены именно в областях между спинодалями и бинадалями материала. Это предопределяет смещение акцента в дальнейших исследованиях на составы твердых растворов, находящихся в метастабильной области, т.е. между бинадалью и спинодалью твердой фазы при выбранной температуре.

Согласно рассматриваемой модели за появление колебаний состава в системе ответственна и так называемая “внешняя упругая энергия”, воз-

никающая при когерентном сопряжении включений новой фазы и исходной кристаллической решетки слоя (массивной подложки). В случае нарушения когерентного сопряжения твердых фаз, например, из-за превышения включением своих критических параметров и формирования в нем дислокационных сеток, исчезнет причина, вызывающая колебания. Это означает, что применение выведенных уравнений должно ограничиться достаточно малыми амплитудами колебаний в окрестности точки равновесия. В то же время из экспериментов по исследованиям эффекта модуляции состава твердых растворов известно, что форма колебаний состава существенно отличается от гармонической и достаточно близка к прямоугольной (образование концентрационных доменов [13, 14]). Появление таких типов колебаний возможно только в ситуации, когда существенны нелинейные компоненты в исходных уравнениях. Это возможно, когда амплитуды колебаний будут достаточно большими и отчетливо проявится зависимость упругих и термодинамических свойств от состава твердой фазы. Такие условия могут быть реализованы, когда обе колебательные подсистемы будут близки к условию резонанса между энергией упругой деформации включений и избыточной энергией смещения компонентов твердой фазы. Эти соображения привели к необходимости проведения тщательного анализа системы уравнений в окрестности стационарной точки  $C_2$ .

Окончательный поиск интервалов начальных параметров системы ( $x_0, \mu$  – для тройной системы и  $x_0, y_0, \mu_1, \mu_2$  – для четверной), когда в ней будут наблюдаться колебательный характер решения, основывался на построении фазового портрета для дифференциальных уравнений (2), т.е. зависимости величины производных  $dx/dz$  и  $dy/dz$  (или величин им пропорциональным) от состава твердого раствора  $x(z)$  и  $y(z)$ . Зависимости производных от величин самих же функций для системы уравнений (2) могут быть получены численным интегрированием правой части представленных выражений по формулам:

$$\beta_1 dx/dz = \int_0^z F_1(x, y, \mu_1); \quad \beta_2 dx/dz = \int_0^z F_2(x, y, \mu_2);$$

В соответствии с представленными выражениями при выбранных константах  $\beta_1, \beta_2$  и  $\mu_1, \mu_2$ , можно получить количественную информацию о поведении искомых производных. Для дальнейшего анализа важна лишь форма искомых зависимостей, тогда для упрощения расчетов представляется целесообразным положить  $\beta_1 = \beta_2 = 1$ , а о ходе зависимости производных судить по графикам для их безразмерных аналогов.

Из теории линейных уравнений второго порядка известно, что периодическое решение задачи имеет место только в ситуации, когда задаваемые исходные параметры системы обеспечивают получение замкнутой фазовой траектории. Параметром, формирующим набор линий уровня (изоэнергетические линии), является величина полной энергии системы  $G_{total} = G_{el} + G_{ex} + \mu_1 + \mu_2$ , а входными параметрами для их построения служат величины  $\mu_1, \mu_2$ . Расчеты показывают, что в подавляющем количестве случаев, что соответствует произвольному выбору величин констант интегрирования, фазовая траектория оказывается разомкнутой [7–10].

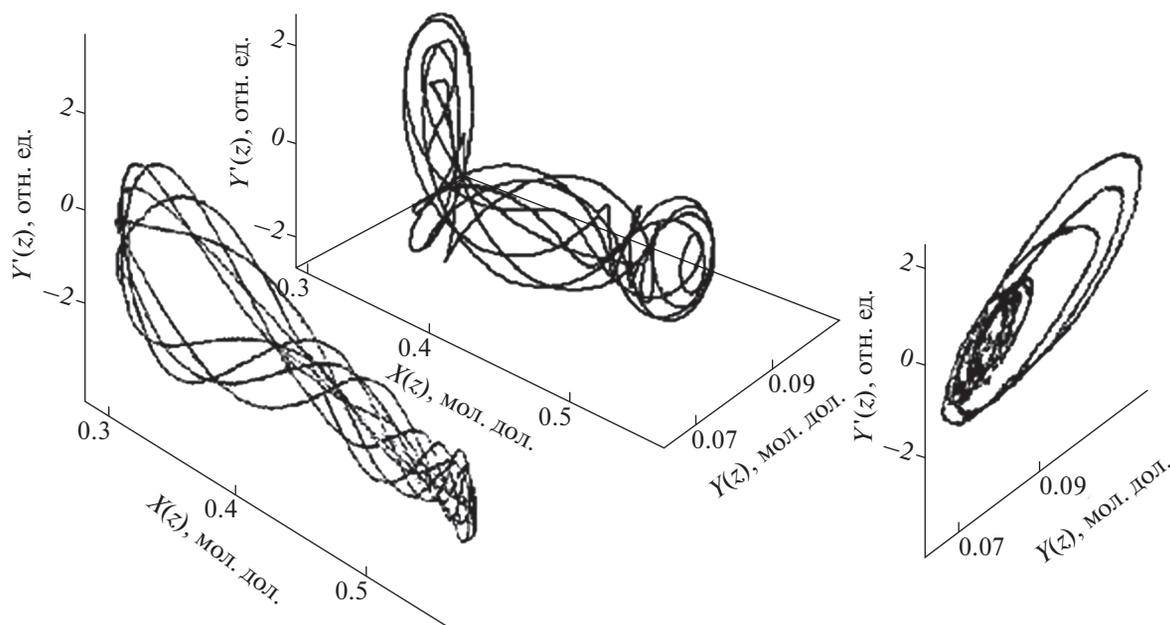
Тщательный анализ фазового портрета показывает наличие вокруг точки  $C_2$  замкнутых траекторий, которые располагаются очень близко к резкому резонансному максимуму амплитуд колебаний состава. Фрагмент фазового портрета для системы дифференциальных уравнений (2), которые иллюстрируют спинодальный распад в четверном твердом растворе  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  когерентно сопряженном с подложкой InP, с параметрами  $\mu_i$ , обеспечивающими появление колебательных решений, представлена рис. 2. Там же даны и ее проекции на концентрационную плоскость состава металлоидной подрешетки твердого раствора. Такие фазовые траектории можно наблюдать, если величины энергетических функций  $F_1(x, y)$  и  $F_2(x, y)$  находятся около стационарного состояния  $C_2$  по рис. 1, а сама система осуществляет эволюцию в непосредственной близости от этого стационарного состояния. Для зависимости производной  $dx/dz$  от  $x$  и  $y$ , которая завершает формирование общей картины фазового портрета характерны те же закономерности, что и для представленной на рис. 2. Это позволяет не приводить дополнительные графики и ограничиться анализом данных рис. 2. Получаемые фазовые портреты для четверной системы имеют принципиальные отличия от фазовых портретов тройных систем [6, 7]. Согласно теории дифференциальных уравнений для системы уравнений вида (2) характерны так называемые квазипериодические решения, для которых период колебаний непостоянен и является слабо изменяющейся величиной [17]. Отсутствие точного периода в таких взаимосвязанных колебательных процессах можно объяснить, используя понятия классической колебательной системы, где действуют неконсервативные силы. Действительно, потери энергии в такой колебательной системе приводят к изменению (увеличению) периода его собственных колебаний. В случае двух связанных колебательных подсистем происходит непрерывный обмен энергиями между металлической и металлоидной подрешетками структуры сфалерита, и появление непрерывных вариаций периода колебаний со-

ставов неизбежно. В математическом отношении указанный эффект в первую очередь связывается с появлением в исходных уравнениях компонент энергии в виде функции состава каждой из подрешеток, т.е. компонент с множителями:  $\alpha_{12}^S, \alpha_{34}^S, \alpha_C^S$ . К этому следует указать на существование зависимостей упругих констант и, следовательно, упругой энергии в каждой подрешетке от состава другой с ней взаимодействующей. Сложное перетекание энергий между подсистемами и нашло свое отражение в квазипериодичности колебаний состава твердого раствора. Отсутствие строгого периода у рассматриваемых колебательных процессов приводит к тому, что фазовый портрет не является стационарным. Динамика его определяется интегрированием системы уравнений. В качестве иллюстрации на рис. 2 представлен фрагмент такого пространственного фазового портрета для колебаний состава в металлоидной подрешетке структуры сфалерита в течение 5 периодов процесса. Фазовая траектория при этом в пространстве составов материала разомкнута. В то же время из рассмотрения проекций следует, что форма проекции фазовых траекторий на плоскости составов оказывается близкой к замкнутой. Это является следствием относительно не очень сильного энергетического взаимодействия между колебательными подсистемами. Поэтому траектории располагаются достаточно близко друг к другу, что позволяет интерпретировать такое решение системы уравнений как квазипериодическое [17].

Отсутствие строгой периодичности в колебаниях вносит некоторую неопределенность в расчеты для средних составов твердого раствора в соответствии с выражениями (3) из-за неопределенности самой величины периода  $L$ . В то же время эти данные необходимы для сопоставления расчетных и экспериментальных результатов по составу твердого раствора. Проблема была решена путем усреднения состава твердого раствора, который изменяется в результате проявления эффекта модуляции состава, за 5 периодов. Повышение точности расчетов средних составов и среднего рассогласования ПКР в гетероструктуре представляется целесообразным из-за точности экспериментального измерения самих указанных величин [1–4].

Что касается формы фазового портрета для тройных систем, то его вид для колебательных решений дифференциального уравнения распада представляет собой четкие замкнутые кривые, по виду напоминающие проекции траекторий на рис. 2.

Таким образом, единственными параметрами модели, которые задают фазовую траекторию и амплитуду колебаний состава, являются параметры  $\mu_1, \mu_2$ . Выполненные исследования влияния величин параметров  $\mu_1, \mu_2$  на форму фазовых тра-



**Рис. 2.** Зависимость производной  $dy/dz$  и ее проекций на концентрационную плоскость состава твердого раствора  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$  (фрагмент фазового портрета) при температуре 873 К в окрестности стационарной точки  $C_2$ , когда система уравнений имеет квазипериодические решения. Ориентация стабилизирующей подложки (111); параметры  $\mu_1 = -2300$  Дж/моль,  $\mu_2 = -2340$  Дж/моль. Процесс интегрирования уравнений длится 5 усредненных периодов.

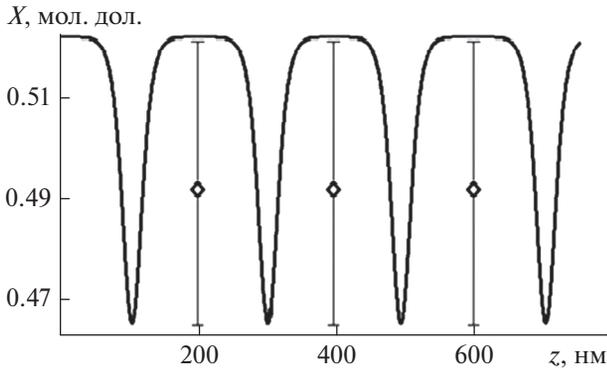
екторий показали, что их абсолютные величины, в первую очередь, задают положение самой точки  $C_2$  на рис. 1, в окрестности которой наблюдаются колебательные решения уравнений, а разница между ними контролирует амплитуду колебаний. Этот результат использовали при окончательном выборе величин обсуждаемых параметров, значения которых корректно описывают эффект модуляции состава твердого раствора. Укажем также, что начальные концентрации  $x_0, y_0$  в этой процедуре следует выбирать несколько левее и в непосредственной близости от  $C_2$  [6–8]. Для всех рассмотренных материалов обнаружено, что даже при небольших вариациях начальных параметров, уводящих систему от точки  $C_2$ , фазовые траектории перестают быть замкнутыми, и эволюция системы к своему равновесному состоянию происходит по затухающим процессам. В то же время близость или равенство нулю избыточных энергий в каждой подрешетке структуры сфалерита означает, что в системе реализованы наиболее благоприятные условия полного перехода избыточной энергии смещения, инициирующей распад фазы, в энергию упругих деформаций выделяющейся новой фазы. При этом полное равенство указанных энергий и означает появление т.н. эффекта резонанса. Такое явление наблюдается в очень узком интервале изменения как параметров  $\mu_1, \mu_2$ , так и составов твердого раствора  $x_0, y_0$ , для которого моделируется распад. Дей-

ствительно, изменение полной энергии системы на величину менее 1% может увести систему от искомого режима образования колебаний.

### ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ЭФФЕКТА МОДУЛЯЦИИ СОСТАВА

Типичные распределения состава в гетероструктурах  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}-\text{GaAs}$  и  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}-\text{InP}$  для описанных условий фазообразования [5, 9] в зависимости от координаты вдоль слоя представлено на рис. 3 и 4. Из них видна периодичность изменения состава твердого раствора в направлении роста слоя. При этом концентрационные профили компонентов существенно отличаются от формы, соответствующей гармоническим колебаниям. Расчетный результат рис. 3 и 4 отчетливо иллюстрирует процесс образования концентрационных доменов при формировании твердой фазы в термодинамических условиях близких к границам спинодального распада. Отметим, что найденное решение находится в непосредственной близости к резонансному состоянию, для которого характерно значительное возрастание амплитуды колебаний и, как следствие этого, проявление нелинейных свойств исходных уравнений.

Важно еще раз отметить, что искомое решение по начальному составу  $x_{\text{нач}}$  в рассматриваемой задаче находится на ветви резкого резонансного

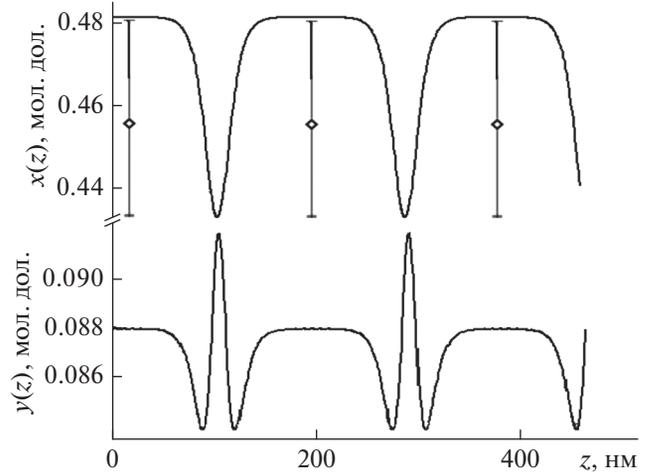


**Рис. 3.** Распределение состава по слою твердого раствора  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ , синтезированного на подложке GaAs (111) при температуре  $T=993$  К. Средний состав твердого раствора  $\bar{X} = 0.5152$  мол. дол.  $\mu = -1910$  Дж/моль,  $X_0 = 0.52229$  мол. дол. Экспериментальные данные из [5].

максимума. Поэтому даже малая его вариация приводит к значительному изменению расчетной формы колебаний состава. Это привело к необходимости указать величину искомого параметра с достаточно высокой точностью.

Кроме того, соответствие эксперименту достигается и в достаточно узком интервале параметра  $\mu$ . Вариация этого параметра в широком интервале вызывает значительное изменение состава твердого раствора, что обеспечит появление больших несоответствий в ПКР когерентной структуры. В такой ситуации ее параметры могут превысить свои критические значения с образованием дислокационных сеток и срыву когерентного состояния фаз. Последнее неизбежно приведет к срыву колебательного процесса, и в таком случае рассматриваемая модель неприменима. Иными словами, эффект модуляции состава твердого раствора реализуется лишь при совпадении множества факторов, и проявляется не во всех случаях, когда ростовая система находится вблизи границы спинодального распада. Поэтому эффект модуляции состава следует признать эффектом, который должен проявляться достаточно редко при практической реализации процесса получения твердых растворов.

Согласно экспериментальным результатам [1–4] концентрационные профили компонентов в эффекте модуляции состава имеют ярко выраженную прямоугольную форму. При этом протяженности каждой из полувольт колебаний приблизительно одинаковы. Согласно выполненным расчетам, в материале образуются достаточно протяженные концентрационные домены, которые разделены относительно тонкими стенками. Такой результат соответствует существующим теоретическим представлениям о доменной



**Рис. 4.** Распределение состава  $x, y$  по слою твердого раствора  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_1$ , когерентно сопряженного с подложкой InP(111), и полученного при температуре 873 К.  $\mu_1 = -2700$  Дж/моль,  $\mu_2 = -3200$  Дж/моль; усредненные составы  $\bar{x} = 0.472$  мол. дол.;  $\bar{y} = 0.1089$  мол. дол.; начальные составы  $x_0 = 0.480854$  мол. дол.,  $y_0 = 0.108791$  мол. дол.; среднее несоответствие ПКР в структуре  $\Delta\bar{a}/a = -0.390\%$ . Экспериментальные данные по амплитуде колебаний состава из [5].

структуре материала после его спинодального распада [12–14]. В этом отношении следует признать наличие противоречия между расчетными представлениями и имеющимися экспериментальными данными о распределении состава материала в различных областях доменной структуры. Высокая “скважность” концентрационных профилей, которая следует из расчетов, представляется все же более близкой к реальности. Действительно, маловероятно, появление доменной структуры, в которой протяженность междоменной стенки и размер самого домена были бы примерно равны. Решение этого вопроса, по-видимому, следует отложить до получения новых экспериментальных результатов и особенно в их взаимосвязи с технологическими режимами синтеза слоев.

Результаты выполненного моделирования показывают, что энергетический резонанс в системе с неизбежными колебаниями состава твердого раствора должен проявляться только тогда, когда термодинамическое состояние системы близко к стационарному состоянию, обозначенному точкой  $S_2$  на рис. 1. Последнее означает, что именно в этой части диаграммы состояния создаются предпочтительные условия для реализации колебательного режима при релаксации распадающейся системы. В этом отношении показательной является выбранная в работе для моделирования система

$Ga_xIn_{1-x}P$ , для которой свойственна относительно высокая критическая температура распада, а состав слоя, который удовлетворяет условию изопериодического замещения с GaAs, расположен очень близко по составу ( $x = 0.51$  мол. дол.) к вершине купола спинодального распада ( $x_{кр} = 0.5$  мол. дол.). Такое стечение термодинамических и кристаллографических свойств системы Ga–In–P, совместно с возможностью технологической реализации процесса синтеза материала в этих условиях, по-видимому, и открыло возможность обнаружения эффекта модуляции состава в материалах этого класса.

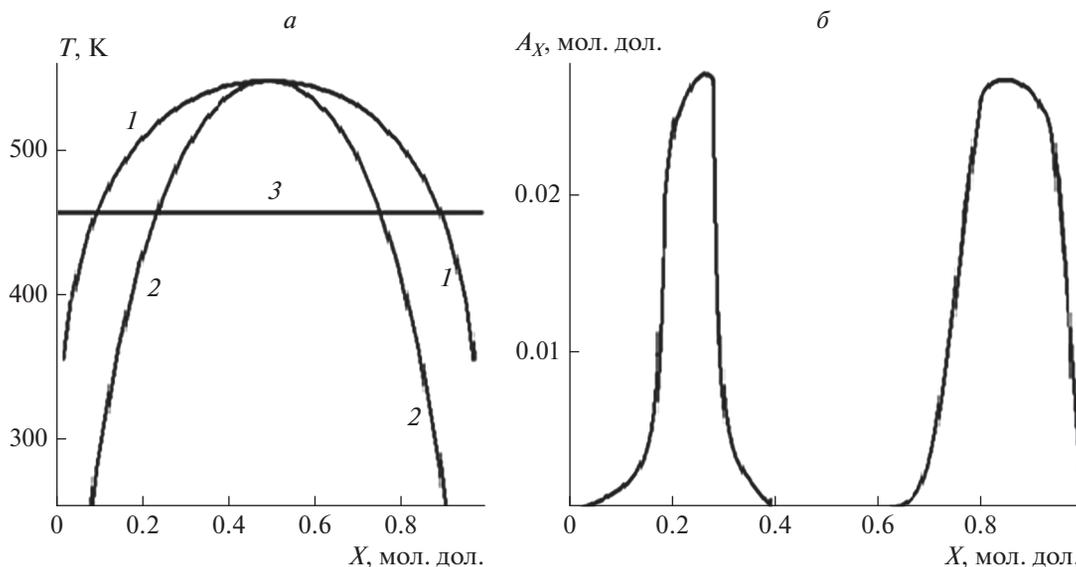
Необходимо указать, что спинодальный распад с подобными закономерностями должен протекать и в твердых растворах  $Ga_xIn_{1-x}As$  при их изопериодическом осаждении на подложку InP. Косвенным подтверждением высказанным соображениям можно считать неоднократные сообщения о наблюдении модуляции состава четверных твердых растворов  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  с составами близкими к граничной тройной системы Ga–In–As при их осаждении на подложку из InP [2–4]. В этом отношении к проявлению эффекта модуляции состава гетерокомпозиции  $Ga_xIn_{1-x}P$ –GaAs и  $Ga_xIn_{1-x}As$ –InP являются системами аналогами.

Основные результаты моделирования эффекта модуляции состава в гетероструктуре на основе твердого раствора  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  и подложки InP (111) представлены на рис. 4. Среди всех возможных составов материала для расчетов был выбран состав, который является практически изопериодичным с подложкой InP.

Концентрационные профили компонентов твердого раствора в металлической и металлоидной подрешетке структуры сфалерита  $x(z)$  и  $y(z)$ , которые получены в результате расчетов, существенно отличаются от формы, соответствующей гармоническим колебаниям. Их форма в большей степени соответствует прямоугольным импульсам. Поэтому можно утверждать, что расчетный результат рис. 4 иллюстрирует процесс образования в твердой фазе концентрационных доменов. Отметим, что найденные входные параметры для расчетов рис. 4 (представлены в подписи под рис.) в квадрате составов материала располагаются несколько левее точки  $C_2$ , т.е. лежат на поверхности, описывающей резонанс между избыточной энергией смещения, вызывающей распад твердого раствора, и упругой энергией, создаваемой включениями новой фазы. На рис. 4 приведена квазипериодическая структура распределения состава твердого раствора. Сравнение форм колебаний состава позволяет найти различия между параметрами даже соседних концентрационных доменов. Действительно, протяженность полуволны колебания около  $U = 1.2$  оказывается несколько

большей, чем, к примеру, полуволны при  $U = 2.0$ , где  $U = \beta^2z$ . Необходимо указать, что сложная форма колебательного процесса в металлоидной подрешетке твердой фазы, т.е. сложная форма функции  $y(z)$ , нашла свое отражение и в сложной форме фазового портрета для изменения этого параметра системы на рис. 2.

Представляет интерес оценка влияния числа компонентов (числа степеней свободы системы) на возможность экспериментального обнаружения эффекта модуляции состава в твердых растворах. Решение такой задачи осуществляли по следующему алгоритму. Для систем  $Ga_xIn_{1-x}P$  – подложка GaAs (111) и  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  – подложка InP(111) для их типичных температур кристаллизации определяли условия появления колебательного режима при решении уравнений распада. Системы находились в окрестности фигуративных точек, которые обеспечивают появление в них резонанса между избыточными энергиями. Поиск решений уравнений распада выполняли с моделированием эффекта модуляции состава. После этого температуру в моделируемом процессе изменяли, и фиксировали то ее значение, при котором колебания исчезали. Расчеты показали, что интервал температур, при котором обнаруживается колебательный режим для тройной системы больше, чем для четверной, примерно на 20 К. Это означает, что эффект модуляции состава проще экспериментально обнаружить в тройных системах, чем четверных, когда интервал параметров системы, обеспечивающий эффективный спинодальный распад сужается. В то же время необходимость создания гетероструктур для оптоэлектронных приборов предопределило интенсивные и прецизионные исследования процесса синтеза и свойств твердых растворов  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  изопериодичных к подложке InP. Большое количество высокоточных экспериментов по выращиванию слоев, проведенных в условиях близости ростовой системы к границам термодинамической неустойчивости, по нашему мнению, и позволило экспериментально обнаружить обсуждаемые эффекты для четверной системы. К сказанному необходимо добавить и то, что достаточно часто осаждение твердых растворов  $Ga_xIn_{1-x}P_yAs_{1-y}$  проводят при непрерывном охлаждении исходной жидкой фазы [15]. Изменение температуры системы увеличивает вероятность прохождения фигуративной точки в окрестностях области резонанса (точка  $C_2$  в работе) и тем самым реализацию условий возникновения эффекта модуляции состава. Результаты моделирования амплитуд колебаний состава твердого раствора Zn–Cd–Te [7], возникающих при спинодальном распаде приведены на (рис. 5). Диапазон изменения состава выбран таким образом, чтобы он по изотерме пересекал бинадаль и спинодаль системы. На рис. 5 видны



**Рис. 5.** Низкотемпературный фрагмент фазовой диаграммы Zn–Cd–Te (а) и зависимость амплитуды колебаний  $A_x$  (б), возникающих при температуре синтеза материала 450 К, от состава твердых растворов  $Zn_xCd_{1-x}Te$ . Кривые 1 и 2 – бинодали и спинодали системы; 3 – анализируемый изотермический разрез диаграммы при 450 К.

области составов твердого раствора, в которых наблюдается энергетический резонанс. Они расположены в области метастабильного состояния твердой фазы в непосредственной близости к спинодальным линиям. Видно, что резонанс реализуется в узком интервале термодинамических параметров процесса синтеза материала. Этот результат подтверждает, что именно резонанс между избыточной энергией смещения компонентов и энергией упругих включений новой фазы ответственен за наблюдаемый экспериментально эффект модуляции состава полупроводниковых твердых растворов. Отклонение фигуративной точки на термодинамической  $T$ – $x$  диаграмме состояния от условий, обеспечивающих резонанс, объясняет отсутствие колебаний состава материала даже, когда его синтез осуществляется в области абсолютной неустойчивости.

Появление периодических изменений состава с периодом на уровне десятков нанометров должно быть учтено при формировании сверхтонких или наноструктур на основе твердых растворов  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$ , когда толщины осаждаемых слоев становятся соизмеримыми с периодом модуляции.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При формировании тройных и четверных твердых растворов на основе соединений  $A^3B^5$  и  $A^2B^6$  в условиях симбатного изменения параметров синтеза вблизи когерентной спинодали обнаружен колебательный характер энергетического взаимодействия компонентов, приводящий к резкому возрастанию амплитуды колебаний со-

става твердых растворов, названный нами модуляционным резонансом. В рамках модели простых растворов с использованием уравнений распада Кана–Хилларда установлены интервалы термодинамических параметров этого эффекта (резонанса) для тройных, и четверных твердых растворов. При отклонении от установленных значений имеет место срыв колебательного процесса, ответственного за модуляцию состава синтезируемого материала, а релаксация системы к равновесному состоянию проходит по затухающим функциям.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Максимов С.К., Бондаренко Л.А., Кузнецов В.В., Петров А.С. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 2. С. 628; Maximov S.K., Bondarenko L.A., Kuznetsov V.V., Petrov A.S. // Phys. Solid State. 1982. V. 24. No. 2. P. 628.
2. Ouillec M., Launois H., Joncour M.C. // J. Vac. Sci. Technol. 1983. V. 1–2. P. 238.
3. Mahajan S., Dutt B.V., Temkin H. et al. // J. Crystal Growth. 1984. V. 68. P. 589.
4. Берн Н.А., Вавилова Л.С., Ипатова И.П. // ФТП. 1999. Т. 33. С. 544. // Bert N.A., Vavilova L.S., Ipatova I.P. et al. // Semiconductors. 1999. V. 33. P. 510.
5. Ipatova I.P., Malyshkin V.G., Shchukin V.A. // Phil. Mag. B. 1994. V. 70. No. 3. P. 557.
6. Moskvina P., Skurativskiy S., Kravchenko O. et al. // J. Crystal Growth. 2019. V. 510. P. 40.
7. Moskvina P., Skurativskiy S., Sadowski W. et al. // Metall. Mater. Engin. 2021. V. 27. No. 3. P.385.
8. Moskvina P.P., Skurativskiy S.I., Zasuk H.B. et al. // J. Phys. Stud. 2020. V. 24. No. 1. P. 1602.

9. *Moskvin P.P., Skurativskiy S.I., Kuznetsov V.V.* // J. Phys. Conf. Ser. 2019. V. 1400. Art. No. 055025.
10. *Kuznetsov V.V., Moskvin P.P., Skurativskiy S.I. et al.* // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1697. Art. No. 012092.
11. *Moskvin P.P., Skurativskiy S.I., Gromovyi O.A. et al.* // Metallurg. Mater. Engin. 2021. V. 25. P. 1601.
12. *Cahn J.W.* // Acta Metallurgica. 1961. V. 9. P. 81.
13. *Cahn J.W., Hillard J.E.* // J. Chem. Phys. 1958. V. 28. P. 258.
14. *Хачатурян А.Г.* Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 383 с.
15. *Кузнецов В.В., Москвин П.П.* Межфазные взаимодействия при гетероэпитаксии полупроводниковых твердых растворов. Санкт-Петербург: Лань, 2019. 376 с.
16. *Jordan A.S., Piegems M.* // J. Phys. Chem. Sol. 1975. V. 36. P. 329.
17. *Демидович Б.П.* Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 472 с.

## **Peculiarities of the composition modulation effect during spinodal decay of elastically deformed semiconductor solid solutions under energy resonance conditions**

**V. V. Kuznetsov<sup>a, \*</sup>, P. P. Moskvin<sup>b</sup>, S. I. Skurativskiy<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Saint-Petersburg State Electrotechnical University, St.-Petersburg, 197022 Russia*

<sup>b</sup>*Zhytomyr State Technological University, Zhytomyr, 10005 Ukraine*

*\*e-mail: vvkuznetsov@inbox.ru*

The thermodynamic concepts of Cahn–Hilliard are extended to the description of the spinodal decomposition of ternary and quaternary semiconductor solid solutions of the  $A^3B^5$  and  $A^2B^6$  classes. The resulting system of differential equations is used to describe the effect of composition modulation found in the synthesis of heterostructures based on  $A^3B^5$  and  $A^2B^6$  solid solutions. The ranges of thermodynamic parameters of the growth system are revealed, in which the effect of modulation of the composition of solid solutions should be observed.

УДК 536.21

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ РЕЖИМЫ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ “ТЕПЛОВОЙ ЯЧЕЙКИ”

© 2022 г. О. В. Володина<sup>1</sup>\*, А. А. Скворцов<sup>1</sup>, Д. Е. Пшонкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Московский политехнический университет”, кафедра “Динамика, прочность машин и сопротивление материалов”, Москва, Россия

\*E-mail: moosbeere\_O@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Исследованы температурные режимы функционирования новой модели “тепловой ячейки”, предназначенной для систем хранения и преобразования информации, реализованной на системе металлических пленок, нанесенных на кремниевую пластину. Представлена имитационная модель нагрева полупроводниковой пластины от температурных полей, создаваемых прямоугольным фрагментом металлизации, при импульсном токовом воздействии. Рассмотрено деформационное поведение металлической пленки при “жестких” условиях эксплуатации “тепловой ячейки”.

DOI: 10.31857/S0367676522110333

### ВВЕДЕНИЕ

Продолжающаяся миниатюризация полупроводниковых компонентов ведет к росту уровня плотности джоулевого тепла в металлизации и емкостных токов, которые могут привести к сбоям при передаче информации (взаимное электромагнитное влияние). Кроме того, в широко используемой архитектуре фон Неймана, где блок обработки отделен от памяти, что является так называемым узким местом данной архитектуры, происходят значительные потери энергии из-за передачи данных туда и обратно [1]. Такие ограничения в развитии микроэлектроники, связанные с плотностью компоновки элементов на платах, дают предпосылки для изучения функциональной электроники и создания памяти на тепловых элементах. Тепловая память – это память, которая хранит данные термически, путем поддержания температуры. Тепловая ячейка – это функциональный элемент тепловой памяти. Для записи логической единицы в тепловую ячейку ее необходимо нагреть. Когда температура ячейки памяти вернется к исходному значению, будет записан логический 0.

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Для формирования тепловой ячейки памяти использовалась разработанная ранее структура – система металлизации – тонкая пленка металла (Al), нанесенная на поверхность полупроводника

(Si) [2]. Схемотехническое изображение структуры представлено на рис. 1а, здесь ширина дорожки металлизации 75 мкм, длина –  $4 \cdot 10^3$  мкм. Толщина напыленной пленки алюминия составляет 2–3 мкм. Длина кремниевого основания структуры составляет  $10^4$  мкм, ширина  $5 \cdot 10^3$  мкм. Дорожка, проходящая от контакта I до I, предназначена для переноса импульса тока в прямом и обратном направлениях. Контакты от 1 до 12 используются для регистрации сигнала напряжения с различных участков токопроводящей дорожки [3, 4]. Электрофизическая установка, с помощью которой наблюдали эффект тепловой памяти структуры, показана на рис. 1б. Здесь структура приклеена к кремниевому основанию, к которому припаяны провода для пропускания токового импульса.

Использование систем тонких металлических пленок, нанесенных на поверхность полупроводника как элемента тепловой памяти, обосновано тем, что подобные резистивные коммутационные системы являются важными элементами в структурах микроэлектроники [5].

Экспериментальное исследование изменения температуры нагреваемой дорожки металлизации, необходимое для определения предельно допустимых параметров прямоугольного импульса тока, проводилось на импульсной установке. Температуру тестовой дорожки определяли по падению напряжения  $U(t)$ , как в процессе прохождения токового импульса, так и в промежутках между импульсами тока (см. рис. 4). К сожа-

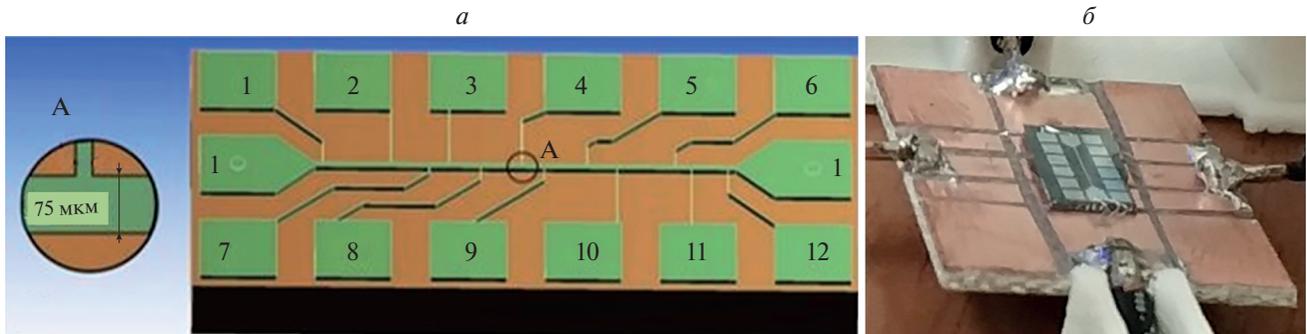


Рис. 1. Внутреннее устройство ячейки тепловой памяти. Схематическое представление структуры (а). Электрофизическая установка (б).

лению, методика определения температурных режимов по временным зависимостям потенциала  $U(t)$  не позволяет измерять  $T(t)$  после отключения токового воздействия. Однако можно произвести качественную оценку скорости охлаждения металлизации, изучая динамику нагрева дорожки при повторном пропускании импульса тока меньшей амплитуды через еще не остывшую структуру [6].

Экспериментальное исследование деградационных процессов проводилось на тестовых структурах при увеличении амплитуды прямоугольного токового импульса  $j > 6 \cdot 10^{10}$  А/м<sup>2</sup> и длительности  $t > 500$  мкс [7].

О температурных изменениях рассматриваемых структур судили по осциллограммам включения [8]. На рис. 4б представлены типичные результаты этих исследований.

Соотношение амплитуд импульсов подбиралось экспериментально так, чтобы избежать последующего накопления тепла и перегрева структуры [7, 9, 10]. Процесс перегрева наглядно изображен на рис. 5а.

Резкое увеличение падения напряжения на структуре  $U$  при  $t = 900$  мкс связано с началом оплавления как алюминиевой пленки, так и на границе фаз алюминий–кремний (Al–Si). Увеличение удельного сопротивления расплава на основе алюминия приводит к наблюдаемым изменениям сигнала  $U(t)$ . Экспериментальное подтверждение теплового разрушения структуры приведены на рис. 5б. Активное тепловыделение в пленке способствовало ее оплавлению (и кристаллизации после отключения импульса, см. 1 на рис. 5б), а также взрывному характеру разрушений (2 на рис. 5б), связанному с плохой адгезией пленки к подложке [7].

Наблюдаемые разрушения структуры произошли после прохождения через нее одиночного

прямоугольного импульса тока амплитудой  $j_1 = 8 \cdot 10^{10}$  А/м<sup>2</sup> и длительностью  $t = 500$  мкс [7].

### ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ НАГРЕВА

Тепловые поля  $T(r, \tau)$  в полупроводниковой пластине, нагреваемой слоем металлизации, напыленном на пластину, определяются процессами нестационарной теплопроводности и описываются уравнением теплопроводности [6]:

$$\frac{\partial T(r, \tau)}{\partial \tau} = \alpha \Delta T(r, \tau), \quad (1)$$

где  $r$  – радиус-вектор точки наблюдения,  $\tau$  – время,  $a = \lambda/(c\rho)$  – коэффициент температуропроводности пластины. Здесь  $\lambda$  – теплопроводность,  $c$  – удельная теплоемкость,  $\rho$  – плотность кремния [8]. Такие задачи нестационарной теплопроводности (теплопередачи) в твердом теле, а также задачи нестационарного теплообмена позволяют решать расчетный модуль DesignSimulation (DS) на платформе ANSYS Workbench [11].

Модель кремниевой пластины с напылением пленки металлизации (см. рис. 2) разработана с

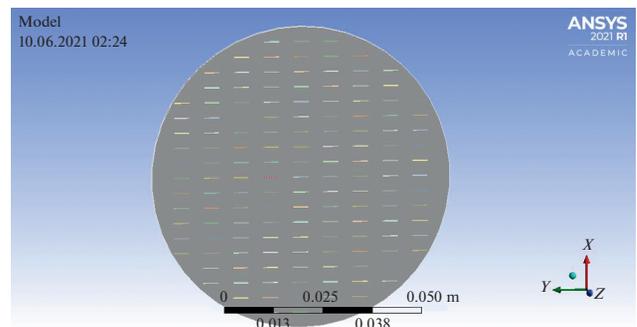


Рис. 2. Модель кремниевой пластины с напылением пленки металлизации в расчетном модуле DesignSimulation (DS) на платформе ANSYS Workbench. Пленка металлизации состоит из 143 алюминиевых дорожек.

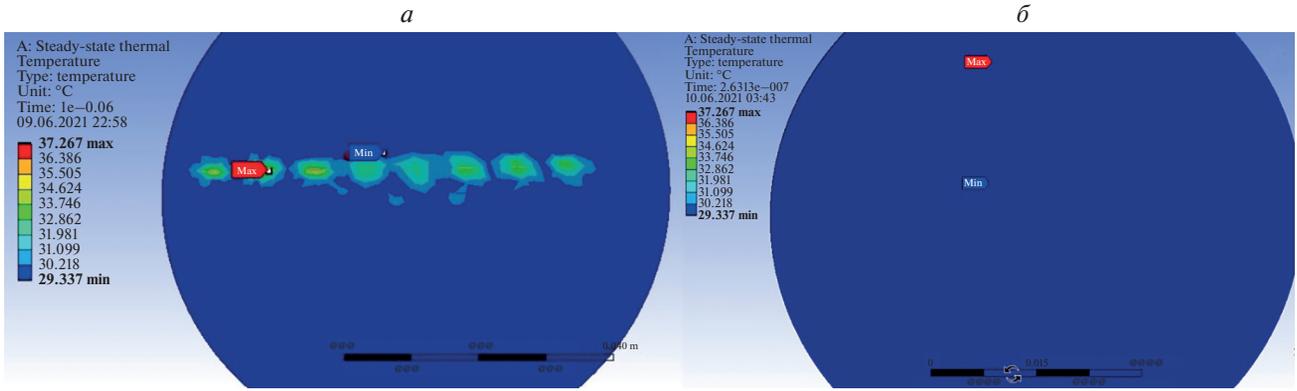


Рис. 3. Решение задачи теплообмена между 8 алюминиевыми дорожками и кремниевой подложкой в модуле Ansys Steady-State Thermal (а). Оценка равновесного состояния системы при постоянных тепловых нагрузках и условиях окружающей среды (б).

использованием программного комплекса SolidWorks и загружена в расчетный модуль DS. Сборка геометрической модели сохранена с расширением SAT. Данная модель имеет следующие размеры: диаметр пластины 76 мм, толщина 1мм. Алюминиевые дорожки, представляющие напы-

ленную систему металлизации, смоделированы со следующими размерными характеристиками: ширина 75 мкм, длина 3.8 мм, толщина 3 мкм.

В модуле работы с базой данных материалов Engineering Data произведена настройка температурно-зависимых свойств материала. Для пластины

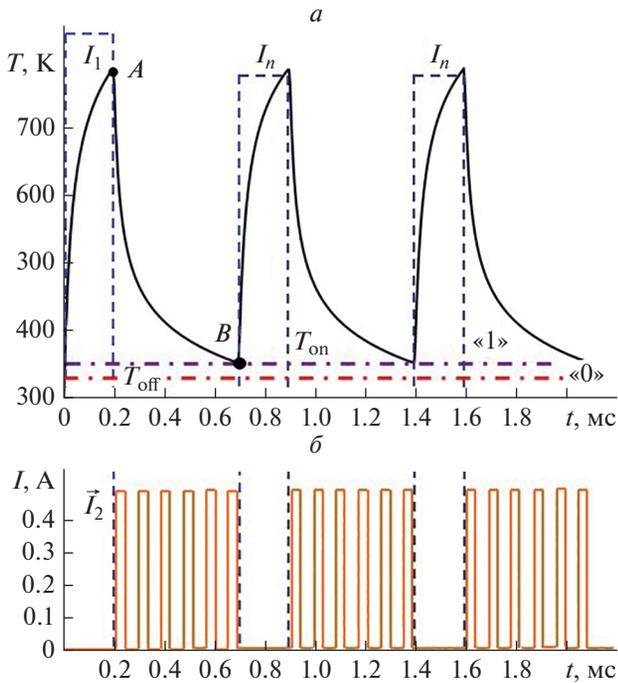


Рис. 4. Динамика температуры области тестовой структуры системы кремний–алюминий, при последовательном воздействии токовыми импульсами (пунктир) амплитудой  $I_n = 7.5 \text{ A}$  ( $j_n = 5 \cdot 10^{10} \text{ A/m}^2$ ) (а). Толщина металлической пленки  $h_1 = 2 \text{ мкм}$ . Длительность импульсов – 200 мкс. Форма последовательности токовых импульсов для контроля температурных режимов системы (б).

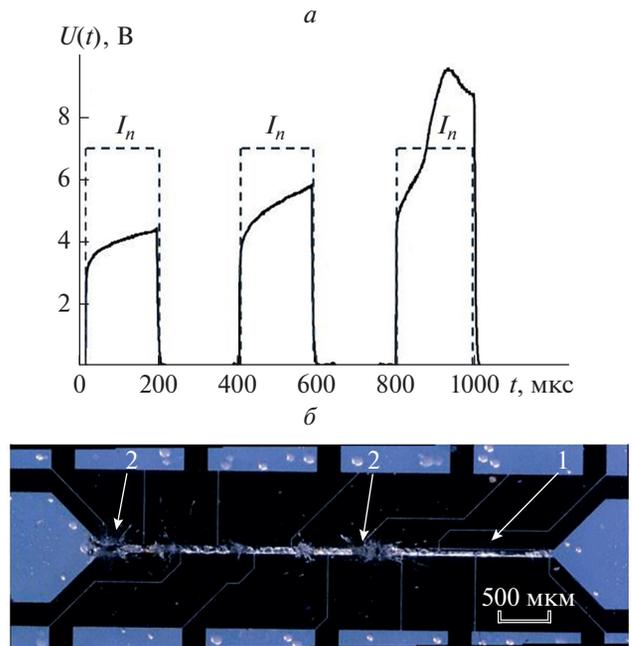


Рис. 5. Форма осциллограмм при последовательном прохождении прямоугольных импульсов тока амплитудой  $I_n = 9.5 \text{ A}$  ( $j = 6.5 \cdot 10^{10} \text{ A/m}^2$ ), длительностью  $\tau = 200 \text{ мкс}$ . Пунктир – форма импульсов тока, проходящих через дорожку металлизации (а). Толщина металлической пленки  $h_1 = 2 \text{ мкм}$ . Изображение разрушения области структуры алюминий–кремний после прохождения одиночного токового импульса прямоугольной формы  $I_1 = 15 \text{ A}$  ( $j_1 = 8 \cdot 10^{10} \text{ A/m}^2$ ) и длительностью  $\tau = 500 \text{ мкс}$  (б).

Таблица 1. Физические параметры кремния (Silicon)

Кремний	
Плотность	2330.0 кг/м <sup>3</sup>
Коэффициент температурного расширения	
Эталонная температура нулевой тепловой деформации	22.000 °C
Изотропная теплопроводность	124.00 Вт/м · °C
Удельная теплоемкость при постоянном давлении	702.00 Дж/кг · °C
Изотропное удельное сопротивление	10 <sup>-4</sup> Ом · м
Изотропная относительная проницаемость	1.0000

выбран полупроводниковый материал – кремний, физические параметры которого приведены в табл. 1. Материалом для дорожек выбран алюминиевый сплав, основные физические параметры данного материала: плотность – 2713.0 кг/м<sup>3</sup>, изотропная теплопроводность – 155.30 Вт/м · °C, изотропный секущий коэффициент теплового расширения –  $2.278 \cdot 10^{-5}$  1/°C.

Сгенерирована сетка конечных элементов с количеством узлов 32872 и элементов 2870. В модуле Mechanical созданы 143 контактных региона по количеству алюминиевых дорожек. На поверхности объекта заданы 8 тепловых потоков, для демонстрации сохранения байта данных, мощность каждого равна 5.5 Вт. На внешней стенке пластины установлена постоянная температура, равная 30°C. Общее время воздействия тепловых потоков равно 1 мс. Тепловой поток в контакте передается между поверхностями посредством контактных элементов по нормали к поверхности контакта. За установленное время дорожка нагревается до температуры 37.267°C. Распространение тепла по поверхности кремниевой подложки показано на рис. 3а. В результате решения задачи имитационного моделирования теплопроводности выявлено, что тепловой поток не доходит до внешней стенки полупроводниковой подложки за время воздействия теплового потока, что видно на рис. 3б. Следующим шагом в работе с имитационной моделью будет расчет скорости остывания дорожки в условиях вынужденной конвекции, применяемой для охлаждения устройства

оперативной памяти, для решения задачи по определению частоты регенерации ячеек.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ температурных режимов функционирования “тепловой” ячейки показал, что механические напряжения термоупругой природы, возникающие в металлической пленке во время действия токового импульса, достигают критических значений, приводящих к деформационным изменениям пленки вплоть до появления расплавленного участка и обрыву токопроводящей линии [7].

Локальное изменение геометрии при оплавлении пленки алюминия, выраженное в том, что на части участков расплавленной пленки площадь поперечного сечения растет, а на части участков данная площадь уменьшается, привело к сильным тепловым градиентам во время протекания тока на границах таких участков и способствовало разрушению целостности дорожки.

Работа тепловой ячейки памяти связана со способностью материала быстро нагреваться без разрушения и быстро отдавать тепло для получения максимального количества тактов обработки данных за 1 с. Разрушение пленки алюминия приводит к утрате пленкой данных качеств и выходу ячейки памяти из строя.

В статье описана экспериментальная возможность построения тепловой ячейки памяти на данной технологии. Рассмотренная технология

предполагает создание медленной динамической ячейки памяти, что в современном мире высокочастотных устройств не найдет применения, но доказанная возможность функционирования элементов памяти при управлении тепловыми потоками в последних позволяет проводить дальнейшие исследования и разработки более быстрых технологий. Целью дальнейшей работы и экспериментов является создание устройства для управления передачей электрической и распределением тепловой энергии в части объема материала памяти в “тепловой ячейке” памяти. Исследование также нацелено на изобретение средства управления передачей тепловой энергии в определенные (адресные) “тепловые ячейки” памяти и из них.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-29-01373).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hadamek T., Fiorentini S., Bendra M.* // Solid-State Electron. 2022. V. 193. Art. No. 108269.
2. *Skvortsov A.A., Glinskiy V.V., Zuev S.M. et al.* // Microelectron. Intern. 2016. V. 33. No. 2. P. 102.
3. *Skvortsov P.A., Koryachko M.V., Luk'yanov M.N. et al.* // J. Mater. Engin. Perform. 2020. V. 29. No. 7. P. 4390.
4. *Skvortsov A.A., Zuev S.M., Koryachko M.V.* // Key Engin. Mater. 2018. V. 771. P. 118.
5. *Bermejo R., Krautgasser C., Deluca M. et al.* // J. Microelectron. Electron. Pack. 2016. V. 1. No. 1. P. 17.
6. *Литвиненко О.В.* Исследование термоакустических эффектов в кремниевых пластинах. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Ульяновск: Ульяновский гос. ун-т, 2003. 126 с.
7. *Скворцов А.А., Пшонкин Д.Е., Володина О.В.* // Сб. тез. 9 Междунар. конф. “Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов” (Москва, 2021). С. 154.
8. *Скворцов А.А.* Транспортные процессы в полупроводниках с участием линейных и объемных дефектов. Дис. ... докт. физ.-мат. наук. Ульяновск: Ульяновский гос. ун-т, 2004. 358 с.
9. *Nguyen T.A., Joubert P.-Y., Lefebvre S. et al.* // Microelectron. Reliab. 2011. V. 51. No. 6. P. 1127.
10. *Ambrogio S., Magyari-Köpe B., Onofrio N. et al.* // J. Electroceramics. 2017. V. 39. No. 1–4. P. 39.
11. <https://www.ansysadvantage.ru/heat-exchange-problems-in-ansys-workbench>.

### Temperature modes of the ‘heat cell’ functioning

**O. V. Volodina<sup>a, \*</sup>, A. A. Skvortsov<sup>a</sup>, D. E. Pshonkin<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Moscow Polytechnic University, Moscow, Russia

\*e-mail: moosbeere\_O@mail.ru

We studied the temperature modes of the “heat cell”—functional elements of thermal memory implemented on a system of metal films deposited on a silicon wafer. A mathematical analysis of the temperature fields in a semiconductor wafer, created by a rectangular piece of metallization, under a pulsed current action is carried out. Experimental results are presented that clearly depict the process of deformation of a metal film, leading to the destruction of the structure.

УДК 53.096:538.953

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ СТИМУЛЯЦИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПОЛИМЕРОВ В НЕОДНОРОДНОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ПОЛЕ

© 2022 г. Н. С. Камалова<sup>1</sup>, \*, Н. Н. Матвеев<sup>1</sup>, Н. Ю. Евсикова<sup>1</sup>, В. И. Лисицын<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
“Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова”, Воронеж, Россия

\*E-mail: rc@icmail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Предложена концепция для формирования базового соотношения для вычислительного эксперимента по определению параметров кинетики процесса поляризации кристаллизующихся гибкоцепных полимеров в неоднородном температурном поле при фазовых переходах. Моделирование проводилось на основе экспериментальных данных для полидиметилсилоксана с добавлением 0.5% метилвиниловых групп (СКТВ-1).

DOI: 10.31857/S0367676522110138

### ВВЕДЕНИЕ

Известно, что надмолекулярная структура полимеров активно реагирует на воздействие внешних физических факторов (изменение температуры, электромагнитные поля и т.д.) [1]. Это позволяет использовать их в качестве основы для создания новых материалов с заданными свойствами [2–5]. Следует заметить, что сложные полимерные материалы представляют собой самоорганизующиеся системы [6], поэтому их отклик на внешнее воздействие может быть неоднозначным. Это обстоятельство требует при исследовании изменения свойств полимеров особого подхода к моделированию кинетики процессов в их микроструктуре [7–10]. Использование имитационного математического моделирования, содержащего значительное количество экспериментальных параметров, применимо для конкретного вида пластика и не позволяет выявить закономерности формирования конечного состояния полимеров. Кроме того, отсутствие универсального подхода затрудняет формирование моделей, необходимых для вербального прогнозирования состояния нового материала, а, следовательно, и таких важных параметров эксплуатации, как износостойкость и ее зависимость от условий эксплуатации. Для решения этих проблем необходима разработка базовой концепции описания состояния исследуемого материала и конформаций его компонент. Такая концепция должна оперировать физической моделью, составленной в рамках фундаментального подхода.

Поскольку отклик материала на внешнее воздействие экспериментально можно анализировать с контролируемой точностью только с помощью современных электроизмерительных приборов, то процессом, интересным для моделирования, является изменение поляризованности полимеров под влиянием внешних факторов.

В статье, используя концептуальный подход, основанный на анализе изменения энтропии в процессе перестройки микроструктуры полимера, предлагается модель для вычислительного эксперимента с целью определения параметров кинетики процесса его поляризации в неоднородном температурном поле в условиях фазового перехода. Моделирование проводилось на основе экспериментальных температурных зависимостей поляризованности СКТВ-1 – полидиметилсилоксана с добавлением 0.5% метилвиниловых групп.

### ДАННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для измерения поляризованности полимера использовался метод поляризационных токов [11]. Основным элементом экспериментальной установки являлась специальная ячейка с двумя массивными электродами, между которыми помещался образец толщиной  $h$  около 100 микрон [8]. Нижний электрод охлаждался или нагревался с постоянной скоростью в диапазоне температур фазового перехода исследуемого полимера. В результате в образце формировался градиент температуры  $\nabla T$ , величина которого была прямо про-

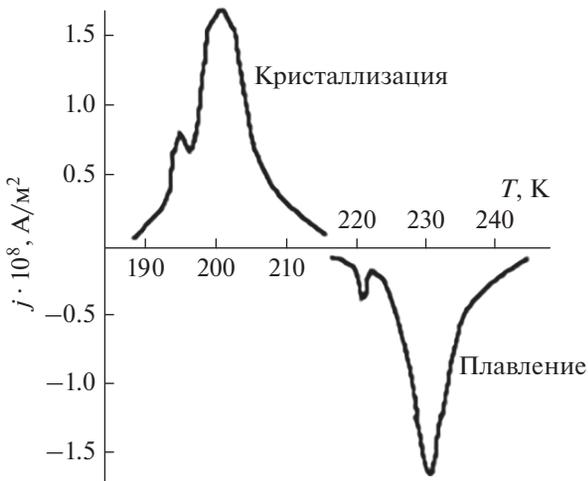


Рис. 1. Термограммы плотностей поляризационных токов при кристаллизации и плавлении СКТВ-1 ( $\nabla T = 7.7 \cdot 10^4$  К/м).

порциональна скорости изменения температуры нижнего электрода. Таким образом, в эксперименте создается контроль над фактором внешнего воздействия.

Ранее нами показано, что охлаждение нижнего электрода со скоростью  $(0.05 \pm 0.01)$  К/с в области температур кристаллизации СКТВ-1 (при температурах ниже 213 К) сопровождается появлением поляризационного тока [10]. Зависимость плотности тока поляризации  $j(T)$  от температуры кроме основного максимума при  $T = 203$  К содержит еще один максимум (при  $T = 199$  К) (см. рис. 1). Кривая плотности тока депольаризации  $j_d(T)$  при нагревании СКТВ-1 с той же скоростью в интервале температур плавления тоже содержит два пика (температуры, соответствующие основному и локальному максимумам, равны 230 и 222 К) (см. рис. 1). Дублетность пика говорит о том, что зависимость поляризованности от температуры при фазовых переходах носит пороговый характер (см. рис. 2). Следовательно, в неоднородном температурном поле с постоянным градиентом температуры вдоль толщины образца в области фазовых переходов происходит изменение надмолекулярной структуры гибкоцепного полимера [8, 10].

#### ОБОСНОВАНИЕ БАЗОВОГО СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе [7] в рамках конформационного подхода было показано, что усредненный по всему набору конформаций квадрат дипольного момента молекулы гибкоцепного полимера зависит от его молярной массы и во многом определяется

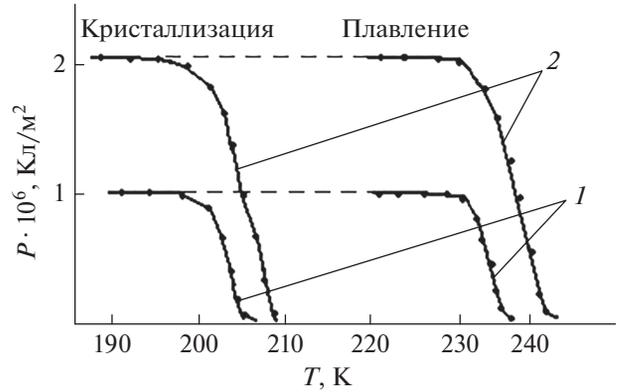


Рис. 2. Температурные зависимости поляризованности при кристаллизации и плавлении СКТВ-1 для различных значений градиента температуры  $\nabla T$ :  $\nabla T = 1.2 \cdot 10^4$  (1),  $7.7 \cdot 10^4$  К/м (2).

геометрией его молекулы. При этом необходимо понимать, что конечное макросостояние образца в целом будет связано с изменением энтропии в предлагаемых условиях.

Термодинамическая вероятность макросостояния образца полимера зависит от числа упорядоченных состояний молекул  $N$  и при переходе “расплав—кристалл” может быть представлена в виде:

$$W = (N/(N^* - N))^{\delta}, \quad (1)$$

где  $N^*$  — число молекул в образце;  $\delta$  — параметр, который необходимо определить.

Изменение энтропии образца при кристаллизации и плавлении найдем, воспользовавшись известным определением энтропии ( $S = k \ln W$ , где  $k = 1.3 \cdot 10^{-23}$  Дж/К — постоянная Больцмана):

$$dS = k \frac{dW}{W} = \pm \delta k N^* \frac{dN}{N(N^* - N)}. \quad (2)$$

Знак “ $\pm$ ” в (2) определяет увеличение числа упорядоченных молекул при кристаллизации или уменьшение при плавлении.

С другой стороны, изменение энтропии и элементарное количество теплоты  $\delta Q$ , проходящее через образец полимера при изменении температуры на  $dT$ , связаны соотношением

$$dS = \delta Q/T = \mp cm dT/T, \quad (3)$$

где  $c$  и  $m$  — удельная теплоемкость и масса образца полимера. Поскольку толщина образца достаточно мала, то в качестве температуры в модели можно взять среднюю по образцу температуру  $T = T_m - \nabla T h/2$ , где  $T_m$  — максимальная температура в экспериментальной ячейке (начальная температура нижнего электрода при кристаллизации и

конечная при плавлении). Тогда из соотношений (2) и (3) получим, что

$$\delta k N^* \frac{dN}{N(N^* - N)} = -cm dT / (T_m - 0.5 \nabla Th). \quad (4)$$

Поскольку  $\nabla Th / 2T_m \ll 1$ , то в рамках приближенных вычислений (4) преобразуется к виду

$$\frac{dN}{N(N^* - N)} = -\frac{cm(1 + 0.5 \nabla Th / T_m)}{\delta k N^* T_m} dT. \quad (5)$$

Поляризованность образца полимера можно найти, умножив  $N$  на корень из среднего квадрата дипольного момента  $p_M$  макромолекулы полимера, т.е.

$$P = p_M N. \quad (6)$$

После введения обозначений  $dP = p_M dN$  и  $P^* = p_M N^*$  соотношение (6) трансформируется в дифференциальное уравнение для определения изменения поляризованности гибкоцепного полимера в условиях перехода “расплав–кристалл” в неоднородном температурном поле в ограниченной области:

$$\frac{dP}{P(P^* - P)} = -\frac{\alpha}{P^*} dT, \quad (7)$$

где  $\alpha = cm p_m (1 + 0.5 \nabla Th / T_m) / (\delta k T_m)$  – коэффициент, характеризующий температурную стимуляцию фазового перехода гибкоцепного полимера.

Если предположить, что при начальной температуре  $T_n$  поляризованность составляла  $P_0$ , то уравнение (7) решается аналитически. Результатом решения является соотношение для температурной зависимости  $P(T)$  в условиях фазового перехода в неоднородном температурном поле:

$$P(T) = \frac{P_0 \exp(-\alpha(T - T_n))}{1 - \eta(1 - \exp(-\alpha(T - T_n)))}, \quad (8)$$

где  $\eta = P_0 / P^* = N_0 / N^*$  – параметр, показывающий долю молекул, дающих вклад в поляризуемость при температуре  $T_n$ . Поскольку при кристаллизации  $T < T_n$ , то в определенный момент времени получится, что  $\exp(\alpha(T_n - T)) \gg 1$ , тогда поляризованность достигнет своей максимальной величины, во многом определяемой температурной стимуляцией, которая прямо пропорциональна градиенту температуры, формируемому в полимере внешними условиями при переходе “расплав–кристалл”. Соотношение (8) содержит параметры, имеющие ясный физический смысл, и может лечь в основу вычислительного эксперимента по формированию базы данных, накапливающих информацию о поляризационных свойствах гибкоцепных полимеров в неоднородном температурном поле.

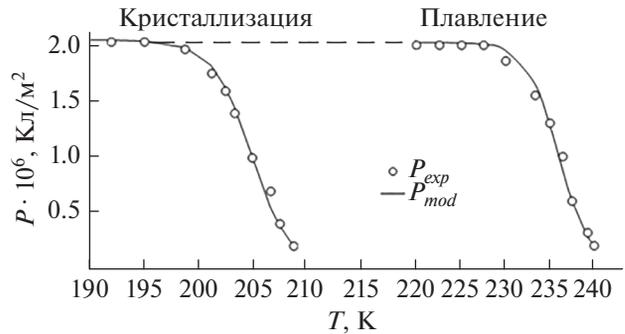


Рис. 3. Сопоставление экспериментальных температурных зависимостей поляризованности ( $P_{exp}$ ) СКТВ-1 при кристаллизации и плавлении в неоднородном температурном поле с градиентом температуры  $\nabla T = 7.7 \cdot 10^4$  К/м и результатов вычислительного эксперимента ( $P_{mod}$ ).

### АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В вычислительном эксперименте использовались результаты исследований зависимости поляризованности СКТВ-1 от температуры, полученные в области фазового перехода (кристаллизация и плавление) при наличии неоднородного температурного поля с градиентом  $\nabla T = 7.7 \cdot 10^4$  К/м.

Параметры  $\alpha$  и  $\eta$  для исследуемого гибкоцепного полимера были определены методом минимизации среднего относительного отклонения экспериментальных значений поляризованности от рассчитанных по соотношению (8). Для проведения вычислительного эксперимента была составлена программа, которая позволяла автоматически пересчитывать модельную зависимость для различных величин параметров и контролировать среднюю относительную ошибку сопоставления результатов. Результаты вычислительного эксперимента в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 3.

Вычислительный эксперимент позволяет определить и параметр  $\delta$  как

$$\delta = \frac{cm p_m (1 + 0.5 \nabla T / T_m) N_A}{\alpha R}. \quad (9)$$

Вычислительный эксперимент показал, что минимум относительной ошибки (хорошее согласие с экспериментом) соответствует значениям параметров  $\alpha = 0.569 \text{ К}^{-1}$  и  $\eta = 0.09772$  (величина безразмерная) для процесса кристаллизации и  $\alpha = 0.560 \text{ К}^{-1}$  и  $\eta = 0.09900$  в случае плавления. Различие параметров в третьем знаке (это доли процента) свидетельствует о достаточной точности определения их величины и уникальности для разных гибкоцепных полимеров.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты проведенного исследования показали, что данные анализа термограмм токов поляризации и деполяризации в сочетании с вычислительным экспериментом позволяют определять параметры кинетики процессов в микроструктуре исследуемых гибкоцепных полимеров: коэффициент, характеризующий температурную стимуляцию фазового перехода “расплав–кристалл” в неоднородном температурном поле, параметр, показывающий долю молекул, дающих вклад в поляризуемость при начальной температуре, а также параметры функции термодинамической вероятности реализуемых состояний сложной высокомолекулярной структуры.

Определение параметров с ясным физическим смыслом позволит сформировать базы данных для сравнения гибкоцепных полимеров и технологии прогнозирования отклика полимеров на действие неоднородного температурного поля. На основе таких баз данных можно разработать методы сравнения влияния различных физических факторов на протекание процессов структуризации и деструктуризации не только гибкоцепных полимеров, но и композитов на их основе, в том числе и природного происхождения.

Кроме того, предложенный концептуальный подход базируется на анализе изменения энтропии в процессах перестройки микроструктуры полимеров, поэтому может быть применен также для оценки их отклика на другие физические воздействия.

Важным результатом проделанной работы является тот факт, что в рамках такого подхода можно сформулировать соотношение для термодинамической вероятности переходов типа “расплав-

кристалл”, и, следовательно, расширить наши представления о физике переходных процессов.

Исследования проведены в рамках гранта, выделенного ФГБОУ ВО “Воронежский государственный университет имени Г.Ф. Морозова”.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бартевев Г.М., Френкель С.Я.* Физика полимеров. Л.: Химия, 1990. 432 с.
2. *Aziz S.B., Hamsan M.H., Nofal M.M. et al.* // *Polymers*. 2020. No. 12. P. 1411.
3. *Du B.* Polymer dielectrics: properties and applications of. London: Intech Open, 2017. 150 p.
4. *Нгуен Х.Т., Миловидова С.Д., Сидоркин А.С., Рогазинская О.В.* // *ФТТ*. 2015. Т. 57. № 3. С. 491; *Nguyen K.T., Milovidova S.D., Sidorkin A.S., Rogazinskaya O.V.* // *Phys. Sol. State*. 2015. V. 57. No. 3. P. 503.
5. *Милинский А.Ю.* // *Науч.-техн. вед. СПбГПУ. Физ.-мат. науки*. 2017. Т. 10. № 1. С. 93.
6. *Халатур П.Г.* // *СОЖ*. 2001. Т. 7. № 4. С. 36.
7. *Матвеев Н.Н., Лисицын В.И., Саушкин В.В., Камалова Н.С.* // *Пласт. массы*. 2021. № 1–2. С. 44.
8. *Матвеев Н.Н., Борисова Н.И., Камалова Н.С., Евсикова Н.Ю.* // *ФТТ*. 2018. Т. 60. № 10. С. 1911; *Matveev N.N., Borisova N.I., Kamalova N.S., Evsikova N.Yu.* // *Phys. Sol. State*. 2018. V. 60. No. 10. P. 1953.
9. *Matveev N.N., Nguyen H.T., Kamalova N.S. et al.* // *St. Petersburg State Polytech. Univer. J. Phys. Math*. 2018. V. 11. No. 3. С. 9.
10. *Камалова Н.С., Матвеев Н.Н., Евсикова Н.Ю., Саврасова Н.А.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2020. Т. 84. № 9. С. 1300; *Kamalova N.S., Matveev N.N., Evsikova N.Y., Savrasova N.A.* // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2020. V. 84. No. 9. С. 1107.
11. *Гороховатский Ю.А.* Основы термодеполяризационного анализа. М.: Наука, 1981. 174 с.

## Temperature stimulation of polymer polarization in an inhomogeneous temperature field

N. S. Kamalova<sup>a, \*</sup>, N. N. Matveev<sup>a</sup>, N. Yu. Evsikova<sup>a</sup>, V. I. Lisitsyn<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Voronezh State University of Forestry and Technologies, Voronezh, 394087 Russia*

<sup>\*</sup>*e-mail: rc@icmail.ru*

We propose a concept for the formation of a basic equation for a computational experiment for determination the parameters of the kinetics of the polarization process of crystallizing flexible-chain polymers in an inhomogeneous temperature field during phase transitions. Modeling was carried out based on experimental data for polydimethylsiloxane with the addition of 0.5% methylvinyl groups (SKTV-1).

УДК 537.63:539.26

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА БЕРИЛЛИЕВОЙ БРОНЗЫ БрБ-2, СОСТАРЕННОЙ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2022 г. Ю. В. Осинская<sup>1</sup>, \*, А. В. Покоев<sup>1</sup>, С. В. Дивинский<sup>1, 2</sup>, С. Г. Магамедова<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева”, Самара, Россия<sup>2</sup>Институт физики материалов, Университет Мюнстера, Мюнстер, 48149 Германия

\*E-mail: oju76@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Впервые методами микротвердости, просвечивающей электронной микроскопии и измерения магнитных свойств исследовано влияние температуры старения и приложенного постоянного магнитного поля (ПМП) на старение бериллиевой бронзы БрБ-2. Обнаружен отрицательный магнитоэластический эффект (МПЭ), приводящий к увеличению микротвердости до ~38%. Установлено наличие упрочняющей фазы  $\gamma$ -Cu<sub>3</sub>Be, играющей большую роль в формировании прочностных свойств сплава, причем наложение ПМП приводит к активизации процесса старения. При наложении ПМП наблюдается тенденция перехода сплава от диамагнитного состояния к суперпарамагнитному.

DOI: 10.31857/S0367676522110217

### ВВЕДЕНИЕ

Одной из современных задач физики твердого тела и материаловедения является выявление закономерностей изменения физико-механических свойств и характеристик металлического сплава, таких как пластичность и прочность, в зависимости от его структуры и фазового состояния [1–3]. Существенно изменить такие свойства позволяют технологии термической обработки, такие как, старение, отжиг, отпуск, нормализация и так далее. В процессе старения закаленного сплава происходит распад пересыщенного твердого раствора и образование фазовых выделений. Фазовые выделения тормозят движение дислокаций, что приводит к изменению физико-механических свойств сплава, таких как микротвердость, прочность и пластичность [4]

Ранее установлено [5–9], что при искусственном старении закаленного технического сплава бериллиевой бронзы БрБ-2 в ПМП увеличение микротвердости может достигать ~38%. Поскольку пластические свойства сплава при этом уменьшаются, наблюдаемый эффект можно определить как “отрицательный” МПЭ [10]. До сих пор не ясна физическая природа этого эффекта в металлическом сплаве. Интересным является то, что бериллиевая бронза БрБ-2, являясь типичным диамагнетиком, так сильно реагирует на приложенное ПМП в процессе старения сплава [11, 12]. Таким образом, целью данной работы яв-

ляется комплексное экспериментальное исследование влияния ПМП и температуры старения на микротвердость, фазообразование и магнитные свойства бериллиевой бронзы БрБ-2.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследования проводились на бериллиевой бронзе БрБ-2 следующего состава, представленного в табл. 1. Режимы закалки и старения сплава выбирали на основе литературных данных [13] и результатов ранее проведенных исследований [5–9]. После выдержки 0.33 ч при температуре 800°C образцы закаливали быстрым погружением в воду температурой 20°C. Старение образцов в ПМП напряженностью 557.2 кА/м проводили на уни-

Таблица 1. Состав бериллиевой бронзы БрБ-2

Элемент	Содержание в сплаве не более, %
Cu	97.49
Be	2.08
Ni	0.31
Содержание примеси не более	
Si	0.09
Al	0.01
Mg	0.02
Fe	н/обн (<0.001)

**Таблица 2.** Режимы термомагнитной обработки бериллиевой бронзы БрБ-2

Температура отжига $T$ , °С	Время отжига $t$ , ч	Напряженность $H$ , кА/м
Закалка от 800°С (0.33 ч) в воду (20°С)		
250	1	0 557.2
300		0 557.2
325		0 557.2
350		0 557.2
400		0 557.2
450		0 557.2
500		0 557.2

кальной установке для отжигов ПМП-2 [14] в динамическом вакууме  $\sim 10^{-2}$  Па. Напряженность ПМП измеряли и контролировали с точностью до 1%, при этом неоднородность поля составляла менее 5%. Направление ПМП было перпендикулярно поверхности образца. Температуру измеряли Pt/Pt(Rh) термопарой и поддерживали на заданном уровне с точностью  $\pm 0.5^\circ\text{C}$ . Режимы термомагнитной обработки приведены в табл. 2. Согласно диаграмме фазовых состояний Cu–Be [15] при 800°С содержание бериллия в сплаве составляет  $\sim 12$  ат. %, тогда как растворимость бериллия при температурах от 300 до 400°С ограничивается  $\sim 2\text{--}3$  ат. %, что соответствует состоянию пересыщенного твердого раствора.

Микротвердость измеряли с помощью микротвердомера HAUSER при нагрузке 100 г и времени нагружения – 7 с. Каждое значение микротвердости получали усреднением по 20 измерениям. Относительная ошибка среднего значения микротвердости составила 3–5%.

Фазообразование наблюдали методом тонких фольг на просвет [16–18] на просвечивающем электронном микроскопе ЭМ-200. Взаимодействие электронов с веществом на несколько порядков превосходит взаимодействие рентгеновских лучей и нейтронов. Поэтому при съемке на просвет с помощью электронов можно исследовать очень тонкие объекты ( $10^{-5}\text{--}10^{-7}$  см). Важнейшим обстоятельством является то, что на электронном изображении кристалла возникает более или менее резкий дифракционный контраст везде, где имеются какие-либо искажения

кристаллической решетки или нарушения ее правильной периодичности, вызванные присутствием тех или иных дефектов: дислокаций, дефектов упаковки, границ зерен и блоков, включений или зон Гинье–Престона.

Магнитные свойства (реакция на изменение внешнего магнитного поля, намагничивание при изменении температуры) бериллиевой бронзы БрБ-2 были измерены с помощью системы измерения физических свойств (PPMS) в магнитометре с вибрирующим образцом (VSM). В представленной работе использовался PPMS 6000 при LOT-QuantumDesign с EverCool II системой (Мюнстер, Германия). Все измерения проводились при давлении  $10^{-4}$  мбар. Для измерения магнитных свойств в магнитометре с вибрирующим образцом (VSM), образец помещается в держатель, который имеет низкую намагниченность. В качестве держателя использовалась стеклянная трубка. Подготовленный образец помещается в установку исследования физических свойств (PPMS). Электромагнит вызывает индуцированное магнитное поле внутри образца, который периодически подвергается вибрации в вертикальном направлении. Это движение приводит к изменению магнитного потока, что вызывает индуцированное напряжение в измерительных катушках. Напряженность этого магнитного поля пропорционально магнитному моменту образца.

Были выполнены два вида измерений. Сначала измеряли реакцию образца на переменное магнитное поле. Магнитное поле было увеличено до 1 Тл, затем уменьшено до –1 Тл, а затем снова увеличено до 1 Тл. Это измерение было выполнено при комнатной температуре (RT) и при  $T = 10$  К. Второе измерение – это реакция на изменение температуры (RT и 10 К) при воздействии внешнего магнитного поля в 1 Тл. Для этой установки размеры образца составляют  $6 \times 3 \times 3$  мм<sup>3</sup>, поскольку магнитное поле, создаваемое электромагнитом, теряет свою однородность за пределами этой области.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты влияния температуры старения и ПМП на микротвердость бериллиевой бронзы БрБ-2 представлены в табл. 3, а также наглядно изображены на рис. 1. Относительная ошибка среднего значения микротвердости исследуемого материала составила 3–5%. Из рис. 1 видно, что после закалки значение микротвердости составляет 1313 МПа. Полученное значение микротвердости согласуется с литературными данными [13], что свидетельствует о достоверности результатов настоящей работы.

После старения без наложения ПМП (рис. 1) микротвердость увеличилась при всех исследо-

**Таблица 3.** Результаты измерения температурной зависимости микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2

Время отжига $t$ , ч	Температура отжига $T$ , °С	Напряженность $H$ , кА/м	$H_{\mu} \pm \Delta H_{\mu}$ , МПа	$(H_{\mu, H \neq 0} - H_{\mu, H=0})/H_{\mu, H=0}$ , %
Закалка 800°С (0.33 ч) → 20°С 1	—	—	1313 ± 29	—
	250	0	1744 ± 49	10
		557.2	1911 ± 39	
	300	0	2871 ± 59	38
		557.2	3949 ± 39	
	325	0	3675 ± 98	11
		557.2	4087 ± 108	
	350	0	3989 ± 196	5
		557.2	4194 ± 196	
	400	0	2852 ± 69	30
		557.2	3734 ± 69	
	450	0	1980 ± 39	11
		557.2	2205 ± 29	
	500	0	1901 ± 59	5
557.2		1999 ± 29		

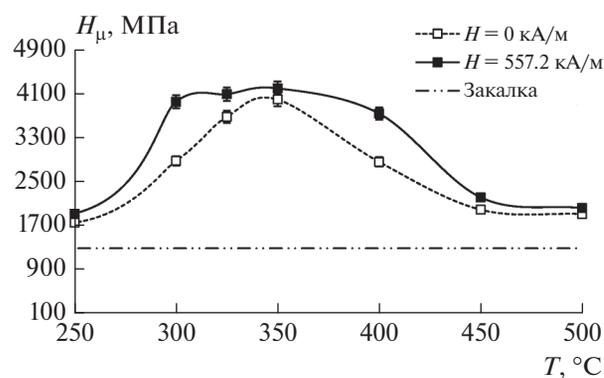
ванных температурах, прирост составил до 230% по сравнению с закаленным состоянием. Это объясняется тем, что при старении бериллиевой бронзы БрБ-2 выделяются фазы (в частности,  $\gamma$ -Cu<sub>3</sub>Be), которые тормозят движение дислокаций и тем самым, приводят к возрастанию прочностных свойств сплава [19, 20]. Максимальное значение микротвердости достигается при 350°С и составляет 3989 МПа. Такое изменение микротвердости после старения без поля, позволяет сделать вывод, что основная доля процесса старения завершается после 350°С, а при температурах выше 400°С идет процесс перестаривания, приводящий к уменьшению микротвердости.

Наложение ПМП напряженностью 557.2 кА/м на те же режимы термической обработки всегда приводит к возрастанию микротвердости образцов по сравнению с состаренными без ПМП до ~38%. Наблюдается отрицательный МПЭ [1–3, 10]. Полученное увеличение микротвердости в совокупности с литературными данными [13] можно объяснить активизацией процесса старения при наложении ПМП и формированием более однородной мелкодисперсной структуры сплава. Характер зависимостей не изменяется, что говорит о том, что ПМП не меняет стадийности процесса старения.

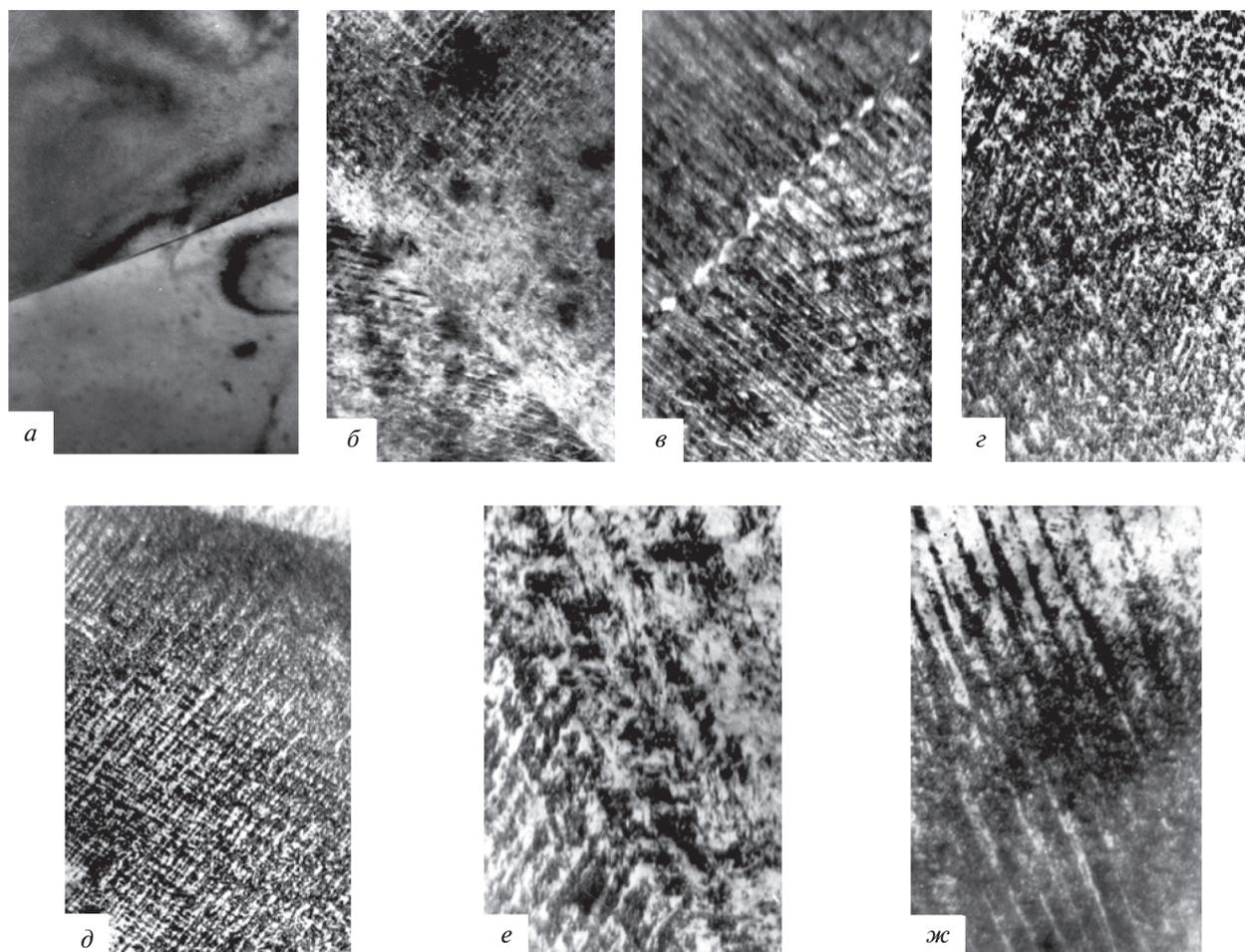
Таким образом, был сделан вывод, что оптимальным режимом термомагнитной обработки бериллиевой бронзы БрБ-2 является старение при температуре 350°С, времени 1 ч и напряжен-

ности ПМП 557.2 кА/м, поскольку при этом значении температуры, напряженности ПМП и времени отжига достигаются наиболее высокие значения физико-механических свойств сплава, в частности микротвердости [21].

Электронно-микроскопический метод (метод тонких фольг на просвет) анализа структуры и фазового состава бериллиевой бронзы БрБ-2 до и после термической и термомагнитной обработки (рис. 2 и 3), проводился при следующих режимах: температура старения – 300, 350 и 400°С, время старения – 1 ч, напряженность ПМП – 557.2 кА/м и без него.



**Рис. 1.** Температурная зависимость микротвердости бериллиевой бронзы БрБ-2 при времени старения 1 ч.



**Рис. 2.** Типичная структура бериллиевой бронзы БрБ-2 при закалке (*a*), отжиге при температурах 300 (*б*, *в*), 350 (*г*, *д*), 400°C (*е*, *ж*) с наложением ПМП (*в*, *д*, *ж*) и в его отсутствии (*б*, *г*, *е*), снятые с увеличением  $\times 20000$ .

В закаленном состоянии структура сплава представляет собой  $\alpha$ -твердый раствор бериллия на основе меди с четкими границами раздела (рис. 2*a*). Расшифровка электронограммы показала наличие кристаллической ГЦК решетки (твердого раствора) на основе меди (рис. 3*a*, табл. 4).

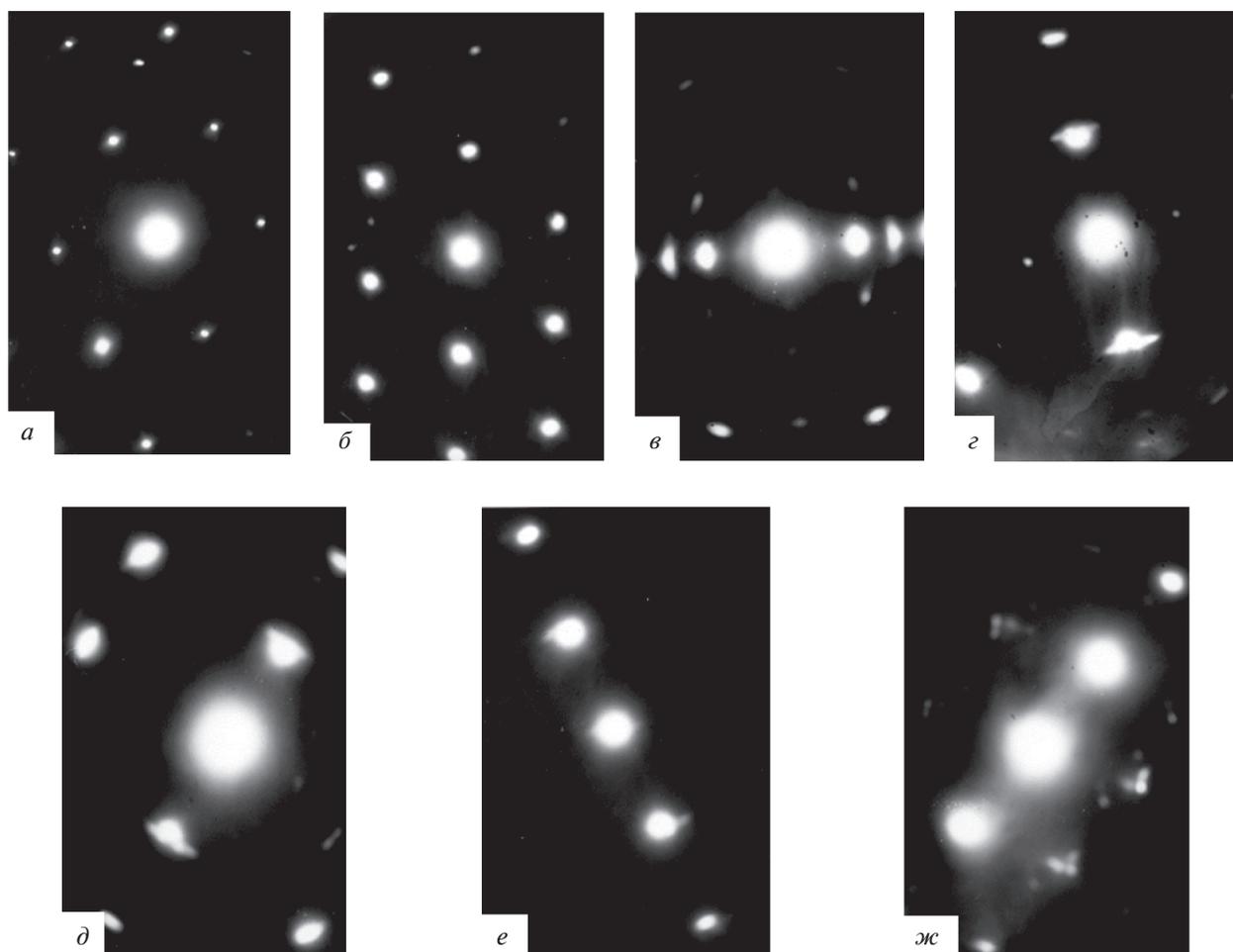
**Таблица 4.** Результаты расшифровки электронограммы образца бериллиевой бронзы БрБ-2 (закалка 800°C в воду 20°C)

№	<i>r</i> , мм	Постоянная прибора <i>C</i>	$(d/n)_{\text{изм}}$ , Å	$(d/n)_{\text{табл}}$ , Å	Фаза	НКЛ
1	24.0	50.5	2.104	2.087	$\alpha$ -Cu	111
2	28.0		1.803	1.808	$\alpha$ -Cu	200
3	39.5		1.278	1.278	$\alpha$ -Cu	220
4	47.0		1.074	1.089	$\alpha$ -Cu	311
5	48.2		1.047	1.044	$\alpha$ -Cu	222

С целью сравнения структуры сплава после обработки при оптимальном режиме (температура старения 350°C), был выбран температурный интервал вблизи этого режима, а именно температуры старения 300 и 400°C.

В литературе имеются данные [4], что в результате старения бериллиевой бронзы БрБ-2 без наложения ПМП на первом этапе выделяются микроскопические выделения, подобные зонам Гинье-Престона, которые представляют собой тонкие упорядоченные области, насыщенные бериллием. Области представляют собой пластинки, когерентно связанные с матрицей основного компонента, имеющие размеры порядка 1000 Å. Эти выделения в общем случае могут представлять собой мелкодисперсную систему, равномерно распределенную по всему объему образца, которая приводит к упрочнению сплава.

Анализ структуры сплава, состаренного при температуре 300°C, 1 ч, в отсутствие ПМП показывает, что структура претерпевает существенные



**Рис. 3.** Электронограммы бериллиевой бронзы БрБ-2 при закалке (а), отжиге при температурах 300 (б, в), 350 (г, д), 400°C (е, ж) с наложением ПМП (в, д, ж) и в его отсутствии (б, г, е).

изменения: наблюдается тенденция к образованию модулированной структуры (рис. 2б). Результаты расчета электронограммы (рис. 3б) показали, что вся матрица представляет собой преимущественно однородный  $\alpha$ -твердый раствор бериллия в меди. В то же время наблюдаются тяжи у основных рефлексов, которые свидетельствуют о наличии тонких дефектных участков, возможно когерентных выделений, представляющих собой зарождающиеся зоны Гинье–Престона.

Наложение ПМП на этот режим термической обработки приводит к активизации процесса распада  $\alpha$ -твердого раствора бериллия на основе меди: мелкодисперсные выделения приобретают определенную ориентацию (рис. 2в), а расшифровка электронограмм (рис. 3в) показывает, что в данном случае выделяется фаза  $\gamma$ -CuBe. Наличие тяжей у основных рефлексов  $\alpha$ -твердого раствора свидетельствует о наличии высокой объемной доли обогащенных областей, представляющих собой ОЦК-решетку фазы  $\gamma$ -CuBe.

Увеличение температуры старения до 350°C приводит к максимальному распаду  $\alpha$ -твердого раствора, процесс выделения происходит более интенсивно (рис. 2г), что подтверждается расшифровкой электронограммы (рис. 3г, табл. 5) и увеличением микротвердости в этом случае по сравнению с закаленным состоянием.

Наложение ПМП на этот режим термической обработки оказывает активное воздействие на структуры и свойства сплава, что приводит к определенной направленности модулированной структуры (рис. 2д), при этом наблюдается пространственное распределение выделений на определенном расстоянии друг от друга и максимальное значение микротвердости. Сказанное выше подтверждает расшифровка электронограммы (рис. 3д, табл. 6), которая показывает наличие собственных рефлексов фазы  $\gamma$ -CuBe, что свидетельствует о частично когерентных выделениях в матрице сплава.

Дальнейшее увеличение температуры старения до 400°C приводит к стабилизации структу-

**Таблица 5.** Результаты расшифровка электронограммы образца бериллиевой бронзы БрБ-2 (старение при  $T = 350^\circ\text{C}$ ,  $t = 1$  ч,  $H = 0$  кА/м)

№	$r$ , мм	Постоянная прибора $C$	$(d/n)_{\text{изм}}$ , Å	$(d/n)_{\text{табл}}$ , Å	Фаза	НКЛ
1	17.5	47.7	2.725	2.728	$\gamma$ -CuBe	100
2	22.8		2.092	2.087	$\alpha$ -Cu	111
3	24.8		1.923	1.930	$\gamma$ -CuBe	110
4	25.9		1.841	1.808	$\alpha$ -Cu	200
5	43.4		1.099	1.105	$\gamma$ -CuBe	211
6	46.0		1.036	1.043	$\alpha$ -Cu	222

**Таблица 6.** Результаты расшифровка электронограммы образца бериллиевой бронзы БрБ-2 (старение при  $T = 350^\circ\text{C}$ ,  $t = 1$  ч,  $H = 557.2$  кА/м)

№	$r$ , мм	Постоянная прибора $C$	$(d/n)_{\text{изм}}$ , Å	$(d/n)_{\text{табл}}$ , Å	Фаза	НКЛ
1	18.0	49.5	2.750	2.728	$\gamma$ -CuBe	100
2	23.7		2.088	2.087	$\alpha$ -Cu	111
3	25.8		1.918	1.930	$\gamma$ -CuBe	110
4	31.5		1.571	1.567	$\gamma$ -CuBe	111
5	38.6		1.282	1.278	$\alpha$ -Cu	220
6	45.5		1.087	1.084	$\alpha$ -Cu	311
7	47.5		1.042	1.044	$\alpha$ -Cu	222

ры, связанное со снятием напряжений в сплаве и процессов полигонизации, что приводит к уменьшению микротвердости и подобным изменениям в структуре (рис. 2е), расшифровка электронограммы подтверждает этот вывод (рис. 3е). Наложение ПМП в данном случае не приводит к существенным изменениям в структуре (рис. 2ж и 3ж).

Таким образом, можно сделать вывод, что электронно-микроскопическим методом наглядно показано выделение упрочняющей фазы  $\gamma$ -CuBe и образование направленной модулиро-

ванной структуры, следствием чего является достижение максимальных значений микротвердости. Кроме этого наблюдается активизация процесса старения по сравнению со старением без ПМП.

Анализ полученных результатов измерений и расчетов магнитных свойств (коэрцитивная сила  $H_c$ , магнитный момент  $M_R$ , диамагнитная проницаемость  $\chi$ ) бериллиевой бронзы БрБ-2 после термической и термомагнитной обработок (табл. 7) показал, что значения коэрцитивной силы ( $H_c$ )

**Таблица 7.** Расчетные значения магнитных свойств

	325°C ( $H \neq 0$ , не очищенный)	325°C ( $H \neq 0$ , очищенный)	350°C ( $H \neq 0$ , не очищенный)	Ед. измерения
$\chi$ (10 К)	$-5.20 + 0.04$	$-5.34 + 0.05$	$22.30 + 0.09$	$-10^{-9}$ ед. СГС/кЭ
$\chi$ (RT)	$-7.73 \pm 0.03$	$-6.90 \pm 0.30$	$-21 \pm 0.39$	
$M_R$ (10 К)	$4.1 + 1.3$	—	$40 + 10$	$10^{-6}$ ед. СГС
$M_R$ (RT)	$1.6 \pm 0.5$	—	$26.9 \pm 75$	
$H_c$ (10 К)	$263 \pm 175$	—	$575 + 75$	—
$H_c$ (RT)	$113 \pm 75$	—	$288 \pm 100$	

увеличиваются с ростом температуры старения, как в случае комнатной температуры (RT) эксперимента, так и при 10 К. Кроме этого, из табл. 7 видно, что при температуре эксперимента 10 К магнитный момент ( $M_R$ ) сплава, состаренного при температуре 350°C, в 10 раз больше, чем при температуре 325°C, а при комнатной температуре в 17 раз больше. В свою очередь, диамагнитная проницаемость сплава, состаренного при температуре 325°C, принимает значение примерно равные диамагнитной проницаемости чистой меди ( $-9.6 \cdot 10^{-6}$ ), однако для сплава, состаренного при температуре 350°C, ее значение возрастает больше, чем в 2 раза, а при температуре эксперимента 10 К она принимает положительное значение, как у парамагнитного состояния.

Кроме этого, обнаружена тенденция перехода сплава от диамагнитного состояния к суперпарамагнитному поведению. Это может быть связано с наличием а) дислокаций, б) парных атомных комплексов медь-бериллий, в) примесей. Каждый из указанных объектов может обладать парамагнитным моментом, который при включении ПМП реагирует на него и вносит положительный парамагнитный вклад в общую намагниченность.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ полученных результатов и литературных данных позволяет сделать следующие выводы. Наблюдается “отрицательный” МПЭ, приводящий к увеличению микротвердости до ~38%. Полученный эффект обусловлен активизацией процесса старения при наложении ПМП и формированием более однородной мелкодисперсной структуры сплава. Установлено, что оптимальным режимом термомагнитной обработки бериллиевой бронзы БрБ-2 является старение при температуре 350°C, времени 1 ч и напряженности ПМП 557.2 кА/м, поскольку при этом значении температуры, напряженности ПМП и времени отжига достигаются наиболее высокие значения физико-механических свойств сплава, в частности микротвердости. Электронно-микроскопическим методом наглядно показано выделение упрочняющей фазы  $\gamma$ -Cu<sub>3</sub>Be и образование направленной модулированной структуры, следствием чего является достижение максимальных значений микротвердости. Кроме этого наблюдается активизация процесса старения по сравнению со старением без ПМП. Выявлена тенденция перехода от диамагнитного состояния образцов к суперпарамагнитному. Такое поведение может быть связано с наличием дислокаций, парных атомных комплексов медь-бериллий и примесей, которые могут обладать парамагнитным моментом. Наложение ПМП реагирует на него и

вносит положительный парамагнитный вклад в общую намагниченность.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В. и др. // Кристаллография. 2003. Т. 48. С. 838.
2. Головин Ю.И. // ФТТ. 2004. Т. 46. № 5. С. 769.
3. Моргунов Р.Б. // УФН. 2004. Т. 174. № 2. С. 131.
4. Бунин К.П., Баранов А.А. Металлография. М.: Металлургия, 1970. 254 с.
5. Осинская Ю.В., Покоев А.В. // Материаловедение. 2005. № 11. С. 2.
6. Осинская Ю.В., Петров С.С., Покоев А.В. и др. // ФТТ. 2012. Т. 54. № 3. С. 531.
7. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Петров С.С. // Изв. Самар. науч. центра РАН. 2009. Т. 11. № 5-1. С. 56.
8. Осинская Ю.В., Покоев А.В. // Физ. и хим. обработки матер. 2003. № 3. С. 18.
9. Пост Р., Осинская Ю.В., Вильде Г. и др. // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. иссл. 2020. № 5. С. 36.
10. Молоцкий М.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 10. С. 3112.
11. Molodov D.A., Gunster C., Gottstein G. // J. Mater. Sci. 2014. V. 49. P. 3875.
12. Molodov D.A., Konijnenberg P.J., Barrales-Mora L.A., Mohles V. // J. Mater. Sci. 2006. V. 41. P. 7853.
13. Тофпенец Р.Л. Разупрочняющие процессы в стареющих сплавах. Минск: Наука и техника, 1979. 184 с.
14. Миронов В.М., Покоев А.В. Камера для отжига в магнитном поле. Технология получения и исследования порошковых материалов с особыми свойствами. Куйбышев: Куйбышевский авиационный институт, 1983. С. 98.
15. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Т. 1. М.: Машиностроение, 1996. 567 с.
16. Утевский Л.М. Дифракционная электронная микроскопия в металловедении. М.: Металлургия, 1973. 583 с.
17. Томас Г. Электронная микроскопия металлов. Прямое исследование металлов в просвечивающем электроном микроскопе. М.: ИЛ, 1963. 351 с.
18. Эндрюс К., Дайсон Д., Киоун С. Электронограммы и их интерпретация. М.: Мир, 1971. 256 с.
19. Миркин Л.И. Старение сплавов. М.: Металлургиздат, 1962. 493 с.
20. Чуистов К.В. Старение металлических сплавов. Киев: Наук. думка, 1985. 230 с.
21. Покоев А.В., Осинская Ю.В. Способ термомагнитной обработки деталей из бериллиевой бронзы. Пат. РФ № 2401879. 2008.

**Magnetic properties of beryllium bronze BrB-2 aged in a constant magnetic field****Yu. V. Osinskaya<sup>a, \*</sup>, A. V. Pokoev<sup>a</sup>, S. V. Divinsky<sup>a, b</sup>, S. G. Magamedova<sup>a</sup>**<sup>a</sup>*Samara National Research University, Samara, 443086 Russia*<sup>b</sup>*Institute for Materials Physics, University of Münster, Munster, 48149 Germany*<sup>\*</sup>*e-mail: oju76@mail.ru*

For the first time, the influence of the aging temperature and the applied constant magnetic field (PMF) on the aging of beryllium bronze BrB-2 has been studied by methods of microhardness, transmission electron microscopy and measurements of magnetic properties. A negative magnetoplastic effect (MPE) was found, leading to an increase in microhardness up to ~30%. The presence of the strengthening phase  $\alpha$ -CuBe, which plays a large role in the formation of the strength properties of the alloy, is established, and the imposition of the PMF leads to the activation of the aging process. When the PMF is applied, a tendency is observed for the transition of the alloy from the diamagnetic state to the superparamagnetic state.

УДК 669.35

## ЭВОЛЮЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ, ПРОЧНОСТИ, ПЛАСТИЧНОСТИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СПЛАВЕ Cu–0.5Cr ПРИ ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКЕ И СТАРЕНИИ

© 2022 г. Е. А. Саркеева<sup>1</sup> \*, И. В. Александров<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Уфимский государственный авиационный технический университет”, Уфа, Россия

\*E-mail: sarkeeva.e@inbox.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Представлены результаты исследования эволюции микроструктуры, механических свойств и электропроводности ультрамелкозернистого состояния сплава Cu–0.5(вес. %)Cr в ходе холодной прокатки с различными степенями обжатия и старения. Ультрамелкозернистое состояние было получено методом равноканального углового прессования. Исследования проведены в сравнении с крупнозернистым состоянием сплава.

DOI: 10.31857/S0367676522110230

### ВВЕДЕНИЕ

Сплавы системы Cu–Cr являются объектом активных исследований, так как обладают высокими прочностью, электро- и теплопроводностью. Данные материалы используются для производства электрических проводников, используемых в миниатюрных интеллектуальных вычислительных системах в микроэлектронике в качестве профилей для коллекторных пластин электродвигателей, которые требуют высокопрочных проводящих материалов [1, 2].

Необходимое сочетание прочности и электропроводности возможно достичь благодаря оптимальной деформационной-термической обработке [1–3]. Традиционно, для получения листовых заготовок применяется холодная деформация прокаткой. Однако материалы после прокатки, наряду с повышенной прочностью, характеризуются пониженными пластичностью и электропроводностью, что снижает потенциал их применения и заставляет большее внимание уделять достижению баланса между данными свойствами. Особое внимание при формировании оптимального комплекса свойств отводится пост-деформационной термообработке (ТО), т.к., с одной стороны, реализованное в результате старения дисперсионное упрочнение дает большой прирост прочности, а, с другой стороны, оно приводит к восстановлению электропроводности [3, 4, 6–9].

Достижение уникального сочетания технологических и эксплуатационных свойств в сплавах

возможно за счет формирования в них ультрамелкозернистой или нанокристаллической (НК) структуры. Эффективным для получения ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры является метод интенсивной пластической деформации (ИПД) [5–12], в частности, равноканальное угловое прессование (РКУП). Например, в работах [11, 12] показано, что в сплавах Cu–0.5(вес. %)Cr и Cu–0.69(вес. %)Cr подвергнутых 4 проходам РКУП удалось увеличить предел прочности до 570 и 530 МПа, за счет уменьшения размера структурных составляющих до 510 и 540 нм и выделения дисперсных частиц Cr. Применение РКУП позволяет получать массивные заготовки в виде прутков, однако промышленное производство требует дальнейшего передела прутков в ленты, листы, пластины и др. Таким образом, актуальным является вопрос исследования влияния прокатки на микроструктуру УМЗ медных сплавов.

Целью данной работы является экспериментальное исследование влияния холодной прокатки и последующего старения на микроструктуру и свойства дисперсионно-твердеющего сплава Cu–0.5(вес. %)Cr (Cu–0.5)Cr с УМЗ структурой, полученной методом РКУП.

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве материала для исследований был выбран промышленный электротехнический сплав Cu–0.5Cr. Образцы в исходном состоянии имели размеры 10 × 10 × 60 мм и форму прямо-

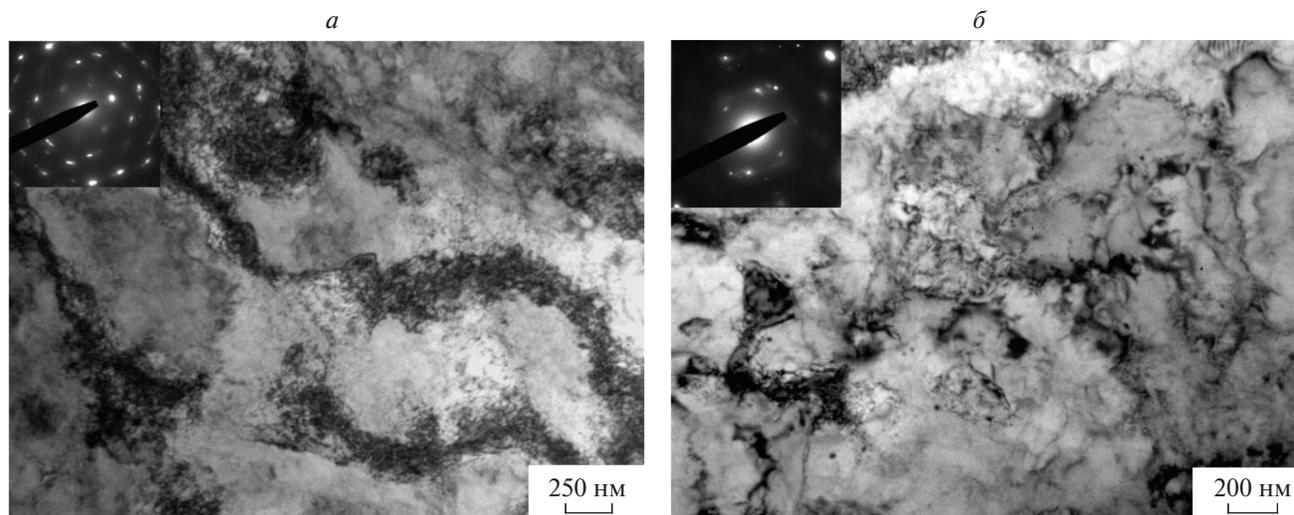


Рис. 1. Микроструктура сплава в состояниях ХП90 (а) и ХП90 + ТО (б). ПЭМ.

угольных параллелепипедов. Для формирования пересыщенного твердого раствора образцы выдерживали в течение 0.5 ч при 1000°C и далее закачивали в 5%-ном растворе NaCl. Далее это состояние обозначено как “ИС” (Исходное состояние).

ИС характеризуется крупнозернистой микроструктурой со средним размером зерна  $260 \pm 11$  мкм и большим количеством двойников отжига. В микроструктуре видны включения размером  $4.3 \pm \pm 0.1$  мкм на основе хрома [13].

Далее часть образцов в ИС была подвергнута холодной прокатке (ХП). Вторая часть образцов подвергалась РКУП.

ХП проводили при комнатной температуре со степенями обжатия 40, 60, 80 и 90%. За один проход при прокатке уменьшение толщины составило примерно 5%. Между проходами заготовки охлаждали на воздухе, чтобы минимизировать влияние деформационного нагрева на микроструктуру.

РКУП осуществляли в оснастке с внутренним углом пересечения каналов  $\psi = 90^\circ$  по маршруту Вс (поворот заготовки на угол  $90^\circ$  по часовой стрелке вдоль продольной оси заготовки после каждого прохода) при комнатной температуре со скоростью 0.2 мм/с. Было сделано 4 прохода. После РКУП была проведена ХП при комнатной температуре со степенями обжатия 40, 60, 80 и 90%. Направление прокатки было параллельно направлению экструзии.

Старение проводили на воздухе в печи Nobertherm 45 при 425°C в течение 40 мин. Исследования микроструктуры и свойств проводили в плоскости прокатки. Для исследования микроструктуры использовали оптический микроскоп (ОМ) OLIMPUS GX51, растровый электронный микроскоп JEOL JSM-6490LV и просвечиваю-

щий электронный микроскоп (ПЭМ) JEOL 2100. Расчет размера зерен/субзерен в микроструктуре после деформации проводили по темнопольному изображению. Измерения проводили вдоль короткой оси, т.е. измеряли толщину зерен/субзерен.

Испытания на растяжение проводили при скорости деформации  $10^{-3} \text{ с}^{-1}$  на приборе Instron 8801 при комнатной температуре. Образцы вырезали из центральной части РКУП заготовок и листов после прокатки параллельно направлению деформации. Измерение электропроводности проводили методом вихревых токов в соответствии с ГОСТ 27333-87 на приборе ВЭ-27НЦ/4-5. Измерения проводили при комнатной температуре. Погрешность измерения составила  $\pm 2\%$ .

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе ХП со степенями обжатия от 40 до 90% микроструктура ИС вытягивается в направлении прокатки. При больших степенях деформации микроструктура становится ламелярной. Наблюдается значительное уменьшение расстояния между границами, измеренного в перпендикулярном направлении к плоскости прокатки, с  $200 \pm 10$  до  $350 \pm 10$  нм. На рис. 1а представлена типичная микроструктура после прокатки со степенью обжатия 90% (состояние 90ХП). Видно, что границы уширены и изогнуты [14].

Последующее старение прокатанного ИС (состояние 90ХП + ТО) приводит к распаду пересыщенного твердого раствора и выделению дисперсных частиц со средним размером  $13 \pm 1$  нм (рис. 1б). При этом среднее расстояние между границами практически не меняется и составляет  $360 \pm 15$  нм.

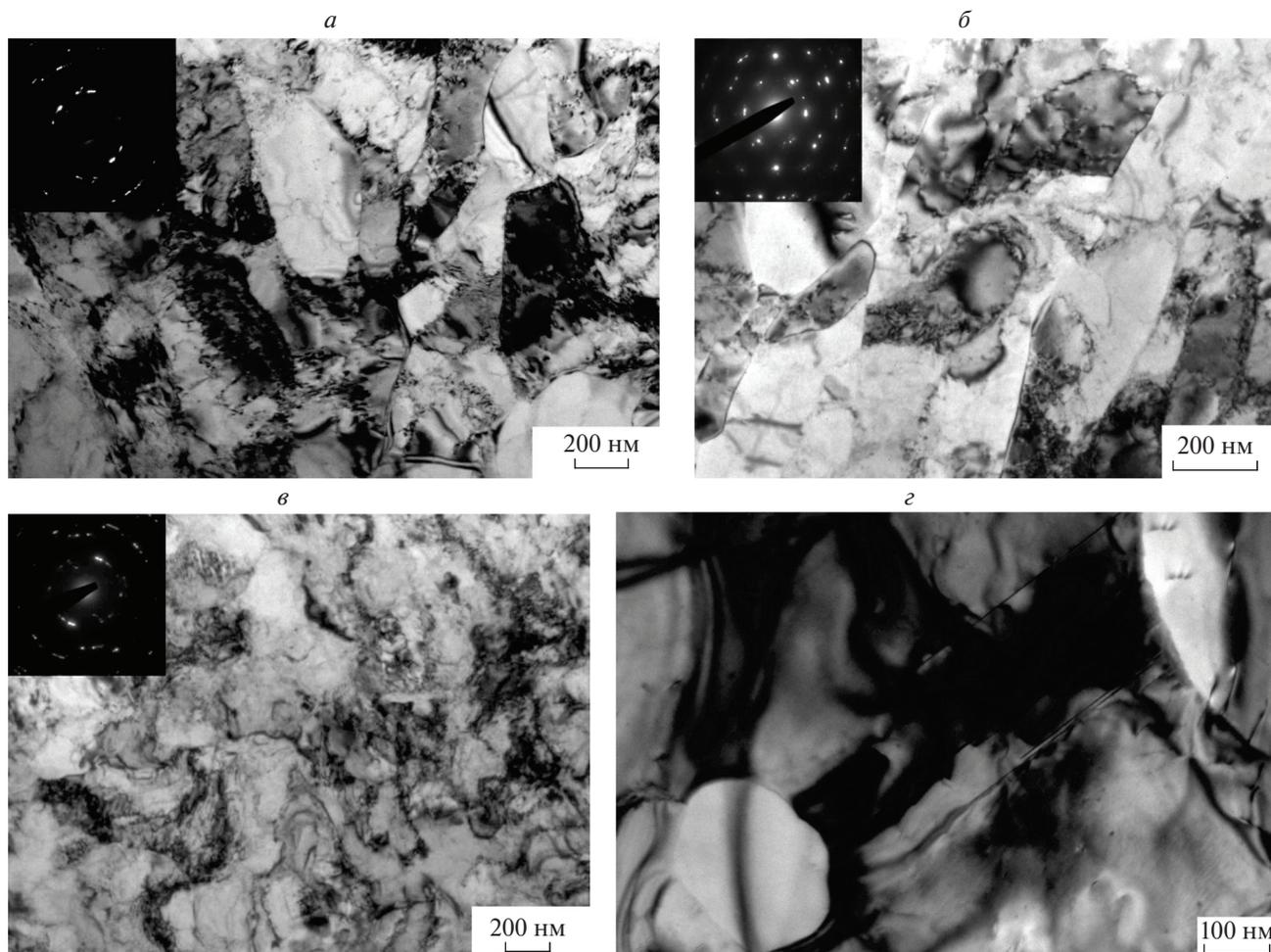


Рис. 2. Микроструктура состояний РКУП4 (а), РКУП4 + 40ХП (б) и РКУП4 + 90ХП (в, з). ПЭМ.

РКУП (рис. 2а) приводит к значительному измельчению структурных элементов и преобразованию микроструктуры ИС в УМЗ структуру за счет перестройки дислокаций. В ходе РКУП дислокации непрерывно генерируются и за счет постепенной объеденения в клубки/ячейки и границы субзерен, в итоге формируют новые границы зерен [15]. В результате 4 проходов РКУП (состояние РКУП4) формируется вытянутая микроструктура со средним размером зерен/субзерен  $255 \pm 20$  нм. Анализ фотографий микроструктуры после РКУП выявил наличие частиц вторичных фаз. Таким образом, во время ИПД активизировались процессы диффузии, приводящие к разложению перенасыщенного твердого раствора и образованию частиц размером около 6 нм.

Микроструктура состояний РПКУП4 + 40ХП и РПКУП4 + 90ХП, полученных в результате холодной прокатки состояния РКУП4 со степенями обжатия 40 и 90% соответственно, представлена на рис. 2.

В результате холодной прокатки со степенью обжатия 40% состояния РКУП4 микроструктура вытягивается в направлении прокатки. Средний размер зерен/субзерен достигает  $406 \pm 16$  нм (рис. 3). Выявленные изменения в микроструктуре являются следствием использованной схемы деформации

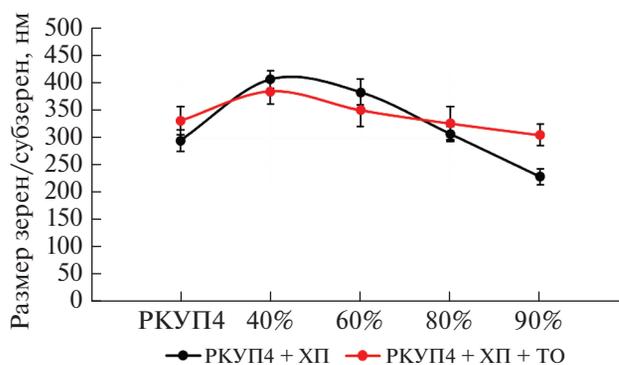


Рис. 3. График зависимости размера зерен/субзерен от степени деформации.

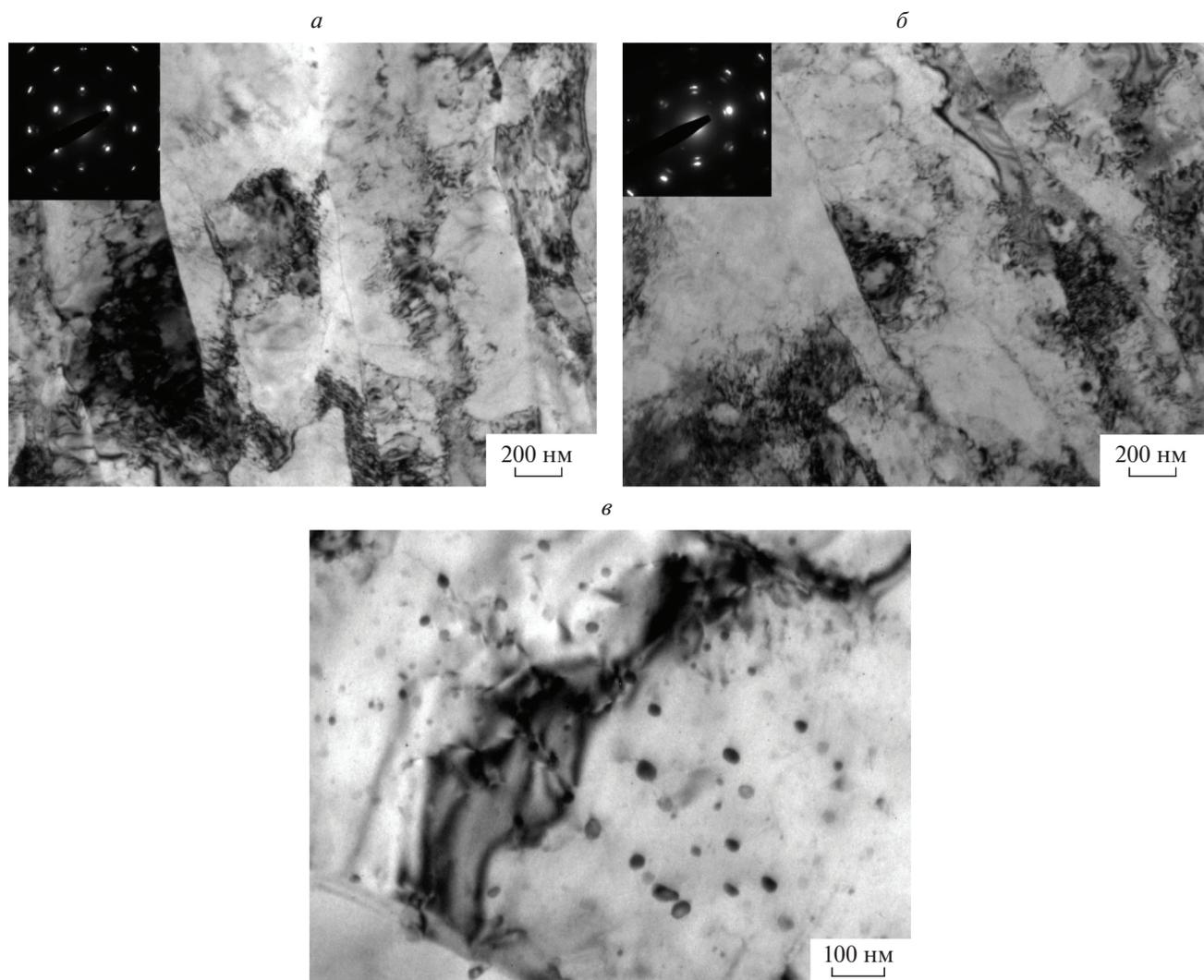


Рис. 4. Микроструктура состояний РКУП4 + 40ХП + ТО (а), РКУП4 + 90ХП + ТО (б, в). ПЭМ.

ции. Ранее вытянутые в направлении деформации зерна/субзерна, характерные для состояния РКУП4, становятся уплощёнными за счет уменьшения их толщины [16]. Последующее увеличение степени обжатия до 90% приводит к постепенному уменьшению среднего поперечного размера зерен/субзерен до  $229 \pm 15$  нм. При больших степенях обжатия, наряду с вытянутыми сильнодеформированными зернами, наблюдаются мелкие равноосные зерна, свободные от дислокаций, с ровными тонкими границами (рис. 2г). Подобные зерна наблюдали в работе [16] после прокатки образцов чистой меди, подвергнутых 4, а особенно 10 проходам РКУП. В микроструктуре также наблюдаются частицы вторичных фаз диаметром в диапазоне 3–6 нм.

Таким образом, в результате холодной прокатки УМЗ состояния удалось сформировать микроструктуру с меньшим размером зерен/субзерен по

сравнению прокатанным исходным состоянием. Границы зерен/субзерен становятся более тонкими и резкими, что связано с увеличением их ориентировки.

В результате старения не происходит существенного изменения размера зерен/субзерен (рис. 3) в микроструктуре состояний РКУП4, РКУП4 + ХП со степенью обжатия 40, 60 и 80%. После прокатки со степенью обжатия 90% размер зерна/субзерна увеличивается с  $229 \pm 15$  до  $305 \pm 20$  нм.

Старение не приводит к видимому изменению в расположении и плотности дислокаций как в РКУП4 + ТО, так и в РКУП4 + 90ХП + ТО состояниях (рис. 4а и 4б). Сохраняются зерна/субзерна с размытыми и неровными границами. Неоднородность в распределении дислокаций внутри некоторых из них свидетельствует о сохранении напряженного состояния. Старение сопровождается

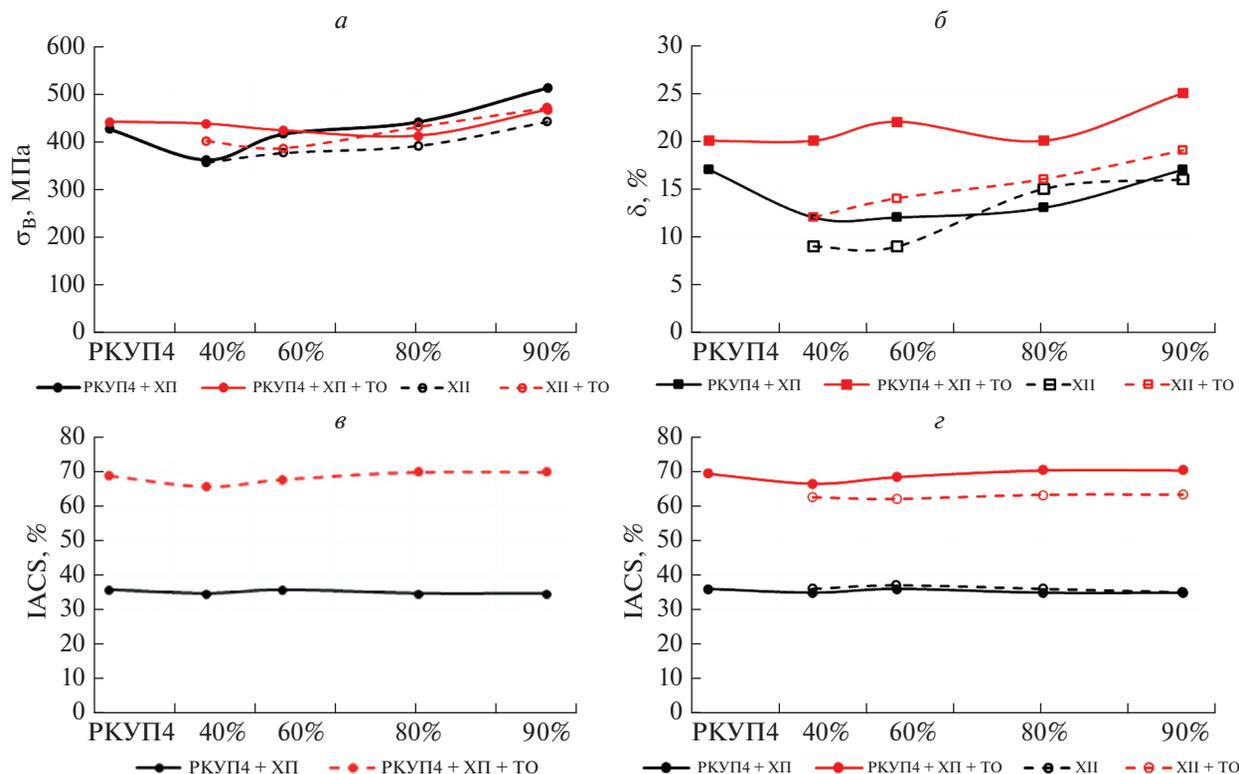


Рис. 5. Свойства сплава: зависимость предела прочности от степени деформации (а), зависимость относительного удлинения от степени деформации (б), зависимость электропроводности сплава от степени деформации (в, г).

формированием частиц сферической и эллипсоидальной форм (рис. 4в). Частицы расположены неравномерно как по объему, так и по границам зерен. Размер частиц увеличивается и составляет около  $10 \pm 1$  нм. Таким образом, при старении предварительная деформационная обработка (РКУП + ХП) приводит к выделению частиц с меньшим размером, чем после старения ИС + ХП состояния ( $13 \pm 1$  нм).

Пластическая деформация способствует изменению механических характеристик сплава. ИС + ХП приводит к увеличению предела прочности с 160 МПа до 440 МПа (табл. 1, рис. 5а), относительное удлинение уменьшается с 42 до 16% (табл. 1, рис. 5б). РКУП приводит к росту предела прочности  $\sigma_B$  с  $160 \pm 10$  до  $425 \pm 10$  МПа, что связано с дислокационным и зернограничным упрочнениями. При этом относительное удлинение уменьшается с  $42 \pm 2$  до  $17 \pm 2$ %. Последующая ХП со степенью обжатия 40% способствует разупрочнению, что связано с увеличением среднего размер зерен/субзерен (рис. 3) в соответствии с соотношением Холла-Петча [17, 18]. При дальнейшем увеличении степени обжатия до 90% предел прочности возрастает до  $510 \pm 18$  МПа. Смена схемы деформации с РКУП на ХП приводит к снижению относительного удлинения с  $17 \pm 2$  до

$12 \pm 1$ %. Дальнейшее увеличение степени деформации приводит к ее восстановлению до  $17 \pm 1$ %.

Низколегированный сплав Cu–0.5(Cг относится к классу дисперсионно–упрочняемых сплавов, для которых старение является важнейшим этапом достижения оптимального комплекса прочности и электропроводности. В дополнение к дислокационному и зернограничному упрочнениям происходит упрочнение дисперсными частицами вторичных фаз, которые выделяются при распаде твердого раствора. Частицы, выделяясь в местах

Таблица 1. Механические и электрические свойства

Состояние	$\sigma_B$ , МПа	$\epsilon$ , %	IACS, %
ИС	$160 \pm 10$	$42 \pm 2$	37
ИС + 90ХП	$440 \pm 10$	$16 \pm 1$	35
ИС + 90ХП + ТО	$465 \pm 10$	$18 \pm 2$	67
РКУП4	$425 \pm 7$	$17 \pm 2$	39
РКУП4 + 90ХП	$510 \pm 18$	$17 \pm 1$	35
РКУП4 + 90ХП + ТО	$460 \pm 10$	$25 \pm 1$	70

скопления дислокаций, границах зерен и субзерен препятствуют движению дислокаций, миграции границ зерен/субзерен. Однако, если частицы укрупняются, вклад дисперсионного упрочнения ослабляется, что наблюдается после старения состояния РКУП4 + ХП. При этом происходит некоторый возврат микроструктуры, что обеспечивает уменьшение предела прочности до  $460 \pm 10$  МПа и улучшение пластичности до  $25 \pm 1\%$ , что на 8% выше, чем в случае прокатанного крупнозернистого ИС.

В ИС электропроводность составила 37% IACS. Величина электропроводности существенно зависит от уровня дефектности микроструктуры. ИПД и последующая ХП сопровождаются увеличением плотности дислокаций и протяженности границ зерен, на которых происходит рассеяние электронов проводимости. Однако, как видно из рис. 5в, величина электропроводности не сильно зависит от степени деформации. Следовательно, основной вклад в электропроводность вносят атомы легирующего элемента, находящиеся в твердом растворе, что согласуется с результатами, полученными в [19, 20]. В процессе старения происходит распад твердого раствора, в результате которого происходит выделение частиц вторичных фаз и их укрупнение (рис. 4г, табл. 1), а также процессы, приводящие к восстановлению микроструктуры, в результате чего электропроводность всех деформированных состояний восстанавливается до 68–70% IACS. При этом электропроводность прокатанного УМЗ состояния, равная 70% IACS, несколько выше, чем у прокатанного исходного крупнозернистого состояния, равная 67% IACS. Следовательно, предварительная ИПД способствует более полному распаду пересыщенного твердого раствора.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Холодная прокатка УМЗ состояния приводит к формированию вытянутой сильнодеформированной микроструктуры. При этом увеличение степени обжатия приводит к увеличению размера структурных составляющих при 40% обжатии. При больших степенях обжатия размер зерен/субзерен монотонно уменьшается. Немонотонный характер изменения размера структурных составляющих связан со сменой схемы деформации. Последующее старение приводит к аналогичным изменениям в характере микроструктуры. При этом размер структурных составляющих меняется незначительно. Обнаруженные тенденции слабо отличаются от тенденций, характерных для прокатки и старения ИС.

Прочность УМЗ состояния после прокатки и старения слабо отличается от прочности соответствующих состояний, полученных прокаткой и старением ИС. В то же время, пластичность УМЗ

состояния, подвергнутого плоской прокатке и старению, выше.

Старение приводит к более высокой электропроводности прокатанного УМЗ состояния, чем у прокатанного ИС крупнозернистого состояния, что связано с более полным распадом пересыщенного твердого раствора.

Обнаруженные закономерности говорят о положительном влиянии предварительного измельчения микроструктуры на уровни пластичности и электропроводности сплава Cu–0.5Cr при прокатке и старении.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0838-2020-0006 “Фундаментальные исследование новых принципов создания перспективных электромеханических преобразователей энергии с характеристиками выше мирового уровня, с повышенной эффективностью и минимальными удельными показателями, с использованием новых высокоэффективных электротехнических материалов”).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Осинцев О.Е., Федоров В.Н.* Медь и медные сплавы, отечественные и зарубежные марки. М.: Машиностроение, 2004. 215 с.
2. *Vinogradov A., Ishida N., Kitagawa K., Kopylov V.* // *Acta Mater.* 2005. V. 53. P. 2181.
3. *Purcek G., Yanar H., Saray O. et al.* // *Wear.* 2014. V. 311. P. 149.
4. *Sarkeeva E.A., Alexandrov I.V.* // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Engin.* 2020. V. 1008. Art. No. 012057.
5. *Валиев П.З., Александров И.В.* Объемные наноструктурные металлические материалы, Получение, структура и свойства. М.: Академкнига, 2007. 271 с.
6. *Islamgaliev R.K., Nesterov K.M., Bourgon J. et al.* // *J. Appl. Phys.* 2014. V. 115. Art. No. 194301.
7. *Vinogradov A., Suzuki Y., Ishida T. et al.* // *Mater. Trans.* 2004. V. 45. No. 7. P. 2187.
8. *Vinogradov A., Patlan V., Suzuki Y. et al.* // *Acta Mater.* 2002. V. 50. No. 7. P. 1639.
9. *Kun Xia Wei, Wei Wei, Fei Wang et al.* // *Mater. Sci. Engin. A.* 2011. V. 528. No. 3. P. 1478.
10. *Vinogradov A., Ishida T., Kitagawa K., Kopylov V.I.* // *Acta Mater.* 2005. V. 53. No. 8. P. 2181.
11. *Xu C.Z., Wang Q.J., Zheng M.S. et al.* // *Mater. Sci. Engin. A.* 2007. V. 59. P. 303.
12. *Wang Q.J., Xu C.Z., Zheng M.S. et al.* // *Mater. Sci. Engin. A.* 2008. V. 496. P. 434.
13. *Sarkeeva E.A., Alexandrov I.V.* // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Engin.* 2020. V. 672. Art. No. 012056.
14. *Liua Q., Huang X., Lloyd D.J., Hansen N.* // *Acta Mater.* 2019. V. 50(15). P. 3789.
15. *Hughes D.A., Hansen N.* // *Acta Mater.* 1997. V. 45. P. 3871.

16. *Guowei Wang, Dan Song, Zhikai Zhou et al.* // J. Mater. Res. Tech. 2021. V. 15. P. 2419.
17. *Stepanov N.D., Kuznetsov A.V., Salishchev G.A. et al.* // Mater. Sci. Engin. A. 2012. V. 554. P. 105.
18. *Petch N.J.* // J. Iron. Steel. Inst. 1953. V. 174. P. 25.
19. *Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. № 9. С. 1295; *Kozlov E.V., Konneva N.A., Popova N.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2009. V. 73. No. 9. P. 1227.
20. *Chembarisova R.G.* // Tech. Phys. 2020. V. 65. P. 593.

## **Evolution of microstructure, strength, plasticity, and electric conductivity in ultrafine-grained Cu–0.5Cr alloy during cold rolling and aging**

**E. A. Sarkeeva<sup>a, \*</sup>, I. V. Alexandrov<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Ufa State Aviation Technical University, Ufa, Russia*

*\*e-mail: sarkeeva.e@inbox.ru*

We presented the results of a study of the evolution of the microstructure, mechanical properties and electrical conductivity of the ultrafine-grained state of the Cu–0.5(wt %)Cr alloy during cold rolling with various degrees of reduction and aging. The ultrafine-grained state was obtained by equal channel angular pressing. The studies were carried out in comparison with the coarse-grained state of the alloy.

УДК 53.043:54-7:517.929.7

# МОДЕЛИРОВАНИЕ И КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА, ОБУСЛОВЛЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ШИРОКИХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ИЛИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С МНОГОСЛОЙНЫМИ ПЛАНАРНЫМИ СТРУКТУРАМИ

© 2022 г. М. А. Степович<sup>1</sup> \*, Д. В. Тургин<sup>2</sup>, В. В. Калманович<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского”, Калуга, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова”, Ивановский филиал, Иваново, Россия

\*E-mail: m.stepovich@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Изучены некоторые аспекты математического моделирования и качественной оценки одномерных процессов тепломассопереноса в многослойных планарных структурах. Рассмотрение проведено на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широкими пучками заряженных частиц или электромагнитным излучением в многослойных планарных полупроводниковых мишенях.

DOI: 10.31857/S036767652211028X

## ВВЕДЕНИЕ

При проектировании микро- и нанoeлектронных систем, работающих в условиях стационарного радиационного и/или контактного теплового воздействия: потоков заряженных частиц и/или электромагнитного излучения [1, 2] одной из важных задач является оценка степени внешнего воздействия на эти системы. Не менее важной является и задача оценки теплового, в т.ч. и радиационного, воздействия на такие системы. Поскольку экспериментальная регистрация информативных сигналов от реальных нанообъектов может быть затруднена, использование математического моделирования для решения таких задач является весьма актуальным. Ввиду того, что значительное число структур различной природы образованы планарными слоями, задача математического моделирования и качественной оценки одномерных процессов тепломассопереноса в многослойных планарных структурах, обусловленных воздействием различных видов радиации (нейтронов, протонов, электронов, электромагнитного излучения, в т.ч. рентгеновского и гамма-диапазонов) [1–5] и математическое описание таких процессов могут быть реализованы с использованием единого подхода, что и является предметом рассмотрения в настоящей работе.

Рассмотрение математических моделей и их качественная оценка проведены на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ), генерированных в многослойных планарных полупроводниковых структурах широким внешним источником.

## КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА МОДЕЛИ НЕЗАВИСИМЫХ ИСТОЧНИКОВ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ ПРОЦЕСС ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ СТРУКТУРЕ

Диффузия ННЗ, генерированных в полупроводниковой мишени киловольтными электронами, моделируется с использованием так называемой модели независимых источников, согласно которой на диффузию генерированных электронным пучком неравновесных ННЗ из любого микрообъема полупроводника не оказывают влияние другие электроны или дырки из других микрообластей материала [6, 7]. В этом случае для одномерной диффузии, реализующейся при использовании широкого пучка первичных электронов, сначала находится распределение ННЗ, продиффундировавших из бесконечно тонкого слоя по-

лупроводника, расположенного на определенной глубине в объеме мишени, после чего искомое распределение находится как суперпозиция ННЗ от всех таких слоев мишени.

Для бесконечно тонкого планарного источника ННЗ, находящегося на глубине  $z_0$ ,  $z_0 \in [0, \infty)$ , математическая модель диффузии может быть записана как [7]:

$$D \frac{d^2 \Delta p(z, z_0)}{dz^2} - \frac{\Delta p(z, z_0)}{\tau} = -\rho(z) \delta(z - z_0) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$D \frac{d \Delta p(z, z_0)}{dz} \Big|_{z=0} = v_s \Delta p(0, z_0), \quad \Delta p(\infty, z_0) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\Delta p(z, z_0)$  – распределение ННЗ после их диффузии от тонкого планарного источника в однородной полупроводниковой мишени,  $z$  – координата, отсчитываемая от плоской поверхности в глубь полупроводника,  $\rho(z)$  – число ННЗ, генерированных электронным пучком в единицу времени на глубине  $z$  до их диффузии, а  $D$ ,  $\tau$ ,  $v_s$  – коэффициент диффузии, время жизни и скорость поверхностной рекомбинации ННЗ соответственно. Для рассматриваемой математической модели диффузии ННЗ, генерированных киловольтными электронами, при проведении расчетов распределений ННЗ в объеме мишени для переменных и параметров модели наиболее удобным является использование микрометровой шкалы [8–10]. Отметим также, что зависимость от координаты концентрации ННЗ, генерированных электронным пучком в однородной полупроводниковой мишени в единицу времени  $\rho(z)$  для широкого электронного пучка может быть найдена из выражения для плотности энергии электронного пучка, выделяемой в мишени в единицу времени до начала процесса диффузии [11], делением ее на энергию образования электронно-дырочной пары (она приблизительно равна трем ширинам запрещенной зоны полупроводника) [12].

Решив (1), (2), найдем искомое распределение по глубине неравновесных ННЗ  $\Delta p(z)$  в однородной мишени как

$$\Delta p(z) = \int_0^{\infty} \Delta p(z, z_0) dz_0. \quad (3)$$

Отметим, что данный подход может быть использован для нахождения распределений ННЗ в результате их диффузии как в однородных, так и в планарных двух- [13, 14] и трехслойных [15, 16] полупроводниковых мишенях. В принципе, решение может быть получено и для большего числа слоев многослойной полупроводниковой мишени, однако это сопряжено с существенными трудностями технического характера, и потому

этот способ к положительному результату не привел: на основании рассмотрения решений для двух- и трехслойных структур нам не удалось найти закономерность в формулах для решения дифференциальных уравнений и описать алгоритм решения задачи для произвольного числа слоев многослойной структуры.

При наличии различных, в том числе и неконтролируемых, внешних воздействий на изучаемый полупроводник для рассматриваемой математической модели будем иметь различные функции  $\rho_1(z)$  и  $\rho_2(z)$  в правой части дифференциального уравнения (1) и, соответственно, два различных его решения  $\Delta p_1(z, z_0)$  и  $\Delta p_2(z, z_0)$ , а следовательно, и различные функции  $\Delta p_1(z)$  и  $\Delta p_2(z)$ . Можно показать [17], что для однородной мишени при выполнении условия

$$|\rho_2(z) - \rho_1(z)| \leq \varepsilon \quad (4)$$

справедливы оценки

$$|\Delta p_2(z, z_0) - \Delta p_1(z, z_0)| \leq \varepsilon \tau / L$$

и

$$|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq \varepsilon \tau.$$

Отсюда следуют существование и единственность решения дифференциального уравнения (1) с граничными условиями (2), корректность [18, 19] математической модели (1)–(3), а также и многослойных математических моделей, которые могут быть построены на основе модели (1)–(3).

### КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЮЩЕЙ ПРОЦЕСС ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В МИШЕНИ КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ СЛОЕВ

Для одномерной диффузии в конечный полупроводник вдоль оси  $z$ , перпендикулярной поверхности  $n$ -слойной полупроводниковой структуры ( $z \in [0, l]$ ), распределение ННЗ по глубине находится как решение дифференциального уравнения [20]

$$\frac{d}{dz} \left( D^{(i)}(z) \frac{d \Delta p^{(i)}(z)}{dz} \right) - \frac{\Delta p^{(i)}(z)}{\tau^{(i)}(z)} = -\rho^{(i)}(z), \quad (5)$$

$i = \overline{1, n}$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} D^{(1)} \frac{d \Delta p^{(1)}(z)}{dz} \Big|_{z=0} &= v_s^{(1)} \Delta p^{(1)}(0), \\ D^{(n)} \frac{d \Delta p^{(n)}(z)}{dz} \Big|_{z=l} &= -v_s^{(n)} \Delta p^{(n)}(l). \end{aligned} \quad (6)$$

Верхний индекс в скобках указывает номер слоя. Для многослойной структуры  $z_1 = 0, z_{n+1} = l$  – координаты внешних границ полупроводника,  $z_2, z_3, \dots, z_n$  – координаты границ раздела слоев;  $D^{(i)}, L^{(i)}, \tau^{(i)}$  – электрофизические параметры: коэффициент диффузии, диффузионная длина и время жизни ННЗ в  $i$ -м слое соответственно, при этом  $L^{(i)} = \sqrt{D^{(i)}\tau^{(i)}}$ . На границах полупроводника (при  $z = 0$  и при  $z = l$ ) приведенные скорости поверхностной рекомбинации  $S^{(1)} = L^{(1)}v_s^{(1)}/D^{(1)}, S^{(n)} = L^{(n)}v_s^{(n)}/D^{(n)}$ , где  $v_s^{(1)}$  и  $v_s^{(n)}$  – скорости поверхностной рекомбинации ННЗ на поверхности первого и  $n$ -го слоев, соответственно. Функция  $\Delta p^{(i)}(z)$  описывает распределение неравновесных ННЗ по глубине в  $i$ -м слое после их диффузии в полупроводнике. Функция  $\rho^{(i)}(z)$  – зависимость от координаты плотности ННЗ, генерированных широким электронным пучком в  $i$ -м слое полупроводниковой мишени в единицу времени.

Рассмотрим диффузию ННЗ в многослойной мишени, в которой внутри каждого слоя коэффициент диффузии и время жизни ННЗ – величины постоянные. В этом случае дифференциальное уравнение диффузии ННЗ примет вид

$$D^{(i)}(z) \frac{d^2 \Delta p^{(i)}(z)}{dz^2} - \frac{\Delta p^{(i)}(z)}{\tau^{(i)}(z)} = -\rho^{(i)}(z), \quad i = \overline{1, n}.$$

Перепишем это уравнение в виде:

$$\frac{d^2 \Delta p^{(i)}(z)}{dz^2} - \frac{1}{\tau^{(i)}(z) D^{(i)}(z)} \Delta p^{(i)}(z) = -\frac{1}{D^{(i)}(z)} \rho^{(i)}(z), \quad i = \overline{1, n}$$

или

$$y_i''(z) - b_i^2 y_i(z) = f_i(z), \quad i = \overline{1, n}, \quad (7)$$

где  $y_i(z) = \Delta p^{(i)}(z)$ , а

$$b_i^2 = \frac{1}{\tau^{(i)}(z) D^{(i)}(z)}, \quad f_i(z) = -\frac{\rho^{(i)}(z)}{D^{(i)}(z)}$$

есть постоянные величины.

Тогда граничные условия можно записать в виде:

$$y_1(0) = g_1, \quad (8)$$

$$y_i'(z_i) = a_i y_i(z_i), \quad i = \overline{1, n}, \quad (9)$$

$$y_i(z_i) = y_{i+1}(z_i) \quad i = \overline{1, n-1}. \quad (10)$$

Здесь  $g_1$  и  $a_i$  – постоянные,  $i = \overline{1, n}$ .

Для нахождения решений (7) используем метод вариации произвольной постоянной. Решение будем искать в виде

$$y_i(z) = C_{1i}(z) \exp(b_i z) + C_{2i}(z) \exp(-b_i z),$$

где  $C_{1i}(z)$  и  $C_{2i}(z)$  – искомые функции, удовлетворяющие системе уравнений

$$\begin{cases} C_{1i}'(z) \exp(b_i z) + C_{2i}'(z) \exp(-b_i z) = 0, \\ C_{1i}'(z) b_i \exp(b_i z) - C_{2i}'(z) b_i \exp(-b_i z) = f_i(z). \end{cases} \quad (11)$$

Из (11) получим  $C_{1i}'(z) = f_i(z) \exp(-b_i z) / 2b_i$  и  $C_{2i}'(z) = -f_i(z) \exp(b_i z) / 2b_i$ , откуда

$$C_{1i}(z) = \frac{1}{2b_i} \int_{z_i}^z f_i(t) \exp(-b_i t) dt + a_{1i}, \quad i = \overline{1, n},$$

$$C_{2i}(z) = -\frac{1}{2b_i} \int_{z_i}^z f_i(t) \exp(b_i t) dt + a_{2i}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} y_i(z) &= a_{1i} \exp(b_i z) + a_{2i} \exp(-b_i z) + \\ &+ \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_i(t) \operatorname{sh}[b_i(z-t)] dt, \quad i = \overline{1, n}, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $a_{1i}$  и  $a_{2i}$  ( $i = \overline{1, n}$ ) – произвольные постоянные.

Подставив функцию (12) в граничные условия (8)–(10), получим систему рекурсивных уравнений для нахождения постоянных  $a_{1i}$  и  $a_{2i}$ ,  $i = \overline{1, n}$ . При вычислении производной от функции  $y_i(z)$ ,  $i = \overline{1, n}$ , используя формулу дифференцирования интеграла с переменным верхним пределом, получим:

$$\begin{aligned} y_i'(z) &= a_{1i} b_i \exp(b_i z) - a_{2i} b_i \exp(-b_i z) + \\ &+ \frac{1}{b_i} f_i(z) \operatorname{sh}(0) + \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_i(t) b_i \operatorname{ch}[b_i(z-t)] dt = \\ &= a_{1i} b_i \exp(b_i z) - a_{2i} b_i \exp(-b_i z) + \\ &+ \int_{z_i}^z f_i(t) \operatorname{ch}[b_i(z-t)] dt, \quad i = \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Подставив  $y_i(z)$  и  $y_i'(z)$ ,  $i = \overline{1, n}$ , последовательно в (8)–(10), получим:

1) из (8):

$$a_{11} + a_{21} = g_1,$$

2) из (9):

$$\begin{aligned} a_{1i} b_i \exp(b_i z) - a_{2i} b_i \exp(-b_i z) = \\ = a_i [a_{1i} \exp(b_i z_i) + a_{2i} \exp(-b_i z_i)], \end{aligned}$$

откуда

$$a_{1i}(b_i - a_i) \exp(b_i z) = a_{2i}(a_i + b_i) \exp(-b_i z) = [a_{1i} \exp(b_i z_i) + a_{2i} \exp(-b_i z_i)],$$

3) из (10):

$$a_{1i} \exp(b_i z) + a_{2i} \exp(-b_i z) = a_{1,i+1} \exp(b_{i+1} z_i) + a_{2,i+1} \exp(-b_{i+1} z_i) + \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_{i+1}(t) \operatorname{sh}[b_{i+1}(z_i - t)] dt.$$

Из этих соотношений следует единственность решения задачи (7)–(10).

Как и для так называемой модели независимых источников, аналогично неравенству (4) положим, что  $\forall z: z_i \leq z \leq z_{i+1}$  в  $i$ -м слое справедлива оценка

$$|f_i^{(2)}(z) - f_i^{(1)}(z)| \leq \delta. \tag{13}$$

Из (12) получим

$$y_i^{(2)}(z) = a_{1i} \exp(b_i z) + a_{2i} \exp(-b_i z) + \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_i^{(2)}(t) \operatorname{sh}[b_i(z - t)] dt,$$

$$y_i^{(1)}(z) = a_{1i} \exp(b_i z) + a_{2i} \exp(-b_i z) + \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z f_i^{(1)}(t) \operatorname{sh}[b_i(z - t)] dt.$$

Отсюда

$$y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z) = \frac{1}{b_i} \int_{z_i}^z [f_i^{(2)}(t) - f_i^{(1)}(t)] \operatorname{sh}[b_i(z - t)] dt.$$

С учетом оценки (13) получим

$$|y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z)| = \frac{1}{|b_i|} \int_{z_i}^z |f_i^{(2)}(t) - f_i^{(1)}(t)| \operatorname{sh}[b_i(z - t)] dt \leq \frac{1}{|b_i|} \int_{z_i}^z \delta \operatorname{sh}[b_i(z - t)] dt = \delta \{-1 + \operatorname{ch}[b_i(z - z_i)]\} \leq \delta \{\operatorname{ch}[b_i(z_{i+1} - z_i)] - 1\}.$$

Таким образом

$$|y_i^{(2)}(z) - y_i^{(1)}(z)| \leq C_i \delta, \tag{14}$$

где  $C_i = \operatorname{ch}[b_i(z_{i+1} - z_i)] - 1$ .

Следовательно, для рассматриваемой задачи тепломассопереноса в многослойной мишени имеет место существование и единственность решения дифференциального уравнения (7) с гра-

ничными условиями (8)–(10), т.е. рассматриваемая математическая модель корректна.

Возвращаясь к исходным обозначениям, получим, что если

$$|\rho_i^{(2)}(z) - \rho_i^{(1)}(z)| \leq \frac{1}{D^{(i)}(z)} \delta,$$

то для любого  $i (i = \overline{1, n})$  справедлива оценка

$$|\Delta p^{(i)(2)}(z) - \Delta p^{(i)(1)}(z)| \leq C_i \delta,$$

где  $C_i = \operatorname{ch}[(z_{i+1} - z_i) / \sqrt{\tau^{(i)}(z) D^{(i)}(z)}] - 1$ .

Поскольку при моделировании вид функции в правой части дифференциальных уравнений не конкретизировался, полученные результаты справедливы для любого внешнего источника: широкого пучка заряженных частиц или широко-го потока квантов электромагнитного излучения.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изложены результаты качественного анализа математических моделей, описывающих процессы тепломассопереноса, обусловленного взаимодействием широких пучков заряженных частиц или электромагнитного излучения с многослойными планарными структурами. Рассмотрение проведено на примере диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных широкими пучками заряженных частиц или электромагнитным излучением в многослойных планарных полубесконечных полупроводниковых мишенях и в полупроводниковых мишенях конечной толщины при произвольном, но конечном, числе слоев. Получены оценки влияния изменений в условиях проведения эксперимента на распределение неравновесных неосновных носителей заряда в объеме таких структур.

Исследования проведены при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-03-00271), а также РФФИ и правительства Калужской области (проект № 18-41-400001).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Филачев А.М., Таубкин И.И., Тришенков М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фотодиоды. М.: Физматкнига, 2011. 448 с.
2. Филачев А.М., Таубкин И.И., Тришенков М.А. Твердотельная фотоэлектроника. Фоторезисторы и фотоприемные устройства. М.: Физматкнига, 2012. 368 с.
3. Алоян Р.М., Федосов С.В., Мизонов В.Е. Теоретические основы математического моделирования механических и тепловых процессов в производстве строительных материалов. Иваново: Ивановский

- гос. архитектурно-строительный университет, 2011. 255 с.
4. *Кожухов М.В.* Разработка и исследование моделей радиационных воздействий для расчета характеристик кремниевых и кремний-германиевых биполярных транзисторов с помощью системы TCAD. Дис. ... канд. техн. наук. М.: ВШЭ, 2016. 149 с.
  5. *Близнюк У.А., Студеникин Ф.Р., Борщегоская П.Ю. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 10. С. 1418; *Bliznyuk U.A., Studenikin F.R., Borshchegovskaya P.Yu. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 10. P. 1097.
  6. *Van Roosbroeck W.* // J. Appl. Phys. 1955. V. 26. No. 1. P. 380.
  7. *Белов А.А., Петров В.И., Степович М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66. № 9. С. 1317; *Belov A.A., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2002. V. 66. No. 9. P. 1317.
  8. *Wittry D.B., Kyser D.F.* // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 375.
  9. *Конников С.Г., Сидоров А.Ф.* Электронно-зондовые методы исследования полупроводниковых материалов и приборов. М.: Энергия, 1978. 135 с.
  10. *Михеев Н.Н., Захаров Б.Г.* // Электрон. техн. Сер. матер. 1982. № 2(163). С. 55.
  11. *Михеев Н.Н., Степович М.А.* // Завод. лаб. и диагн. матер. 1996. Т. 62. № 4. С. 20; *Mikheev N.N., Stepovich M.A.* // Industrial Laboratory. 1996. V. 62. No. 4. P. 221.
  12. *Dmitruk N.L., Litovchenko V.G., Talat G.N.* // Surf. Sci. 1978. V. 72. No. 2. P. 321.
  13. *Степович М.А., Снопова М.Г., Хохлов А.Г.* // Прикл. физика. 2004. № 3. С. 61.
  14. *Stepovich M.A., Khokhlov A.G., Snopova M.G.* // Proc. SPIE. 2004. V. 5398. P. 159.
  15. *Снопова М.Г., Бурьлова И.В., Петров В.И., Степович М.А.* // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. иссл. 2007. № 7. С. 1; *Snopova M.G., Burylova I.V., Petrov V.I., Stepovich M.A.* // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Techn. 2007. V. 1. No. 4. P. 406.
  16. *Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A.* // ФТП. 2007. Т. 41. № 4. С. 458; *Burylova I.V., Petrov V.I., Snopova M.G., Stepovich M.A.* // Semiconductors. 2007. V. 41. No. 4. P. 444.
  17. *Туртин Д.В., Калманович В.В., Степович М.А.* // Итоги науки и техн. Совр. матем. прилож. Тем. обзоры. 2022. Т. 206. С. 133.
  18. *Петровский И.Г.* Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений М.: Изд-во МГУ, 1984. 296 с.
  19. *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, ГРФМЛ, 1967. 436 с.
  20. *Stepovich M.A., Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Filipov M.N.* // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1740. Art. No. 012035.

## Modeling and qualitative assessment of heat and mass transfer processes due to interaction of wide beams of charged particles or electromagnetic radiation with multilayer planar structures

M. A. Stepovich<sup>a, \*</sup>, D. V. Turtin<sup>b</sup>, V. V. Kalmanovich<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga, 248023 Russia

<sup>b</sup>Plekhanov Russian University of Economics, Ivanovo Branch, Ivanovo, 153025 Russia

\*e-mail: m.stepovich@rambler.ru

Some aspects of mathematical modeling and qualitative assessment of one-dimensional heat and mass transfer processes in multilayer planar structures are studied. The consideration is carried out on the example of diffusion of nonequilibrium minority charge carriers generated by wide beams of charged particles or electromagnetic radiation in multilayer planar semiconductor targets.

УДК 537.9:53.098:537.622:543.429.3:54-165.2

## ВЛИЯНИЕ МАГНИТОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ НА ГЕКСАГОНАЛЬНЫЕ СКАНДИЙЗАМЕЩЕННЫЕ ФЕРРИТЫ С МУЛЬТИФЕРРОИДНЫМИ СВОЙСТВАМИ

© 2022 г. М. Н. Шипко<sup>1</sup>\*, М. А. Степович<sup>2</sup>, В. В. Коровушкин<sup>3</sup>, В. Г. Костишин<sup>3</sup>,  
А. В. Труханов<sup>3</sup>, М. А. Дарвиш<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина”, Иваново, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Калужский государственный университет имени К.Э. Циолковского”, Калуга, Россия

<sup>3</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
“Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, Москва, Россия

<sup>4</sup>Университет Танты, Танта, Египет

\*E-mail: michael-1946@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Изучено влияние магнитоимпульсной обработки на электромагнитные свойства и кристаллическую структуру высокотемпературных мультиферроиков – скандийзамещенных гексаферритов бария. Показано, что импульсное магнитное поле обеспечивает повышение степени ковалентности химической связи между ионами  $Fe^{3+}$ , расположенными в пятикратной координации и в нецентрированных октаэдрах, что связывается с упорядочением ионов, катионных и анионных вакансий, а также дополнительным смещением ионов  $Sc^{3+}$  и  $Fe^{3+}$  из центра полиэдров.

DOI: 10.31857/S0367676522110242

### ВВЕДЕНИЕ

Актуальной задачей магнитоэлектроники является получение материалов (мультиферроиков), магнитными свойствами которых можно управлять с помощью электрического поля [1]. Такими возможностями обладают ферриты, в которых имеются ионы, способные занимать несколько положений равновесия в кислородных полиэдрах и, как следствие, изменять степень ковалентности химической связи между катионами и анионами в зависимости от характера смещения магнитоактивных ионов. Упомянутые особенности свойственны гексагональным ферритам, в монокристаллах которых может проявляться магнитоэлектрический эффект, и они являются мультиферроиками [1–4]. В поликристаллических гексагональных ферритах такие свойства можно наблюдать в образцах с высокой степенью текстуры, с упорядоченным расположением точечных дефектов кристаллической структуры, с фиксацией доменных стенок на границах кристаллитов [5]. Эти условия могут быть реализованы в замещенных гексаферритах бария или стронция, в которых ионы, замещающие ионы железа, имеют предпочтения к локализации в пятикратной би-

пирамиде или в октаэдрах, расположенных в гексагональном блоке вблизи ионов  $Ba^{2+}$  или  $Sr^{2+}$ . Упорядочение дефектов в них может осуществляться в результате различных физических воздействий: электромагнитных полей, термообработки, лазерного отжига и т.п. Некоторые возможности использования слабых импульсных магнитных полей изложены в работах, в которых описаны результаты воздействия магнитоимпульсной обработки (МИО) на ферриты [6, 7], аморфные сплавы [8–10], оксиды железа [11, 12].

В мультиферроиках в качестве ионов-заместителей могут выступать ионы  $Sc^{3+}$ ,  $Ti^{4+}$ , имеющие электронное строение благородного газа после отдачи s-d электронов анионам и имеющие высокую склонность к локализации в кислородных полиэдрах вблизи ионов  $Ba^{2+}$  или  $Sr^{2+}$ , которые обладают большой поляризуемостью за счет несимметричной конфигурации их электронного облака [13, 14]. В связи с этим значительный интерес представляет изучение возможностей проявления магнитоэлектрического эффекта, а также улучшения мультиферроидных свойств в скандийзамещенных гексагональных ферритах

**Таблица 1.** Магнитные свойства анизотропных ферритов  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$  до и после магнитоимпульсной обработки 30 импульсами

Значение $x$	Состояние феррита $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$	Удельная намагниченность насыщения $\sigma_s, \text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	Остаточная намагниченность $\sigma_r, \text{A} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$	Коэрцитивная сила $H_c, \text{kA} \cdot \text{m}^{-1}$
0.1	До обработки	56.93	15.58	71.6
	После обработки	57.23	16.28	84.9
0.6	До обработки	56.99	6.2	15.9
	После обработки	57.34	6.5	18.4
0.9	До обработки	55.44	3.07	2.4
	После обработки	55.78	3.22	2.77

$\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$  после их магнитной обработки при относительно низких параметрах замещения ( $x \leq 1.2$ ) [14].

В настоящей работе исследованы особенности влияния МИО на катионное распределение, магнитные и электрические свойства анизотропных поликристаллических скандийзамещенных гексаферритов  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$  с целью определения возможности изменения их мультиферроидных свойств.

#### ОБЪЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Объектами для исследования служили образцы анизотропных поликристаллических ферритов состава  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$ , где  $x$  принимало значения 0.1, 0.3, 0.6, 0.9, 1.0, 1.2. Синтез образцов осуществляли по известной керамической технологии из оксидов  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Sc}_2\text{O}_3$  и карбоната бария  $\text{BaCO}_3$  марки “ОСЧ”. Синтезирующий обжиг проводили на воздухе при  $1200^\circ\text{C}$  в течение 6 ч, спекание при  $1300^\circ\text{C}$  также в течение 6 ч. Охлаждение осуществляли в печи со скоростью около  $100^\circ\text{C} \cdot \text{ч}^{-1}$ . МИО проводилась импульсами магнитного поля прямоугольной формы частотой 10–20 Гц, напряженностью 10–100  $\text{kA} \cdot \text{m}^{-1}$  [15, 16]. Магнитные параметры: остаточную намагниченность  $\sigma_r$ , удельную намагниченность насыщения  $\sigma_s$ , коэрцитивную силу  $H_c$ , форму петли магнитного гистерезиса — измеряли при комнатной температуре на вибрационном магнитометре VSM-250 в магнитном поле напряженностью 20 кЭ. Электрические свойства: диэлектрическую проницаемость  $\epsilon'$  и удельное электрическое сопротивление  $\rho$  — измеряли также при комнатной температуре на частоте 1 кГц с помощью LCR-метра.

Мёссбауэровские исследования выполнены при комнатной температуре на спектрометре MS 1104-Em с обработкой спектров по программе

Univem MS. Изомерный сдвиг определяли относительно  $\alpha\text{-Fe}$ .

#### РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1 и 2 в качестве примера приведены магнитные и электрические свойства ферритов  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$  до и после МИО. Видно, что такая обработка ферритов с  $0.1 \leq x \leq 0.6$  способствует увеличению остаточной намагниченности и коэрцитивной силы. Эффективность обработки определяется содержанием ионов скандия в феррите. Наиболее чувствительным параметром к магнитоимпульсной обработке является коэрцитивная сила, которая увеличивается на 15–20%. Высокую чувствительность к такой обработке проявляют и электрические свойства ферритов, в частности, электрическое сопротивление увеличивается на 15–40%.

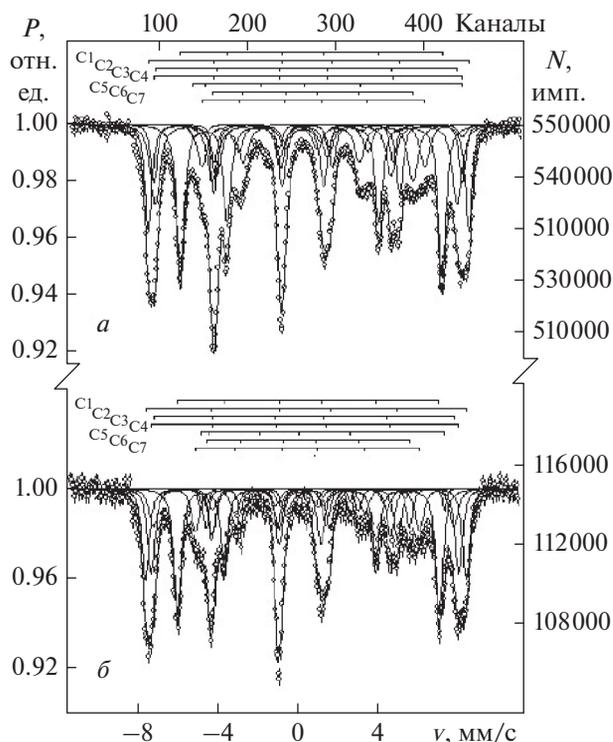
Для выяснения причин наблюдаемых изменений электромагнитных свойств ферритов были выполнены мёссбауэровские исследования, позволяющие оценить влияние магнитной обработки на катионное распределение, локальные искажения координационных полиэдров и степень ковалентности химической связи ионов  $\text{Fe}^{3+}$ . В качестве примера на рисунке приведены мёссбауэровские спектры феррита  $\text{BaFe}_{11.4}\text{Sc}_{0.6}\text{O}_{19}$ , а в табл. 3 — параметры его сверхтонкой структуры до и после МИО. Видно, что спектр представляет суперпозицию семи секстиплетов от ядер ионов  $\text{Fe}^{3+}$ , расположенных в позициях 12k, 4f<sub>2</sub>, 4f<sub>1</sub>, 2a, 2b. Помимо секстиплетов, свойственных основным позициям гексагональной структуры бариевого феррита, можно выделить два дополнительных секстиплета (12k' и 12k''), соответствующих ионам железа, расположенным в позициях 12k и имеющим в ближайшем окружении ионы  $\text{Sc}^{3+}$ , локализованными в позициях 2b и 4f<sub>2</sub>. При  $x = 0.1$  регистрируется дополнительный секстиплет 12k', ука-

**Таблица 2.** Электрические свойства анизотропных ферритов  $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$  до и после магнитоимпульсной обработки 30 импульсами

Значение $x$	Состояние феррита $\text{BaFe}_{12-x}\text{Sc}_x\text{O}_{19}$	Диэлектрическая проницаемость $\epsilon'$	Тангенс угла потерь $\text{tg}\delta$	Удельное электрическое сопротивление $\rho$ , Ом · м
0.1	До обработки	857.9	2.009	$2.088 \cdot 10^6$
	После обработки	878.9	1.351	$3.03 \cdot 10^6$
0.6	До обработки	210.18	1.501	$1.41 \cdot 10^7$
	После обработки	187.4	1.361	$1.4 \cdot 10^7$
1.2	До обработки	408.53	1.299	$6.78 \cdot 10^6$
	После обработки	384.0	1.208	$7.74 \cdot 10^6$

зывающий на преимущественную локализацию ионов  $\text{Sc}^{3+}$  в позициях 2b. После МИО не наблюдается заметных изменений в структуре спектров, однако при этом меняются такие параметры спектров, как вероятность эффекта Мёссбауэра, интегральные интенсивности компонент секстиплетов, величины квадрупольного и изомерного сдвигов от ядер ионов  $\text{Fe}^{3+}$ , расположенных в тригональной бипирамиде (позиция 2b) и в нецентрированных октаэдрах (позиции 12k' и 12k''). Изменения квадрупольного и изомерного сдвига указывают на увеличение степени искажения локального окружения ионов  $\text{Fe}^{3+}$  и увеличение ковалентного переноса электронной плотности на ионы  $\text{Fe}^{3+}$ . Такой эффект возможен либо в результате дополнительных смещений ионов железа относительно центров полиэдров, либо с изменением количества анионных вакансий в ближайшем окружении ионов  $\text{Fe}^{3+}$ . Учитывая тот факт, что в ферритах  $\text{BaFe}_{11.9}\text{Sc}_{0.1}\text{O}_{19}$  наиболее заметные изменения изомерного и квадрупольного сдвигов наблюдаются для подрешетки 2b, увеличение квадрупольного сдвига можно объяснить дополнительным смещением ионов  $\text{Fe}^{3+}$  из базисной плоскости бипирамиды, а также смещением анионов в октаэдрах, расположенных вблизи ионов  $\text{Sc}^{3+}$ . В результате таких смещений происходит изменение степени поляризации решетки и напряженности внутреннего электрического поля, вызванных смещением ионов и их электронных оболочек. Так как число смещенных ионов в одном направлении и, как следствие, анизотропия феррита зависят от характера упорядочения катионных и анионных вакансий, то можно констатировать, что при МИО происходит их дополнительное упорядочение. Это находится в соответствие с изменением удельного электрического сопротивления, коэрцитивной силы и диэлектрической проницаемости ферритов (табл. 1, 2). При этом изменение изомерного сдвига свидетельствует об изменении

электронной плотности на ядрах  $\text{Fe}^{57}$  и, как следствие, на изменении ковалентной составляющей химической связи магнитоактивных ионов, что коррелирует с ростом параметров, лимитируемых анизотропией кристаллической решетки и ее поляризуемостью. Это связано с тем, что существенную роль в формировании электромагнитных свойств гексагональных ферритов бария играют длина и углы связей между ионами  $\text{Fe}^{3+}$ , а также специфика электронной конфигурации ионов

**Рис. 1.** Мёссбауэровские спектры образца  $\text{BaFe}_{11.4}\text{Sc}_{0.6}\text{O}_{19}$  до (а) и после (б) магнитоимпульсной обработки.

**Таблица 3.** Параметры мёссбауэровских спектров ферритов  $\text{BaFe}_{11.4}\text{Sc}_{0.6}\text{O}_{19}$  до и после магнитоимпульсной обработки 30 импульсами

Состояние феррита	Положение ионов $\text{Fe}^{3+}$ , подрешетка	Изомерный сдвиг $\delta$ , $\text{мм} \cdot \text{с}^{-1}$	Квадрупольный сдвиг $\Delta$ , $\text{мм} \cdot \text{с}^{-1}$	Магнитное поле на ядрах $\text{Fe}^{57} H_{\text{д}}$ , кЭ	Площади компонент $S$ , % отн.	Величина резонансного эффекта, %
До обработки	12k	0.35	0.42	404	30.7	7.57
	$4f_2$	0.3	0.1	494	17.0	
	$4f_1$	0.26	0.11	460	10.1	
	2a	0.31	0.14	477	17.8	
	2b	0.34	2.45	395	1.5	
	12k'	0.36	0.49	313	14.7	
	12k''	0.37	0.41	350	8.2	
После обработки	12k	0.35	0.40	404	28.3	7.76
	$4f_2$	0.38	0.07	493	22.7	
	$4f_1$	0.23	0.11	453	8.7	
	2a	0.30	0.16	479	15.4	
	2b	0.09	2.81	390	2.2	
	12k'	0.34	0.51	313	13.8	
	12k''	0.33	0.40	351	8.9	

бария, находящихся между кислородными полиэдрами [17]. Увеличение квадрупольного сдвига для ионов  $\text{Fe}^{3+}$ , расположенных в позициях 2b и 12k после МИО можно связать с увеличением анизотропии их химических связей. Однако, учитывая, что ковалентные эффекты дают малый вклад в аномально высокие значения квадрупольного сдвига для подрешетки 2b, эти изменения в большей степени связаны с эффектами перекрывания электронных оболочек ионов, расположенных в 2b позиции, с электронными орбитами кислорода. Это обусловлено, с одной стороны, значительной вытянутостью бипирамиды вдоль оси  $c$ , с другой – спецификой положения катионов в таком полиэдре. Действительно, ионы  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Sc}^{3+}$ , расположенные в тригональной бипирамиде, имеют возможность занимать два неэквивалентных положения с близкими значениями энергии и находящимися на расстоянии  $0.312 \text{ \AA}$  от ее базисной плоскости [18, 19]. Этим положениям соответствует потенциальный барьер, который ионы способны преодолевать при температурах, превышающих  $80 \text{ K}$  и перескакивающих из одного положения в другое с частотой  $10^{-8} \text{ с}^{-1}$ . Наличие ионов  $\text{Sc}^{3+}$ , локализованных преимущественно вблизи ионов  $\text{Ba}^{2+}$  способствует смещению в среднем по времени положения равновесия для катионов. Упорядоченное смещение этих ионов в пределах нескольких элементарных ячеек феррита будет способствовать его поляризации и появлению внутреннего электрического поля на границе шпинельного и гексагонального блоков. Степень согласованности таких смещений определяется характером упорядочения дефектов. Увеличение

удельного сопротивления и коэрцитивной силы после МИО связано именно с таким упорядочением, а также изменениями ковалентной составляющей химической связи между ионами. Это обстоятельство указывает на возможность изменения магнитных свойств ферритов под воздействием внешнего электрического поля.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Магнитоимпульсная обработка существенно влияет на структурночувствительные электромагнитные параметры феррита, а также сверхтонкую структуру их мёссбауэровских спектров. Наличие ионов  $\text{Sc}^{3+}$ , локализованных преимущественно вблизи ионов  $\text{Ba}^{2+}$ , способствует смещению в среднем по времени положения равновесия для катионов. Упорядоченное смещение этих ионов в пределах нескольких элементарных ячеек феррита способствует его поляризации и появлению внутреннего электрического поля на границе шпинельного и гексагонального блоков. Это обстоятельство указывает на возможность изменения магнитных свойств ферритов под воздействием внешнего электрического поля, что обуславливает возможность изменения их мультиферроидных свойств.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Ивановской области (проект № 18-43-370012) и гранта РФФИ и правительства Калужской области (проект № 18-41-400001).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Костишин В.Г., Тимофеев А.В., Ковалев А.Н. // Журн. неорг. химии. 2016. Т. 61. № 2. С. 234; Kostishin V.G., Timofeev A.V., Kovalev A.N. // Russ. J. Inorganic Chem. 2016. V. 61. No. 2. P. 221.
2. Tokunaga Y., Kaneko Y., Okuyama D. et al. // Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105. No. 25. Art. No. 257201.
3. Розин Е.Г., Шипко М.Н., Желудев И.С. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 36. № 9. С. 316.
4. Коровушкин В.В., Шипко М.Н., Костишин В.Г. и др. // Неорг. матер. 2019. Т. 55. № 10. С. 1065.
5. Костишин В.Г., Панина Л.В., Кожитов Л.В. и др. // ЖТФ. 2015. Т. 85. № 8. С. 85; Kostishin V.G., Panina L.V., Kozhitov L.V. et al. // Tech. Phys. 2015. V. 60. No. 8. P. 1189.
6. Коровушкин В.В., Костишин В.Г., Степович М.А., Шипко М.Н. // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 12. С. 1643; Korovushkin V.V., Kostishyn V.G., Stepovich M.A., Shipko M.N. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2016. V. 80. No. 12. P. 1450.
7. Шипко М.Н., Коровушкин В.В., Костишин В.Г. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 2. С. 232; Shipko M.N., Korovushkin V.V., Kostishin V.G. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 2. P. 203.
8. Шипко М.Н., Тихонов А.И., Степович М.А. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 8. С. 1090; Shipko M.N., Tikhonov A.I., Stepovich M.A. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 8. P. 988.
9. Viryus A.A., Kaminskaya T.P., Shipko M.N. et al. // IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Engin. 2020. V. 848. Art. No. 012085.
10. Шипко М.Н., Степович М.А., Сибирев А.Л. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 11. С. 1528; Shipko M.N., Stepovich M.A., Sibirev A.L. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 11. P. 1191.
11. Степович М.А., Шипко М.Н., Коровушкин В.В., Костишин В.Г. // Изв. РАН. Сер. физ. 2017. Т. 81. № 8. С. 1152; Stepovich M.A., Shipko M.N., Korovushkin V.V., Kostishin V.G. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2017. V. 81. No. 8. P. 1037.
12. Вирюс А.А., Шипко М.Н., Степович М.А. и др. // Поверхн. Рентген., синхротрон., нейтрон. иссл. 2019. № 3. С. 55; Viryus A.A., Shipko M.N., Stepovich M.A. et al. // J. Surf. Invest. X-ray. Synchrotron Neutron Technique. 2019. V. 13. No. 2. P. 215.
13. Смоленский Г.А., Крайник Н.Н. // УФН. 1969. Т. 97. № 4. С. 657; Smolenskii G.A., Kraĭnik N.N. // Sov. Phys. Usp. 1969. V. 12. No. 2. P. 271.
14. Смоленский Г.А., Крайник Н.Н. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Наука, 1968. 429 с.
15. Староверов Б.А., Степович М.А., Шипко М.Н. // Промышл. АСУ и контроллеры. 2011. № 8. С. 1.
16. Шипко М.Н., Степович М.А., Староверов Б.А., Костюк В.Х. // Промышл. АСУ и контроллеры. 2012. № 1. С. 2.
17. Желудев И.С. Основы сегнетоэлектричества. М.: Атомиздат, 1973. 472 с.
18. Pullar R.C. // Progr. Mater. Sci. 2012. V. 57. No. 7. P. 1191.
19. Костишин В.Г., Андреев В.Г., Читанов Д.Н. и др. // Журн. неорг. химии. 2016. Т. 61. № 3. С. 294; Kostishin V.G., Chitanov D.N., Nalagin A.G. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2016. V. 61. No. 3. P. 279.

## Effect of magnetic pulse treatment on hexagonal scandium-substituted ferrites with multiferroic properties

M. N. Shipko<sup>a,\*</sup>, M. A. Stepovich<sup>b</sup>, V. V. Korovushkin<sup>c</sup>, V. G. Kostishin<sup>c</sup>,  
A. V. Trukhanov<sup>c</sup>, M. A. Darvish<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Lenin Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, 153003 Russia

<sup>b</sup>Tsiolkovsky Kaluga State University, Kaluga, 248023 Russia

<sup>c</sup>National University of Science and Technology "MISiS", Moscow, 119049 Russia

<sup>d</sup>Tanta University, Faculty of Science, Tanta, 31111 Egypt

\*e-mail: michael-1946@mail.ru

The effect of magnetic pulse treatment on the electromagnetic properties and crystal structure of high-temperature multiferroics, scandium-substituted barium hexaferrites, is studied. It was shown that a pulsed magnetic field enhances the covalence degree of the chemical bond between Fe<sup>3+</sup> ions located in fivefold coordination and in non-centered octahedra, which is associated with the ordering of ions, cationic and anion vacancies, and the additional displacement of Sc<sup>3+</sup> and Fe<sup>3+</sup> ions from center of polyhedra.

УДК 669.35.5

## ЭВОЛЮЦИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ, МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ПРОКАТКЕ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Cu–Zn С РАЗНЫМ РАЗМЕРОМ ЗЕРНА

© 2022 г. Л. И. Зайнуллина<sup>1</sup>, \*, И. В. Александров<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Уфимский государственный авиационный технический университет”, Уфа, Россия

\*E-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Исследована эволюция параметров кристаллографической текстуры, микроструктуры и механических свойств однофазных сплавов на основе меди с содержанием 10 и 30 вес. % Zn, подвергнутых плоской прокатке в крупнозернистом состоянии и предварительно сформированном ультрамелкозернистом состоянии. Показано, что уменьшение энергии дефекта упаковки и увеличение степени обжатия при плоской прокатке приводят к увеличению значений функций распределения ориентировок, соответствующих двойниковых ориентировкам, а в целом, к уменьшению размера зерна и областей когерентного рассеяния, росту плотности дислокаций и вероятности двойниковогоания. Указанные изменения положительно влияют на уровень прочностных свойств исследованных сплавов.

DOI: 10.31857/S0367676522110357

### ВВЕДЕНИЕ

Сплавы системы Cu–Zn относятся к латуням, обладают различной величиной энергии дефекта упаковки (ЭДУ) в зависимости от степени легирования медной матрицы атомами Zn [1]. ЭДУ представляет собой энергию, связанную с расщеплением полной дислокации и образованием частичных дислокаций, и играет решающую роль в эволюции кристаллографической текстуры (КТ), микроструктуры, и деформационного поведения металлов и сплавов [2]. Однофазные твердорастворные сплавы на основе меди представляют большой интерес в качестве модельных объектов исследований для понимания влияния содержания легирующих элементов и, следовательно, влияния величины ЭДУ на взаимосвязь “микроструктура–свойства” [3, 4]. При этом в медном сплаве при содержании 10 вес. % Zn величина ЭДУ становится равной  $35 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$ , а при 30 вес. % Zn –  $14 \text{ мДж} \cdot \text{м}^{-2}$  [5].

Применение методов интенсивной пластической деформации (ИПД) приводит к измельчению микроструктуры и повышению прочностных и функциональных свойств [6]. В ранних работах [7, 8] было изучено влияние ЭДУ на микроструктурные изменения в сплавах, подвергнутых ИПД. Такие методы ИПД, как равноканальное угловое прессование (РКУП) [9] и кру-

чение под высоким давлением (КВД) [10–12], были применены для исследования микроструктурных преобразований и свойств сплавов системы Cu–Zn в зависимости от величины ЭДУ. Было обнаружено, что уменьшение ЭДУ приводит к уменьшению размера кристаллитов, увеличению плотности дислокации и двойников. Кроме того, было изучено влияние традиционного метода обработки металлических материалов плоской прокаткой при комнатной или криогенных температурах на формирование УМЗ структуры в этих сплавах [13–15].

Как известно, прокатка материалов приводит к образованию различных текстурных ориентировок за счет того, что в микроструктуре присутствуют зерна, каждое из которых в силу определенной ориентации в заготовке откликается своими специфическими деформационными реакциями на внешнюю приложенную деформацию. На характер формирующейся КТ и механические свойства при плоской прокатке сплавов системы Cu–Zn заметно влияет содержание цинка [16]. В частности, увеличение содержания Zn в крупнозернистой (КЗ) меди при прокатке приводит к формированию другого типа текстуры. Это изменение характера КТ названо текстурным переходом от текстуры типа “медь” (Copper)  $\{112\}\langle 111 \rangle$  к текстуре типа “латунь” (Brass)  $\{110\}\langle 112 \rangle$  [16–18].

Для описания эволюции КТ при прокатке ГЦК материалов удобно рассматривать в качестве главных  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\theta$  и  $\tau$ -волокна, на которых расположены ориентировки Brass  $\{011\}\langle 211\rangle$ , Goss  $\{011\}\langle 100\rangle$ , Soper  $\{112\}\langle 111\rangle$ , Dillamore  $\{4411\}\langle 11118\rangle$  [15,19]. Однако при описании КТ в настоящей статье, опираясь на подход к описанию подобной текстуры прокатки, описанный в работе [20], рассмотрены ориентировки, расположенные в пространстве углов Эйлера при различных значениях  $\phi_1$ , но фиксированных углах  $\Phi = 45^\circ$  и  $\phi_2 = 0^\circ$  ( $\alpha$ -волоконно), а также при различных значениях угла  $\Phi$ , но фиксированных углах  $\phi_1 = 90^\circ$  и  $\phi_2 = 45^\circ$  ( $\tau$ -волоконно).

Эволюция КТ в сплавах системы Cu–Zn была исследована при многократной накапливаемой деформации плоской прокаткой, являющейся одним из методов ИПД [15]. Было показано, что при уменьшении ЭДУ происходит уменьшение интенсивности текстуры типа “медь” и преобладание текстуры типа “латунь” за счет деформационного двойникования.

Целью настоящей работы явилось исследование влияния ЭДУ на эволюцию КТ, особенности формирования микроструктуры и механические свойства сплавов системы Cu–Zn, подвергнутых плоской прокатке в КЗ состоянии и УМЗ состоянии, предварительно сформированном РКУП.

#### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Заготовки сплавов Cu–10 вес. % Zn, Cu–30 вес. % Zn подвергали двум проходам РКУП и дальнейшей плоской прокатке. РКУП заготовок с размерами 8 мм × 8 мм × 60 мм проводили при  $T = 150^\circ\text{C}$  для сплава Cu–10% Zn и  $T = 300^\circ\text{C}$  для сплава Cu–30% Zn. Выбор температур РКУП был обусловлен задачей получения целостных заготовок без сколов и трещин. Внешний угол пересечения каналов в оснастке составил  $\psi = 0^\circ$ , внутренний –  $\phi = 90^\circ$  [21]. Последующую плоскую прокатку заготовок проводили при температурах, равных температурам РКУП для каждого материала. Степени обжатия составили 30, 60, 80, 95% с постепенным (не более 10%) накоплением деформации за каждый проход. Исходные КЗ заготовки (КЗ состояние) исследованных сплавов подвергли плоской прокатке при аналогичных условиях.

Исследования тонкой структуры были выполнены методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) при помощи прибора JEOL JEM-2100. Тонкие фольги в ходе ПЭМ исследований исследовали в темных и светлых полях при ускоряющем напряжении 200 кВ.

Рентгеновскую съемку проводили с продольного горизонтального сечения заготовок после РКУП и с плоскости прокатанных образцов при

ускоряющем напряжении 40 кВ, токе 40 мА при комнатной температуре с использованием рентгеновского дифрактометра Rigaku Ultima IV. Съемку проводили в пределах углов дифракции  $2\theta$  от  $10^\circ$  до  $145^\circ$  с шагом  $0.02^\circ$  и временем экспозиции на точку – 10 с. Оценку параметра кристаллической решетки, размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) исследуемых сплавов проводили, анализируя профиль рентгеновских линий при помощи программного обеспечения Maud 2.93 [22]. Склонность материалов к двойникованию (вероятность двойникования) оценивали, используя подход Уоррена также с использованием программного обеспечения Maud 2.93 [23]. Подгонку формы профиля рентгеновских линий к экспериментальным данным проводили методом Ритвельда. При определении ОКР использовали опцию “Произвольная текстура” (“Arbitrary texture”). При расчетах показатель несоответствия и взвешенный фактор профиля ( $R_{wp}$  и Sigma) в среднем составили 5.7% и 1.65.

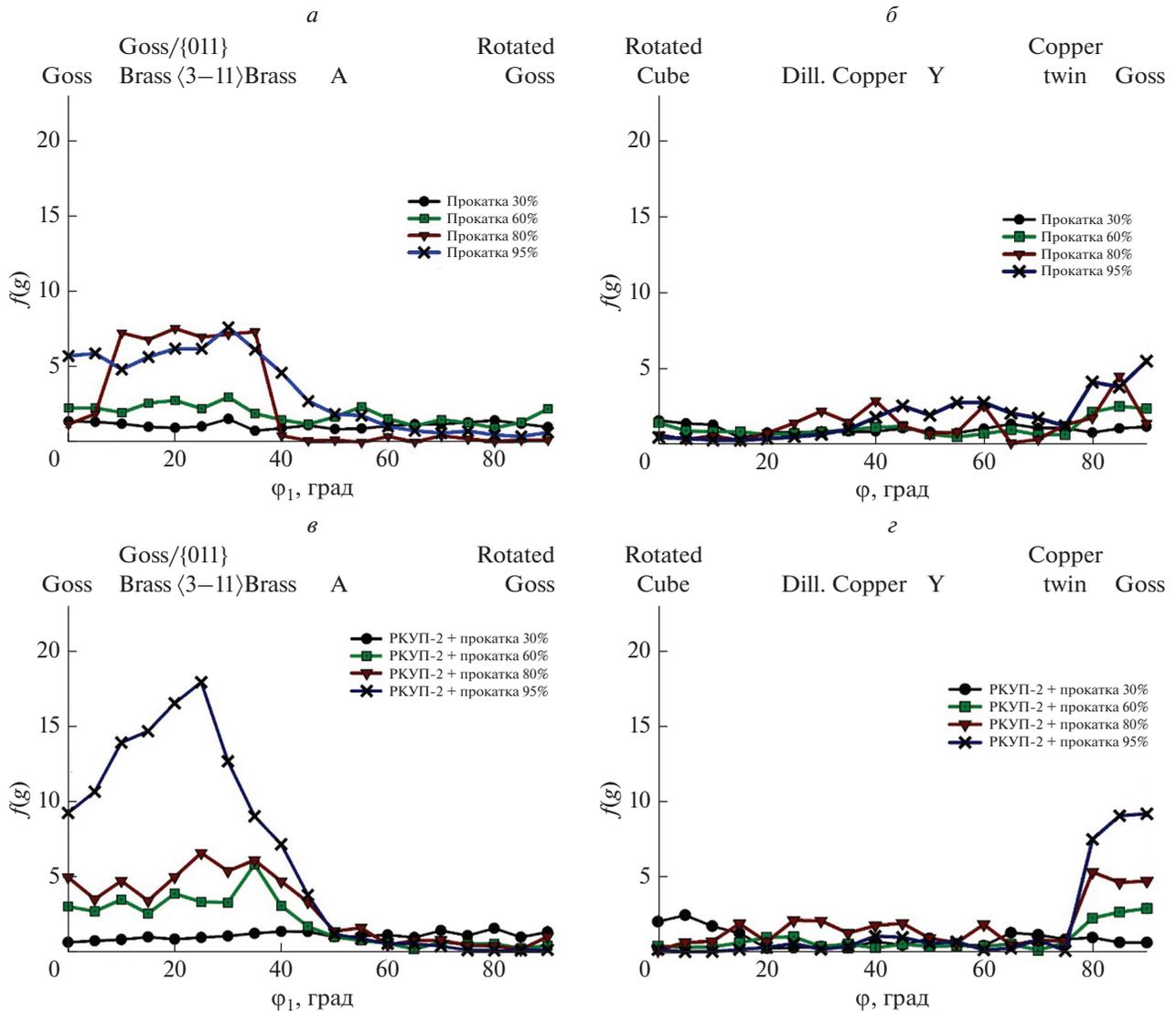
Плотность дислокаций определяли по формуле [24]:

$$\rho = 2\sqrt{3}\langle \epsilon^2 \rangle^{1/2} / (Db), \quad (1)$$

где  $\langle \epsilon^2 \rangle^{1/2}$  – среднеквадратичные микроискажения кристаллической решетки,  $D$  – размеры ОКР,  $b$  – вектор Бюргерса.

Анализ процессов текстурообразования выполняли с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-3. Неполные полюсные фигуры (ПФ) для плоскостей (111), (200) и (220) получали при использовании фильтрованного на вторичном пучке рентгеновского  $\text{CuK}_{\alpha 1}$  (0.1540598 нм) излучения. Съемку ( $U = 40$  кВ,  $I = 40$  мА) проводили в режиме “на отражение” в пределах изменения радиального угла  $\gamma$  от  $0^\circ$  до  $75^\circ$  (с учетом эффектов дефокусировки) и азимутального угла  $\delta$  от  $0^\circ$  до  $360^\circ$  с шагом  $5^\circ$  с плоскости прокатанных образцов. Расчет полных ПФ и значений плотности ориентаций  $f(g)$  трехмерных функций распределения ориентировок (ФРО) в пространстве углов Эйлера  $\phi_1$ ,  $\Phi$  и  $\phi_2$  проводили с помощью стандартного пакета программ LaboTex 2.1 [25]. В основу расчетов положен широко известный дискретный метод, называемый методом произвольных ячеек (ADC метод).

Микротвердость по Виккерсу оценивали на микротвердометре MicroMet 5101. К изготовленным образцам прилагали нагрузку 100 г в течение 10 с. Механические испытания на растяжение проводили на установке Instron 8801 при комнатной температуре со скоростью растяжения 0.24 мм/мин. При этом использовали стандартные образцы с размерами рабочей части 4 мм.



**Рис. 1.** Значения плотности ориентаций  $f(g)$  основных ориентировок в  $\alpha$  и  $\tau$ -волокнах с постоянными углами Эйлера  $\Phi = 45^\circ$  и  $\varphi_2 = 0^\circ$  ( $\alpha$ -волокно: *a*, *в*),  $\phi_1 = 90^\circ$  и  $\varphi_2 = 45^\circ$  ( $\tau$ -волокно: *б*, *г*) сплава Cu–10% Zn, подвергнутого прокатке в КЗ (*a*, *б*) и УМЗ состоянии (*в*, *г*).

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1 приведены основные для ГЦК металлов, подвергнутых плоской прокатке, кристаллографические ориентировки, расположенные вдоль  $\alpha$ - и  $\tau$ -волокон, с индексами Миллера и углами Эйлера для ГЦК металлов, подвергнутых плоской прокатке [19]. На рис. 1 представлены распределения значений плотности ориентировок вдоль  $\alpha$ - и  $\tau$ -волокон для сплава Cu–10% Zn, подвергнутого плоской прокатке в КЗ и УМЗ состояниях. КЗ состояние сплава характеризуется однородным распределением равноосных зерен со средним размером  $117 \pm 3$  мкм. УМЗ состояние характеризуется средним размером зерен  $795 \pm 66$  нм.

При плоской прокатке сплава в КЗ состоянии в диапазоне степеней обжатия 30–60% не происходит значительных изменений в величине ФРО, соответствующих кристаллографическим ориентировкам вдоль  $\alpha$ - и  $\tau$ -волокон (рис. 1*a* и 1*б*). Когда степень обжатия достигает 80% происходит увеличение доли ориентировок Goss/Brass,  $\{011\}\langle 3\bar{1}1 \rangle$  и Brass. При увеличении степени обжатия до 95% в  $\alpha$ -волокне максимальное значение интенсивности на графике находится близко к идеальному положению пика ориентировки  $\{011\}\langle 3\bar{1}1 \rangle$  ( $\phi_1 = 25^\circ$ ,  $\Phi = 45^\circ$ ,  $\varphi_2 = 0^\circ$ ) (рис. 1*a*), в  $\tau$ -волокне максимальное значение интенсивности на графике соответствует ориентировке Goss ( $\phi_1 = 90^\circ$ ,  $\Phi = 90^\circ$ ,  $\varphi_2 = 45^\circ$ ) (рис. 1*б*).

**Таблица 1.** Индексы Миллера и углы Эйлера для основных текстурных ориентировок ГЦК материалов [14]

Ориентировки	Индексы Миллера	$\varphi_1$	$\Phi$	$\varphi_2$	Волокно
Rotated cube	{001}<110>	0/90	0	45	$\tau$
Goss	{011}<100>	0	45	0	$\alpha/\tau$
		90	90	45	
Rotated Goss	{011}<011>	90	45	0	$\alpha$
Brass	{011}<211>	35	45	0	$\alpha/\beta$
Goss/brass	{011}<115>	16	45	0	$\alpha$
A	{011}<111>	55	45	0	$\alpha$
Y	{111}<112>	90	55	45	$\gamma/\tau$
Copper	{112}<111>	90	35	45	$\tau/\beta$
Copper twin	{552}<115>	90	74	45	$\tau$
Dillamore	{4411}<11118>	90	27	45	$\tau$
–	{011}<3 $\bar{1}$ 1>	25	45	0	$\alpha$

При плоской прокатке сплава в УМЗ состояний изменения в величинах ФРО, соответствующих основным ориентировкам, наблюдаются при достижении степени обжатия 60% (рис. 1*а* и 1*з*).

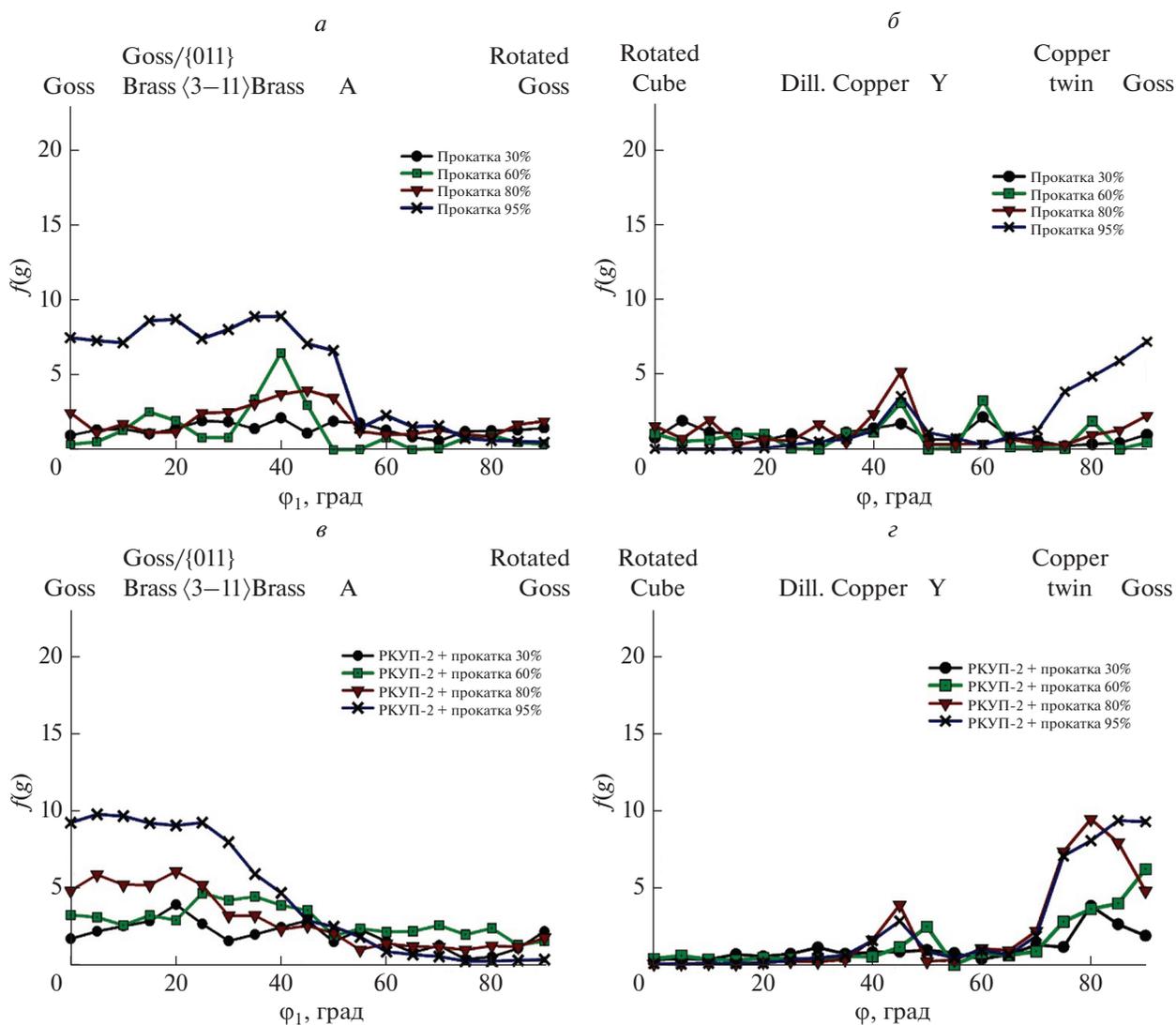
Максимальное значение интенсивности ФРО на графике для  $\alpha$ -волокна при степени обжатия 60% приходится на идеальное положение пика ориентации Brass ( $\varphi_1 = 35^\circ$ ,  $\Phi = 45^\circ$ ,  $\varphi_2 = 0^\circ$ ) (рис. 1*а*). При увеличении степени обжатия до 80% в  $\alpha$ -волокне наблюдается усиление доли ориентировок {011}<3 $\bar{1}$ 1> и Brass (рис. 1*а*). В  $\tau$ -волокне увеличивается доля ориентировок Goss и Copper twin [15, 20] вблизи ( $\varphi_1 = 90^\circ$ ,  $\Phi = 74^\circ$ ,  $\varphi_2 = 45^\circ$ ) (рис. 1*з*). При достижении степени обжатия 95% в  $\alpha$ -волокне максимальное значение интенсивности на графике приходится на {011}<3 $\bar{1}$ 1> ориентировку. Величина интенсивности ФРО, соответствующей ориентировке Brass также выше, чем при прокатке данного сплава в КЗ состоянии. Также увеличивается доля ориентировок Copper twin и Goss (рис. 1*з*) в  $\tau$ -волокне по сравнению с прокатанным сплавом в КЗ состоянии.

Как показано на рис. 2, основные ориентировки КТ в сплаве Cu–30% Zn соответствуют таковым в сплаве Cu–10% Zn. КЗ состояние сплава Cu–30% Zn до плоской прокатки характеризуется средним размером зерна  $93 \pm 3$  мкм. После РКУП в микроструктуре достигнуто значение среднего размера зерна  $288 \pm 55$  нм. При плоской прокатке сплава в КЗ состоянии до степени обжатия 60% происходит усиление интенсивности ФРО, соответствующей Brass ориентировке в  $\alpha$ -волокне (рис. 2*а*). При этом в  $\tau$ -волокне максимальное значение интенсивности на графике находится вблизи ориентировки Copper ( $\varphi_1 = 90^\circ$ ,  $\Phi = 35^\circ$ ,  $\varphi_2 = 45^\circ$ ) (рис. 2*б*). Увеличение степени обжатия

до 80% уменьшает интенсивность ФРО, соответствующей ориентировке Brass в  $\alpha$ -волокне, и увеличивает интенсивность ФРО, соответствующей ориентировке Copper в  $\tau$ -волокне (рис. 2*а* и 2*б*). При увеличении степени обжатия вплоть до 95% интенсивность ФРО, соответствующей Brass ориентировке имеет тенденцию к увеличению. Наряду с этим наблюдается рост интенсивностей ФРО, соответствующих ориентировкам Goss, Goss/Brass и {011}<3 $\bar{1}$ 1> (рис. 2*а*). Кроме того, отметим, что интенсивность ФРО, соответствующей ориентировке Copper, сначала увеличивается, а затем уменьшается по мере увеличения степени обжатия до 95% (рис. 2*б*).

При плоской прокатке сплава в УМЗ состоянии в  $\alpha$ -волокне по мере увеличения степени обжатия от 30 до 95% наблюдается постепенное увеличение интенсивностей ФРО, соответствующих ориентировкам Goss, Goss/Brass и {011}<3 $\bar{1}$ 1>, но при этом уменьшается интенсивность ФРО, соответствующей Brass ориентировке, по сравнению с состоянием сплава после прокатки в КЗ состоянии (рис. 2*в*). При увеличении степени обжатия происходит усиление интенсивностей ФРО в  $\tau$ -волокне от Copper ориентировки (при степенях обжатия 80 и 95%) через Y ориентировку ( $\varphi_1 = 90^\circ$ ,  $\Phi = 55^\circ$ ,  $\varphi_2 = 45^\circ$ ) (при степени обжатия 60%) в направлении Copper twin и Goss ориентировок (при степени обжатия 95%) (рис. 2*з*). Следует отметить, что интенсивности ФРО, соответствующие рассмотренным выше ориентировкам в сплаве Cu–30% Zn, имеют низкую величину ЭДУ, меньше по сравнению с таковыми в сплаве Cu–10% Zn.

На рис. 3 представлены рентгенограммы сплавов в исходном состоянии, подвергнутых плоской прокатке, РКУП и последующей плоской



**Рис. 2.** Значения плотности ориентации  $f(g)$  основных ориентировок в  $\alpha$  и  $\tau$ -волокнах с постоянными углами Эйлера  $\Phi = 45^\circ$  и  $\Phi_2 = 0^\circ$  ( $\alpha$ -волокно: *a, в*),  $\Phi_1 = 90^\circ$  и  $\Phi_2 = 45^\circ$  ( $\tau$ -волокно  $\alpha$ : *б, г*) сплава Cu–30% Zn, подвергнутого прокатке в КЗ (*a, б*) и УМЗ состоянии (*в, г*).

прокатки на начальную 30% и крайнюю 95% степени обжатия. При прокатке обоих сплавов в КЗ и УМЗ состояниях на рентгенограммах присутствуют основные пики, характерные для рентгенограмм чистой меди (рис. 3*a–3г*). Параметр кристаллической решетки больше по сравнению с параметром кристаллической решетки чистой меди за счет легирования медной матрицы атомами Zn. Для сплава Cu–10% Zn параметр решетки составляет  $3.638 \pm 0.005 \text{ \AA}$ , для сплава Cu–30% Zn –  $3.679 \pm 0.008 \text{ \AA}$ .

В табл. 2 представлены результаты оценки ОКР, плотности дислокаций и вероятности обнаружения двойников сплавов в различных структурных состояниях. Изменения параметров после

плоской прокатки образцов в КЗ и УМЗ состояниях имеют одинаковую тенденцию.

Как видно, по мере уменьшения величины ЭДУ и увеличения степени обжатия при прокатке сплава в УМЗ состоянии происходит уменьшение размеров ОКР до  $66 \pm 1 \text{ нм}$ . Вероятность деформационного двойникования у сплавов системы Cu–Zn закономерно нарастает за счет РКУП, плоской прокатки и совместной деформации (табл. 2). Для сплава Cu–30% Zn, имеющего малую величину ЭДУ, это значение составляет 1.3% (табл. 2). По мере уменьшения величины ЭДУ и увеличении степени обжатия при прокатке сплава в КЗ состоянии в микроструктуре происходит увеличение плотности дислокаций (табл. 2). Однако, при прокатке сплавов системы

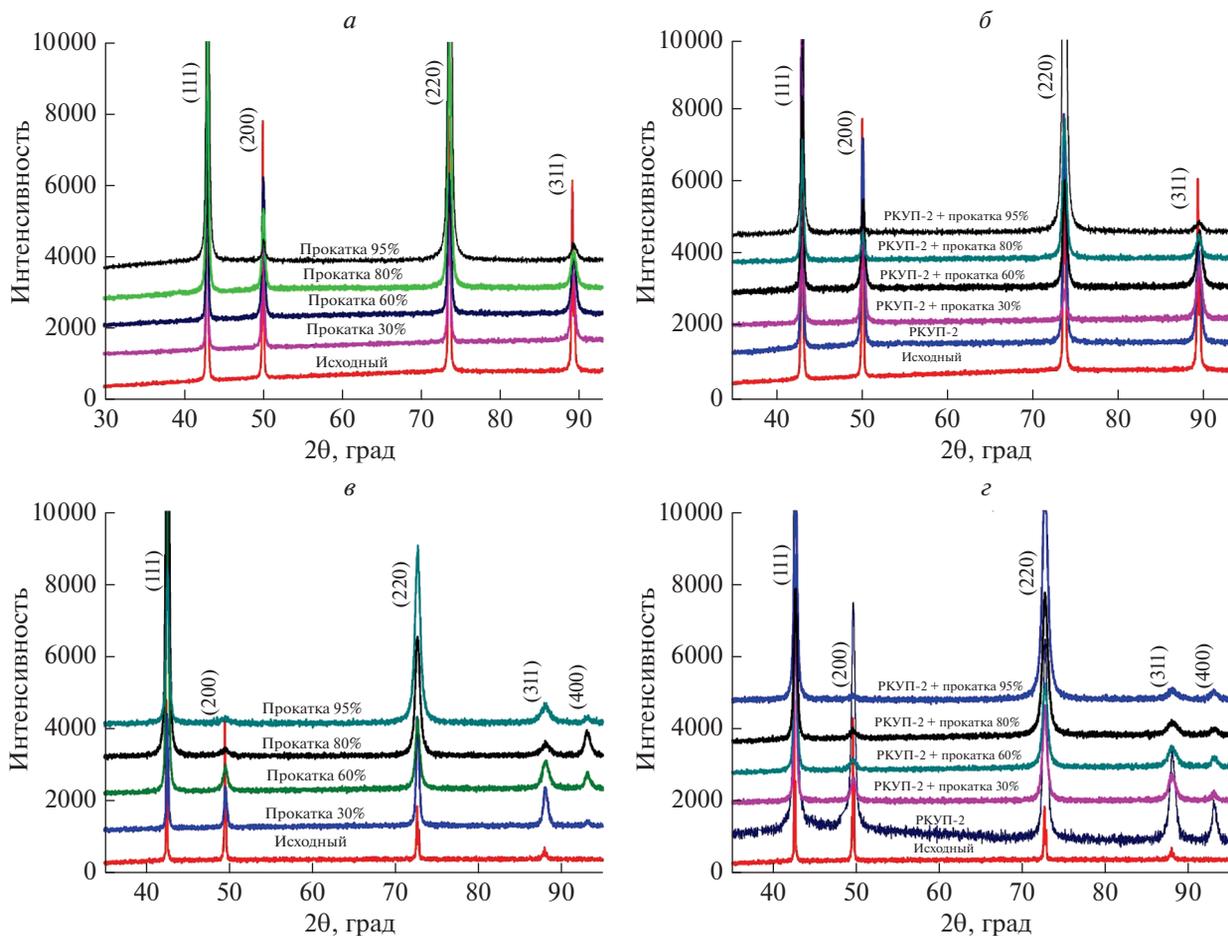


Рис. 3. Общий вид рентгенограмм после прокатки (а, в), РКУП и последующей плоской прокатки (б, г) на различные степени обжата. Сплав Cu–10% Zn (а, б), сплав Cu–30% Zn (в, г).

Cu–Zn в УМЗ состоянии наблюдается снижение значений плотности дислокаций (табл. 2). Как известно, в материалах с высокой величиной ЭДУ сложные дислокационные преобразования,

включая размножение, накопление, пространственную перестройку, управляют образованием наноструктурного состояния во время ИПД [26]. В материалах с низкой ЭДУ подвижность дисло-

Таблица 2. Величины структурных параметров сплавов системы Cu–Zn

		Cu–10% Zn			Cu–30% Zn		
		ОКР, нм	$\rho, 10^{14} \text{ м}^{-2}$	$\beta, \%$	ОКР, нм	$\rho, 10^{14} \text{ м}^{-2}$	$\beta, \%$
КЗ	Прокатка 30%	711 ± 97	0.18	0.31	167 ± 16	1.03	0.27
	Прокатка 60%	192 ± 12	0.98	0.32	153 ± 17	1.85	0.61
	Прокатка 80%	149 ± 3	1.28	0.52	104 ± 3	2.47	0.97
	Прокатка 95%	81 ± 2	1.89	0.40	58 ± 3	4.74	0.99
УМЗ		497 ± 1	0.31	0.34	135 ± 6	1.31	0.78
УМЗ	Прокатка 30%	294 ± 32	0.70	0.41	260 ± 19	1.07	0.95
	Прокатка 60%	149 ± 11	1.60	0.47	122 ± 4	2.56	0.99
	Прокатка 80%	90 ± 4	2.04	0.53	48 ± 1	5.63	0.93
	Прокатка 95%	100 ± 6	1.34	0.79	66 ± 1	3.98	1.30

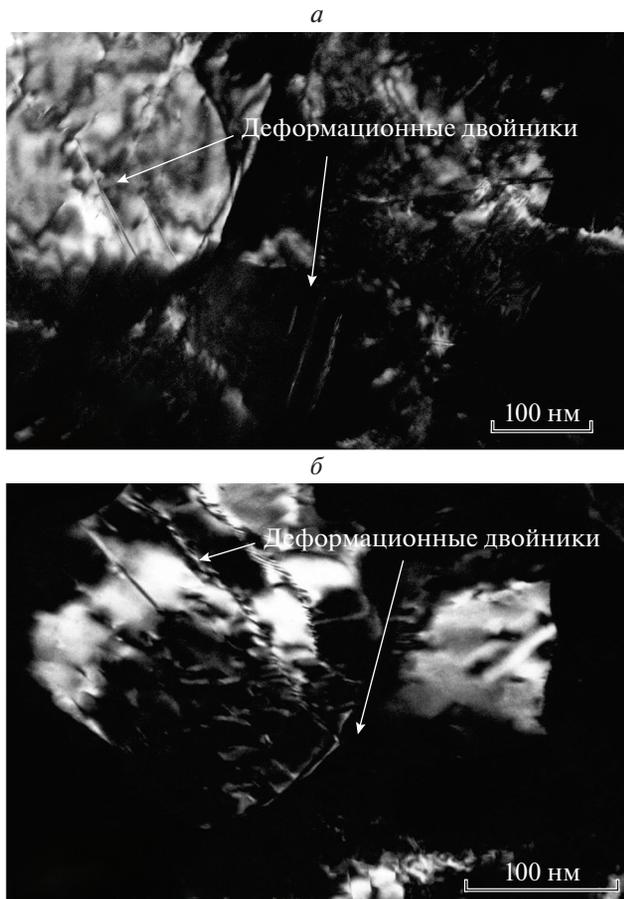


Рис. 4. Тонкая структура после прокатки УМЗ состояния со степенью обжатия 95%: сплав Cu–10% Zn (а), сплав Cu–30% Zn (б).

каций снижается и образованные дефекты упаковки являются зародышами двойников деформации. Деформация легко активизирует превращение дефектов упаковки в двойники деформации [27]. Таким образом, прокатка образцов в УМЗ со-

стоянии, сформированном в результате РКУП, приводит к более активному образованию деформационных двойников по сравнению с прокаткой образцов в КЗ состоянии, что должно способствовать повышению прочностных свойств.

Наличие в структуре деформационных двойников и их влияние определенным образом на формирование ориентировок КТ подтверждается исследованиями методом ПЭМ тонкой структуры сплавов (рис. 4). В качестве примера на рис. 4а и 4б приведены темнопольные изображения тонкой структуры после плоской прокатки сплавов в УМЗ состояниях на максимальную степень обжатия 95%.

Изменения в КТ и микроструктуре сплавов в результате плоской прокатки приводят к изменениям прочностных свойств. Результаты измерения микротвердости и механических испытаний методом одноосного растяжения образцов в КЗ и УМЗ состояниях после плоской прокатки на степень обжатия 80 и 95% сплавов Cu–Zn приведены в табл. 3. В сплаве Cu–10% Zn в КЗ состоянии после прокатки со степенью обжатия 95% предел прочности составил  $515 \pm 65$  МПа, что в 2.1 раза больше предела прочности в исходном состоянии. Значение относительного удлинения оказалось невысоким и составило 7% (табл. 3). После плоской прокатки сплава Cu–30% Zn в КЗ состоянии предел прочности достиг  $670 \pm 73$  МПа, что также в 2.1 раза больше прочности исходного состояния и относительное удлинение составило 11%.

Плоская прокатка сплава Cu–10% Zn в УМЗ состоянии повышает предел прочности до  $749 \pm 25$  МПа. Относительное удлинение достигает 6% (табл. 3). В УМЗ сплаве Cu–30% Zn с малой величиной ЭДУ при прокатке происходит увеличение предела прочности до  $812 \pm 32$  МПа, что является максимальным из полученных значений. При этом относительное удлинение составляет 5% (табл. 3).

Таблица 3. Прочностные характеристики сплавов системы Cu–Zn

		Cu–10% Zn			Cu–30% Zn		
		<i>HV</i>	$\sigma_b$ , МПа	$\epsilon$ , %	<i>HV</i>	$\sigma_b$ , МПа	$\epsilon$ , %
Исходное		$65 \pm 5$	$240 \pm 33$	45	$72 \pm 4$	$320 \pm 11$	40
КЗ	Прокатка 80%	$177 \pm 10$	$412 \pm 45$	15	$196 \pm 6$	$593 \pm 65$	22
	Прокатка 95%	$198 \pm 5$	$515 \pm 65$	7	$216 \pm 9$	$670 \pm 73$	11
УМЗ		$145 \pm 9$	$413 \pm 78$	18	$222 \pm 7$	$590 \pm 20$	10
УМЗ	Прокатка 80%	$200 \pm 8$	$653 \pm 22$	16	$241 \pm 3$	$683 \pm 27$	4
	Прокатка 95%	$213 \pm 13$	$749 \pm 25$	6	$250 \pm 6$	$812 \pm 32$	5

Из приведенных выше результатов видно, что тенденция эволюции КТ, микроструктуры и механических свойств при плоской прокатке сплавов Cu–10% Zn и Cu–30% Zn практически одинакова. Скорее всего, это вызвано влиянием температуры деформации. Температура деформации сплава Cu–10% Zn с большей величиной ЭДУ была ниже, чем в случае сплава с 30% Zn с меньшей величиной ЭДУ, деформированном при более низкой температуре. Повышение температуры деформации затрудняет образование деформационных двойников и способствует активизации дислокационного скольжения. Таким образом, как температура деформации, так и ЭДУ являются значимыми факторами, влияющими на развитие формирования микроструктуры во время ИПД [26].

Ориентировки КТ Brass, Goss и Corper являются основными ориентировками при всех степенях обжатия при прокатке образцов в КЗ состояниях исследованных сплавов. Это характерно и для УМЗ состояния сплавов, однако наблюдаются отличия в значениях ФРО, соответствующих ориентировок КТ. В сплаве Cu–10% Zn значения ФРО ориентировки  $\{011\}\langle 3\bar{1}1 \rangle$  преобладает наряду с таковыми для ориентировок Goss, Goss/Brass и Brass. В  $\tau$ -волокне значения ФРО для ориентировки Goss монотонно увеличивается при увеличении степени обжатия. В сплаве Cu–30% Zn повышенным значениям ФРО соответствуют Goss, Goss/Brass и  $\{011\}\langle 3\bar{1}1 \rangle$  ориентировкам. В  $\tau$ -волокне во время деформации зерна, соответствующие ориентировке Corper, поворачиваются вокруг оси  $\langle 110 \rangle$ , проходя через двойниковую ориентировку  $\gamma$  в сторону ориентировки Goss. При этом анализ литературных источников указывает на то, что ориентация зерен в полосах сдвига соответствует Goss ориентировке [28]. Образование полос сдвига является результатом того, что нормальное скольжение дислокаций затруднено двойниками. При дальнейшем увеличении деформации полосы сдвига распространяются вдоль двойниковой пластинчатой структуры. В результате этого ориентировка Corper, соответствующая определенным зернам, исчезает вовсе [20]. Также за счет деформационного двойникования в зернах происходит увеличение доли ориентировки Corper twin. Corper twin ориентировка способствуют как дислокационному скольжению, так и деформационному двойникованию. Следовательно, данная ориентировка является нестабильной и со временем может перейти в другую ориентировку во время пластической деформации [20]. Таким образом, при больших степенях деформации для ГЦК-металлов с малой величиной ЭДУ деформационные двойники и полосы сдвига являются доминирующей причиной значительного увеличения интенсивности ориентировок типа “латунь”.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования влияния ЭДУ на эволюцию КТ, особенности формирования микроструктуры и механические свойства сплавов системы Cu–Zn при их плоской прокатке в КЗ состоянии и УМЗ состоянии, предварительно сформированном РКУП, установлено, что уменьшение величины ЭДУ и увеличение степени накопленной деформации приводят к: увеличению значений ФРО, соответствующих ориентировкам, формирование которых вызвано процессами двойниковая и полосами сдвига; росту вероятности обнаружения двойников (по данным ПЭМ); росту вероятности деформационного двойникования (по данным РСА); повышению прочностных свойств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-33-90109) и Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0838-2020-0006 “Фундаментальные исследование новых принципов создания перспективных электромеханических преобразователей энергии с характеристиками выше мирового уровня, с повышенной эффективностью и минимальными удельными показателями, с использованием новых высокоэффективных электротехнических материалов”).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Carter C.B., Ray I.L.F. // *Phil. Mag.* 1977. V. 35. No. 1. P. 189.
2. Hirsch P. // *Phil. Mag.* 1962. V. 7. P. 1349.
3. Qu S., An X.H., Yang H.J. et al. // *Acta Mater.* 2009. V. 57. No. 5. P. 1586.
4. Zhang P., An X.H., Zhang Z.J. et al. // *Scr. Mater.* 2012. V. 67. P. 871.
5. Gallagher P.C.J. // *Metall. Trans.* 1970. V. 1. No. 9. P. 2429.
6. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. // *Progr. Mater. Sci.* 2000. V. 45. P. 103.
7. Wang Z., Wang Y., Liao X. et al. // *Scr. Mater.* 2009. V. 60. No. 1. P. 52.
8. Zhao Y., Horita Z., Langdon T. et al. // *Mater. Sci. Engin. A.* 2008. V. 474. No. 1–2. P. 342.
9. Zhang Z., Duan Q., An X. et al. // *Mater. Sci. Engin. A.* 2011. V. 528. No. 12. P. 4259.
10. An X., Lin Q., Wu S. et al. // *Scr. Mater.* 2011. V. 64. No. 3. P. 249.
11. Ungar T., Balogh L., Zhu Y. et al. // *Mater. Sci. Engin. A.* 2007. V. 444. No. 1–2. P. 153.
12. Bahmanpour H., Youssef K., Horky J. et al. // *Acta Mater.* 2012. V. 60. No. 8. P. 3340.
13. Roy B., Kumar N., Gopalakrishnan Nambissan P. et al. // *Aip Adv.* 2014. V. 4. No. 6. Art. No. 067101.
14. Konkova T., Mironova S., Korznikov A. et al. // *Mater. Charact.* 2015. V. 101. P. 173.

15. *Jamaati R., Toroghinejad M.* // Mater. Sci. Engin. A. 2014. V. 598. P. 263.
16. *Kallend J.S., Davies G.J.* // Texture. 1972. V. 1. P. 51.
17. *Gu C.F., Toth L.S., Zhang Y., Hoffman M.* // Scr. Mater. 2014. V. 92. P. 51.
18. *Lapeire L., Sidor J., Verleysen P. et al.* // Acta Mat. 2015. V. 95. P. 224.
19. *Suwas S., Ray R.* Crystallographic texture of materials. London: Springer-Verlag, 2014.
20. *Yan H., Zhao X., Jia N. et al.* // J. Mater. Sci. Technol. 2014. V. 30. No. 4. P. 408.
21. *Валиев П.З., Александров И.В.* Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. М.: ИКЦ “Академкнига”, 2007. 398 с.
22. *Lutterotti L., Matthies S., Wenk H.R.* // Proc. 12th Inter. Conf. Textur. Mater. 1999. V. 1. P. 1599.
23. *Warren B.E.* // Prog. Metal. Phys. 1959. V. 8. P. 147.
24. *Williamson G.K., Smallman R.E.* // Phil. Mag. 1956. V. 1. P. 34.
25. <https://labosoft.com>.
26. *An X.H., Wu S.D., Wang Z.G., Zhang Z.F.* // Progr. Mater. Sci. 2019. V. 101. P. 1.
27. *Christian J.W., Mahajan S.* // Progr. Mater. Sci. 1995. V. 39. P. 1.
28. *El-Danaf E., Kalidindi S.R., Doherty R.D. et al.* // Acta Mater. 2000. V. 48. P. 2665.

## Evolution of crystallographic texture, microstructure, and mechanical properties during flat rolling of the Cu–Zn alloys system with different grain sizes

L. I. Zaynullina<sup>a, \*</sup>, I. V. Alexandrov<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Ufa State Aviation Technical University, Ufa, 450008 Russia

\*e-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

The evolution of crystallographic texture parameters, microstructure, and mechanical properties of single-phase copper-based alloys with a content of 10 and 30 wt % Zn subjected to flat rolling in the coarse-grained state and preformed ultrafine-grained state. It is shown that a decrease in the stacking fault energy and an increase in the reduction degree during flat rolling lead to an increase in the orientation distribution function values corresponding to twin orientations, in general, a decrease in the grain size and coherent domain sizes, an increase in the dislocation density, and the twinning probability. These changes have a positive effect on the level of strength properties of the investigated alloys.

УДК 53.043:538.913

## ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ГИДРИРОВАННОГО МЕМБРАННОГО СПЛАВА НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ

© 2022 г. О. В. Акимова<sup>1</sup>, \*, Р. Д. Светогоров<sup>2</sup>,  
С. В. Горбунов<sup>3</sup>, Н. Р. Рошан<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение  
“Научно-исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: akimova@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 01.06.2022 г.

После доработки 15.06.2022 г.

Принята к публикации 22.06.2022 г.

Методом прецизионной рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения определен отклик сплава палладий–свинец на внедрение водорода в кристаллическую решетку. Изучена кинетика деформационных процессов в течение релаксации гидрированной системы при комнатной температуре и атмосферном давлении. Гидрирование проводили при температуре 300°C и давлении 16 атм.

DOI: 10.31857/S0367676522100039

### ВВЕДЕНИЕ

Уникальные свойства палладия, одним из которых является его избирательная водородная проницаемость, наследуются и сплавами на его основе [1–4]. В настоящее время необходимость развития водородной энергетики обеспечивает высокую востребованность палладиевых сплавов во многих областях промышленности и придает особый статус развитию технологий их использования в качестве катализаторов в производстве неорганических соединений и фармацевтических препаратов [5–7]. Плотные металлические мембраны на основе палладия обеспечивают при диффузионном извлечении водорода из промышленных газовых смесей высокую степень его сепарации и чистоты (99.9999%) [1, 4, 7]. Потребности в таком высокочистом водороде многих сфер жизнедеятельности человечества [5–8] сделали изучение взаимодействия его с металлическими системами одной из наиболее актуальных задач физики конденсированной среды в настоящее время. Влияние окклюдированного кристаллической решеткой водорода на структурно-фазовые изменения в мембранных диффузионных фильтрах определяет надежность и долговечность их использования, что сформировало цель настоящей работы — установление кинетики деформационных процессов при гидрировании довольно

малоизученного, но имеющего хорошую водородо-проницаемость перспективного сплава палладий–свинец [3].

### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе сплав палладий–свинец был получен методом электродуговой плавки в среде очищенного гелия из металлов высокой степени чистоты ( $\approx 99.95\%$ ). Для обеспечения однородности состава каждый слиток переплавляли два–три раза. Фольги толщиной 50 мкм изготавливали методом холодной прокатки заготовок на четырехвалковом прокатном стане с промежуточными вакуумными отжигами при 950°C. Продолжительность отжига зависела от толщины заготовки. Подробно детали изготовления мембран описаны в работе [3].

Рентгеноструктурные исследования выполнены на оборудовании станции “РСА” Курчатовского источника синхротронного излучения (СИ) [9]. На образцы направлялся пучок СИ энергии 15.7 кэВ, монохроматизированный с помощью двухкристального кремниевого монохроматора до  $\Delta E/E \sim 10^{-4}$ , основное отражение от плоскостей типа (111). В процессе измерения образцы вращались вокруг горизонтальной оси перпендикулярно пучку СИ для усреднения по ориен-

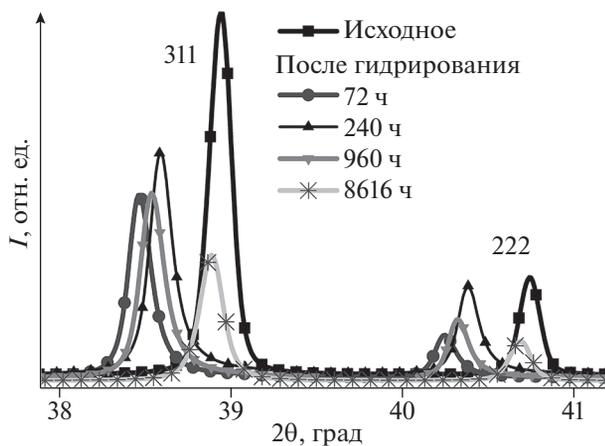


Рис. 1. Дифрактограммы сплава  $\text{Pd}_{97.82}\text{Pb}_{2.18}$  до гидрирования и по прошествии 72, 240, 960, 8616 ч после него в угловой области дифракции  $37.8^\circ\text{--}41.2^\circ$ .

тациям кристаллитов. Дифракционная картина регистрировалась в геометрии Дебая–Шеррера в угловом диапазоне  $1^\circ\text{--}60^\circ$ . Зависимости интенсивности дифрагированного пучка ( $I$ ) от двойного угла дифракции ( $2\theta$ ) были получены по двумерным картинам дифракции с использованием программного обеспечения “Dionis” [10]. Обработку экспериментальных рентгеновских спектров проводили с помощью компьютерной программы Fituk-0.9.8 [11]. При анализе дифракционных максимумов использовали метод аппроксимаций [12].

Режим гидрирования ( $300^\circ\text{C}$ , 16 атм) выбран согласно эксплуатационным параметрам работы мембран в агрессивных газовых средах [1, 3, 4]. Релаксация проходила при комнатной температуре и атмосферном давлении. Двумерные дифрактограммы для состояний сплава до гидрирования, по прошествии 72 и 8616 ч релаксации, показаны нами в работе [13]. Путем индентирования структурных отражений было установлено, что угловые положения дифракционных пиков соответствуют гранцентрированной кубической решетке ( $Fm\bar{3}m$ ) как до, так и после гидрирования. В настоящей работе рассмотрена кинетика релаксации гидрированного сплава. Согласно [2], количество водорода, вошедшего в решетку, можно определить из соотношения

$$n_{\text{H}}/n_{\text{M}} = 4.02\Delta a_{hkl}, \quad (1)$$

где  $\Delta a_{hkl}$  – изменение параметров элементарной ячейки после гидрирования, 4.02 – эмпирически установленный числовой коэффициент.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Дифрактограммы в угловой области  $37.8^\circ\text{--}41.2^\circ$  для состояний удержания мембранным фильтром водорода показаны на рис. 1. Сдвиг дифракцион-

ных максимумов в сторону уменьшения угла дифракции после гидрирования мембранного фильтра по сравнению с их положениями для состояния до гидрирования свидетельствует об увеличении периода кристаллической решетки сплава в результате внедрения в нее водорода. Для состояния мембранного фильтра до гидрирования (исходное) была определена основная фаза с периодом решетки  $3.90268 \pm 0.00012 \text{ \AA}$ , что отвечает концентрации свинца в  $2.18 \pm 0.10 \text{ ат. \%}$ . Выявлена и дополнительная к основной фаза малой объемной доли с периодом решетки  $3.9176 \pm 0.0017 \text{ \AA}$ , концентрация свинца в этом случае –  $4.88 \pm 0.32 \text{ ат. \%}$  [13]. Для исходного состояния сплава максимальное содержание дополнительной фазы с увеличенным периодом решетки было отмечено для областей когерентного рассеяния (ОКР) с индексами Миллера 100, далее ОКР (100), порядка 7.0 об. %, в ОКР (110) ее содержание 4.1 об. %, в ОКР (311) 4.6 об. % и в ОКР (111) – 3.6 об. % [13]. Полученный результат отличается сплав системы палладий–свинец от рассмотренного в более ранних наших работах сплава системы палладий–индий–рутений, где тенденция преимущественного формирования дополнительных фаз в ОКР (111) отмечена как до, так и после гидрирования [14, 15].

Формирование даже столь малых неоднородностей по составу обуславливает различия локальной дилатации решетки, что при взаимодействии с водородом может стать источником дополнительных деформационных искажений и требует внимания.

После гидрирования дифракционные максимумы одиночные, с небольшой асимметрией на увеличении угла дифракции (рис. 1).

Параметры элементарных ячеек фаз сплава показали отсутствие в гидрированном мембранном фильтре области  $\beta \leftrightarrow \alpha$  превращений (табл. 1). Для состояния 72 ч релаксации было установлено наличие основной фазы с периодом решетки  $3.97687 \pm 0.00025 \text{ \AA}$  и дополнительных фаз малой объемной доли с частично когерентными к основной фазе границами. Периоды решеток дополнительных фаз для этого состояния составили  $3.9622 \pm 0.0022$  и  $3.955 \pm 0.023 \text{ \AA}$ , что может свидетельствовать как о меньшем содержании свинца и/либо водорода в них, так и об обогащении вакансиями.

Максимальное суммарное содержание таких включений с меньшим периодом решетки для состояния 72 ч релаксации выявлено для ОКР (111) – 13.0 об. %. Минимальное (8.0 об. %) содержание дополнительных фаз установлено в ОКР (110), в ОКР (100) и ОКР (311) – по 11 об. %. Таким образом, в гидрированном мембранном фильтре определено формирование большего объемного содержания дополнительных фаз по кристалло-

**Таблица 1.** Параметры элементарных ячеек фаз сплава и содержание в фазах водорода по прошествии 72 ч релаксации сплава после гидрирования

<i>hkl</i>	$a_{hkl}, \text{Å}$ (осн. фаза)	$a_{hkl}, \text{Å}$ (доп. фаза <sup>1</sup> )	$a_{hkl}, \text{Å}$ (доп. фаза <sup>2</sup> )	$n_{\text{H}}/n_{\text{M}}$	Объемная доля
100	$3.97813 \pm 0.00008$	$3.9631 \pm 0.0013$	$3.956 \pm 0.008$	0.31//0.25//0.22	0.87//0.03//0.08
110	$3.97652 \pm 0.00010$	$3.96224 \pm 0.00083$	$3.954 \pm 0.010$	0.30//0.25//0.21	0.92//0.04//0.04
111	$3.97749 \pm 0.00013$	$3.96536 \pm 0.00065$	$3.958 \pm 0.008$	0.31//0.26//0.23	0.87//0.05//0.08
311	$3.97743 \pm 0.00013$	$3.96248 \pm 0.00070$	$3.954 \pm 0.011$	0.31//0.25//0.21	0.89//0.05//0.06
$a = 3.97687 \pm 0.00025 \text{ Å} // 3.9622 \pm 0.0022 \text{ Å} // 3.955 \pm 0.023 \text{ Å}$					

графическому направлению (111) (табл. 1). Изменение содержания водорода в кристаллической решетке сплава в зависимости от времени релаксации показано на рис. 2.

В мембранном фильтре выявлены сложные релаксационные процессы после гидрирования. Так, для состояний 240 и 408 ч релаксации определена миграция водорода из областей β-фазы, наиболее вероятно, в границы блоков субструктуры, а не к поверхности мембранного фильтра, так как далее, для состояния 960 ч релаксации, наблюдается обратное поступление водорода в ОКР (*hkl*): β-фаза стремится сохранить свое присутствие в структуре. Подобное поведение β-фазы отмечено в ряде работ как характерное для палладия после гидрирования [17, 18].

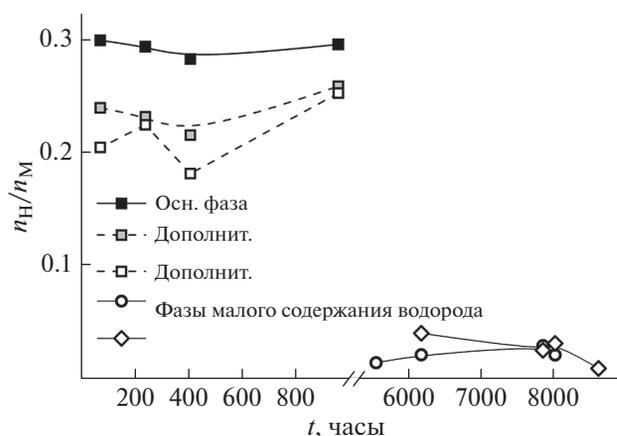
Для состояния 8616 ч релаксации содержание водорода составило 0.03 долей как в основной, так и в дополнительной фазе. Далее получение дифрактограмм выполнено для времени релаксации 16600 и 18640 ч. Влияние водорода на фазовый состав мембранного фильтра и период кристаллической решетки для состояний длительной релаксации не выявлено. После гидрирования и длительной релаксации при комнатной температуре и атмосферном давлении практически восстановлено исходное состояние кристаллической решетки мембранного фильтра. Установлено наличие и дополнительной фазы, которое обусловило асимметрию отражений на увеличении угла дифракции. Тенденция неравномерного распределения дополнительной фазы в кристаллической решетке мембранного фильтра для состояния длительной релаксации 18640 ч выражена менее интенсивно по сравнению с состоянием до гидрирования: для ОКР (100) доля дополнительной фазы составила 4.0 об. %; для ОКР (111) – 3.2 об. %; для ОКР (110) – 4.8 об. % и для ОКР (311) – 2.8 об. %.

В течение времени нахождения водорода в кристаллической решетке мембранного фильтра для дополнительных фаз вариации параметров элементарной ячейки более существенные по сравнению с изменениями параметров элементарной ячейки основной фазы (рис. 3а). Выяв-

ленные вариации параметров элементарной ячейки свидетельствуют, что для дополнительных фаз характерны более значительные поля деформаций в кристаллической решетке как для исходного состояния, так и после гидрирования мембранного фильтра, вплоть до 8616 ч релаксации. Для состояний длительной релаксации 16600 и 18640 ч отмечено уменьшение деформационных искажений кристаллической решетки (рис. 3б).

Для состояний до гидрирования полученный результат значительных деформационных локальных напряжений кристаллической решетки мы полагаем закономерным – дополнительная фаза обогащена атомами свинца, которые значительно превосходят атомы металла-растворителя (палладия) по размеру. Являясь для решеток палладия дефектами первого рода, атомы свинца создают локальные напряжения и упругие деформации.

При гидрировании мембранных фильтров диффузия водорода в эти области локальной деформации повышает градиент полей деформации. Рентгеновские данные показали (рис. 3а), что для состояний сплава до гидрирования и 8616 ч



**Рис. 2.** Изменение содержания водорода в кристаллической решетке сплава в зависимости от времени релаксации сплава.

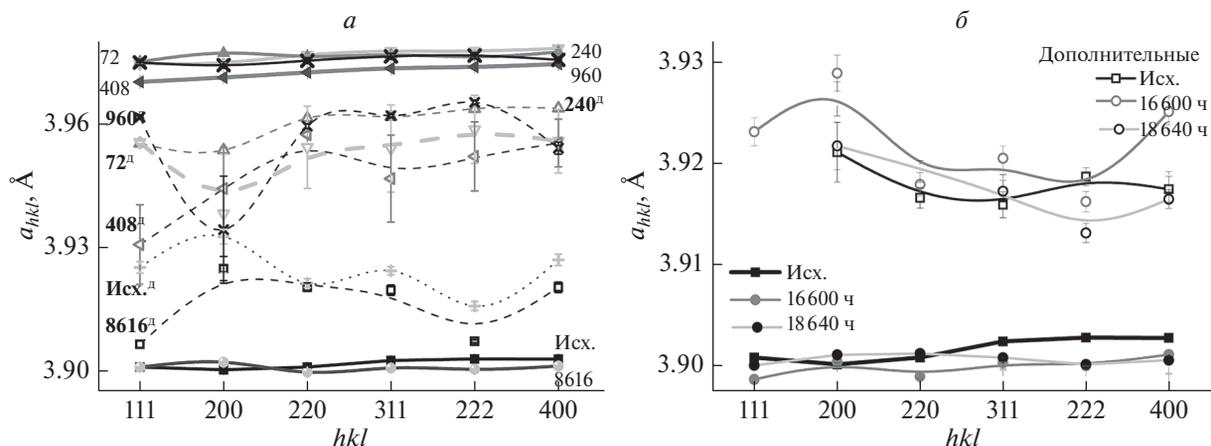


Рис. 3. Параметры элементарных ячеек основной и дополнительной фаз мембранного фильтра: для состояний до гидрирования и по прошествии 72, 240, 960, 8616 ч после него (а); для состояний до гидрирования и длительной (16600 и 18640 ч) релаксации после него (б).

релаксации после него элементарная ячейка дополнительной фазы имеет искажения — она несколько вытянута по кристаллографическому направлению (100), где модуль Юнга для палладия и его сплавов наименьший [16].

Концепция влияния фактора размерного несоответствия атомов компонент сплава на формирование локальных напряжений в кристаллической решетке, фазового состава и физических свойства материалов давно рассматривается в той либо иной форме в целом ряде работ [19–21]. При востребованности для научно-технического прогресса новых материалов с особыми свойствами эта проблема остается по-прежнему злободневной [22, 23]. В этом контексте дальнейшее изучение системы Pd–Pb является задачей актуальной и определяет перспективы совершенствования комплекса специфических свойств, необходимых для высокой производительности мембранных сплавов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отмечены особенности формирования гидридного состояния сплава палладий–свинец.

Выявлена стадийность процесса релаксации гидрированного сплава, следовательно, и развития дефектной структуры при сопровождающих этот процесс дилатациях кристаллической решетки.

Установлена возможность применения гидрирования для устранения градиента распределения дополнительной фазы по ОКР ( $hkl$ ) с целью снижения локальных дилатационных искажений кристаллической решетки.

Авторы выражают благодарность профессору Вербецкому Виктору Николаевичу и сотрудни-

кам лаборатории энергоемких и каталитически активных веществ химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова за помощь в гидрировании образцов.

Мембранные фильтры изготовлены сотрудниками Института металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН в рамках темы государственного задания № 075-00715-22-00.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бурханов Г.С., Горина Н.Б., Кольчугина Н.Б., Рощан Н.Р. // Журн. Росс. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева. 2006. Т. 50. № 4. С. 36.
2. Алефельд Г., Фелькл И. Водород в металлах. Т. 1. М.: Мир, 1981. 475 с.
3. Горбунов С.В., Канныкин С.В., Пенкина Т.Н. и др. // Металлы. 2017. № 1. С. 63; Gorbunov S.V., Kannykin S.V., Penkina T.N. et al. // Russ. Metallurgy (Metally). 2017. V. 2017. No. 1. P. 54.
4. Al-Mufachi N.A., Rees N.V., Steinberger-Wilkens R. // Renew. Sustain. Energy Rev. 2015. V. 47. P. 540.
5. Рывтин Е.И., Лебедеко И.Ю., Тыкочинский Д.С., Васекин В.В. // Журн. Росс. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева. 2006. Т. 50. № 4. С. 41.
6. Савицкий Е.Г. Благородные металлы. Справочное издание. М.: Металлургия. 1984, 592 с.
7. Grashoff G.J., Pilkington C.E., Corti C.W. // Platinum Met. Rev. 1983. V. 27. No. 4. P. 157.
8. Uskov I.V., Moskvichev V.V., Belyaev S.V., Uskov D.I. // J. Siberian Federal Univ. Engin. Technol. 2014. V. 4. No. 7. P. 449.
9. Svetogorov R.D., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A. // Crystal Res. Technol. 2020. V. 55. No. 5. Art. No. 1900184.
10. Светогоров Р.Д. Dionis – Diffraction Open Integration Software. Св-во о гос. рег. прогр. для ЭВМ № 2018660965.

11. *Wojdyr M.* // J. Appl. Crystallography. 2010. V. 43. P. 1126.
12. *Иверонова В.И., Ревкевич Г.П.* Теория дифракции рентгеновских лучей. М.: МГУ, 1978. 278 с.
13. *Akimova O.V., Svetogorov R.D., Gorbunov S.V.* // Key Engin. Mater. 2022. V. 910. P. 767.
14. *Акимова О.В., Авдюхина В.М., Левин И.С., Ревкевич Г.П.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. № 9. С. 1246; *Akimova O.V., Avdyukhina V.M., Levin I.S., Revkevich G.P.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2015. V. 79. No. 9. P. 1101.
15. *Акимова О.В., Светогоров Р.Д.* // Физ. мет. и металловед. 2021. Т. 122. № 4. С. 402; *Akimova O.V., Svetogorov R.D.* // Phys. Met. Metallography. 2021. V. 122. No. 4. P. 376.
16. *Куттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
17. *Кацнельсон А.А., Князева М.А., Олемской А.И., Ревкевич Г.П.* // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физ. и астрон. 1997. № 6. С. 46. // *Katsnelson A.A., Knyazeva M.A., Olemskoi A.I., Revkevich G.P.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 1997. V. 52. No. 6. P. 63.
18. *Кацнельсон А.А., Князева М.А., Олемской А.И., Ревкевич Г.П.* // ФТТ. 1997. Т. 39. № 7. С. 1275. // *Phys. Solid State.* 1997. Т. 39. No. 7. С. 1132.
19. *Гинье А.* Неоднородные металлические твердые растворы: атомно-кристаллическое строение, свойства и методы рентгенографического исследования. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. 158 с.
20. *King H.W.* // J. Mater. Sci. 1966. No. 1. P. 79.
21. *Sacamoto Y., Baba K., Flanagan T.B.* // Z. Physikal. Chem. Neue Folge. 1988. V. 158. P. 223.
22. *Shilkrot L.E., Srolovitz D.J., Tersoff J.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. No. 12. P. 8397.
23. *Dorin C., Mirecki J., Millunchick J.M. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2001. V. 79. No. 25. P. 4118.

## Deformation behavior of hydrogenated palladium-based membrane alloy

**O. V. Akimova<sup>a, \*</sup>, R. D. Svetogorov<sup>b</sup>, S. V. Gorbunov<sup>c</sup>, N. R. Roshan<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Department of Solid-State Physics, Lomonosov State University, Moscow, 119991 Russia

<sup>b</sup> National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, 123182 Russia

<sup>c</sup> Baykov Institute of Metallurgy and Materials Science of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119334 Russia

\*e-mail: akimova@physics.msu.ru

The response of the palladium-lead system to hydrogen exposure was determined by the method of precision X-ray diffraction using synchrotron radiation. The kinetics of deformation processes the hydrogenated system during its relaxation at room temperature and pressure is shown. Hydrogenation was carried out for 300°C and pressure 16 atm.

УДК 539.213.02

## ПОДАВЛЕНИЕ РАВНОВЕСНОЙ $\gamma$ -ФАЗЫ ПРИ КРУЧЕНИИ ПОД ВЫСОКИМ КВАЗИГИДРОСТАТИЧЕСКИМ ДАВЛЕНИЕМ В КАМЕРЕ БРИДЖМЕНА ФЕРРОМАГНИТНОГО СПЛАВА $Fe_{50}Ni_{25}Co_{25}$

© 2022 г. Л. Ф. Мурадимова<sup>1, 2, \*</sup>, А. М. Глезер<sup>2</sup>, И. В. Щетинин<sup>1</sup>, А. А. Томчук<sup>2</sup>,  
Д. Л. Дьяконов<sup>2</sup>, Н. С. Перов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
“Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное унитарное предприятие

“Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии имени И.П. Бардина”, Москва, Россия

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия

\*E-mail: lyaysan42@gmail.com

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Изучены особенности изменения физико-механических и магнитных свойств сплава  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  после деформации кручением под высоким давлением в камере Бриджмена при различных значениях числа оборотов подвижной наковальни (от 0.5 до 4).

DOI: 10.31857/S0367676522110175

### ВВЕДЕНИЕ

Одним из наиболее эффективных способов управления свойствами материалов является воздействие на них большими пластическими деформациями [1, 2]. В предыдущих работах [3, 4] нами были обнаружены эффекты влияния больших пластических деформаций на фазовые превращения и, как следствие, на механические и магнитные свойства металлических ферромагнитных материалов.

В данной работе эти исследования были продолжены, и было детально проанализировано влияние мегапластической деформации (МПД) путем кручения под высоким давлением (КВД) на эволюцию структуры и магнитных и механических свойств сплава  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$ , состоящего из трех стабильных при комнатной температуре  $3d$ -ферромагнитных металлов. По своему химическому составу этот двухфазный сплав трехкомпонентной системы  $Fe_{50}(Co_{50}Ni_{50-x})$  в равновесном состоянии находится на границе двух фаз (ОЦК-фаза при  $Co > 25$  ат. %) и ГЦК-фаза при  $Ni > 25$  ат. %), что привлекает к нему особый интерес в связи с воздействием МПД. “Пограничный” сплав  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  обладает ярко выраженными магнитными свойствами [5]. Ряд исследований [6–8] демонстрируют влияние изменения характера структуры на ее магнитные и механические

свойства, однако в них не обнаружено влияние возможных фазовых превращений, которые могут происходить под воздействием МПД. Поиску возможных фазовых превращений и их влиянию на структуру и свойства в “приграничном” двухфазном трехкомпонентном ферромагнитном сплаве  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  (смесь ОЦК- и ГЦК-фаз) под воздействием КВД посвящено данное исследование.

### МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Образцы сплава  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  были выплавлены в вакуумной печи в виде стержней диаметром 8 мм. Далее из них были изготовлены диски толщиной 0.4 мм, которые были отожжены в атмосфере аргона при температуре 900°C в течение 10 ч с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100 град/ч.

Для анализа характера структурно-фазовых превращений в изученном сплаве при МПД была использована камера Бриджмена. Эксперименты проводились на дискообразных образцах высотой 300 мкм и радиусом 5 мм при квазигидростатическом давлении 6 ГПа и количестве полных оборотов подвижной наковальни  $N = 1–4$  при комнатной температуре.

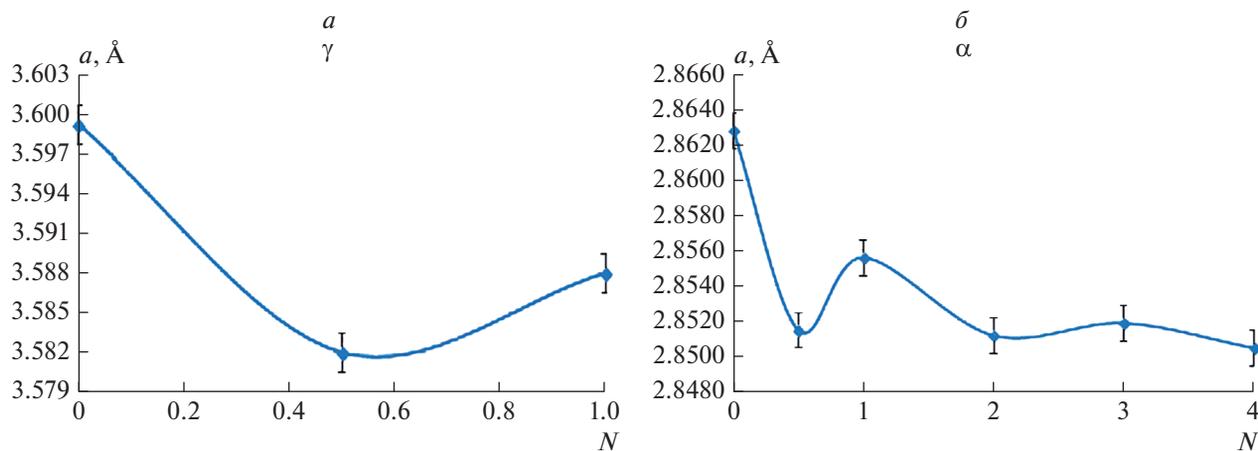


Рис. 1. Изменение параметра кристаллической решетки  $a$  в зависимости от  $N$  в сплаве  $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{25}\text{Ni}_{25}$  для  $\gamma$ -фазы (а) и для  $\alpha$ -фазы (б).

Истинные логарифмические деформации для КВД рассчитываются по формуле [9]:

$$e = \ln \left( 1 + \left( \frac{\varphi r}{h} \right)^2 \right)^{0.5} + \ln \left( \frac{h_0}{h} \right), \quad (1)$$

где  $r$  – радиус дискообразного образца;  $h_0$  и  $h$  – его высота до и после деформации соответственно;  $\varphi$  – угол поворота подвижной части наковальни. После КВД получали образцы без трещин с различными величинами больших пластических деформаций ( $e = 4.83$ – $6.91$ ).

Рентгеноструктурный анализ проводили на дифрактометре ДРОН-4 с использованием излучения  $\text{CoK}\alpha$  ( $\lambda = 1.79021 \text{ \AA}$ ) и графитового монохроматора. Дифрактограммы получали по методу Брэгга–Брентано в интервале углов  $2\Theta - 120^\circ$ , с шагом  $0.1^\circ$  и экспозицией 3 с. Анализ дифрактограмм проводили с использованием модифицированного метода Ритвельда, реализованного в программе  $\text{Phan\%}$ . В качестве структурных параметров определяли кристаллоструктурный тип и параметры кристаллических решеток формирующихся фаз, а также значения параметра и средней величины упругих искажений кристаллической решетки после различных величин деформации в условиях МПД.

Изучение структуры исходных и деформированных образцов было выполнено на просвечивающем электронном микроскопе JEM-1400 при ускоряющем напряжении 120 кВ. Образцы после деформации в камере Бриджмена дополнительно механически утончали до 30–40 мкм и затем проводили электрополировку.

Измерение удельной намагниченности насыщения  $M_s$  осуществляли при комнатной температуре, в экспериментах использовали вибрационный магнетометр VSM-250. Напряженность постоянного магнитного поля изменялась в пределах 80–

640 кА/м с минимальным шагом 0.8 А/м. Калибровка прибора была проведена по эталонному образцу чистого никеля. Измерения микротвердости  $HV$  выполняли на микротвердометре LECO M 400A при нагрузке 50 г и времени нагружения 5 с.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 представлены зависимости изменения параметра решетки  $a$  для  $\gamma$ -фазы (ГЦК) (а) и  $\alpha$ -фазы (ОЦК) (б) при увеличении деформации (числа полных оборотов  $N$ ). Как мы видим, уже в начале деформации значения  $a$  для обеих фаз резко уменьшаются. По мере дальнейшего увеличения  $N$  параметры решетки заметно снижаются (особенно в случае  $\alpha$ -фазы). Такой же эффект наблюдался ранее [9, 10].

При дальнейшей деформации происходят фазовые превращения в материале, соотношения фаз меняются. В недеформированном состоянии доля  $\gamma$ -фазы составляет 35%, как видно на рис. 2. При увеличении  $N$  наблюдается исчезновение

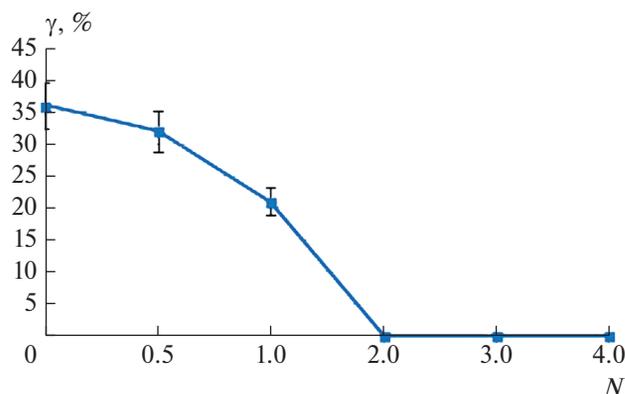


Рис. 2. Изменение содержания  $\gamma$ -фазы.

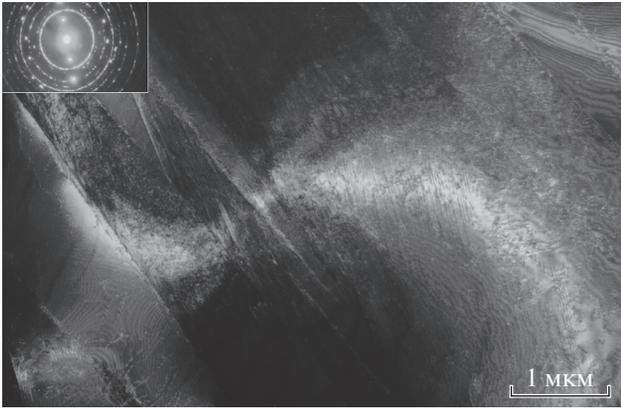


Рис. 3. Дифракционная картина и темнопольный снимок  $\gamma$ -фазы при  $N = 0$ .



Рис. 4. Темнопольное изображение  $\gamma$ -фазы при  $N = 0.5$ .

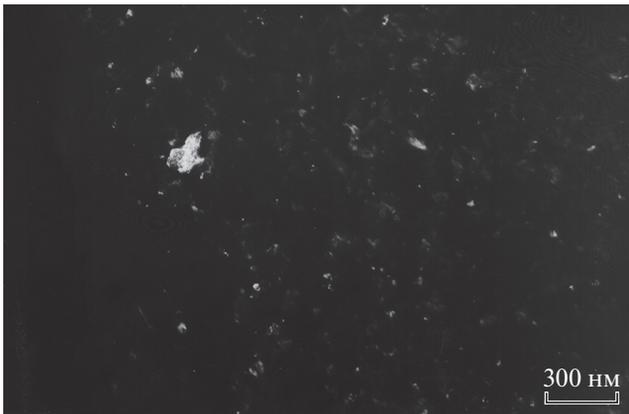


Рис. 5. Темнопольное изображение  $\gamma$ -фазы при  $N = 1$ .

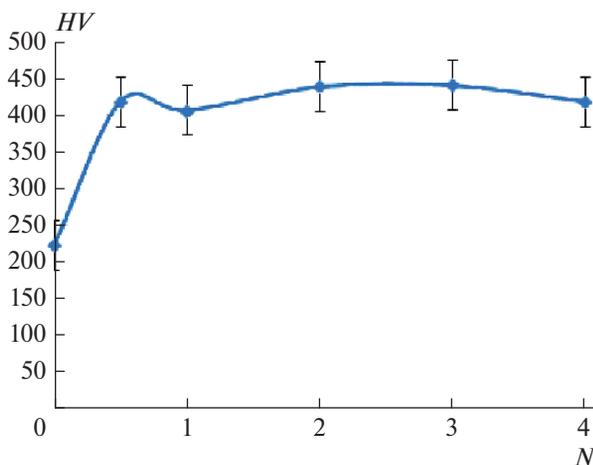


Рис. 6. Изменение твердости  $HV$  при увеличении деформации.

$\gamma$  фазы и при двух оборотах ее не удается обнаружить с помощью рентгеноструктурного анализа.

Исчезновение  $\gamma$ -фазы так же можно наблюдать на снимках, полученных с просвечивающего электронного микроскопа. Начальное недеформированное состояние для  $\gamma$ -фазы показано на рис. 3. Видно, что с ростом  $N$  содержание  $\gamma$ -фазы уменьшается. На рис. 4 к  $\gamma$ -фазе относятся только наиболее яркие и большие зерна, в поле зрения их несколько. На рис. 5 зерно одно. Данные ПЭМ подтверждают результаты, полученные рентгенографией.

Об изменениях механических свойств материала, можно судить по характеру изменения твердости  $HV$  (рис. 6). Как видно из рис. 6, твердость резко повышается при значении  $N = 0.5$  (половине) оборота. При дальнейшем увеличении  $N$  твердость изменяется незначительно. Такая же зависимость наблюдается для коэрцитивной силы  $H_c$  (рис. 7).

На рис. 8 показано изменение намагниченности насыщения при увеличении  $N$ . По виду зависимости от  $N = 0$  до  $N = 1$  можно сделать вывод, что значения намагниченности коррелируют с фазовым составом сплава. При наибольшем содержании  $\gamma$ -фазы намагниченность насыщения наименьшая, но затем, пропорционально уменьшению содержания  $\gamma$ -фазы, возрастает.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При изучении влияния КВД на сплав  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  были показаны процессы фазовых превращений  $\gamma-\alpha$ , а также влияние деформации на механические и магнитные свойства.

В недеформированном состоянии в сплаве присутствует две фазы с разным типом решетки ( $\gamma$ -ГЦК,  $\alpha$ -ОЦК). При увеличении длительности деформации кручением доля  $\gamma$ -фазы постепенно

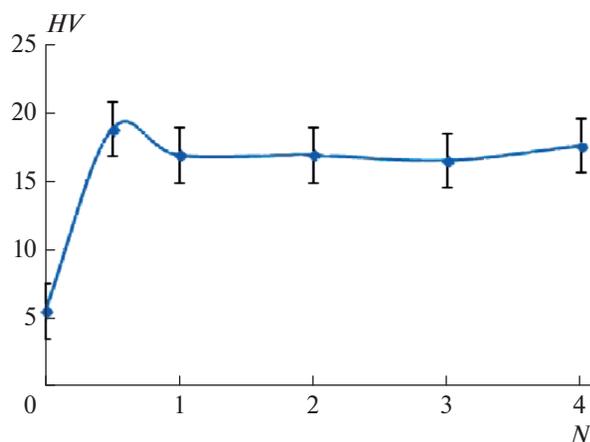


Рис. 7. Изменение коэрцитивной силы при увеличении степени деформации.

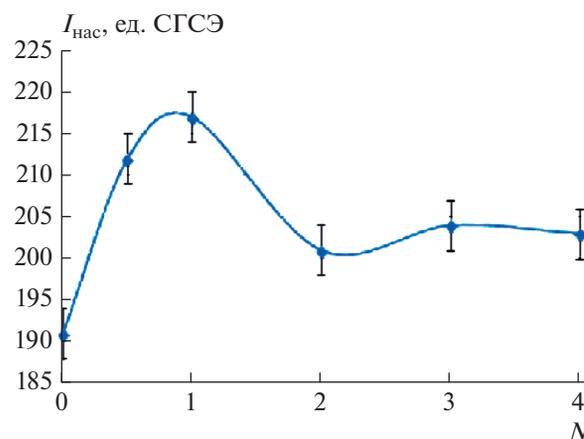


Рис. 8. Изменение намагниченности насыщения при увеличении степени деформации.

уменьшается и затем исчезает полностью. Это было показано с помощью ПЭМ и так же подтверждено рентгеноструктурным анализом. Доля  $\gamma$ -фазы меняется от 35% в недеформированном состоянии до нуля. Полное исчезновение происходит при двух оборотах. На темнопольных снимках, полученных с помощью ПЭМ, видно постепенное уменьшение доли  $\gamma$ -фазы, проявляющееся в уменьшении количества зерен, попадающих в данном рефлексе в кадр.

Структурные и фазовые изменения влияют на механические и магнитные свойства сплава. Так твердость повышается практически в два раза уже с  $N = 0.5$ . Это происходит в результате повышения в материале внутренних напряжений. Подробнее это было описано нами в работе [10]. Так же уровень внутренних напряжений влияет на коэрцитивную силу. Ее зависимость, представленная на рис. 7, имеет такой же вид, как и зависимость твердости.

Дополнительно при изучении влияния КВД, было показано изменение значения намагниченности насыщения. При деформации в сплаве  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  намагниченность насыщения увеличивалась, и в процессе деформации ее значение так же изменялось. Это может быть связано с изменением фазового состава сплава в процессе кручения. Так же свой вклад может вносить изменение параметра решетки.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами рентгеноструктурного анализа и ПЭМ, а также путем измерения микротвердости и коэрцитивной силы, исследованы особенности формирования структуры и свойства сплава  $Fe_{50}Co_{25}Ni_{25}$  после мегапластической деформации при комнатной температуре в камере Бриджмена для различных значений числа оборотов по-

движной наковальни (от 0.5 до 4). Показано изменение фазового состава сплава и  $\gamma$ - $\alpha$  превращения под действием деформации кручения. Обнаружено, что при продолжительной деформации  $\gamma$ -фаза полностью исчезает при 2 оборотах наковальни.

Продемонстрировано увеличение твердости и коэрцитивной силы, связанное с изменением внутренних напряжений в материале. После деформации при КВД оба показателя увеличились примерно в два раза. Также установлено влияние деформации на намагниченность насыщения. В результате изменения фазового состава и параметра решетки в процессе деформации кручением, намагниченность насыщения значительно увеличивается.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. // *Progr. Mater. Sci.* 2008. V. 53. No. 6. P. 893.
2. Gleiter H. // *Acta Mater.* 2000. V. 48. P. 1.
3. Glezer A.M., Luzgin D.V., Muradimova L.F. et al. // *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Engin.* 2020. V. 709. No. 4. Art. No. 044091.
4. Glezer A.M., Louzguine-Luzgin D.V., Muradimova L.F. et al. // *Intermetallics.* 2019. V. 115. Art. No. 106615.
5. Raa Z., Pongea D., Körmanna F. // *Intermetallics.* 2019. V. 111. Art. No. 106520.
6. Chokprasombat R., Pinitsoontorn S., Maensiri S. // *J. Magn. Magn. Mater.* 2016. V. 405. P. 174.
7. Muratov D.G., Kozhitov L.V., Korovushkin V.V. // *Russ. Phys. J.* 2019. V. 61. No. 10. P. 1788.
8. Sharma G., Grimes C.A. // *J. Mater. Res.* 2004. V. 19. No. 12. P. 3695.
9. Томчук А.А., Мурадимова Л.Ф., Железный М.В. и др. // *Деформ. и разруш. матер.* 2020. № 12. С. 12.
10. Мурадимова Л.Ф., Глезер А.М., Ширишиков С.О. и др. // *Вектор науки Тольят. гос. ун-та.* 2021. № 1. С. 16.

## Suppression of the equilibrium $\gamma$ -phase by torsion under high quasi-hydrostatic pressure in the Bridgeman chamber of the ferromagnetic $\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{25}\text{Co}_{25}$ alloy

L. F. Muradimova<sup>a, b, \*</sup>, A. M. Glezer<sup>a, b</sup>, I. V. Shchetinina<sup>a</sup>, A. A. Tomchuk<sup>b</sup>,  
D. L. D'yakonov<sup>b</sup>, N. S. Perov<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, Russia*

<sup>b</sup>*Bardin Central Science Institute for Ferrous Metallurgy, Moscow, Russia*

<sup>c</sup>*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

*\*e-mail: lyaysan42@gmail.com*

The features of changes in the physico-mechanical and magnetic properties of the  $\text{Fe}_{50}\text{Co}_{25}\text{Ni}_{25}$  alloy after deformation by torsion under high pressure in the Bridgeman chamber at different values of the number of revolutions of the movable anvil (from 0.5 to 4) are discussed.

# **Волновые явления: физика и применения**

Редактор тематического выпуска  
канд. физ.-мат. наук **А. Н. Калиш**

УДК 535.14

## ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КВАНТОВОГО ФАНТОМНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ САМОВОЗДЕЙСТВИЯ, КРОСС-ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ВОЛНОВОЙ РАССТРОЙКИ

© 2022 г. А. В. Белинский<sup>1, 2</sup>, Р. Сингх<sup>1, \*</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия<sup>2</sup>Государственное бюджетное учреждение здравоохранения города Москвы “Научно-практический центр специализированной медицинской помощи детям имени В.Ф. Войно-Ясенецкого Департамента здравоохранения города Москвы”, Москва, Россия

\*E-mail: ranjit.singh@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Рассмотрена возможность формирования квантовых фантомных изображений на основе коллинеарного попутного четырехфотонного смещения, учитывающего самовоздействие, кросс-взаимодействие и волновую расстройку. Показано, что коэффициент корреляции парных коррелированных фотонов больше или равен 2. Обнаружено, что среднее число фотонов и коэффициент корреляции слабо зависят от волновой расстройки.

DOI: 10.31857/S0367676522110059

### ВВЕДЕНИЕ

Одним из источников генерации запутанных состояний является спонтанное параметрическое рассеяние (СПР) на основе нелинейной восприимчивости  $\chi^{(2)}$  оптических кристаллов. В результате рождаются коррелированные фотоны, которые затем используются для решения задач квантовой информатики и/или формирования квантовых фантомных изображений. Для формирования квантовых фантомных изображений также используется СПР процесс [1].

Ограничения, связанные с выполнением условия фазового синхронизма при определенных углах взаимодействия световых пучков негативно влияют на эффективное рождение коррелированных фотонов в широкой угловой апертуре в случае кристалла с оптической нелинейностью  $\chi^{(2)}$ . Интерес к использованию встречного вырощенного по частоте процесса четырехфотонного смещения на основе нелинейности  $\chi^{(3)}$  обусловлен безусловным выполнением фазового синхронизма в изотропных средах [2]. Нелинейные операторные уравнения, описывающие этот процесс, не удается решить аналитически, поэтому приходится прибегать к приближению заданного поля. В случае вырощенного по частоте встречного четырехфотонного смещения система нелинейных операторных уравнений линеаризуется, но аналитическое решение становится син-

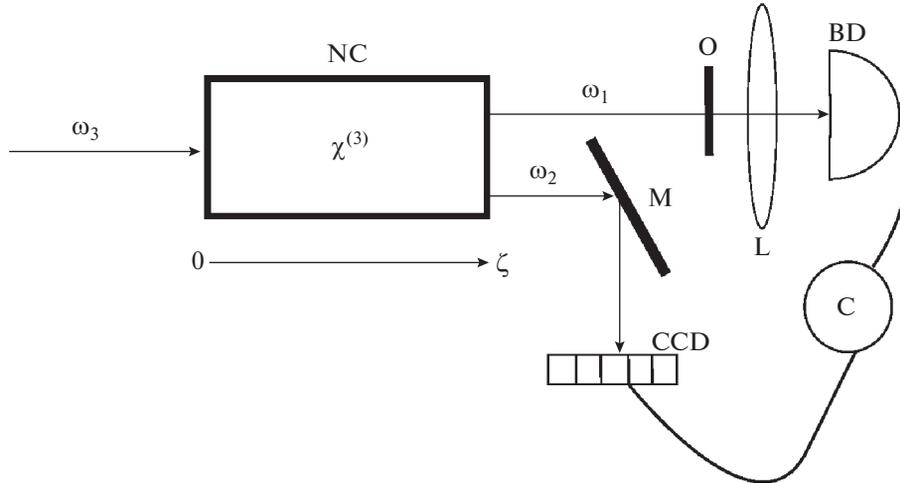
гулярным при высокой эффективности взаимодействия [2]. Для ухода от сингулярности необходимо решать полную систему операторных уравнений, то есть, без использования приближения заданного поля.

Мы предлагаем еще одну возможность формирования квантовых фантомных изображений на основе коллинеарного попутного четырехфотонного взаимодействия  $\omega_3 + \omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ , включая самовоздействие, кросс-взаимодействие и волновую расстройку.

### ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Рассмотрим плоские монохроматические моды с частотами  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  и  $\omega_3$  характеризующиеся операторами уничтожения (рождения) фотона  $\hat{a}_1$  ( $\hat{a}_1^+$ ),  $\hat{a}_2$  ( $\hat{a}_2^+$ ) и  $\hat{a}_3$  ( $\hat{a}_3^+$ ). Эти моды коллинеарно распространяются внутри нелинейной среды с кубической нелинейностью (см. рис. 1). Операторы удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям:  $[\hat{a}_j, \hat{a}_{j'}^+] = \delta_{j,j'}$  ( $j = 1, 2, 3; j' = 1, 2, 3$ ). Гамильтониан взаимодействия имеет следующий вид [3, 4]

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} = & \hbar\gamma_1 \left( \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \hat{a}_3^2 e^{-i\Delta kz} + \hat{a}_1 \hat{a}_2 \hat{a}_3^{+2} e^{i\Delta kz} \right) + \\ & + \hbar 2^{-1} \gamma_2 \left( \hat{a}_1^{+2} \hat{a}_1^2 + \hat{a}_2^{+2} \hat{a}_2^2 + \hat{a}_3^{+2} \hat{a}_3^2 \right) + \\ & + \hbar\gamma_2 \left( \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 \hat{a}_3^+ \hat{a}_3 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \hat{a}_3^+ \hat{a}_3 \right), \end{aligned} \quad (1)$$



**Рис. 1.** Схема формирования квантовых фантомных изображений: NC – нелинейный кристалл;  $\omega_3$  – накачка;  $\omega_1$  и  $\omega_2$  – моды запутанных пар фотонов; O – прозрачный объект; M – зеркало; BD – интегрирующий детектор в объектном канале; L – оптический объектив; CCD – матрица фотодетекторов в восстанавливающем канале; C – коррелятор интенсивностей (схема совпадений).

где  $\gamma_1$  описывает параметрический процесс генерации фотонных пар,  $\gamma_2$  – самовоздействие и кросс-взаимодействие между модами  $\hat{a}_1$ ,  $\hat{a}_2$  и  $\hat{a}_3$ ; а  $\Delta k = 2k_{3z} - k_{1z} - k_{2z}$  – волновая расстройка.

Система операторных уравнений Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{a}_j}{dz} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{int}, \hat{a}_j], \quad (2)$$

$$\frac{d\hat{a}_1}{dz} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{a}_2^+ e^{-i\Delta k z} - i\gamma_2 \hat{E} \hat{a}_1, \quad (3)$$

$$\frac{d\hat{a}_2}{dz} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{a}_1^+ e^{-i\Delta k z} - i\gamma_2 \hat{E} \hat{a}_2, \quad (4)$$

где  $\xi_3$  – постоянная амплитуда неистошимой накачки моды  $\hat{a}_3$ ; ( $d\hat{a}_3/dz = 0$ ),  $\hat{E} = \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_3^+ \hat{a}_3$  – полная энергия рассматриваемого коллинеарного процесса четырехфотонного смешения, которая не меняется от длины взаимодействия, т.е. является инвариантом.

Для решения системы операторных уравнений (3), (4) можно сделать замену переменных  $\hat{a}_1 = \hat{A}_1 e^{-i\frac{\Delta k z}{2}}$ ,  $\hat{a}_2 = \hat{A}_2 e^{-i\frac{\Delta k z}{2}}$ , тогда система (3), (4) преобразуется к виду [5]:

$$\frac{d\hat{A}_1}{d\zeta} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{A}_2^+ - i \left( E - \frac{\Delta k}{2\gamma_2} \right) \hat{A}_1, \quad (5)$$

$$\frac{d\hat{A}_2}{d\zeta} = -i\gamma_1 \xi_3^2 \hat{A}_1^+ - i \left( E - \frac{\Delta k}{2\gamma_2} \right) \hat{A}_2, \quad (6)$$

где  $\gamma = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ ;  $\zeta = \gamma_2 z$  – приведенная длина взаимодействия. Линейные операторные уравнения (5), (6) решаются аналитически, например, с помощью преобразования Лапласа:

$$\hat{a}_1(\zeta) = e^{\frac{i\Delta k \zeta}{2}} u(\zeta) \hat{a}_1(0) + e^{\frac{i\Delta k \zeta}{2}} v(\zeta) \hat{a}_2^+(0), \quad (7)$$

$$\hat{a}_2(\zeta) = e^{\frac{i\Delta k \zeta}{2}} v(\zeta) \hat{a}_1^+(0) + e^{\frac{i\Delta k \zeta}{2}} u(\zeta) \hat{a}_2(0), \quad (8)$$

где  $u(\zeta) = \text{ch}(\mu\zeta) - \frac{\tilde{E}}{\mu} \text{sh}(\mu\zeta)$ ,  $v(\zeta) = -i \frac{\xi_3^2}{\mu} \gamma \text{sh}(\mu\zeta)$ ,

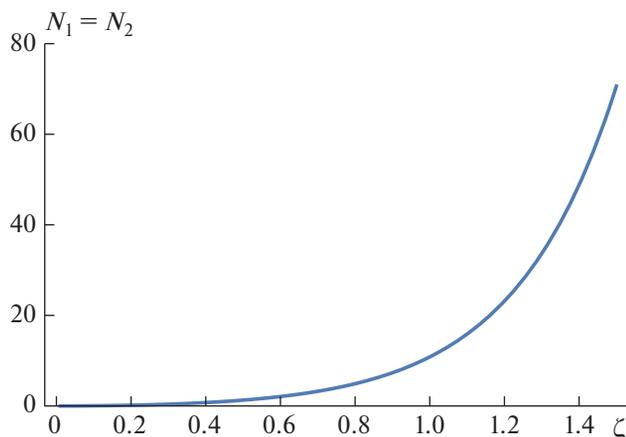
$\mu = \sqrt{\gamma^2 |\xi_3|^4 - \tilde{E}^2}$  и  $\tilde{E} = E - \frac{\Delta k}{2\gamma_2}$ . Правильность

решения можно проверить контролем коммутационных соотношений  $[\hat{a}_j, \hat{a}_{j'}^+] = \delta_{j,j'}$  ( $j = 1, 2$ ;  $j' = 1, 2$ ). Среднее число фотонов и корреляционная функция между модами  $\hat{a}_1$  и  $\hat{a}_2$  равны:

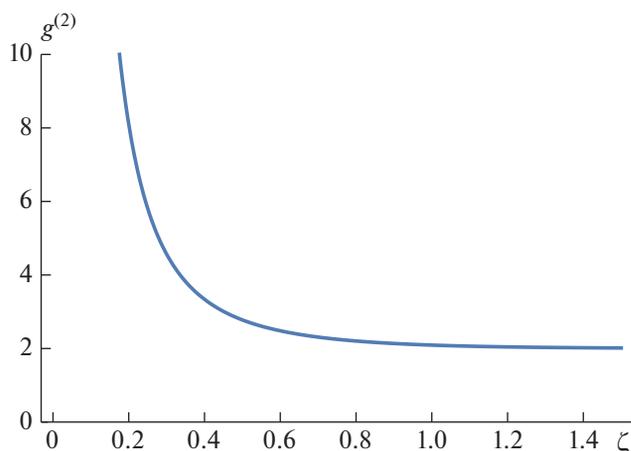
$$N_j(\zeta) = \langle \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \rangle = \frac{|\xi_3|^4}{\mu^2} \text{sh}^2(\mu\zeta), \quad (j = 1, 2), \quad (9)$$

$$g^{(2)}(\zeta) = \frac{\langle \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \rangle}{\langle \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 \rangle \langle \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 \rangle} = 2 + \left( 1 - \frac{\tilde{E}^2}{|\xi_3|^4 \gamma^2} \right) \text{csch}^2(\mu\zeta). \quad (10)$$

Среднее значение  $N_1$ ,  $N_2$  и  $g^{(2)}$  вычислялись в случае, когда моды  $\hat{a}_1$  и  $\hat{a}_2$  находились в исходном вакуумном состоянии при разных значениях  $\Delta k = \{0, 0.1, 0.3\}$  (см. рис. 2 и 3). Поведение кривых корреляции слабо зависит от волновой расстройки.



**Рис. 2.** Среднее число фотонов сигнальной и холостой мод, когда они изначально находились в вакуумном состоянии при  $\Delta k = \{0, 0.1, 0.3\}$ . Кривые при разных значениях  $\Delta k$  практически совпадают.



**Рис. 3.** Коэффициент корреляции между сигнальной и холостой модами, накачка неистощимая, а  $\Delta k = \{0, 0.1, 0.3\}$ . Кривые при разных значениях  $\Delta k$  практически не отличаются.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Каков физический смысл нашего результата  $g^{(2)} \geq 2$ ? Он означает, что коррелированных фотонных пар больше, чем независимых одиночных фотонов в каждой моде. Таким образом, предложенная схема может стать хорошим кандидатом генерации запутанных/коррелированных фотонов.

Интересно также, что средние значения рожденных фотонов и величина коэффициента корреляции в приближении заданной накачки слабо зависят от волновой расстройки. Этот факт дает надежду на эффективное использование рассматриваемого процесса в формировании квантовых фантомных изображений за счет жесткой корреляции между запутанными фотонами, а также в нелинейных интегральных схемах для создания квантовых компьютеров [7]. Для реализации данного процесса можно использовать нелинейные среды с кубической нелинейностью, например, рутил [8], кальцит и кварц [9].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колобов М.И., Чиркин А.С. Квантовое изображение. М.: Физматлит, 2009.
2. Белинский А.В., Сингх Р. // ЖЭТФ. 2021. Т. 159. № 2. С. 258; Belinsky A.V., Singh R. // JETP. 2021. V. 132. P. 212.
3. Чиркин А.С., Орлов А.А., Паращук Д.Ю. // Квант. электрон. 1993. Т. 20. № 10. С. 999; Chirkin A.S., Orlov A.A., Paraschuk D.Yu. // Quantum Electron. 1993. V. 23. No. 10. P. 870.
4. Gantsog Ts., Tanaś R. // J. Mod. Opt. 1991. V. 38. No. 6. P. 1021.
5. Perina J., Perina J. Jr. // Quant. Semiclass. Opt. 1995. V. 7. P. 863.
6. Borne A, Segonds P, Boulanger B. et al. // Opt. Mater. Express. 2012. V. 2. No. 12. P. 1797.
7. Chi, Y., Huang, J., Zhang, Z. et al. // Nature Commun. 2022. V.13. P. 1166.
8. Gravier F., Boulanger B. // Opt. Expr. 2006. V. 14. № 24. Art. No. 11715.
9. Ghosh G. // Opt. Commun. 1999. V. 163. No. 1–3. P. 95.

## Some features of the formation of quantum ghost imaging considering the effects of self-phase modulation, cross-phase modulation, and phase mismatch

A. V. Belinsky<sup>a, b</sup>, R. Singh<sup>a, \*</sup>

<sup>a</sup>Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

<sup>b</sup>Scientific and Practical Center for Specialized Medical Care for Children, Moscow, 119620 Russia

\*e-mail: ranjit.singh@mail.ru

The possibility of formation of quantum ghost images based on collinear interaction of four-wave mixing process, including self-phase modulation, cross-phase modulation and phase mismatch, is considered. It is shown that the correlation coefficient of paired correlated photons is greater than or equal to 2. It is found that the mean number of photons and the correlation coefficient weakly depend on the phase mismatch.

УДК 519.6

## РЕГРЕССИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ КРИВЫХ МЕТОДОМ ОРТОГОНАЛИЗОВАННЫХ ПОЛИНОМОВ

© 2022 г. О. И. Топор<sup>1, \*</sup>, А. А. Белов<sup>1, 2</sup>, Л. В. Бородачев<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Российский университет дружбы народов”, Москва, Россия

\*E-mail: topor.oi15@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Впервые проведено количественное сравнение двух способов регрессии: на основе ортогональных и неортогональных полиномов. В качестве теста построена модельная задача, имитирующая эксперименты по измерению скоростей химических реакций. Показаны преимущества метода ортогональных полиномов.

DOI: 10.31857/S036767652211031X

### ВВЕДЕНИЕ

Задача регрессии экспериментальных кривых является важной частью интерпретации натурального эксперимента. В общем случае задача ставится следующим образом [1]. Пусть имеется набор экспериментальных точек: аргументов  $x_i$  и значений функции  $u_i \pm \delta_i$ , где  $\delta_i$  — абсолютные погрешности измерений. Требуется приблизить зависимость  $u(x)$  некоторой априорно выбранной кривой  $\varphi(x)$ , содержащей свободные параметры  $a_j$ ,  $1 \leq j \leq n$ .

Чаще всего в качестве  $\varphi(x)$  используют обобщенный многочлен

$$\varphi(\vec{a}, x) = \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x). \quad (1)$$

Параметры  $a_j$  выбирают так, чтобы среднеквадратичное отклонение кривой (1) от экспериментальных точек было минимальным

$$F(\vec{a}) \equiv \sum_{i=1}^l \frac{(u_i - \varphi(x_i))^2}{\delta_i^2} \rightarrow \min. \quad (2)$$

Если экспериментальные погрешности велики, то задача является некорректной: один и тот же набор данных может достоверно описываться различными аппроксимантами  $\varphi(x)$ . При этом функция  $F(\vec{a})$  является многоэкстремальной. Так, экспериментальные точки, расположенные далеко от кривой  $\varphi(x)$ , слабо влияют на  $F(\vec{a})$  и на

выбор параметров  $a_j$ . Если одна из точек расположена близко к кривой  $\varphi(x)$ , а остальные точки сравнительно далеко, то  $F(\vec{a})$  имеет локальный минимум. Вблизи другой точки возникнет другой локальный минимум и т.д.

В этом случае из физического смысла выбирают специальный вид  $\varphi(x)$  с небольшим числом параметров  $a_j$  либо вводят регуляризацию с помощью стабилизатора Тихонова [2, 3].

В ряде случаев за счет выбора специальных переменных экспериментальную зависимость удается привести к полиномиальной, в частности — линейной. Например, зависимость скоростей  $K$  химических реакций от температуры  $T$  описывается законом Аррениуса [4]

$$K(T) = A \exp(-E/T), \quad (3)$$

где  $A$ ,  $E$  — подгоночные параметры. В переменных  $1/T - \lg K$  эта зависимость превращается в прямую.

Традиционно для регрессии таких данных используют аппроксимацию полиномами. В качестве базиса выбирают степени  $\varphi_j(x) = x^j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Этот базис является неортогональным: скалярные произведения

$$\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = \sum_{i=1}^l \frac{\varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i)}{\delta_i^2}, \quad (4)$$

отличны от нуля при  $j \neq k$ .

Коэффициенты  $a_j$  зависят от случайных величин  $\delta_i$  и поэтому сами являются случайными величинами. Для них хорошо известны классические оценки стандартного отклонения на основе распределения Стюдента [5]. Сами коэффициенты округляют в пределах этих стандартных отклонений. Однако из-за неортогональности базиса случайные величины  $a_j$  оказываются коррелированными. Поэтому их нельзя округлять независимо: это может вносить существенную погрешность в аппроксимирующую кривую [1].

Чтобы преодолеть эту трудность, в [1, 6] был предложен метод аппроксимации с помощью полиномов, ортогонализированных на множестве экспериментальных точек в смысле скалярного произведения (2). В указанных работах были получены оценки доверительных интервалов для коэффициентов регрессии и для аппроксимирующей кривой.

В данной работе проведено количественное сравнение двух способов регрессии: на основе ортогонализированных и неортогональных полиномов. В качестве теста построена модельная задача, имитирующая эксперименты по измерению скоростей химических реакций. Показаны преимущества метода ортогонализированных полиномов. Насколько нам известно, такие процедуры тестирования ранее не применялись.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ПО СКОРОСТЯМ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

В химических экспериментах непосредственно измеряют концентрации реагирующих веществ в зависимости от времени, и по этим профилям определяют скорости реакций  $K$  при фиксированной температуре  $T$  и давлении  $p$  (см., например, [4]).

Как правило, по каждой реакции опубликовано [7–10] много экспериментальных работ, причем диапазон условий в них частично перекрывается, частично различается. Из-за неизбежных погрешностей эксперимента результаты различных авторов отличаются друг от друга, причем нередко эти отличия значительны. Поэтому вся совокупность экспериментальных данных в координатах  $1/T - \lg K$  выглядит как размытая прямая. Например, для реакции  $C_2H_6 \rightarrow 2CH_3$  данные разных авторов для  $K$  при фиксированной температуре могут различаться до 20–30 раз (т.е. до 1.5 порядков) [11]. При этом полный диапазон изменения  $K$  составлял  $\sim 14$  порядков.

Такие данные, бесспорно, представительны для тестирования методов регрессии. Однако, чтобы провести адекватное количественное сравнение, необходимо иметь не только массив исходных экспериментальных данных, но и точную

кривую, которая в натурном эксперименте неизвестна.

## МОДЕЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

В данной работе в качестве “экспериментального” материала использовались модельные данные, которые генерировались по следующему правилу. Пусть

$$u = k_0x + b_0 \quad (5)$$

есть точная “экспериментальная” прямая. Она определена во всем рассматриваемом диапазоне аргумента  $x$ .

Пусть имеется  $M$  “лабораторий”. Для каждой лаборатории зададим диапазон аргумента  $[x_{min}, x_{max}]$ . В этом диапазоне зададим среднюю кривую данной лаборатории

$$u = kx + b. \quad (6)$$

Здесь  $k, b$  есть случайные величины со средними значениями соответственно  $k_0, b_0$  и стандартными отклонениями соответственно  $\delta k, \delta b$ . Разница средней кривой (5) и точной (4) есть систематическая погрешность данной лаборатории.

Далее возьмем  $I$  точек  $x_i$ , равномерно распределенных на отрезке  $[x_{min}, x_{max}]$ . Для каждой точки вычислим  $u_i$  по формуле (5) и добавим к этому значению гауссову случайную величину с нулевым средним и стандартным отклонением  $\delta u$ . Последняя величина есть случайная погрешность отдельного измерения. Полная погрешность каждого измерения определялась как разность экспериментальной ординаты и точной прямой  $\delta_i = u_i - u(x_i)$ .

Таким образом, совокупность точек и их погрешностей  $\{x_i, u_i, \delta_i\}$  для всех “лабораторий” являются исходными экспериментальными данными. Для каждой из них известны случайная, систематическая и полная погрешности. Уменьшение величин  $\delta k, \delta b, \delta u$  приводит к пропорциональному уменьшению указанных погрешностей.

Пример таких модельных данных приведен на рис. 1. Здесь  $M = 4, I = 160, k_0 = -1, b_0 = 2, \delta k = \delta b = \delta u = 0.3$ . Насколько нам известно, такие процедуры тестирования для задач регрессии экспериментальных данных ранее не применялись.

## ОРТОГОНАЛИЗОВАННЫЕ ПОЛИНОМЫ

Опишем построение полиномов, ортогонализированных на множестве экспериментальных точек [1, 6]. Определим средние величины

$$\bar{x}^q = \frac{1}{\Delta} \sum_{j=1}^J \delta_j^{-2} x_j^q, \quad \Delta = \sum_{j=1}^J \delta_j^2. \quad (7)$$

Пусть  $\varphi_j(x)$  есть многочлен степени  $j$ . Он имеет  $j$  нулей, которые обозначим через  $c_{j,k}$ , где  $1 \leq k \leq j$ . Представим этот многочлен в виде

$$\varphi_n(x) = \prod_{m=1}^n (x - c_{n,m}). \quad (8)$$

Очевидно,  $\varphi_0(x) = 1$ . Многочлен  $\varphi_1(x) = x - c_{1,1}$  выберем так, чтобы он был ортогонален  $\varphi_0(x)$  в смысле скалярного произведения (4):  $\langle \varphi_0, \varphi_1 \rangle = 0$ . Отсюда нетрудно найти  $c_{1,1} = \bar{x}$ . Многочлен  $\varphi_2(x) = (x - c_{2,1})(x - c_{2,2})$  определим так, чтобы он был ортогонален  $\varphi_0(x)$  и  $\varphi_1(x)$ . Это приводит к квадратному уравнению относительно корней  $c_{2,1}, c_{2,2}$

$$c^2 + Pc + Q = 0, \quad (9)$$

$$P = -\frac{\overline{x^3} - \overline{x^2}\bar{x}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}, \quad Q = \frac{\overline{x^3\bar{x}} - \overline{x^2}^2}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}.$$

Аналогично строятся кубический полином  $\varphi_3(x)$  и многочлены более высоких степеней.

Подставляя разложение по таким полиномам в (2) и проводя минимизацию, найдем коэффициенты  $a_j$

$$a_j = \frac{\langle u, \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}. \quad (10)$$

Чтобы найти доверительные интервалы коэффициентов, проварьировем в (12) экспериментальные данные  $u_i$  в пределах их стандартных уклонений  $\delta_i$ . Величина  $\delta(a_j)_i = (\partial a_j / \partial u_i) \delta_i$  есть возмущение коэффициента  $a_j$ , вызванное погрешностью  $i$ -го измерения. Просуммируем квадраты таких возмущений по всем значениям  $i$  и извлечем квадратный корень. Это даст стандартное уклонение коэффициента  $a_j$ . Оно равно

$$\delta a_j = \frac{1}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle^{1/2}}. \quad (11)$$

Таким образом, данный подход позволяет вычислить не только коэффициенты разложения, но и их доверительные интервалы. Поскольку функции  $\varphi_j$  ортогональны, коэффициенты разложения некоррелированы. Поэтому каждый коэффициент можно округлять независимо от других в пределах его доверительного интервала. Коэффициенты  $a_j$  можно считать недостоверными, если  $|a_j| < \delta a_j$ . Недостоверные коэффициенты необходимо отбрасывать и ряд (1) соответственно обрывать.

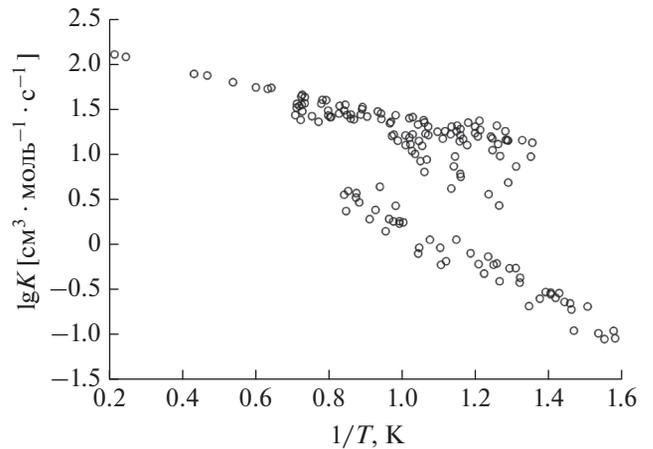


Рис. 1. Пример реализации модельных данных.

Аналогично выводится выражение доверительного коридора полученной аппроксимации

$$\delta\varphi(x) = \pm \left( \sum_{j=1}^n \delta a_j^2 \varphi_j^2(x) \right)^{1/2}, \quad (12)$$

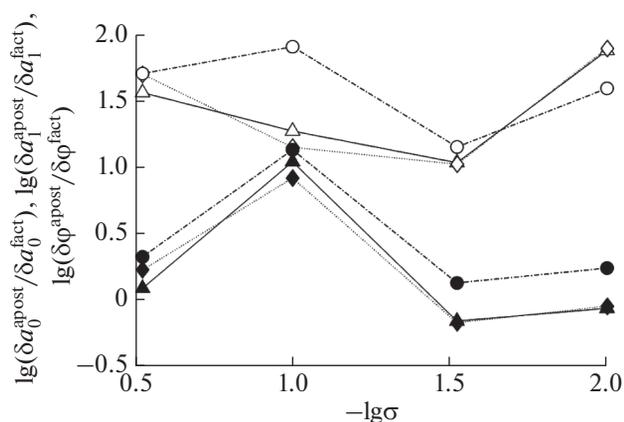
причем суммируются только члены с достоверными коэффициентами.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы провели серию расчетов для описанной выше модельной задачи с различными значениями параметров  $\delta k, \delta b, \delta u$ . Для простоты в каждом расчете эти величины были одинаковыми  $\delta k = \delta b = \delta u \equiv \sigma$ . В каждом расчете мы строили аппроксимацию двумя способами: а) по неортогональному базису  $\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x$  и б) по ортогонализованному базису  $\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x - \bar{x}$ . Эти аппроксимации определялись для всего рассматриваемого диапазона аргумента  $x$ .

Для каждого способа вычислялись оценки доверительных интервалов для коэффициентов  $\delta a_0, \delta a_1$  и аппроксимирующей кривой  $\delta\varphi(x)$ . Эти оценки можно трактовать как апостериорные оценки погрешности. Вычислялось также отличие  $k_0$  и  $b_0$  от соответствующих коэффициентов аппроксимации и точной кривой  $u(x)$  от аппроксиманты  $\varphi(x)$ . Эти разности можно рассматривать как фактическую погрешность относительно точного ответа.

На рис. 2 показано отношение апостериорных оценок к фактической точности для обоих коэффициентов и среднеквадратичной нормы апостериорной оценки к среднеквадратичной норме фактической точности для аппроксимирующей кривой. Здесь выбраны  $I = 160, M = 4$ . По горизонтали отложен параметр  $\sigma$ . Чтобы охватить широкий диапазон значений  $\sigma$ , график построен в двойном логарифмическом масштабе.



**Рис. 2.** Отношение оценок доверительных интервалов к фактическим погрешностям.  $\blacktriangle$  –  $a_0$ ,  $\blacklozenge$  –  $a_1$ ,  $\circ$  –  $\|\delta\phi\|$ .

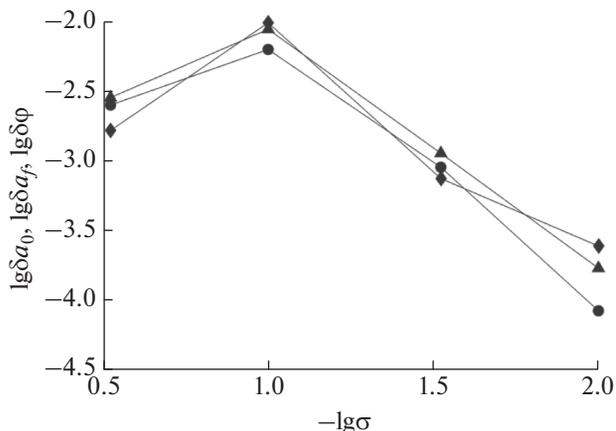
Видно, что для обоих способов аппроксимации апостериорная оценка является завышенной. При этом апостериорная оценка для метода ортогонализированных полиномов в 10 и более раз точнее, чем классические оценки для неортогональных полиномов. Это показывает, что регрессия по ортогонализированным полиномам является более надежной, чем по неортогональным.

На рис. 3 показаны апостериорные оценки погрешности  $\delta a_0$ ,  $\delta a_1$ ,  $\delta\phi$  в зависимости от  $\sigma$  для ортогонализированных полиномов. В качестве примера выбраны  $I = 160$ ,  $M = 4$ . Видно, что при уменьшении  $\sigma$  указанные погрешности уменьшаются пропорционально  $\sigma$ . Таким образом, имеет место сходимость аппроксиманты и ее коэффициентов к точной кривой и точным значениям коэффициентов соответственно. Проводились расчеты и с другими значениями  $I$  и  $M$ , для них результаты оказались аналогичными.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В вычислительной математике алгоритмы тестируются на задачах с известным точным решением. Погрешность расчета непосредственно находят как разность численного и точного решений. Далее исследуют поведение погрешности при уменьшении шага разностной сетки, при внесении возмущений в параметры задачи и т.д.

В данной работе построена аналогичная процедура количественного исследования для методов регрессии экспериментальных данных. Впервые проведено количественное сравнение аппроксимации ортогонализированными и неортогональными полиномами на модельных данных, имитирующих эксперименты по измерению скоростей химических реакций.



**Рис. 3.** Сходимость коэффициентов аппроксимации и аппроксимирующей кривой при уменьшении экспериментальных погрешностей. Обозначения соответствуют рис. 2.

Показано, что оценки доверительных интервалов в методе ортогонализированных полиномов существенно (в 10 и более раз) точнее таковых для неортогональных полиномов.

Показано, что при уменьшении погрешности экспериментальных точек коэффициенты и аппроксиманта в методе ортогонализированных полиномов сходятся к точному ответу.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ (проект № МК-3630.2021.1.1).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Днестровская Е.Ю., Калиткин Н.Н. Регрессия экспериментальных кривых. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 1987. № 181.
2. Белов А.А., Калиткин Н.Н. // ДАН. 2016. Т. 470. № 3. С. 266.
3. Белов А.А., Калиткин Н.Н. // ЖВМиМФ. 2017. Т. 57. № 11. С. 7.
4. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных химических реакций. М.: Наука, 1974
5. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. М.: Наука, 1985.
6. Белов А.А., Калиткин Н.Н. // ЖВМиМФ. 2020. Т. 60. № 7. С. 105.
7. <http://kinetics.nist.gov/kinetics>.
8. Burkholder J.B., Sander S.P., Abbatt J.P.D. et al. Chemical kinetics and photochemical data for use in atmospheric studies. Evaluation No. 18. JPL Publication 15-10. Pasadena: Jet Propulsion Laboratory, 2015.
9. Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M. et al. // GRI-Mech 3.0. Berkeley University of California, Gas Research Institute, 2002.
10. Baulch D.L. et al. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. No. 3. P. 757.

11. *Топор О.И., Белов А.А., Федоров И.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 2. С. 261; Топор О.И., Белов А.А., Федоров И.А. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 2. P. 196.*

## **Regression of experimental data via the orthogonalized polynomial method**

**О. И. Топор<sup>a, \*</sup>, А. А. Белов<sup>a, b</sup>, Л. В. Бородачев<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

<sup>b</sup>*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, 117198 Russia*

*\*e-mail: topor.oi15@physics.msu.ru*

The problem of experimental data regression is of large practical importance. In the present work, we perform quantitative comparison of two regression methods: the orthogonalized polynomials and non-orthogonal ones. As a test, we construct a model problem imitating experimental data on chemical reactions. The advantages of the orthogonalized polynomial method are shown.

УДК 621.315.592:621.373

## МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ МОЩНОГО ИК ДИОДНОГО ЛАЗЕРА ПО ТОКОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЕГО СПЕКТРАЛЬНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ

© 2022 г. В. В. Близинок<sup>1</sup>, \*, В. А. Паршин<sup>1</sup>, А. Г. Ржанов<sup>2</sup>, О. И. Семенова<sup>1</sup>,  
А. И. Смирнов<sup>1</sup>, А. Е. Тарасов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Национальный исследовательский университет “МЭИ”, Москва, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

\*E-mail: 40595141@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Предложена методика определения качества гетероструктуры серийного мощного лазерного диода с широким контактом по токовой зависимости количества каналов генерации излучения на начальной стадии эксплуатации. Показано, что распад излучения на отдельные нефазированные каналы генерации связан с изменением длины когерентности излучения.

DOI: 10.31857/S0367676522110060

### ВВЕДЕНИЕ

Мощные полупроводниковые лазерные диоды (ЛД) с выводом излучения через оптическое волокно широко используются в разных областях науки, техники и медицины. К таким лазерам принято относить ЛД с мощностью непрерывной генерации от сотен милливатт до нескольких ватт, а также ЛД, с полосы электрического контакта которых шириной 1 мкм снимается излучение мощностью от 10 мВт [1–5].

Современные методики тестирования гетероструктуры мощных ЛД основаны на анализе временной зависимости медленно изменяющихся параметров лазерного излучения: мощности, диаграммы направленности и степени линейной поляризации (контраста) [6–8]. При нормальном режиме работы ЛД первые признаки деградации их гетероструктуры проявляются не ранее, чем через две–три тысячи часов наработки. Поэтому в настоящее время для тестирования гетероструктуры ЛД проводятся испытания по ускоренному старению выборки приборов из партии лазеров при повышенных значениях температуры окружающей среды и тока накачки. Однако в ходе ускоренного старения ЛД они практически полностью вырабатывают свой ресурс, что не позволяет решить главную проблему, остро стоящую при серийном производстве лазеров – проблему определения качества конкретного отдельно взя-

того активного элемента ЛД из партии приборов без расходования значительной части ресурса лазера [9–14].

В данной работе предлагается методика определения состояния гетероструктуры отдельно взятого экземпляра ЛД практически без расходования его ресурса. В ее основу положена разработанная ранее методика тестирования гетероструктуры одномодовых лазерных диодов по токовой зависимости их спектральной характеристики на начальном этапе эксплуатации [13].

### МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Мощные многомодовые ЛД с широким контактом и квантовой ямой в отличие от одномодовых ЛД, характеризуются сложной формой спектральной характеристики  $f_{\text{экс}}(\lambda)$  (рис. 1). Поэтому анализ спектра излучения мощных ЛД  $f_{\text{экс}}(\lambda)$  проводится путем разложения его на  $N$  составляющих ( $N$  каналов генерации) с расчетными профилями спектральных линий  $f_{\text{расч},i} \left( \frac{\lambda - \lambda_{0i}}{\Delta\lambda_i} \right)$ , характерными для излучения одномодового лазера с центральной длиной волны  $\lambda_{0i}$  [13–15]:

$$f_{\text{экс}}(\lambda) = \sum_{i=1}^N f_{\text{расч},i} \left( \frac{\lambda - \lambda_{0i}}{\Delta\lambda_i} \right), \quad (1)$$

где  $\Delta\lambda_i$  – ширина спектра длин волн излучения  $i$ -го канала генерации.

Полученные в результате разложения расчетные профили спектральных линий  $f_{\text{расч},i}(\lambda)$  во всех каналах генерации в диапазонах  $\Delta\lambda_i$  отличаются от гауссовых кривых  $f_{G,i}\left(\frac{\lambda - \lambda_{0i}}{\Delta\lambda_i}\right)$ , характерных для излучения одномодового лазера с центральной длиной волны  $\lambda_{0i}$  [15].

Физическое обоснование такого подхода к анализу спектральной характеристики  $f_{\text{эксп}}(\lambda)$  состоит в том, что процесс разделения излучения мощных ЛД на  $N$  независимых каналов генерации наблюдался экспериментально. Разделение излучения на  $N$  независимых каналов генерации можно объяснить следующим образом [16–19]. Для того чтобы поле излучения в определенной части волновода, например, на краю активной области, могло быть связано по фазе с полем на другом краю этой области, волновому лучу необходимо несколько раз обойти резонатор. Если длина когерентности меньше оптического пути при таком обходе, то излучение разделяется на нефазированные каналы генерации. Из этого следует, что необходимым условием разделения излучения является, в первую очередь, малая (примерно до 5 см) длина когерентности ЛД [6, 15, 20], а также превышение порога генерации по всей ширине контакта  $W$  и в пределах всего спектрального контура усиления квантовой ямы. Кроме того, на формирование канала влияет нелинейный динамический эффект пространственной самофокусировки за счет зависимости рефракции от концентрации неравновесных носителей и соответствующей трансформации латерального профиля инверсии (и показателя преломления). В процессе работы лазера происходит уменьшение длины когерентности излучения. Одним из механизмов, влияющих на величину длины когерентности излучения ЛД, является диссипация излучения внутри лазерного резонатора. Увеличение потерь в резонаторе вызвано возрастанием дефектности гетероструктуры, то есть ухудшением ее качества. С другой стороны число каналов генерации однозначно связано с когерентностью. Таким образом, в качестве критерия состояния гетероструктуры конкретного лазера целесообразно использовать наблюдаемое число каналов генерации, о котором можно судить по числу основных линий в измеренном спектре излучения ЛД.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ МОЩНЫХ ЛД KLM-N980-120-5

В настоящей работе анализ функции  $f_{\text{эксп}}(\lambda)$  был проведен для партии из пяти лазерных диодов KLM-N980-120-5 с порядковыми номерами с 121 по 125. У всех ЛД из этой партии ширина кон-

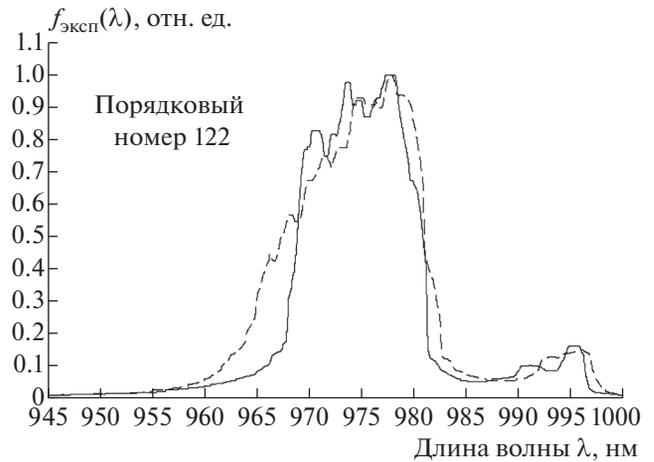


Рис. 1. Спектральные характеристики мощных ЛД модели KLM-N980-120-5 на начальном этапе эксплуатации при разных токах накачки – лазер с порядковым номером 122. Сплошная линия – ток  $I = 244$  мА, пунктирная линия –  $I = 278$  мА.

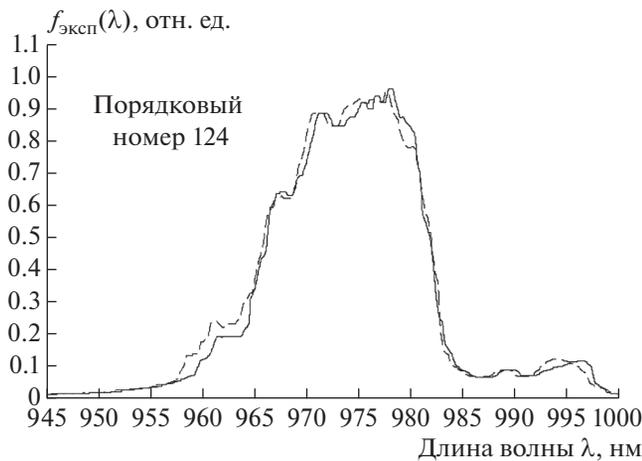
такта была равна  $W = 100$  мкм, а штатная мощность излучения –  $P = 120$  мВт.

На момент начала тестирования лазеров время наработки всех приборов не превышало 20 ч. В процессе тестирования ЛД наблюдалось существенное отличие формы спектральной линии ЛД  $f_{\text{эксп}}(\lambda)$  для приборов с разными порядковыми номерами. Анализ спектров излучения пяти ЛД по методике, изложенной в [13], показал, что в спектре излучения лазеров с порядковыми номерами 121 и 124 можно выделить три канала генерации, а в спектре излучения лазеров с порядковыми номерами 122, 123 и 125 – четыре канала.

Как было указано выше, такого рода различия спектров излучения ЛД мы связываем с вариациями от прибора к прибору коэффициента нелинейной рефракции полупроводника квантовой ямы, либо показателя потерь излучения в лазерном резонаторе, что влияет на длину когерентности излучения в каналах генерации ЛД. Наиболее вероятным механизмом уменьшения со временем длины когерентности следует считать связь между потерями излучения и добротностью лазерного резонатора, которая зависит как от коэффициентов отражения зеркал, так и от внутренних потерь в резонаторе.

Проведенные нами расчеты показали, что меньшее число каналов генерации  $N_{\text{кан}}$  соответствует большей длине когерентности излучения ЛД  $L_{\text{ког}}$ , и, наоборот, увеличение числа каналов означает, что длина когерентности излучения в каналах уменьшается [16, 17]:

$$N_{\text{кан}} = W \sqrt{\frac{2\pi n}{\lambda_0 L_{\text{ког}}}}, \quad (2)$$



**Рис. 2.** Спектральные характеристики мощных ЛД модели KLM-H980-120-5 на начальном этапе эксплуатации при разных токах накачки — лазер с порядковым номером 124. Сплошная линия — ток  $I = 259$  мА, пунктирная линия —  $I = 284$  мА.

где  $\lambda_0$  — средняя длина волны излучения ЛД в вакууме,  $n$  — эффективный показатель преломления фундаментальной моды.

При значениях  $n = 3.56$ ,  $W = 100$  мкм и  $\lambda_0 = 975$  нм, согласно выражению (2), для ЛД с порядковыми номерами 121 и 124 длина когерентности получается равной  $L_{\text{ког}} = 2.56$  см. Для лазеров с порядковыми номерами 122, 123 и 125 —  $L_{\text{ког}} = 1.43$  см. Таким образом, результаты расчетов указывают на низкое качество гетероструктуры ЛД с порядковыми номерами 122, 123 и 125 [13].

Ранее нами было экспериментально установлено, что с ростом тока накачки спектральная характеристика мощных ЛД  $f_{\text{эксп}}(\lambda)$  трансформируется, что приводит к изменению числа и амплитуды спектральных составляющих излучения [14, 16–19]. Такого рода трансформация спектра оказалась характерной для лазеров с порядковыми номерами 122, 123 и 125. Напротив, для лазеров с порядковыми номерами 121 и 124 наблюдается практически полное отсутствие токовой зависимости спектра излучения.

В качестве иллюстрации к сказанному на рис. 1 и 2 приведены кривые  $f_{\text{эксп}}(\lambda)$  для лазеров с порядковыми номерами 122 и 124 при разных токах накачки. Выбор этих приборов обусловлен тем, что среди всех пяти лазеров токовая зависимость спектральной характеристики ЛД с порядковым номером 122 (рис. 1) проявляется сильнее всего, а в ЛД с порядковым номером 124 (рис. 2) — практически отсутствует.

Спектры излучения всей партии ЛД измерялись после испытаний по ускоренному старению при температуре  $45^\circ\text{C}$  в течение 90 ч. Экспериментально установлено, что после таких испыта-

ний вариация спектра излучения лазеров с номерами 121 и 124 при разных токах накачки не превышает погрешности измерений, а значит, число каналов генерации остается постоянным в течение долгого времени и процесс деградации гетероструктуры протекает медленно. В спектрах излучения лазеров 122 и 123 после завершения процесса ускоренного старения отмечено формирование четвертых и пятых каналов генерации, что указывает на изначально низкое качество гетероструктуры этих лазеров.

Таким образом, нами показано, что в качестве параметра, по которому можно определить состояние гетероструктуры ЛД, наряду с временной зависимостью количества каналов генерации излучения можно использовать токовую зависимость спектра излучения в первые часы эксплуатации ЛД, что существенно упрощает и удешевляет диагностику ЛД на предмет их долговечности.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами было показано, что предложенная методика определения качества гетероструктуры конкретного серийного мощного диодного лазера по токовой зависимости количества нефазированных каналов генерации излучения применима для быстрой ресурсосберегающей диагностики излучения диодных лазеров. Диагностика возможна на начальной стадии эксплуатации лазеров. Показано, что распад излучения на отдельные каналы генерации в случае увеличения количества этих каналов указывает на ухудшение состояния гетероструктуры.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жуков А.Е. Физика и технология полупроводниковых наноструктур. СПб.: Элмор, 2007. 304 с.
2. Богатов А.П., Дракин А.Е., Стратонников А.А., Конаев В.П. // Квант. электрон. 2000. Т. 30. № 5. С. 401; Bogatov A.P., Drakin A.E., Strattonnikov A.A., Konayev V.P. // Quantum Electron. 2000. V. 30. No. 5. P. 401.
3. Slipchenko S.O., Bondarev A.D., Vinokurov D.A. и др. // ФТП. 2009. Т. 43. № 1. С. 119; Slipchenko S.O., Bondarev A.D., Vinokurov D.A. et al. // Semiconductors. 2009. V. 43. No. 1. P. 112.
4. Slipchenko S.O., Vinokurov D.A., Pikhin N.A. и др. // ФТП. 2004. Т. 38. № 12. С. 1477; Slipchenko S.O., Vinokurov D.A., Pikhin N.A. et al. // Semiconductors. 2004. V. 38. No. 12. P. 1430.
5. Лютецкий А.В., Пухтин Н.А., Фетисова Н.В. и др. // ФТП. 2009. Т. 43. № 12. С. 1646; Lyutetskiy A.V., Pikhin N.A., Fetisova N.V. et al. // Semiconductors. 2009. V. 43. No. 12, P. 1602.
6. Кейс Л., Паниш М. Лазеры на гетероструктурах. Т. 2. М.: Мир, 1981. 299 с.
7. Мифтахутдинов Д.Р., Богатов А.П., Дракин А.Е. // Квант. электрон. 2010. Т. 40. № 7. С. 583; Miftakhut-

- dinov D.R., Bogatov A.P., Drakin A.E.* // Quantum Electron. 2010. V. 40. No. 7. P. 583.
8. *Близнюк В.В., Костина О.О., Крайнов И.В. и др.* // Сб. докл. XXII межд. конф. "Лазеры. Измерения. Информатика—2012" (Санкт-Петербург, 2012). С. 224.
  9. *Сидоров В.Г., Шмидт Н.П.* // Науч.-техн. ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки. 2013. № 2(170). С. 71.
  10. *Близнюк В.В., Брит М.А., Гадаев И.С. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. Т. 79. № 12. С. 1666; *Bliznyuk V.V., Brit M.A., Gadaev I.S. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2015. V. 79. No. 12. P. 1458.
  11. *Близнюк В.В., Коваль О.И., Паршин В.А. и др.* // Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та. 2018. № 6. С. 1860501.
  12. *Близнюк В.В., Коваль О.И., Паршин В.А. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 11. С. 1504; *Bliznyuk V.V., Koval O.I., Parshin V.A. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 11. P. 1367.
  13. *Близнюк В.В., Коваль О.И., Паршин В.А. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 2. С. 225; *Bliznyuk V.V., Koval O.I., Parshin V.A. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 2. P. 173.
  14. *Близнюк В.В., Паршин В.А., Ржанов А.Г., Тарасов А.Е.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 2. С. 255; *Bliznyuk V.V., Parshin V.A., Rzhanov A.G., Tarasov A.E.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 2. P. 184.
  15. *Адамов А.А., Баранов М.С., Храмов В.Н.* // Науч.-тех. Вестн. ИТМО. 2018. Т. 18. № 3. С. 356.
  16. *Ржанов А.Г.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 2. С. 250; *Rzhanov A.G.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 2. P. 180.
  17. *Ржанов А.Г.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 2. С. 220; *Rzhanov A.G.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 2. P. 169.
  18. *Rzhanov A.G.* // EPJ Web Conf. 2019. V. 220. Art. No. 02013.
  19. *Koval O.I., Rzhanov A.G., Solovyev G.A.* // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21. No. 4. P. 287.
  20. <http://www.holography.ru/files/holmich.htm#top>.

## A method for determining the heterostructure condition of a high-power IR diode laser based on the current dependence of its spectral characteristics

V. V. Bliznyuk<sup>a, \*</sup>, V. A. Parshin<sup>a</sup>, A. G. Rzhanov<sup>a</sup>, O. I. Semenova<sup>a</sup>, A. I. Smirnov<sup>a</sup>, A. E. Tarasov<sup>a</sup>

<sup>a</sup>National Research University Moscow Power Engineering Institute, Moscow, Moscow, 111250 Russia

<sup>b</sup>Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

\*e-mail: 40595141@mail.ru

A method is proposed for determining the quality of the heterostructure of a serial high-power laser diode with a wide contact based on the current dependence of the number of radiation channels at the initial stage of operation. It is shown that the decomposition of radiation into separate non-phased generation channels is associated with a change in the coherence length of the radiation.

УДК 535.8

## ФРАКТАЛЬНЫЕ СВЕТОВЫЕ СТРУКТУРЫ ДЛЯ СТИМУЛЯЦИОННОЙ ТЕРАПИИ В ОФТАЛЬМОЛОГИИ

© 2022 г. О. М. Вохник<sup>1, \*</sup>, П. В. Короленко<sup>1, 2</sup>, Р. Т. Кубанов<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: vokhnik@rambler.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Рассмотрены возможности применения результатов исследований в области когерентной оптики для усовершенствования методик лечения глазных патологий с использованием воздействия фрактальных световых структур на органы зрения. Разработанные алгоритмы управления световыми потоками позволяют осуществлять многопараметрическую оптимизацию лечебных процедур.

DOI: 10.31857/S0367676522110321

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в медицине для лечения различных патологий активно применяются технологии светостимуляционной терапии [1]. В офтальмологии они включают в себя светостимуляцию сложноструктурированными оптическими полями, в том числе спекловыми. В работах [2, 3] воздействие спеклового лазерного излучения с различными длинами волн обеспечило увеличение положительных результатов лечения по сравнению с традиционными методами, не использующими лазерную стимуляцию. Дальнейшим развитием светотерапии явилось использование в динамическом режиме фрактальных структур оптического излучения [4]. При этом эффективность воздействия световых потоков на сенсорную систему зрительного анализатора в значительной степени зависит от возможности целенаправленного изменения в достаточно больших пределах спектральных, статистических, пространственно-временных и скейлинговых характеристик излучения.

В настоящее время в процессе изучения фрактальных световых структур получен ряд важных результатов, обладающих как общенаучной, так и практической значимостью. Использование этих результатов в офтальмологии является актуальной задачей.

Цель данной работы состоит в применении результатов исследований в области когерентной оптики для усовершенствования методик лечения глазных патологий с использованием воздействия фрактальных световых структур на органы

зрения. В ней сделан акцент на разработку специализированных алгоритмов управления световыми потоками, которые позволят осуществлять многопараметрическую оптимизацию лечебных процедур; в частности, находить нужное для лечения определенной патологии сочетание пространственных и временных фрактальных характеристик используемого излучения.

Весьма эффективным с точки зрения применения в офтальмологии может оказаться метод генерации фрактальных световых структур, который основан на использовании в качестве математических алгоритмов модифицированных функций Вейерштрасса [5, 6]. Построенные с помощью этих функций распределения интенсивности и фазы световых пучков могут непосредственно наблюдаться на экране монитора, с их помощью можно программным образом влиять на профиль пропускания пространственных модуляторов света или фрактальных фильтров. Функции Вейерштрасса включают набор параметров, позволяющих в широких пределах варьировать фрактальную размерность распределений, коэффициент скейлинга, размеры рабочего поля и (при стохастизации распределений) размеры спеклов, их контрастность, а также вероятность обнаружения спеклов с определенной интенсивностью. Простые программные средства дают возможность менять цветовую палитру генерируемых структур, задавать закон вариации интенсивности и различных характеристик от времени.

СХЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Используемая для моделирования фрактальных световых полей функция Вейерштрасса, имела вид

$$W_{x,y,t} = \sigma \left[ \sum_{\nu=0}^V \sum_{n=0}^N \left[ b^{(D-2)n} \times \cos \left[ 2\pi s b^n \left[ \left( x - \frac{K+1}{2} - \eta(t) \right) \cos(\alpha\nu) + \left( y - \frac{K+1}{2} - \mu(t) \right) \sin(\alpha\nu) \right] + \psi_n k_1 + \psi_\nu k_2 \right] \right] - A(t). \quad (1)$$

Величина  $W$  определяет амплитуду поля, дискретные поперечные координаты  $0 \leq x, y \leq K - 1$  ( $K$  – целое число),  $D$  характеризует фрактальную размерность,  $s$  – масштабирующий параметр,  $b$  – коэффициент скейлинга;  $\sigma$  – нормировочный множитель;  $n$  – номер гармоники;  $\nu$  – азимутальный индекс;  $\psi_n, \nu$  – фазы, зависящие от  $n$  и  $\nu$  (считались в одних случаях детерминированными, в других – случайными);  $t$  – дискретное время, от которого зависели величины  $\eta, \mu, A$ . Первые из них  $\eta(t)$  и  $\mu(t)$  влияли на положение “центров тяжести” изображений световых пучков, третья –  $A(t)$  – определяла амплитуду дополнительной плоской волны. Для того, чтобы зависимость указанных величин от времени носила фрактальный характер, для них использовались выражения

$$\eta(t) = \zeta Y(t), \quad \mu(t) = \zeta Y(t), \quad A(t) = \xi Y(t). \quad (2)$$

Здесь  $\zeta, \xi$  – параметры,  $Y(t)$  – фрактальная зависимость, задаваемая одномерной функцией Вейерштрасса

$$Y(t) = \sum_{n=0}^N b^{(D-2)n} \sin(2\pi s b^n t + \psi_n). \quad (3)$$

График этой функции, построенный для параметров  $D = 1.3, b = 2, s = 0.04, N = 6, \psi_n = \pi/2n, 0 \leq t \leq K - 1$ , показан на рис. 1. Форма задания пространственно-временной структуры излучения на основе выражения (1) в лечебной практике может быть реализована путем создания серии анимаций, предъявляемых пациентам с экрана компьютера.

АНАЛИЗ ГЕНЕРИРУЕМЫХ СТРУКТУР

В ходе анализа структуры световых полей на основе функции (1) было установлено, что поперечное распределение интенсивности  $I_{x,y,t} = |W_{x,y,t}|^2$  в формируемых изображениях существенно зависит от значения и соотношения фаз  $\psi_n$  и  $\psi_\nu$ . При детерминированном задании изменения фаз структура изображений имела регулярный характер, претерпевающий циклические изменения во времени. В качестве примера на рис. 2 приведены

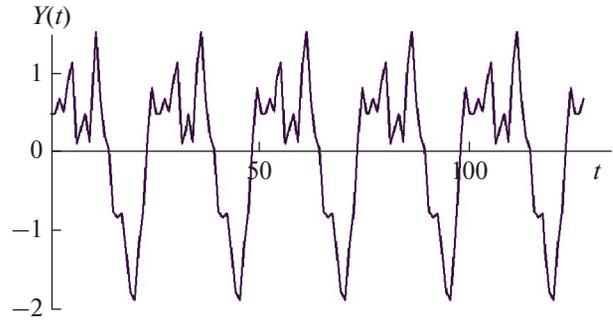


Рис. 1. График вспомогательной функции  $Y(t)$ .

некоторые кадры из анимаций временных изменений. При их создании использовались те же параметры, что и построения функции  $Y(t)$ . При этом считалось, что  $\zeta = 0, \xi = 5, k_1 = 1, k_2 = 0$ .

Видно, что с течением времени скейлинговая структура излучения остается неизменной. Присутствующие в изображениях концентрические окружности имеют радиусы, отличающиеся в два раза. Это соответствует задаваемому коэффициенту скейлинга  $b = 2$ .

Используя зависимости  $\eta(t) = \zeta Y(t)$  или  $\mu(t) = \zeta Y(t)$  можно было обеспечить фрактальные циклические смещения изображений в горизонтальном и вертикальном направлениях. Такие смещения могли сочетаться со структурными изменениями, обусловленные изменением амплитуды дополнительной волны  $A(t)$ .

Качественные изменения в распределении интенсивности изображений происходили при рандомизации значений фаз  $\psi_n$  и  $\psi_\nu$ . Использовалось соотношение

$$\Psi_{n,\nu} = \frac{2\pi r n d(n, \nu)}{(n, \nu + 1)} \quad (4)$$

при значениях  $k_1 = k_2 = 1$ . На рис. 3а показано спеклоподобное распределение интенсивности при рандомизированных фазах. Важно отметить, что, несмотря на случайный хаотический характер распределения интенсивности, определенный методом быстрого преобразования Фурье пространственный спектр имел регулярный фрактальный вид (рис. 3б). Как и в структуре регулярных изображений (рис. 2), в его графическом представлении наблюдается система окружностей, размеры которых соответствовали коэффициенту скейлинга  $b = 2$ . Пространственный спектр, как показали дополнительные расчеты, весьма устойчив к влиянию вносимых в изначальные поля амплитудно-фазовых искажений. Применительно к задачам офтальмологии это означает, что помутнение прозрачных сред глаза не будет серьезным образом его исказить.

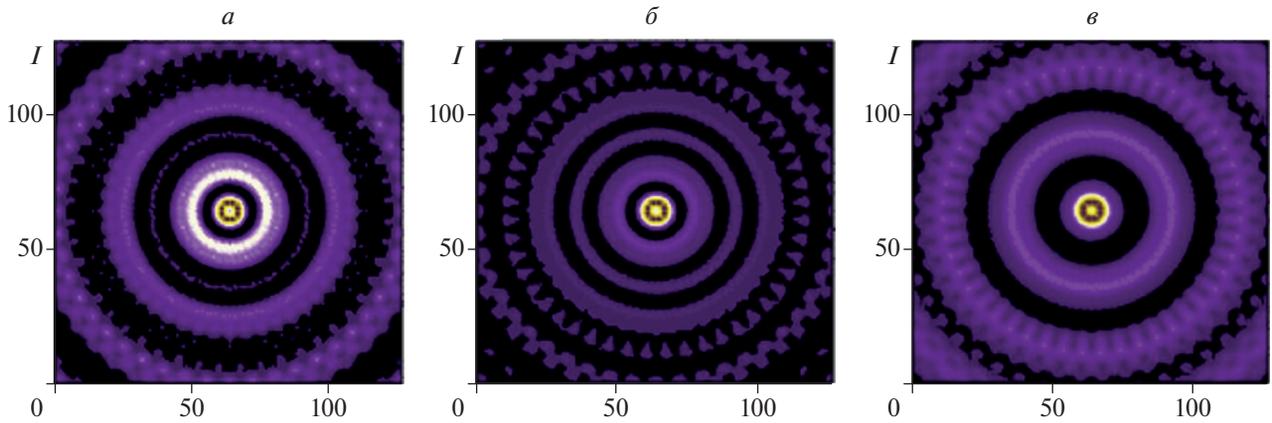


Рис. 2. Динамика изменения структуры фрактальных изображений.  $t = 0$  (а), 9 (б), 18 (в). По осям отложено количество значащих точек.

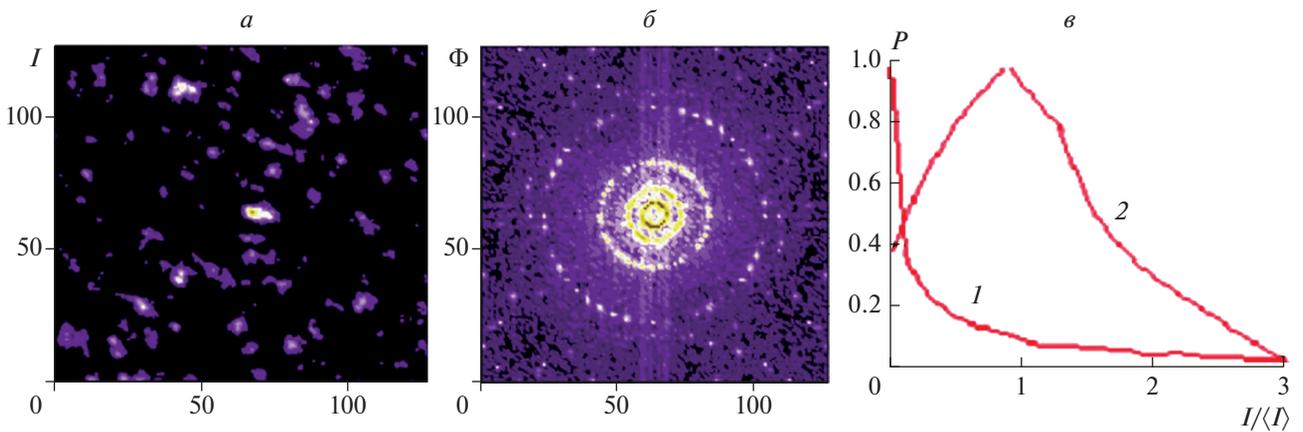


Рис. 3. Характеристики спеклоподобного поля. Распределение интенсивности (а); структура пространственного спектра ( $\xi = 0$ ) (б); по осям отложены нормированные пространственные частоты; графики плотности вероятности для  $\xi = 0$  (1), 5 (2) (в).

Используемый алгоритм позволял вносить целенаправленные изменения в распределения плотности вероятности обнаружения определенной интенсивности (рис. 3в). Экспоненциальное снижение плотности вероятности (кривая 1), свойственное развитым спеклам в отсутствие дополнительной волны, не всегда удобно для офтальмологических процедур, поскольку нулевая интенсивность оказывается наиболее вероятной. Статистику распределения интенсивности можно существенно скорректировать, путем наложения на спекловое поле плоской однородной волны (кривая 2). Этот прием дает возможность повысить наиболее вероятное значение интенсивности.

### ПСИХОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВОЗДЕЙСТВИЯ ФРАКТАЛЬНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Наконец, следует сказать о том, что анализ особенностей структуры фракталов позволяет

дать объяснение наблюдаемому в результате воздействия фрактального излучения на органы зрения улучшению наряду с лечебными показателями психологического и эмоционального настроения пациентов. Такого рода комплексный по своему характеру спекл-стимулирующий эффект заслуживает внимания и, видимо, нуждается в дополнительной проверке. При его интерпретации и использовании следует учитывать опыт, накопленный в так называемой арт-терапии [5], когда для улучшения психического состояния пациентов, им показывают изображения фрактальных объектов. Ключ к объяснению такого способа лечения можно найти, если учесть особенности пространственного спектра фрактальных структур. Как при регулярных, так и при стохастических распределениях интенсивности они в силу скейлинга на разных масштабах подчиняются одной и той же закономерности, то есть обладают самоподобием. Если исходить из того, что при обработке и хранении оптической информации, по-

ступающей в мозг, она препарируется в виде пространственных спектров (фурье-образов) рассматриваемых объектов, то их фиксация в силу самоподобия происходит очень быстро и с высокой степенью эффективности. Повышенная интенсивность процессов в коре головного мозга, развивающихся при воздействии фрактального излучения, подтверждается повышением биоэлектрической активности мозга [1, 7]. Указанные процессы формируют у человека чувство комфорта и удовольствия, улучшающее его психическое состояние. Есть основания полагать, что ускорение процессов обработки оптической информации в коре головного мозга будет эффективным средством лечения некоторых глазных патологий (например, амблиопии), не связанных с каким-либо заболеванием глаз, а обусловленных изменениями в области зрительной коры головного мозга.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ литературных данных показывает, что в офтальмологии сложилось направление, которое использует при терапии глазных болезней воздействие фрактального излучения на органы зрения. Оно нуждается в дополнительном методическом обеспечении, позволяющем связать наблюдаемые положительные результаты лечения с оптико-физическими свойствами фрактальных световых структур. Предложенные алгоритмы генерации фрактальных полей, использующие свойства двумерных функций Вейерштрасса, позволяют существенно расширить диапазоны вариации параметров излучения и обеспечить возможность его многопараметрической оптимизации применительно к улучшению определенных медицинских показателей. Проведенное моделирование фрактальных световых полей показало, что алгоритмы позволяют генерировать как регулярные, так и

стохастические структуры при одном и том же распределении пространственных спектральных компонент. При проведении лечебных процедур могут найти применение опции, позволяющие изменять распределение вероятностей формирования спеклов с определенной интенсивностью и одновременно реализовывать пространственно-временную фрактальность.

Проведенное исследование дает объяснение наблюдаемому в результате воздействия фрактального излучения на органы зрения улучшению наряду с лечебными показателями психологического и эмоционального настроения пациентов. Несложный дружественный интерфейс программы построения фрактальных изображений, реализованный на персональном компьютере, может быть использован широким кругом практикующих офтальмологов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зуева М.В. // Физиол. человека. 2018. Т. 44. № 3. С. 62; Zueva M.V. // Human Physiology. 2018. V. 44. No. 3. P. 289.
2. Кащенко Т.П., Корнюшина Т.А., Базарбаева А.Р. и др. // Вестн. офтальмологии. 2014. Т. 130. № 5. С. 48.
3. Матросова Ю.В., Фабрикантов О.Л. // Офтальмология. 2018. Т. 15(2S). С. 52.
4. Зуева М.В., Ковалевская М.А., Донкарева О.В. и др. // Офтальмология. 2019. Т. 16. № 3. С. 317.
5. Зотов А.М., Короленко П.В., Мишин А.Ю., Рыжикова Ю.В. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физ. и астрон. 2019. № 6. С. 52; Zotov A.M., Korolenko P.V., Mishin A.Y., Ryzhikova Y.V. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2019. V. 74. No. 6. P. 625.
6. Короленко П.В., Кубанов Р.Т., Мишин А.Ю. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 1. С. 68; Korolenko P.V., Kubanov R.T., Mishin A.Y. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 1. P. 53.
7. Прокопенко В.Т., Матвеев Н.В., Олейник Р.В. и др. // Светотехника. 2021. № 4. С. 50.

## Fractal light structures for stimulation therapy in ophthalmology

O. M. Vokhnik<sup>a, \*</sup>, P. V. Korolenko<sup>a, b</sup>, R. T. Kubanov<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

<sup>b</sup>Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

\*e-mail: vokhnik@rambler.ru

The possibilities of applying the results of research in the field of coherent optics to improve the methods of treatment of eye pathologies using the effects of fractal light structures on the organs of vision are considered. The developed algorithms for controlling light flows allow multiparametric optimization of medical procedures.

УДК 535.3

## СВЕРХМОЩНЫЕ ЛАЗЕРНЫЕ ИМПУЛЬСЫ В ФОТОННОМ КРИСТАЛЛЕ С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ПОЛИМЕРОМ

© 2022 г. Ю. В. Двужилова<sup>1</sup>, И. С. Двужиллов<sup>1</sup>, \*, М. Б. Белоненко<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

\*E-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Представлены результаты численного моделирования динамики мощного лазерного импульса, фемтосекундной длительности, в фотонном кристалле на основе полупроводниковых углеродных нанотрубок и полимера. Установлено квазиустойчивое распространение импульса в такой среде. Построены зависимости напряженности импульса от параметров модуляции показателя преломления фотонного кристалла, а также от концентрации полимера в нем.

DOI: 10.31857/S0367676522110084

### ВВЕДЕНИЕ

Научные достижения в прикладной нелинейной оптике, а также в областях нанофотоники и оптоэлектроники, во много обязаны мощным развитием нанотехнологий, которые позволяют выращивать материалы, имеющие периодическую структуру, период которой порядка длины волны света или даже много меньше нее [1].

Материалы, обладающие пространственно переменным показателем преломления, в частности, фотонные кристаллы (ФК), открывают большие перспективы исследования и управления лазерным излучением, проходящим сквозь него. Так, на основе ФК возможно создание пространственных модуляторов, переключателей, разветвителей, циркуляторов и т.д. [2, 3].

Под мощным лазерным излучением, в работе понимаются предельно короткие импульсы (ПКИ) фемтосекундной длительности, которые содержат 1–5 периодов колебания электрического поля. Энергия таких импульсов остается локализованной в ограниченной области пространства, а также они обладают высокой направленностью их излучения, стабильностью формы и устойчивостью к возмущениям [4–6]. Причем, пространственная модуляция показателя преломления ФК, является уникальной средой, обладающей нелинейными свойствами, в которой возможно устойчивое распространение локализованных солитоноподобных импульсов [7].

Дополнительную нелинейность, необходимую для стабилизации ПКИ, вносят полупроводниковые углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие

нелинейными свойствами в оптическом диапазоне [8, 9]. УНТ совместно с полимерами, не только улучшают механические свойства материала, но и, например, повышают электропроводность, теплопроводность, теплостойкость и придают нанокompозиту новые функциональные свойства. Отметим, что достаточно давно разработаны и запатентованы различные механизмы получения нанокompозитов допированных УНТ [10, 11], в которых поброны описаны методы равномерного распределения нанотрубок в полимерной матрице. Таким образом, задача динамики ПКИ в ФК на основе полимера, допированного УНТ является весьма актуальной.

### ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Исследуемая задача имеет следующую геометрию: направление распространения лазерного импульса и направление пространственной модуляции показателя преломления фотонного кристалла совпадают с осью  $OZ$ . Электрическое поле и ток, совпадают с осью нанотрубок и ориентированы вдоль оси  $OY$ . Отметим, что поскольку характерные пространственные длины нанотрубок много меньше типичного размера пространственной области, в которой локализован импульс, таким образом, можно использовать приближение сплошной среды и считать ток распределенным по объему.

Для описания эволюции трехмерного импульса в среде фотонного кристалла воспользуемся

уравнениями Максвелла, с использованием Кулоновской калибровки ( $E = -\partial A/c\partial t$ ) [12, 13]:

$$\Delta \vec{A} - \frac{n^2(\vec{z})}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{CNT}(\vec{A}) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{Pol}(\vec{A}) = 0, \quad (1)$$

здесь  $\vec{A} = (0, A(x, y, z, t), 0)$  – вектор-потенциал электрического поля импульса;  $n(z) = 1 + \mu \cos(2\pi z/\chi)$  – пространственно-модулированный показатель преломления среды, который задает фотонный кристалл ( $\mu$  – глубина модуляции показателя преломления,  $\chi$  – период модуляции показателя преломления);  $c$  – скорость света;  $\vec{j}_{CNT}$  – плотность электрического тока, связанного с углеродными нанотрубками;  $\vec{j}_{Pol}$  – плотность электрического тока, связанного с полимером.

Компонента плотности тока, который образуется благодаря взаимодействию поля импульса с электронами в зоне проводимости нанотрубок, имеет вид:

$$j_{CNT} = e \sum_{ps} v_s(p) \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps}^+ C_{ps} \rangle, \quad (2)$$

$$v_s(p) = \frac{\partial \epsilon_s(p)}{\partial p},$$

$\epsilon_s(p) = \pm \gamma_0 (1 + 4 \cos(ap) \cos(\pi s/m) + \cos^2(\pi s/m))^{1/2}$ , где  $v_s(p)$  – групповая скорость электронов;  $e$  – заряд электрона;  $\epsilon_s(p)$  – закон дисперсии  $\pi$ -электронов в полупроводниковых нанотрубках [9];  $\gamma_0$  – интеграл перекрытия ( $\approx 2.7$  эВ);  $a$  – постоянная решетки углеродной нанотрубки;  $p$  – квазиимпульс электрона;  $m$  – количество гексагонов по периметру нанотрубки;  $C_{ps}^+, C_{ps}$  – операторы рождения и уничтожения электронов с квазиимпульсом ( $p, s$ );  $\langle \rangle$  – усреднение с неравновесной матрицей плотности  $\rho(t)$ :  $\langle B \rangle = Sp(B(0)\rho(t))$ .

Следует заметить, что:

$$\langle B_0 \rangle = Sp(B(0)\rho(0)),$$

$$\rho(0) = \frac{\exp\left\{-\frac{H}{k_B T}\right\}}{Sp\left(\exp\left\{-\frac{H}{k_B T}\right\}\right)},$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура.

Вычисление компоненты тока для полимеров проводится аналогично вычислению тока для системы квантовых точек с прыжковой проводимостью [14]. Данная модель имеет подробное описание и обоснование в работе [15]. Таким образом выражение для  $j_{Pol}$  имеет следующий вид:

$$j_{Pol} = e \sum_{ps\sigma} v_s(p) \left( p - \frac{e}{c} A(t) \right) \langle C_{ps\sigma}^+ C_{ps\sigma} \rangle, \quad (3)$$

где  $C_{ps\sigma}^+, C_{ps\sigma}$  – операторы рождения и уничтожения электронов полимера.

Далее, закон дисперсии электронов в углеродных нанотрубках  $\epsilon_s(p)$ , разложим в ряд Фурье, и подставим выражения для плотности тока нанотрубок (2) и полимеров (3) в уравнения Максвелла (1), и получим эффективное уравнение на компоненту вектор-потенциала электрического поля лазерного импульса в фотонном кристалле:

$$\Delta A - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{4en_{CNT}}{c} \sum_q q b_q \sin\left(\frac{qaeA}{c}\right) + \frac{4en_{Pol}}{c} \sin\left(\frac{a_{Pol}eA}{c}\right) = 0, \quad (4)$$

здесь  $n_{CNT}$  – концентрация электронов в нанотрубках;  $n_{Pol}$  – концентрация полимера в фотонном кристалле;  $a_{Pol}$  – длина связи в полимере;  $\Delta$  – лапласиан в цилиндрической системе координат.

Коэффициенты  $b_q$ , убывают с ростом  $q$ , таким образом в сумме можно ограничиться первыми 15 слагаемыми, не теряя при этом точности расчетов:

$$b_q = \sum_{s=1} a_{sq} \int_{ZB} \cos(apq) \frac{\exp\left\{-\frac{\epsilon_s(p)}{k_B T}\right\}}{1 + \exp\left\{-\frac{\epsilon_s(p)}{k_B T}\right\}} dp,$$

заметим, что  $ZB$  – первая зона Бриллюэна;  $a_{sq}$  – коэффициенты разложения закона дисперсии электронов в ряд Фурье.

Начальные условия на вектор-потенциал электрического поля ПКИ имеют Гауссову форму и выглядят следующим образом:

$$A_{t=0} = A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{\gamma^2}\right\} \exp\left\{-(z - z_c)^2/\beta^2\right\}, \quad (5)$$

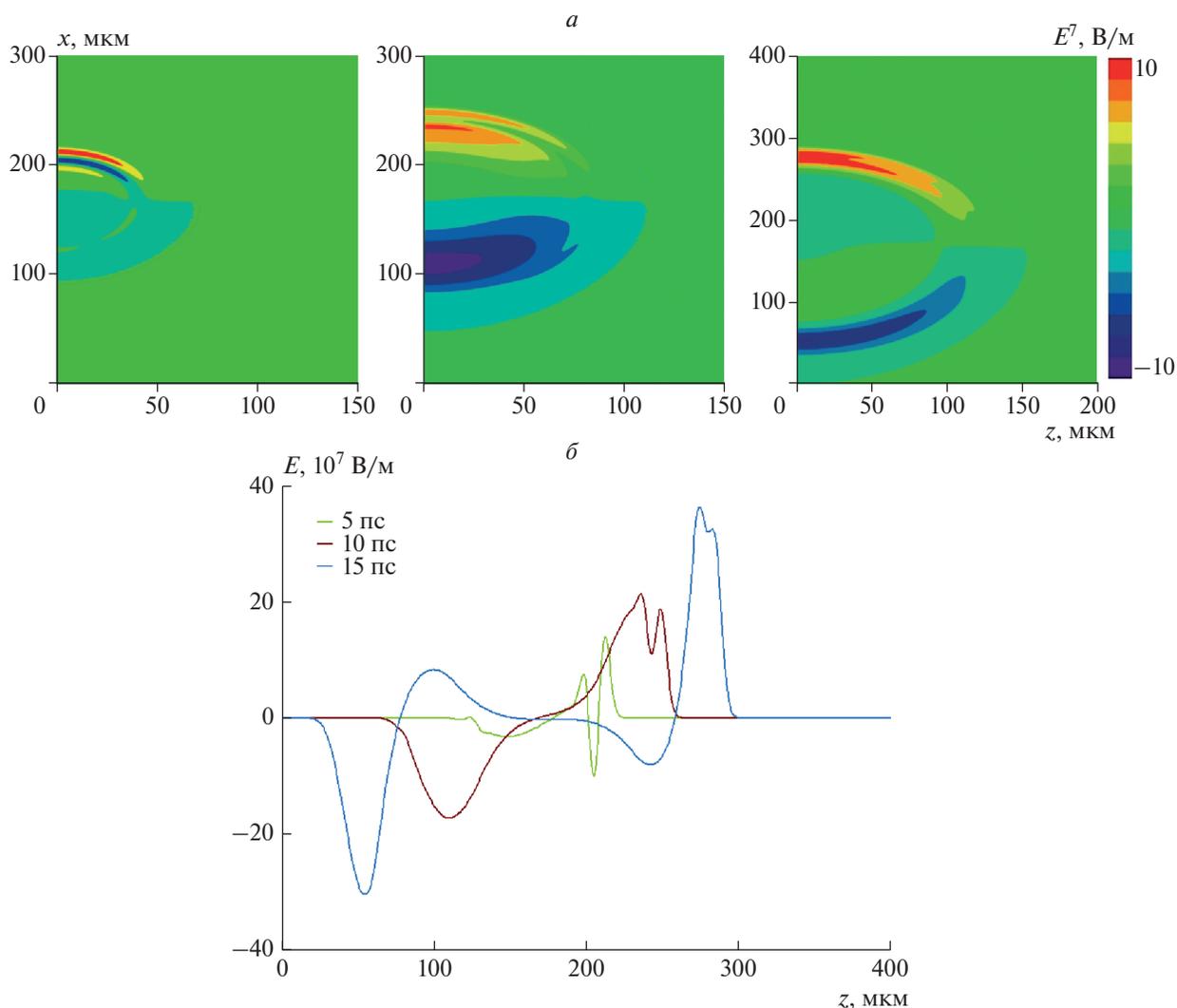
$$\frac{dA}{dt}\Big|_{t=0} = \frac{2vz}{\gamma^2} A_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{\gamma^2}\right\} \exp\left\{-(z - z_c)^2/\beta^2\right\},$$

где  $\beta, \gamma$  – параметры, определяющие ширину импульса вдоль осей  $z$  и  $r$ , соответственно;  $A_0$  – начальная амплитуда импульса;  $v$  – скорость входа импульса в ФК;  $z_c$  – начальная координата.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эффективное уравнение на вектор-потенциал электрического поля ПКИ (4) решалось численно, при помощи явной конечно-разностной схемы типа “крест”, на равномерной сетке по времени и координате, со вторым порядком погрешности [16].

При численном моделировании исследуемой системы, ее параметры выбирались следующим образом:  $m = 13$ ,  $T = 293$  К, время релаксации в нанотрубках  $\approx 10^{-11}$  с; длительность импульса  $\approx 10^{-14}$  с. Значения параметров, определяющих ширину импульса, а также начальную скорость импульса



**Рис. 1.** Зависимость напряженности электрического поля импульса от цилиндрических координат в фиксированные моменты времени (5, 10, 15 пс) (а); Срезы напряженности при  $r = 0$  (б). Отношение концентрации УНТ к полимеру 1 : 1.

при входе в среду, задавались следующим образом ( $\beta = \gamma \sqrt{1 - v^2}$ ,  $v = 0.95c$ ).

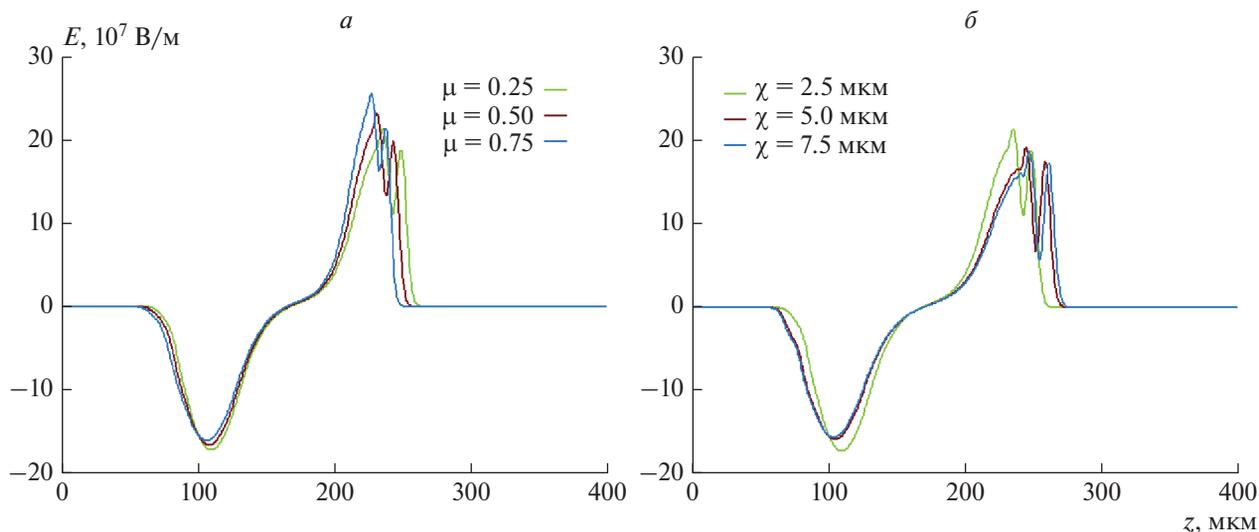
Эволюция трехмерного импульса электромагнитного поля при его распространении в среде УНТ и полимера, с пространственно-переменным показателем преломления, в случае одного колебания электрического поля представлена на рис. 1. Параметры модуляции показателя преломления ФК задавались следующим образом: период – 2.5 мкм, глубина – 0.25.

Из представленной на рис. 1 временной эволюции импульса можно сказать, что присутствие ФК, приводит к изменению формы импульса. Это происходит благодаря интерференции встречных волн, которые испытывают частичное “отражение”. Наличие интерференции также оказывает влияние на групповую скорость волно-

вого пакета импульса, уменьшая ее. Однако, несмотря на изменение формы, энергия импульса остается локализованной в пространстве, что в свою очередь говорит о квазистойчивом распространении импульса на времени до 15 пс. Также отмечается увеличение амплитуды импульса с течением времени, вследствие дисперсии электрического поля в среде углеродных нанотрубок. Этот факт позволяет использовать данную среду в устройствах усиления подобных импульсов.

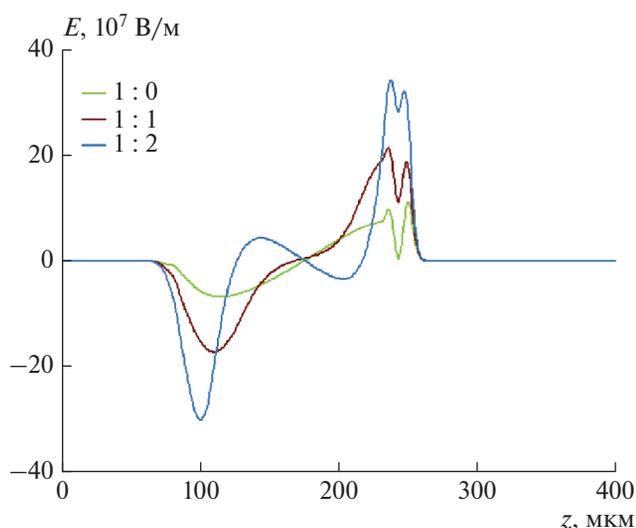
На рис. 2 показаны срезы напряженности трехмерного лазерного импульса в зависимости от параметров модуляции показателя преломления ФК.

Увеличение глубины модуляции показателя преломления ФК приводит к замедлению импульса и незначительному увеличению его амплитуды (рис. 2а), особенно изменения заметны



**Рис. 2.** Продольные срезы трехмерного ПКИ в фотонном кристалле из УНТ и полимера (отношение концентрации УНТ к полимеру 1 : 1.) при различных значениях параметров модуляции показателя преломления, при  $r = 0$ : глубины (0.25, 0.5, 0.75) (а), периода (5, 7.5, 10 мкм) (б).

на фронте импульса. Изменение периода решетки ФК также оказывает влияние на групповую скорость волнового пакета импульса, с увеличением периода импульс начинает распространяться быстрее (рис. 2б), поскольку процессы интерференции, при его столкновении с узлами кристалла, происходят реже. На основании полученного результата можно говорить о том, что, зная время задержки импульса, можно судить об веществе ФК, что в свою очередь является важным результатом в практической области спектроскопии.



**Рис. 3.** Продольные срезы трехмерного ПКИ в фотонном кристалле при различных значениях концентраций нанотрубок и полипропилена, при  $r = 0$ .

Далее мы рассмотрели зависимость напряженности импульса от соотношения концентраций УНТ и полимера в ФК, что показано на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что с увеличением количества полимера в кристалле импульс сужается. Таким образом, влияние этого параметра способствует стабилизации импульса. Это можно связать с инерционностью отклика полимера и последующим переизлучением им энергии.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из проведенного численного исследования динамики трехмерного ПКИ в фотонном кристалле на основе УНТ и полимера можно сделать следующие выводы:

- распространение импульса в такой среде является стабильным на временах до 15 пс;
- исходя из времени задержки импульса, можно судить о параметрах ФК (периоде и глубине модуляции показателя преломления);
- увеличение концентрации полимера в ФК приводит к сужению лазерного импульса.

Двужилова Ю.В., Двужилов И.С. выражают благодарность Министерству науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку в рамках гранта Президента РФ (проект № МК-2089.2021.1.2).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sheng P. Introduction to wave scattering, localization and mesoscopic phenomena. Berlin: Springer-Verlag, 2006. 333 p.
2. Mito S., Takagi H., Lim P.B. et al. // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. Art. No. 07E313.

3. Wang Z., Fan S. // Opt. Lett. 2005. V. 30. P. 1989.
4. Fibich G., Ilan B. // Opt. Lett. 2004. V. 29. P. 887.
5. Goorjian P.M., Mihalache D. // Rom. J. Phys. 2017. V. 69. P. 403.
6. Mihalache D. // Rom. Rep. Phys. 2021. V. 73. P. 403.
7. Sazonov S.V., Ustinov N.V. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. Art. No. 063803.
8. Eletsii A.V. // Phys. Usp. 1997. V. 40. № 9. P. 899.
9. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of fullerenes and carbon nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996. 965 p.
10. Коноплев Б.Г., Агеев О.А., Сюрлик Ю.В. Способ изготовления полимерного композита с ориентированным массивом углеродных нанотрубок. Пат. РФ № 2417891. 2011.
11. Агеев О.А., Сюрлик Ю.В. Способ изготовления композита полимер/углеродные нанотрубки на подложке. Пат. РФ № 2400462. 2010.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1973. 509 с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624 с.
14. Басс Ф.Г., Булгаков А.А., Тетервов А.П. Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. М.: Наука, 1989. 288 с.
15. Осипов В.А., Федянин В.К. Сообщения ОИЯИ. Дубна: ОИЯИ, 1984. 10 с.
16. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.

## High-power laser pulses in a photonic crystal with carbon nanotubes and a polymer

Yu. V. Dvuzhilova<sup>a</sup>, I. S. Dvuzhilov<sup>a, \*</sup>, M. B. Belonenko<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Volgograd State University, Volgograd, 400062 Russia

\*e-mail: dvuzhilov.ilya@volsu.ru

The results of numerical simulation of the dynamics of a high-power femtosecond laser pulse in a photonic crystal based on semiconductor carbon nanotubes and a polymer are presented. Quasi-stable pulse propagation in such a medium is established. The dependences of the pulse intensity on the modulation parameters of the refractive index of the photonic crystal, as well as on the concentration of the polymer in it, are plotted.

УДК 519.24:534.8:681.884

## ПРИМЕНЕНИЕ СКАЛЯРНЫХ И КОМБИНИРОВАННЫХ ПРИЕМНИКОВ В ЗАДАЧЕ ШУМОВОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ ПРИ НАЛИЧИИ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ ПОЛЯ

© 2022 г. К. В. Дмитриев\*

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

\*E-mail: kdmiriev@lanat.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Метод главных компонент применен к задаче пассивной акустической томографии. Предложенная процедура позволяет компенсировать сигналы мешающих мощных локализованных источников и получить необходимые для решения обратной задачи данные. Приведены результаты моделирования для схем со скалярными и комбинированными приемниками акустического поля.

DOI: 10.31857/S0367676522110072

### ВВЕДЕНИЕ

Метод шумовой интерферометрии – это пассивный метод определения акустических характеристик среды. Он не требует использования излучателей и использует только регистрацию полей, которые создаются совокупностью присутствующих в среде источников. В дальнейшем эти поля подвергаются корреляционной обработке. Данный метод был предложен теоретически [1–3] и затем активно развивался применительно к задачам гидроакустики [3–5] и геоакустики [6], а также в рамках корреляционного подхода медицинской термотомографии [7, 8]. В последнем случае он также использовался в сочетании с дополнительной шумовой “подсветкой” [8, 9].

Отсутствие активных источников является важным преимуществом метода шумовой интерферометрии. Их использование в гидроакустике и геоакустике может быть затруднено из-за ряда причин, например, стоимости оборудования или экологических соображений. При медицинском обследовании также предпочтительно снижать воздействие на пациента внешними полями. С другой стороны, метод обладает и недостатками. Первый из них присущ многим корреляционным подходам: требуется длительное накопление сигналов, чтобы оценки функций когерентности обладали достаточной точностью. Вторым недостатком связан с тем, что метод в своей изначальной постановке [1–3] предполагает равномерное распределение источников и изотропность создаваемого ими шумового поля. Во многих практиче-

ских случаях это может не выполняться. Причиной такой анизотропии могут служить мощные локализованные источники шума.

Другое направление, которому в последнее время уделяется большое внимание, связано с использованием комбинированных (скалярно-векторных) приемников акустического поля [10], которые одновременно регистрируют давление и вектор колебательной скорости в точке своего расположения. При этом насколько можно судить, однозначного мнения о целесообразности применения таких приемников, не сложилось [11, 12], и этот вопрос остается предметом дискуссии.

В представляемой работе исследуется возможность устранить влияние анизотропного распределения источников с помощью корректировки собственных чисел матрицы когерентности сигналов, принятых антенной системой. Сравниваются результаты, которые можно получить с помощью метода шумовой интерферометрии при использовании обычных или комбинированных приемников.

### МЕТОД ШУМОВОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ

В основе метода шумовой интерферометрии лежит связь между разностью запаздывающей и опережающей функциями Грина неоднородной среды и функцией когерентности шумового поля. Такая связь была получена как для неподвижных сред [1], так и при наличии течений [2]. В [3] приводятся оценки необходимого времени накопления сигналов для гидроакустических приложений.

Простой (но не строгий) способ получить необходимые уравнения состоит в следующем. Рассматривается запаздывающее поле  $\varphi^+(\vec{z})$  и опережающее поле  $\varphi^-(\vec{z})$  потенциала колебательной скорости в неподвижной среде с постоянной плотностью  $\rho_0$  и пространственным распределением скорости звука  $c(\vec{z})$ , где  $\vec{z}$  – произвольная точка пространства. Эти поля порождаются случайными независимыми источниками  $F(\vec{z})$  монополярного типа с функцией пространственной когерентности  $\Gamma_{FF}(\vec{z}, \vec{z}') = \langle F(\vec{z})F^*(\vec{z}') \rangle = I_F(\vec{z})\delta(\vec{z} - \vec{z}')$ ; операция  $\langle \bullet \rangle$  означает усреднение по множеству реализаций. При этом предполагается монохроматический режим с временной зависимостью полей  $\sim \exp(-i\omega t)$ . Поля  $\varphi^\pm(\vec{z})$  удовлетворяют уравнению Гельмгольца:

$$\nabla_{\vec{z}}^2 \varphi^\pm(\vec{z}) + k^2(\vec{z})\varphi^\pm(\vec{z}) = F(\vec{z}), \quad (1)$$

где  $k(\vec{z}) = \omega/c(\vec{z})$  – волновое число; нижний индекс у оператора  $\nabla_{\vec{z}}$  определяет переменную, по которой ведется дифференцирование. Пусть произвольные точки  $\vec{z}'$  и  $\vec{z}''$  находятся внутри замкнутой выпуклой поверхности  $S$ , ограничивающей область  $V$ . Вводятся запаздывающая  $G^+(\vec{z}, \vec{z}')$  и опережающая  $G^-(\vec{z}, \vec{z}'')$  функции Грина, удовлетворяющие уравнению (1) с источниками вида  $F(\vec{z}) = \delta(\vec{z} - \vec{z}')$  и  $F(\vec{z}) = \delta(\vec{z} - \vec{z}'')$ , соответственно. Для этих функций можно записать теорему Грина:

$$\int_V \left[ G^+(\vec{z}, \vec{z}') \nabla_{\vec{z}}^2 G^-(\vec{z}, \vec{z}'') - G^-(\vec{z}, \vec{z}'') \nabla_{\vec{z}}^2 G^+(\vec{z}, \vec{z}') \right] d\vec{z} = \\ = \oint_S \left[ G^+(\vec{z}, \vec{z}') \nabla_{\vec{z}} G^-(\vec{z}, \vec{z}'') - G^-(\vec{z}, \vec{z}'') \nabla_{\vec{z}} G^+(\vec{z}, \vec{z}') \right] \vec{n} dS,$$

где  $\vec{n}$  – внешняя нормаль к поверхности  $S$ . С учетом (1) левая часть этого равенства сводится к разности функций Грина  $G^+(\vec{z}'', \vec{z}') - G^-(\vec{z}', \vec{z}'')$ . В правой части можно положить приблизительно  $\vec{n} \nabla_{\vec{z}} G^\pm(\vec{z}, \bullet) \approx \pm ik_0 G^\pm(\vec{z}, \bullet)$ , где  $k_0$  – некоторое среднее волновое число на поверхности  $S$ . Учитывая, что в отсутствие течений  $G^\pm(\vec{z}', \vec{z}'') = G^\pm(\vec{z}'', \vec{z}')$ , получается

$$G^-(\vec{z}', \vec{z}'') - G^+(\vec{z}'', \vec{z}') = 2ik_0 \oint_S G^-(\vec{z}'', \vec{z}) G^+(\vec{z}', \vec{z}) d\vec{z}. \quad (2)$$

С другой стороны, для функции когерентности полей  $\varphi^+(\vec{z}')$  и  $\varphi^-(\vec{z}'')$ , регистрируемых в точках  $\vec{z}'$  и  $\vec{z}''$ , их выражение через функции Грина приводит к равенству

$$\langle \varphi^+(\vec{z}') \varphi^-(\vec{z}'') \rangle = \int G^-(\vec{z}'', \vec{z}) G^+(\vec{z}', \vec{z}) I_F(\vec{z}) d\vec{z}. \quad (3)$$

Для преобразования объемного интеграла в (3) пространство разбивается на тонкие слои, ограниченные замкнутыми поверхностями  $S_n$ . Если мощность источников в каждом таком слое одинакова, ее можно вынести из-под знака интеграла. Остающееся под интегралом выражение совпадает с правой частью (2), и поэтому, в итоге

$$\langle \varphi^+(\vec{z}') \varphi^-(\vec{z}'') \rangle = \\ = iD \left( G^+(\vec{z}'', \vec{z}') - G^-(\vec{z}', \vec{z}'') \right) \langle \varphi^+(\vec{z}') \varphi^-(\vec{z}') \rangle. \quad (4)$$

Здесь  $D$  – некоторый безразмерный коэффициент; в правой части в целях нормировки введена мощность  $\langle \varphi^+(\vec{z}') \varphi^-(\vec{z}') \rangle$ , регистрируемая в точке  $\vec{z}'$ .

Следует еще раз подчеркнуть, что предложенный способ получения равенства (4) не является строгим. Тем не менее, он позволяет обратить внимание на некоторые важные обстоятельства. Во-первых, как уже отмечалось, для работоспособности метода необходимо, чтобы мощность источников  $I_F(\vec{z})$  была распределена изотропно, т.е. шумовое поле должно обладать цилиндрической (или сферической) симметрией. Во-вторых, чтобы интеграл в (3) сходился, среда должна обладать поглощением. Если это не так, то, например, в двумерном случае функции Грина имеют асимптотику  $G^\pm(\vec{z}, \bullet) \sim |\vec{z}|^{-0.5}$  при  $|\vec{z}| \rightarrow \infty$ , а их произведение, соответственно,  $\sim |\vec{z}|^{-1}$ , и интеграл расходится. В-третьих, наличие поглощения (а на практике оно всегда есть), приводит к тому, что запаздывающая и опережающая функции Грина, а, вместе с ними, и поля  $\varphi^\pm(\vec{z})$ , не являются комплексно сопряженными. Вместе с тем, в эксперименте измеряется только запаздывающее поле  $\varphi^+(\vec{z})$ , но не  $\varphi^-(\vec{z})$ . Использование поля  $\{\varphi^+(\vec{z})\}^*$  в (4) вместо поля  $\varphi^-(\vec{z})$  может приводить к ошибкам, если поглощение звука существенно. Если же поглощение в среде мало, то соотношение (4) позволяет определять разность функций Грина или, что то же самое, значение  $\text{Im} G^+(\vec{z}'', \vec{z}')$  для всех пар используемых в эксперименте приемников. Далее, для определения характеристик среды эти данные следует обрабатывать одним из алгоритмов решения обратных задач рассеяния.

## КОМПЕНСАЦИЯ МОЩНЫХ СОСРЕДОТОЧЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ

Рассматриваются приемные системы, включающие как скалярные приемники акустического давления, так и комбинированные приемники акустического давления и колебательной скорости [10]. Возможность компенсировать влияние мощного источника шума на результат определе-

ния разности функций Грина в методе шумовой интерферометрии была рассмотрена в [13]. С этой целью предлагалось использовать комбинированные приемники акустического поля. Наличие нескольких каналов в каждом приемнике позволяет определенным образом сформировать его характеристику направленности, введя для каждого канала амплитудно-фазовые множители. В первом случае максимум этой характеристики ориентировался для каждого приемника в направлении на другой приемник. Во втором случае минимум характеристики ориентировался в направлении на источник шума. Определить такое направление можно, предварительно вычислив вектор Умова–Пойнтинга в каждой точке, где расположены приемники. Хотя в обоих описанных случаях результат улучшается, такая обработка не обладает общностью. В частности, если среда достаточно неоднородна, траектория распространения сигналов между приемниками может отличаться от прямой, и выбранное в первом случае направление окажется неправильным. Во втором случае возникают трудности, если рассматриваемый мощный источник шума не единственный, либо если распространение звука многолучевое, либо если уровень сигнала источника недостаточно превышает остальные шумы, чтобы определение вектора Умова–Пойнтинга было точным.

В представляемой работе предлагается перейти от формирования индивидуальных характеристик направленности отдельных элементов антенной решетки к ее фазировке как целого. Пусть антенная решетка включает в себя  $N$  элементов. Каждый элемент регистрирует значения  $p(t)$  акустического давления (если это скалярный приемник), либо 2 или 3 компоненты вектора  $\vec{v}(t)$  колебательной скорости (если это комбинированный приемник), либо обе эти характеристики акустического поля (если это комбинированный приемный модуль). Все полученные таким образом данные позволяют сформировать вектор сигналов

$$\vec{U}(t) = \{p_1(t); \rho_0 c_0 v_{1x}(t); \dots; p_N(t); \rho_0 c_0 v_{Nx}(t); \rho_0 c_0 v_{Ny}(t); \rho_0 c_0 v_{Nz}(t)\},$$

где  $\rho_0$  и  $c_0$  – некоторые средние значения плотности и скорости звука в среде. Таким образом, данные всех каналов имеют одинаковую размерность и учитываются в сквозной нумерации, т.е. не важно, к какому из элементов решетки относится каждый конкретный канал. Дискретизация сигналов во времени переводит этот вектор в матрицу  $\hat{U}$  размером  $T \times N_c$  с элементами  $\hat{U}_{it}$ , где  $t = 1; 2; \dots; T$  – номер временного отсчета, а  $i = 1; 2; \dots; N_c$  – номер канала данных.

Для дальнейших рассуждений спектр принятых сигналов разделяется на отдельные узкие полосы шириной  $\Delta f$ , каждая из которых имеет центральную частоту  $f$ . Это связано с тем, что, во-первых, от частоты могут зависеть свойства исследуемой среды, а во-вторых, спектр каждого из источников шума тоже зависит от частоты. В результате вместо одной матрицы  $\hat{U}$  ведется раздельная обработка набора матриц  $\hat{U}_f$ . Ширина полосы  $\Delta f$  подбирается для конкретных условий рассматриваемой задачи. С одной стороны, она должна быть достаточно узкой, чтобы в рамках нее свойства среды и спектр источника были постоянны. С другой стороны,  $\Delta f$  связано с пропорциональным  $\Delta f T$  фактором накопления, который определяет точность производимых над матрицами  $\hat{U}_f$  статистических оценок. Значит, ширина полосы  $\Delta f$  должна быть достаточно большой, чтобы свойства среды и источников можно было считать постоянными за время регистрации необходимого числа отсчетов  $T$ .

Идея компенсации влияния мощных источников состоит в том, чтобы выделить сигналы каждого из них на элементах антенной решетки. Для этого используется подход, сходный с хорошо известным методом главных компонент. Матрица  $\hat{U}_f$  представляется в виде своего сингулярного разложения  $\hat{U}_f = \hat{A}_f \hat{\Sigma}_f \hat{B}_f^H$ , где символ “ $H$ ” обозначает гильбертово сопряжение. Здесь унитарная матрица  $\hat{B}_f$  составлена из собственных векторов матрицы  $\hat{M}_f \equiv \hat{U}_f^H \hat{U}_f$ , которая имеет размер  $N_c \times N_c$  и представляет собой матрицу когерентности принятых сигналов, предварительно отфильтрованных в рассматриваемой полосе частот со средней частотой  $f$ . Матрица  $\hat{\Sigma}_f$  – диагональная и содержит на своей диагонали собственные числа  $\mu_{f,i}$  матрицы  $\hat{M}_f$ , упорядоченные по убыванию. Так как унитарная матрица  $\hat{A}_f$  составлена из ортогональных друг другу собственных векторов матрицы  $\hat{U}_f \hat{U}_f^H$ , и матрица  $\hat{\Sigma}_f$  – диагональная, столбцы матрицы  $\hat{A}_f \hat{\Sigma}_f$  также ортогональны друг другу. В результате исходные сигналы  $\hat{U}_f$  представляются линейной комбинацией некоррелированных между собой сигналов  $\hat{A}_f \hat{\Sigma}_f$ , амплитуды которых определяются собственными числами  $\mu_{f,i}$ . Преобразование между двумя наборами сигналов осуществляется с помощью матрицы  $\hat{B}_f$ .

Метод главных компонент состоит в выделении и работе только с теми собственными векторами матриц  $\hat{U}_f^H \hat{U}_f$  и  $\hat{U}_f \hat{U}_f^H$ , которые отвечают макси-

мальным собственным значениям  $\mu_{f,i}$ . Все остальные собственные значения при этом обнуляются. В рамках исследуемой задачи эти наибольшие собственные значения соответствуют мощным мешающим источникам шума. Поэтому здесь, в противоположность, именно они должны быть скорректированы. Похожая процедура применялась в [14, 15] для улучшения видимости сигналов слабых источников на фоне сильных. Поскольку метод шумовой интерферометрии оперирует матрицами когерентности сигналов, такая обработка может быть произведена только с участием этих матриц. Для этого каждая матрица  $\hat{M}_f$  представляется в виде суммы, содержащей ее собственные векторы  $\vec{m}_{f,i}$  и соответствующие им собственные значения  $\mu_{f,i}$ :  $\hat{M}_f = \sum_{n=1}^{N_c} \mu_{f,i} \vec{m}_{f,i} \vec{m}_{f,i}^H$ . Коррекция означает замену собственных значений  $\mu_{f,i}$  на  $\tilde{\mu}_{f,i}$  и формирование новой матрицы когерентности  $\tilde{M}_f = \sum_{n=1}^{N_c} \tilde{\mu}_{f,i} \vec{m}_{f,i} \vec{m}_{f,i}^H$ .

В связи с описанной процедурой коррекции матриц  $\hat{M}_f$  следует отметить следующие обстоятельства. Во-первых, явное выделение вклада мешающих источников возможно, если соответствующие им собственные числа существенно превосходят остальные. Если это не так, и собственные числа  $\mu_{f,i}$  уменьшаются с ростом  $i$  плавно, то задача усложняется. В [16] описан возможный статистический подход к ее решению. С другой стороны, такая ситуация означает, что мощность мешающих источников невелика, и можно ожидать, что их наличие не сильно сказывается на матрицах  $\hat{M}_f$ .

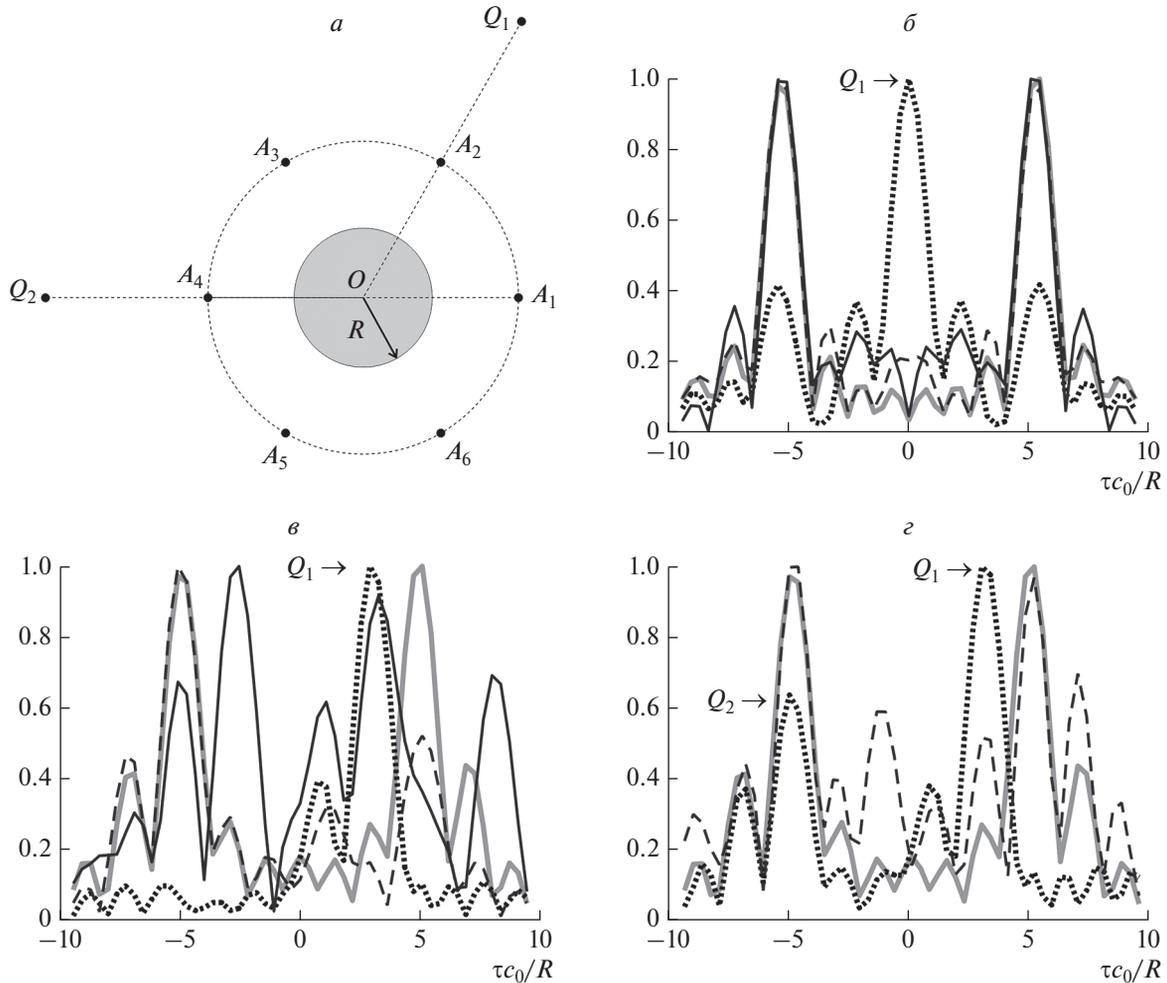
Во-вторых, процедура коррекции не сводится к простому обнулению наибольших собственных чисел. Дело в том, что при подобном обнулении антенная решетка оказывается сфазированной таким образом, чтобы подавлять все сигналы из области пространства вблизи мощных источников шума. Поэтому такой результат не соответствует равномерному распределению источников в пространстве. Чтобы избежать этого, можно приравнять корректируемые собственные значения величине, пропорциональной среднему остальных собственных значений. Для определения коэффициента пропорциональности предлагаются следующие эвристические критерии. Первый критерий связан с требованием минимальной дисперсии диагональных элементов скорректированной матрицы  $\tilde{M}_f$ , что означает примерно равную среднюю мощность регистрируемых шумовых сигналов. Второй критерий предполагает, что каждый элемент матрицы  $\tilde{M}_\tau$ , полученный после выполнения обратного преобразования Фурье, в отсут-

ствии течений должен быть в силу принципа взаимности четной функцией временного сдвига  $\tau$ .

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЕГО РЕЗУЛЬТАТЫ

Моделирование проводилось в двумерном случае для неоднородной среды в виде жидкого цилиндра радиусом  $R$ , скорость звука в котором в два раза больше, чем скорость звука в окружающей жидкости (рис. 1а). В одном случае антенная система включала шесть приемников акустического давления, которые располагались в точках  $A_n$  равномерно вокруг цилиндра на расстоянии  $OA_n = 3R$  от его центра. В другом случае устанавливались только два векторных приемника в точках  $A_1$  и  $A_3$  или в точках  $A_1$  и  $A_4$ . Таким образом, для двух антенных систем число приемных каналов было одинаковым и равным 6. Один или два источника анизотропного шума располагались в точках  $Q_1, Q_2$ , причем  $OQ_1 = OQ_2 = 10R$  и  $\angle Q_1OA_1 = \frac{\pi}{3}$ ;  $\angle Q_2OA_1 = \pi$ .

На рис. 1б и 1в представлены результаты оценок для нормированного на свой максимум модуля разности функций Грина  $|G^+(\vec{z}, \vec{z}') - G^-(\vec{z}, \vec{z}')|$ , когда единственный источник анизотропного шума располагался в точке  $Q_1$ . До проведения процедуры компенсации результат для полученной корреляционной функции (линия, составленная из точек) очень сильно отличается от искомого (сплошная толстая серая линия). В случае симметричного расположения источника относительно точек, между которыми производится оценка, для обеих антенных систем процедура компенсации позволяет получить довольно точную оценку (рис. 1б). При этом мешающий вклад источника  $Q_1$  эффективно подавляется. Для несимметричного положения в случае антенной системы из приемников давления возникают ложные максимумы, а влияние источника остается не полностью скомпенсированным (тонкая черная сплошная линия на рис. 1в). Для системы с комбинированными приемниками в области отрицательных временных сдвигов оценка остается довольно точной, но при положительных временных сдвигах, близких к значению временного сдвига для источника, она ухудшается (тонкая черная пунктирная линия на рис. 1в). Система с комбинированными приемниками дает хороший результат компенсации и в присутствии одновременно двух источников в точках  $Q_1, Q_2$  (тонкая черная пунктирная линия на рис. 1г).



**Рис. 1.** Схема (не в масштабе) расположения неоднородности, приемников  $A_1$ – $A_6$  и источников  $Q_1, Q_2$  при моделировании (а) и результаты сделанных оценок для модуля разности функций Грина, нормированные на свой максимум, для точек  $A_1$  и  $A_3$  (б) или для точек  $A_1$  и  $A_4$  (в, г). Сплошная толстая серая линия обозначает рассчитанную теоретически зависимость. Линия, составленная из точек, соответствует корреляционным функциям акустического давления для каждой пары точек без применения компенсации. Тонкие черные линии (пунктирная и сплошная) изображают результаты процедуры компенсации для антенных систем из шести приемников давления и двух комбинированных приемников, соответственно.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анизотропия шумов среды может приводить к тому, что результат корреляционной обработки данных, зарегистрированных приемниками в паре точек, не соответствует ожидаемой разности функций Грина между этими точками. В том случае, когда в эксперименте имеется только два приемника давления, исправить ситуацию не представляется возможным. Если антенная система состоит из многих датчиков, возможно осуществить процедуру компенсации влияния сосредоточенных источников шумов. Для этого предлагается скорректировать максимальные собственные числа матрицы когерентности. Моделирование показало, что использование ком-

бинированных приемников позволяет получить некоторое преимущество: при том же общем числе каналов регистрации сигналов достигается лучшее приближение к искомой разности функций Грина.

Моделирование специально проводилось с небольшим числом каналов, которых оказалось при этом достаточно для процедуры компенсации. Его увеличение дополнительно улучшает результат и позволяет рассматривать большее число источников. Однако важно отметить, что сильные индивидуальные шумы приемников могут исказить оценки  $\bar{m}_{f,i}$ , т.е. привести к неточной “настройке” на источники, и результат ухудшится.

Этот фактор предполагается предметом отдельного исследования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Москвы (проект № 21-32-70003).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wapenaar K.* // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. No. 25. Art. No. 254301.
2. *Godin O.A.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. No. 5. Art. № 054301.
3. *Буров В.А., Сергеев С.Н., Шуруп А.С.* // Акуст. журн. 2008. Т. 54. № 1. С. 51.
4. *Гончаров В.В., Шуруп А.С., Годин О.А. и др.* // Акуст. журн. 2016. Т. 62. № 4. С. 431.
5. *Сергеев С.Н., Шуруп А.С., Годин О.А. и др.* // Акуст. журн. 2017. Т. 63. № 1. С. 73.
6. *Жостков Р.А., Преснов Д.А., Шуруп А.С., Собисевич А.Л.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2017. Т. 81. № 1. С. 72; *Zhostkov P.A., Presnov D.A., Shurup A.S., Sobisevich A.L.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2017. V. 81. No. 1. P. 64.
7. *Барабаненков Ю.Н., Пасечник В.И.* // Акуст. журн. 1995. Т. 41. № 4. С. 563.
8. *Буров В.А., Румянцева О.Д.* Обратные волновые задачи акустической томографии. Ч. 1. Обратные задачи излучения в акустике. М.: Ленанд. 2020.
9. *Буров В.А., Дмитриев К.В., Румянцева О.Д.* // Акуст. журн. 2018. Т. 64. № 5. С. 591.
10. *Гордиенко В.А.* Векторно-фазовые методы в акустике. М.: Физматлит, 2007. 480 с.
11. *Баскин В.В., Смартышев М.Д.* // Акуст. журн. 2008. Т. 54. № 4. С. 629.
12. *Горелов А.А., Смартышев М.Д.* // Акуст. журн. 2018. Т. 64. № 2. С. 250.
13. *Медведева Е.В., Гончаренко Б.И., Шуруп А.С.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 2. С. 278; *Medvedeva E.V., Goncharenko B.I., Shurup A.S.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 2. P. 220.
14. *Мальшикин Г.С.* // Акуст. журн. 2017. Т. 63. № 2. С. 196.
15. *Мальшикин Г.С.* // Акуст. журн. 2019. Т. 65. № 6. С. 828.
16. *Ermolaev V.T., Flaksman A.G., Anurin A.A.* // Radiophys. Quantum Electron. 1996. V. 39. No. 9. P. 765.

### The use of scalar and combined receivers in the noise interferometry problem in the presence of localized field sources

K. V. Dmitriev\*

*Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

*\*e-mail: kdmitrie@lanat.ru*

The principal component analysis is applied to the problem of passive acoustic tomography. The proposed procedure makes it possible to compensate for the signals of interfering powerful localized sources and to obtain the data necessary for solving the inverse problem. The simulation results for schemes with scalar and combined acoustic field receivers are presented.

УДК 535.8

## СВОЙСТВА ФРАКТАЛЬНЫХ СПЕКЛ-ПОЛЕЙ: ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ

© 2022 г. А. М. Зотов<sup>1, 2, \*</sup>, П. В. Короленко<sup>1, 2, \*</sup>, Н. Н. Павлов<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: pvkorolenko@rambler.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Рассмотрены свойства и способы моделирования фрактальных световых пучков со спеклового структурой. Особое внимание уделено актуальным на данный момент исследованиям нерелеевских спеклов, позволяющим реализовать в оптических системах эффект сверхразрешения. Показано, что в рамках используемой модели переход от релеевской статистики распределения интенсивности к нерелеевской не влияет на скейлинговые свойства излучения.

DOI: 10.31857/S0367676522110369

## ВВЕДЕНИЕ

Свойства спекл-полей оптического излучения нашли отражение в многочисленных монографиях и статьях. Определенное внимание исследователей привлекли так называемые фрактальные спекловые структуры. Такую структуру приобретают волны, отраженные от шероховатых плоскостей и прошедшие через гистологические срезы биологических тканей. Было установлено, что в первом случае по величине фрактальной размерности распределения интенсивности волны можно определять степень шероховатости отражающей поверхности [1], а во втором – оценивать предрасположенность ткани к появлению злокачественных образований [2]. Несмотря на многочисленные публикации, ряд вопросов, относящихся к свойствам фрактальных спеклов, остаются открытыми. Не ясно, как меняется фрактальная размерность спекловых пучков по мере их распространения в пространстве, требуют уточнения изменения свойств спеклов при переходе от релеевской статистики к нерелеевской. Последний вопрос весьма актуален, поскольку появились литературные свидетельства о том, что переход к нерелеевской статистике значительно расширяет возможности практического использования спекловых полей (достижение сверхразрешения [3, 4], построение фантомных изображений [5]). Целью данной работы является построение оптико-физической модели для решения совокупности вышеперечисленных вопросов и анализ особенностей процессов формирования и распространения спекловых полей с разными

статистическими и скейлинговыми характеристиками. Большое внимание уделено разработке и программной реализации вычислительных алгоритмов, обеспечивающих возможность варьирования в широких пределах статистических и фрактальных параметров спекловых пучков в начальной плоскости и на разных расстояниях от нее. Помимо решения чисто исследовательских задач, в значительной степени связанных с созданием биомедицинских технологий, созданные алгоритмы могут оказаться весьма полезными при программировании работы пространственных модуляторов света. Такие модуляторы, получивших в последнее время большое распространение [6], позволяют формировать световые пучки с заданным фазовым профилем.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ СПЕКЛ-ПОЛЕЙ

Основная часть расчетов структуры световых полей проводилась с использованием алгоритмов, основанных на фрактальных свойствах двумерной модификации функции Манделъброта–Вейерштрасса (МВ) [7], имеющей вид

$$W_{x,y} = \sigma \times \sum_{v=0}^V \sum_{n=0}^N \frac{[1 - e^{ib^n s[(x-\eta)\cos(\alpha v) + (y-\eta)\sin(\alpha v)]}] e^{i(\psi_n k_1 + \psi_n k_2)} e^{i\zeta \alpha v}}{b^{(2-D)n}} \quad (1)$$

Выражение (1) является результатом вращения поля, задаваемого одномерной функцией МВ, относительно изначальной системы координат  $\{xy\}$ .

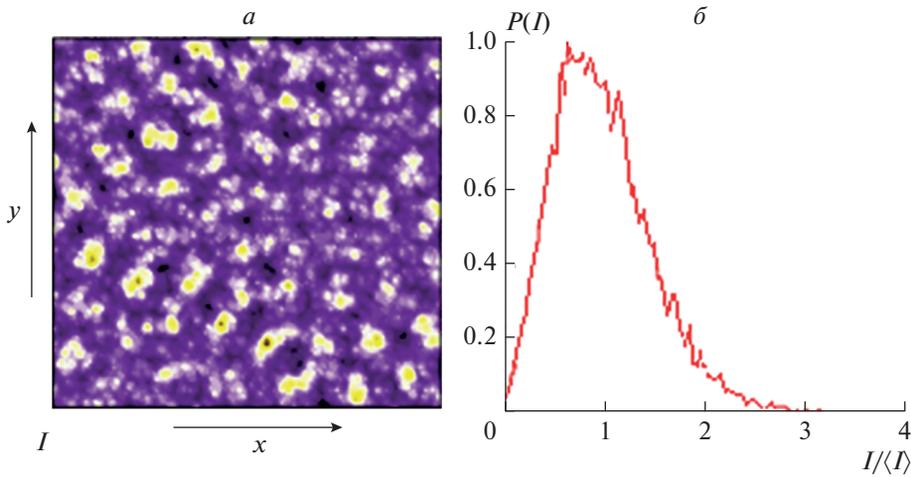


Рис. 1. Распределение интенсивности  $I$  (а) и плотности вероятности  $P$  (б).

Величина  $W$  определяет амплитуду поля, дискретные поперечные координаты  $0 \leq x, y \leq K-1$  ( $K$  – целое число),  $D$  характеризует фрактальную размерность,  $s$  – масштабирующий параметр,  $b$  – коэффициент скейлинга;  $\sigma$  – нормировочный множитель;  $n$  – номер гармоники;  $\nu$  – азимутальный индекс;  $\psi_{n,\nu}$  – фазы гармоник и азимутальных парциальных волн;  $\alpha$  – единичный угол поворота амплитудно-фазового распределения;  $k_1, k_2, \eta, \zeta$  – числовые параметры. Варьируя входящие в формулу (1) величины и параметры, можно в широких пределах изменять статистические и скейлинговые характеристики моделируемых двумерных фрактальных распределений, относящихся, в частности, к спеклоподобным световым полям с релеевской и нерелеевской статистикой.

### АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ

На рис. 1 показано распределение интенсивности  $I(x, y) = |W(x, y)|^2$  с соответствующим графиком плотности вероятности интенсивности. Предполагалось, что  $\sigma = 0.3$ ,  $D = 1.3$ ,  $s = 0.4$ ,  $b = 2$ ,  $N = 6$ ,  $V = 47$ ,  $\alpha = 2\pi/48$ ,  $K = 127$ ,  $\psi_{n,\nu} = \frac{2\pi r \text{rnd}(n, \nu)}{(n, \nu + 1)}$ ,  $\eta = (K + 1)/2$ ,  $\zeta = 1$ ,  $k_1 = k_2 = 1$ . Наличие в выражении (1) фактора  $e^{i\zeta\alpha\nu}$  придает полю вихревой вид, характеризующийся наличием осевой винтовой дислокации.

График плотности вероятности  $P$  интенсивности генерируемой спекловой волны качественно отличается от поведения этой величины, относящейся к обычному развитому спекл-полю. В последнем случае график  $P$  подчинялся релеевской зависимости, при которой наиболее вероятным значением интенсивности было  $I = 0$ . Из рис. 1б следует, что при указанном наборе параметров

наиболее вероятные значения интенсивности располагаются вблизи ее средней величины  $\langle I \rangle$ , т.е. статистика поля становится нерелеевской. Изменением значений параметров в выражении (1) можно было менять форму графика  $P$ . Так, при нулевом значении  $\zeta = 0$  и сохранении всех других параметров статистика становилась релеевской.

Важно отметить, что независимо от вида статистики фрактальные и скейлинговые свойства излучения не претерпевали сколь-нибудь заметных изменений. Это подтверждает рис. 2. На нем изображены структура пространственного спектра распределения амплитуды нерелеевских спеклов (рис. 2а) и график структурной функции интенсивности (рис. 2б). При расчете пространственного спектра  $\Phi$  использовался метод БПФ. Двумерную структуру спектра, показанную на рис. 2а, характеризовала система концентрических окружностей. Поскольку их радиусы отличались в два раза, спектр отражал скейлинговые свойства излучения, определяемые коэффициентом скейлинга  $b = 2$ . Такого рода самоподобная структура пучка создает предпосылки для более эффективной обработки оптических сигналов в коре головного мозга.

Дополнительным подтверждением наличия фрактальных свойств было поведение структурной функции распределения интенсивности. Она задавалась в виде [8]

$$C_m = \frac{1}{(K - 2^{2m})} \sum_{x=0}^{K-2^{2m}} \sum_{y=0}^{K-2^{2m}} |I_{x+2^m, y} - I_{x, y+2^m}|, \quad (2)$$

где  $m$  – целое число. Исследовать поведение  $C_m$  в двойном логарифмическом масштабе удобно с помощью функции  $L_m = \log_2 C_m$ . По наклону графика этой функции можно определить параметр Херста  $H$  и фрактальную размерность  $D = 2 - H$ .

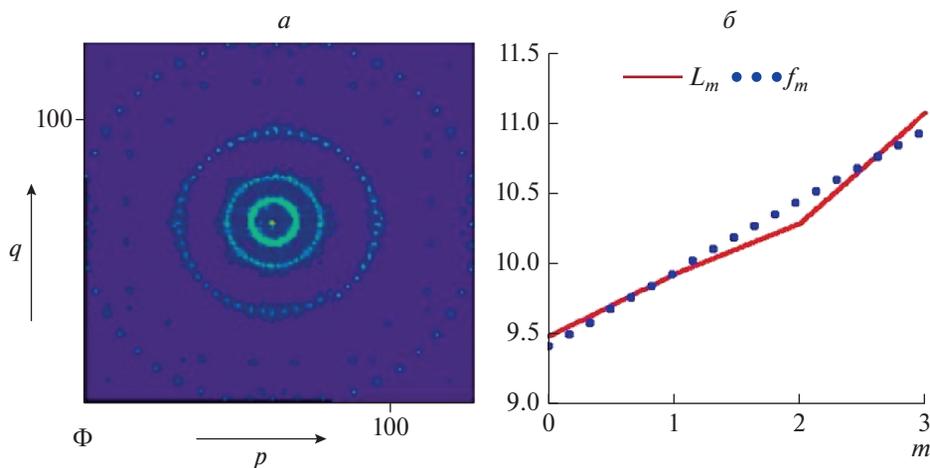


Рис. 2. Структура пространственного спектра  $\Phi$  (а) и поведение структурной функции (б);  $p, q$  – пространственные частоты,  $f_m$  – прямая, аппроксимирующая зависимость  $L_m$ .

Высокая степень линейности функции  $L_m$  свидетельствовала о четко выраженной локальной фрактальности исследуемых распределений. Фрактальная размерность, определяемая из построенной графической зависимости (рис. 2б), имела значение  $D = 1.38$ , весьма близкое задаваемому при использовании выражения (1).

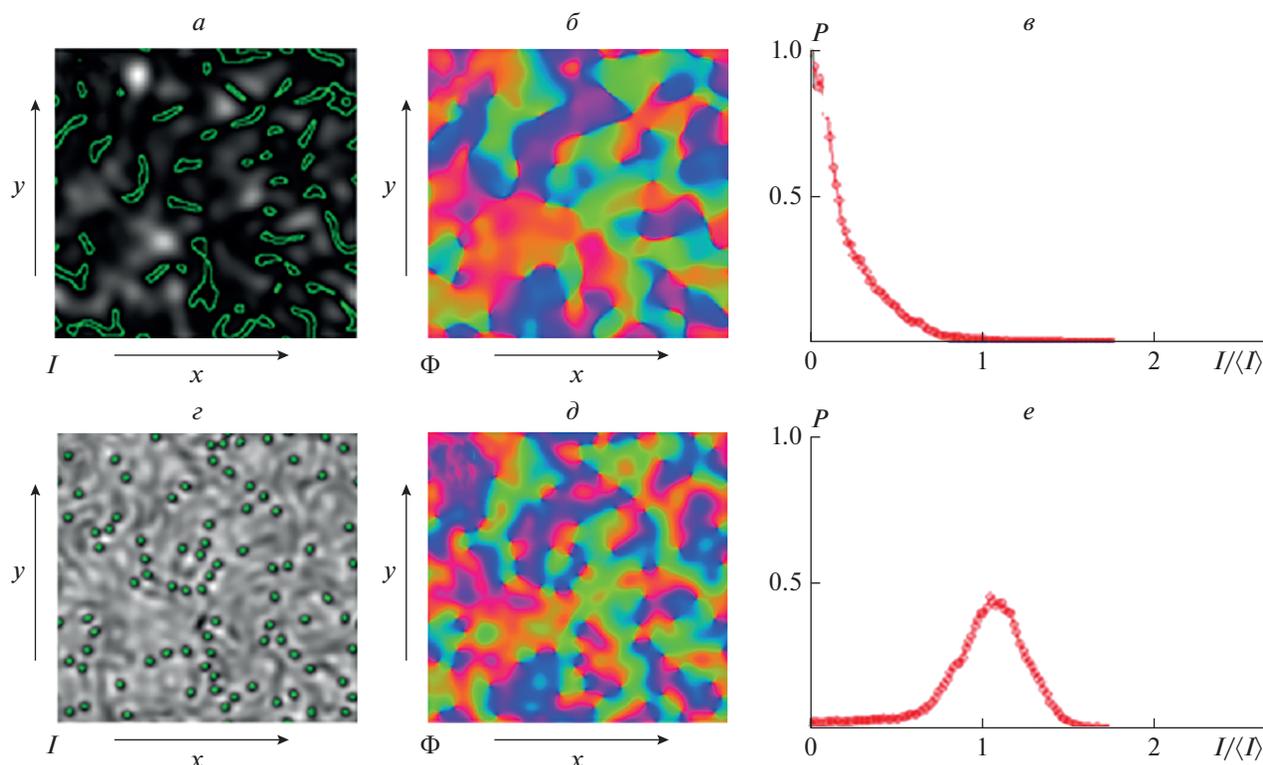
Для оценки устойчивости фрактальных характеристик было рассмотрено распространение пучков со спекловой структурой в системах, обеспечивающих построение оптических изображений. Было установлено, что изображение спекловой структуры обладает фрактальной размерностью, близкой к размерности изначального поля. В промежуточных плоскостях, лежащих между предметной плоскостью и изображением, фрактальная размерность могла меняться в больших пределах.

### ДИСЛОКАЦИИ В НЕРЕЛЕЕВСКИХ СПЕКЛ-ПОЛЯХ

В качестве дополнительного вопроса была рассмотрена динамика трансформации дислокационной структуры волнового фронта спекловых пучков при переходе от нерелеевской статистики к нерелеевской. Изначальная дислокационная структура была образована системой хаотически расположенных винтовых дислокаций. Была использована итерационная процедура Герцберга-Сэкстона (ГС), часто используемая для решения фазовой проблемы в оптике [4, 9]. Программная реализация расчетной схемы позволяла вносить необходимые изменения в форму целевого (требуемого) распределения плотности вероятности при оперативном контроле скейлинговых и статических параметров. Если задать изначальное распределение интенсивности и фазы поля, соот-

ветствующее релеевской, а целевому распределению плотности вероятности придать нерелеевский вид, то после 50 итераций по алгоритму ГС произойдет существенное изменение как структуры поля, так и плотности распределения вероятностей. Независимо от степени упорядоченности начальных распределений и расположения в них винтовых дислокаций в процессе преобразования происходит резкое уменьшение (в 4–5 раз) эффективной площади дислокационных образований. Это видно из рис. 3а и 3г, где контуры дислокаций, внутри которых интенсивность не превышает 10% от среднего значения, помечены зелеными линиями. Это позволяет при построении фазовых портретов световых пучков существенно повысить пространственное разрешение, значительно превысив его дифракционный предел. Процесс перехода к сверхразрешению иллюстрирует рис. 3.

При реализации эффекта сверхразрешения при обработке фазовых изображений способом ГС следует учитывать существование определенных ограничений на уменьшение эффективной площади дислокаций. В этом можно убедиться, используя описание явления Гиббса [10], характеризующего поведение волнового поля вблизи точки сингулярности. Результаты анализа этого явления показывают, что при ограниченном составе пространственных частот излучения минимальная площадь дислокаций будет непосредственно связана с размером рабочего поля, уменьшаясь при его расширении. В этом можно было убедиться при получении данных, показанных на рис. 3. Если количество итераций превышало значение 50, то для данного диапазона изменения поперечных координат уменьшить площади дислокаций не удавалось.



**Рис. 3.** Трансформация характеристик релейевских спеклов. *a, б, в* – Характеристики изначального поля, *z, д, е* – характеристики поля после процедуры ГС. *a, z* – Распределение интенсивности  $I$ ; *б, д* – распределение фазы  $\Phi$ ; *в, е* – графики плотности вероятностей  $P$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан подход к моделированию фрактальных спекловых полей, допускающий варьирование в широких пределах скейлинговых и статистических параметров излучения. Это их свойство делает их весьма полезными для совершенствования методик, используемых в биомедицине.

Разработанные алгоритмы могут быть использованы для программного обеспечения работы пространственных модуляторов света, формирующих световые пучки с фрактальной структурой.

Показано, что в рамках используемой модели переход от релейевской статистики распределения интенсивности спеклов к нерелейевской не влияет на скейлинговые свойства световых пучков.

Применительно к системам, обеспечивающим построение оптических изображений, установлено, что изображение спекловой структуры обладает той же самой фрактальной размерностью, что и изначальное поле.

Эффект уменьшения размеров дислокаций волнового фронта в спекловых полях с нерелейевской статистикой указывает на возможность реализовать с его помощью пространственное сверхразрешение в фазовых изображениях.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Li Z., Li H., Qiu Y.* // Proc. SPIE. 2006. V. 6027. Art. No. 60271S.
2. *Ульянов А.С.* // Квант. электрон. 2008. Т. 38. № 6. С. 557.
3. *Pascucci M., Tessier G., Emiliani V. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 116. Art. No. 093904.
4. *Bender N., Sun M., Yilmaz H. et al.* // Optica. 2021. V. 8. No. 2. P. 122.
5. *Kuplicki K., Chan K.W.C.* // Opt. Express. 2016. V. 24. No. 23. Art. No. 26766.
6. *Funamizu H., Uozumi J.* // Opt. Express. 2007. V. 15. No. 12. P. 7416.
7. *Короленко П.В., Кубанов Р.Т., Мишин А.Ю.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 1. С. 68; *Korolenko P.V., Kubanov R.T., Mishin A.Yu.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 1. P. 53.
8. *Crownover R.M.* Introduction to fractals and chaos. Burlington: Jones and Bartlett, 1995.
9. *Bender N., Yilmaz H., Bromberg Y., Cao H.* // APL Photonics. 2019. V. 4. No. 11. Art. No. 110806.
10. *Хемминг Р.В.* Цифровые фильтры. М.: Недра, 1987.

**Properties of fractal speckle fields: theory and applications****A. M. Zotov<sup>a</sup>, P. V. Korolenko<sup>a, b</sup>, N. N. Pavlov<sup>a</sup>**<sup>a</sup>*Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*<sup>b</sup>*Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia**\*e-mail: pykorolenko@rambler.ru*

The properties and methods of modeling fractal light beams with a speckle structure are considered. Particular attention is paid to currently topical studies of non-Rayleigh speckles, which make it possible to implement the superresolution effect in optical systems. It was shown that the transition from the Rayleigh statistics of the intensity distribution to the non-Rayleigh one within the framework of the used model does not affect the scaling properties of the radiation.

УДК 534.08:534.6

# ЛАЗЕРНЫЙ ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОЦЕНКИ ЛОКАЛЬНОЙ МИКРОТРЕЩИНОВАТОСТИ ОБРАЗЦОВ МИНЕРАЛОВ

© 2022 г. Н. Б. Подымова<sup>1</sup>, \*, Ю. Г. Соколовская<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
"Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова", физический факультет, Москва, Россия\*E-mail: [npodymova@mail.ru](mailto:npodymova@mail.ru)

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Предложен и экспериментально реализован лазерный оптико-акустический метод измерения спектральной мощности импульсов продольных ультразвуковых волн, обратно рассеянных на локальных микротрещинах в образцах полевых шпатов. Установлена прямая корреляция между возрастанием уровня этой мощности и увеличением локальной концентрации микротрещин в образцах.

DOI: 10.31857/S0367676522110229

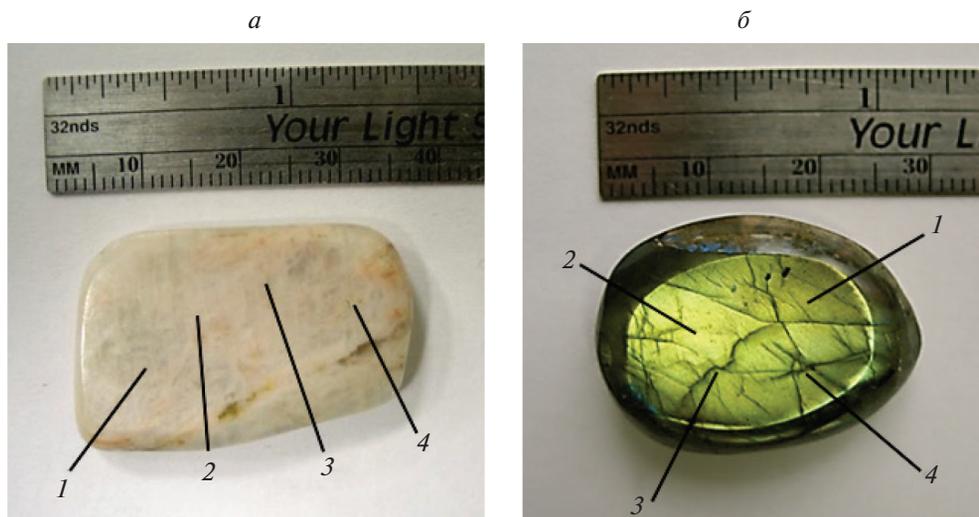
## ВВЕДЕНИЕ

Диагностика разномасштабных структурных неоднородностей минералов и горных пород (геоматериалов) является весьма актуальной для широкого круга прикладных задач, например, сейсморазведка, мониторинг технического состояния инженерных сооружений, разработка моделей возникновения очагов разрушения под действием механических нагрузок и т.п. [1]. Наличие разномасштабных трещин в геоматериалах, а также их поведение под действием внешних нагрузок играет ключевую роль в структурной механике и геофизике при определении эффективных упругих свойств и прочности таких материалов [2]. Хорошо известно, что микротрещины являются первичными источниками инициации развития макротрещин и последующего процесса разрушения массивов горных пород и конструкций из геоматериалов. Исходное распределение микротрещин по объему образцов или конструкций определяет как их деформационную стабильность, так и характер разрушения под действием внешних нагрузок. Таким образом, необходимы методики неразрушающего контроля, которые позволят выявлять локальные области повышенной микротрещиноватости (локальной концентрации микротрещин) в геоматериалах, причем такие методики должны позволять проводить диагностику структуры образцов непосредственно в процессе их нагружения.

В настоящее время для исследования анизотропии упругих свойств геоматериалов, возникновения очагов микротрещин и их ориентации при приложении различных нагрузок широко ис-

пользуют методики измерения скоростей акустических волн различных типов (см., например, [3, 4]). Хорошо известно, что для достижения максимальной чувствительности скорости и затухания ультразвуковой волны к структурным неоднородностям материала, длина этой волны должна быть порядка характерных размеров таких неоднородностей (например, зерен или микротрещин в геоматериалах). Поскольку в образцах геоматериалов, исследуемых в лабораторных условиях, размеры трещин варьируются, как правило, от десятков микрометров до нескольких миллиметров, для их исследований целесообразно использовать мощные зондирующие ультразвуковые импульсы в спектральном диапазоне от сотен килогерц до десятков мегагерц. Более того, амплитуда зондирующих импульсов должна быть достаточно высока для обеспечения надежной диагностики сильно поглощающих и рассеивающих ультразвук неоднородных материалов.

Совместное требование на широкий частотный диапазон и высокую амплитуду возбуждаемых ультразвуковых импульсов выполняется при использовании лазерного термооптического механизма возбуждения ультразвука — оптико-акустического эффекта [5]. При поглощении импульсов лазеров с модуляцией добротности в специально подобранном материале (лазерном источнике ультразвука) амплитуда возбуждаемых акустических импульсов может достигать десятков атмосфер при длительности импульса от единиц до сотен наносекунд в зависимости от энергии и длительности лазерного импульса, а также коэффициента поглощения света и теплофизических характеристик



**Рис. 1.** Фотографии образцов полевых шпатов: ортоклаз, толщина  $H = 6.2$  мм (а); плагиоклаз, толщина  $H = 8.5$  мм (б). Цифрами 1–4 обозначены исследуемые участки в каждом образце.

данного материала. Такие уникальные характеристики лазерного ультразвука позволяют использовать его для прецизионных измерений механических и акустических свойств твердых тел, а также для количественной оценки разномасштабных структурных неоднородностей различных конструкционных материалов по анализу ультразвукового отклика (см., например, [6–10]).

Целью настоящей работы является экспериментальная реализация лазерной оптико-акустической методики оценки локальной микротрещиноватости (концентрации микротрещин) лабораторных образцов минералов на примере двух типов полевых шпатов. Основная идея предлагаемой методики заключается в анализе спектральной эффективности ультразвуковых сигналов, обратно рассеянных на локальных микротрещинах в образце в области прозвучивания (так называемого “структурного шума”), и установлении корреляции между уровнем мощности структурного шума и локальной концентрацией микротрещин. Такая корреляция может служить основой для ультразвуковых систем on-line мониторинга возникновения и развития микротрещин в структуре минералов и горных пород под действием различных внешних нагрузок.

### ИССЛЕДОВАННЫЕ ОБРАЗЦЫ МИНЕРАЛОВ

В качестве исследуемых минералов были взяты образцы полевых шпатов: ортоклаза  $K[AlSi_3O_8]$  и плагиоклаза (член изоморфного ряда  $NaAlSi_3O_8$  (30–50%)– $CaAl_2Si_2O_8$  (50–70%)). Образцы отполированы с двух сторон так, чтобы полированные грани были плоскопараллельны. Фотографии ис-

следуемых образцов представлены на рис. 1 с указанием толщины  $H$  каждого образца. Точность измерения толщины составляла 10 мкм. Полевые шпаты характеризуются слоистым строением из тонких пластинчатых кристаллов и наличием локализованных очагов скопления трещин с характерными размерами от десятков до сотен микрометров. В исследуемых образцах места скопления микротрещин в объеме образцов могут быть качественно определены при их просвечивании видимым светом. С помощью оптического микроскопа в каждом образце были предварительно определены места выхода микротрещин на поверхность, а также были визуально определены возможные участки локализации микротрещин в объеме образцов. Номера этих участков указаны на рис. 1 цифрами 1–4 на каждом образце; затем были проведены исследования внутренней структуры этих участков с помощью лазерного оптико-акустического метода, описанного ниже.

### ЛАЗЕРНО-УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ И МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

Для возможности обнаружения локальных очагов скопления микротрещин и оценки их концентрации в образцах минералов, в которых невозможно напрямую возбудить акустические сигналы лазерным излучением из-за его слабого поглощения, лазерно-ультразвуковой преобразователь, использованный в [11], был модифицирован следующим образом (рис. 2). На лицевую сторону призмы из оргстекла приклеена пленка из черного полиэтилена, которая служит так называемым лазерным источником ультразвука. При поглощении лазерного излучения в его приповерхностном слое

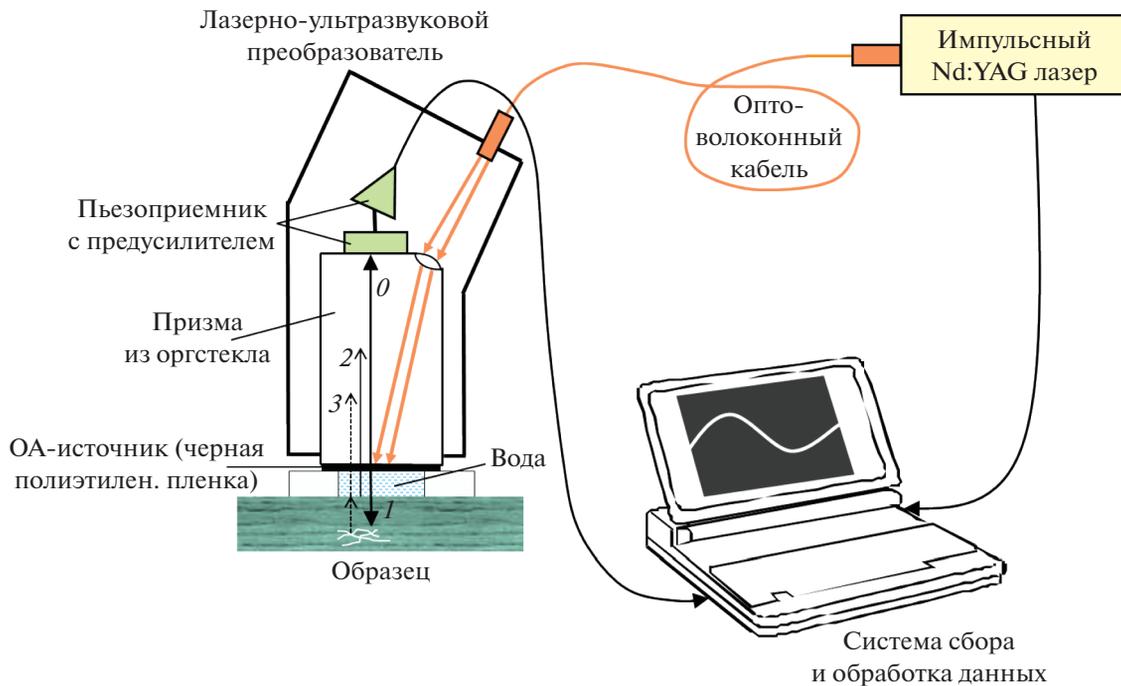


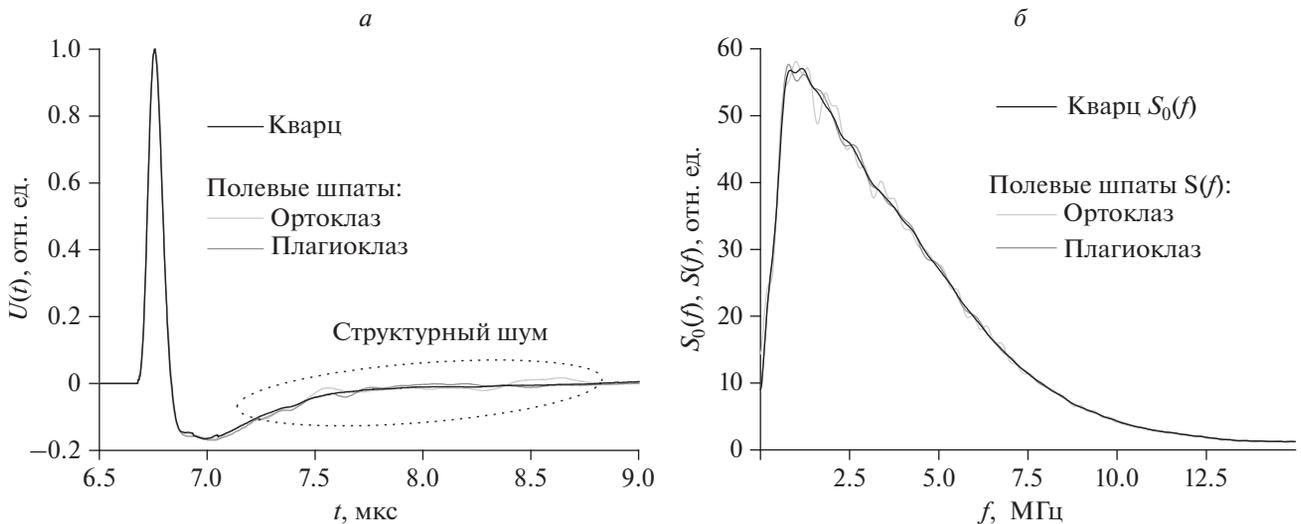
Рис. 2. Схема лазерно-ультразвукового преобразователя.

происходит неоднородный нестационарный нагрев этого слоя и его последующее тепловое расширение. Результирующее термоупругое напряжение в полиэтилене преобразуется в два одинаковых импульса продольных ультразвуковых волн, распространяющихся в противоположных направлениях. Амплитуда и временной профиль (частотный спектр) этих импульсов определяются оптическими и теплофизическими свойствами полиэтилена, временным профилем интенсивности поглощенного лазерного импульса и соотношением акустических импедансов оргстекла и полиэтилена. Один импульс, обозначенный цифрой  $\theta$  на рис. 2, распространяется назад в призму к пьезоприемнику и не используется в измерениях, другой импульс  $I$  распространяется вперед в иммерсионный слой дистиллированной воды между полиэтиленом и исследуемым образцом и далее в образец (зондирующий ультразвуковой импульс). При этом он частично отражается на границе раздела вода-образец и распространяется назад через воду, полиэтилен и призму, и также регистрируется пьезоприемником (импульс 2 на рис. 2). Зондирующий импульс  $I$ , распространяющийся в образце, частично рассеивается на неоднородностях его структуры, например, трещинах и инородных включениях. Серия ультразвуковых импульсов 3 соответствует сигналам, обратно рассеянным на неоднородностях структуры образца, которые распределены по всей толщине прозвучивания и формируют так называемый структурный шум. Временное окно зарегистрированных

сигналов соответствует времени пробега зондирующего импульса до тыльной поверхности образца и обратно к границе раздела образец-вода. Характерный радиус ультразвукового пучка на лицевой поверхности образца практически совпадает с радиусом поглощенного лазерного пучка и составляет 2–3 мм. Практически такой же является локальность тестирования в поперечном направлении (по плоскости образца), что позволяет выявлять участки повышенной трещиноватости в структурно-неоднородных геоматериалах.

Для исследования локальной концентрации микротрещин в прозвучиваемом участке образца регистрируются временной трек совокупности импульсов 2 и 3, а также аналогичный трек, зарегистрированный от однородной пластины плавленого кварца, которая ставится на место исследуемого образца. Временная форма сигнала от кварцевой пластины повторяет зондирующий импульс  $I$  с учетом изменения амплитуды за счет отражения на границе раздела вода-кварц (см. схему преобразователя на рис. 2).

На рис. 3а показаны примеры временных профилей нормированных ультразвуковых сигналов для кварцевой пластины, ортоклаза (участок 3) и плагиоклаза (участок 4). В этих участках образцов визуально наблюдалось существенное скопление микротрещин. При распространении в образце зондирующий импульс частично рассеивается на микротрещинах, расположенных на разных глубинах в прозвученном участке образца. Обратное-



**Рис. 3.** Примеры ультразвуковых сигналов от кварцевой пластины и образцов ортоклаза (участок 3) и плагиоклаза (участок 4): временные профили (а) и соответствующие спектры (б).

рассеянные сигналы регистрируются как нерегулярные пики на “хвосте” опорного импульса и образуют структурный шум. Для оценки степени локальной трещиноватости в прозвученном участке образца используется спектральный анализ сигнала во временном окне, соответствующем времени пробега зондирующего импульса до тыльной поверхности образца и обратно к границе раздела образец–вода. Такие спектры сигналов с рис. 3а показаны на рис. 3б. Следует отметить, что для анализа не требуется регистрация донного ультразвукового импульса, отраженного от тыльной поверхности образца. Это позволяет преодолеть существенное ограничение при измерениях скоростей распространения ультразвуковых волн, а именно, требование плоскопараллельности граней исследуемого образца. Для корректного измерения мощности структурного шума только входная поверхность образца должна быть плоской, поскольку ее шероховатость или кривизна могут исказить форму вводимого зондирующего импульса и, соответственно, повлиять на результаты измерения. Плоскопараллельность образцов никак не влияет на мощность структурного шума; в наших исследованиях плоскопараллельность нужна была только для измерений коэффициента затухания ультразвука во всех исследуемых участках (см. ниже).

Амплитудный спектр  $S(f)$  ультразвукового сигнала от образца представляет собой совокупность спектра зондирующего импульса и нерегулярной “осциллирующей” части. Спектр зондирующего импульса  $S_0(f)$  соответствует спектру сигнала от кварцевой пластины, поскольку мы считаем, что в кварце структурный шум отсутствует. Информация о локальной концентрации микротрещин в прозвученном участке образца

содержится именно в нерегулярной части спектра, определяемой рассеянными назад сигналами или структурным шумом. Мы полагаем, что увеличение амплитуды этих сигналов и, соответственно, амплитуды осцилляций в спектре  $S(f)$ , определяется увеличением концентрации микротрещин в исследуемом участке образца. Величина

$$W = \frac{\int_{f_{min}}^{f_{max}} [S(f) - S_0(f)]^2 df}{\int_{f_{min}}^{f_{max}} S_0^2(f) df} \quad (1)$$

представляет собой интегральную нормированную мощность структурного шума,  $f_{min} = 0.2$  МГц и  $f_{max} = 15$  МГц соответствуют границам рабочего спектрального диапазона лазерно-ультразвукового преобразователя. Величина  $W$  содержит вклады от всех сигналов, рассеянных на разном размерных микротрещинах, локализованных в прозвученном участке образца, без разделения вкладов от микротрещин конкретного размера.

Для подтверждения того, что именно микротрещины влияют на эффективность обратного рассеяния ультразвуковых сигналов (или мощность структурного шума) в исследуемых участках образцов, в этих же участках были проведены измерения коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн. Для этой цели использовался метод широкополосной акустической спектроскопии с лазерным источником ультразвука – оптическим светофильтром СЗС-22 [12], коэффициент затухания рассчитывался по формуле (2) из [12]. Известно, что микротрещины являются весьма эффективными рассеивателями

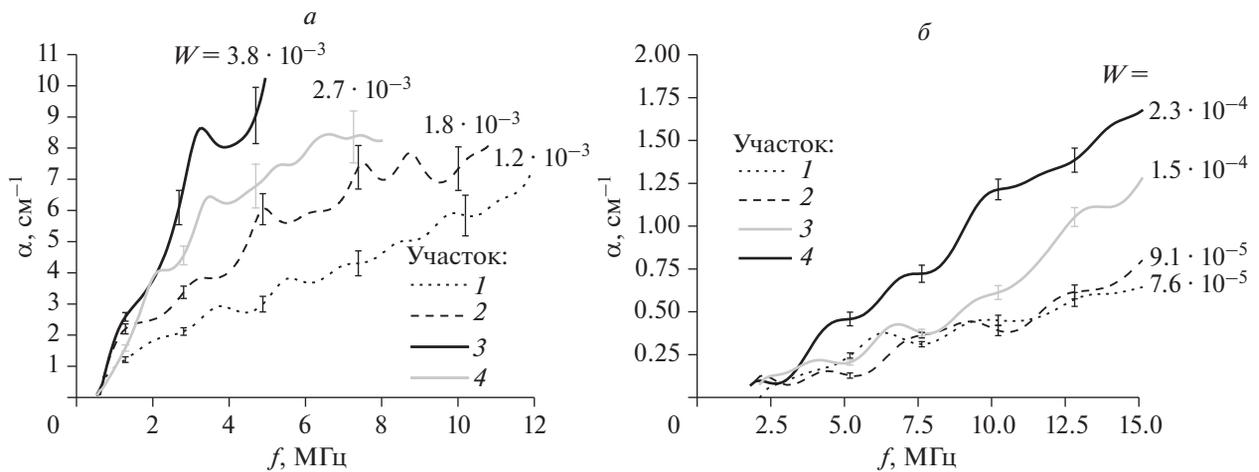


Рис. 4. Частотные зависимости коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн и соответствующие значения мощности структурного шума  $W$  в исследованных участках образцов ортоклаза (а) и плагиоклаза (б).

ультразвука и для исследуемых минералов характерно практическое отсутствие твердых инородных включений и зерен субмиллиметровых размеров с шероховатыми нерегулярными границами. Поэтому возрастание абсолютного значения коэффициента затухания ультразвука в исследуемом участке образца практически во всем диапазоне частот источника СЗС-22 мы качественно объясняли возрастанием концентрации микротрещин в данном участке. Затем была проанализирована корреляция между величиной коэффициента затухания ультразвука и мощностью структурного шума в рабочем спектральном диапазоне используемого лазерно-ультразвукового преобразователя (0.2–15 МГц).

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для расчета мощности структурного шума во всех образцах минералов в качестве спектра зондирующего импульса  $S_0(f)$  был взят результат усреднения спектров четырех импульсов от произвольно выбранных участков кварцевой пластины. Разность между  $S_0(f)$  и спектром каждого импульса определяет так называемую мощность “аппаратного” шума  $W_0$ , которая вычислялась по формуле (1), где в качестве  $S(f)$  были взяты спектры каждого импульса. Ненулевая величина  $W_0$  определяется электрическими шумами и шумами дискретизации сигнала, а также некоторой нестабильностью временной формы лазерного импульса и соответствующего акустического импульса, возбуждаемого в полиэтилене для каждого участка кварцевой пластины. Усреднение по четырем реализациям для кварцевой пластины дает величину  $\langle W_0 \rangle \approx 1.3 \cdot 10^{-5}$ , которая может рас-

считываться как погрешность определения  $W$  для образцов минералов.

На рис. 4 представлены измеренные частотные зависимости коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн  $\alpha(f)$  в четырех участках образцов ортоклаза и плагиоклаза. В этих же участках предварительно были визуализированы выходы микротрещин на поверхность образца, а затем измерена мощность структурного шума  $W$ , значения которой также указаны на рис. 4 для каждого участка. Результаты показывают, что величина  $W$  во всех исследованных участках обоих образцов на один-два порядка превышает среднюю мощность аппаратного шума  $\langle W_0 \rangle$ . Было обнаружено, что в участках с видимым локальным скоплением микротрещин на поверхности наблюдается существенное возрастание  $\alpha(f)$  во всем рабочем частотном диапазоне (участок 3 для образца ортоклаза и участок 4 для плагиоклаза, см. рис. 1). Также видно, что чем выше коэффициент затухания ультразвука в исследуемом участке образца, тем больше значение  $W$  в этом участке. Таким образом, можно считать, что увеличение мощности структурного шума обусловлено возрастанием локальной концентрации микротрещин в исследуемом участке образца. Следует отметить, что лазерный оптико-акустический метод может применяться и для оптически непрозрачных образцов, в которых невозможно заранее визуализировать локальные скопления микротрещин. Для получения количественной информации о концентрации микротрещин в геоматериалах по значениям мощности структурного шума необходима предварительная калибровка лазерно-ультразвукового метода по данным рентгеновской компьютерной томографии, то есть получение зависимости величины  $W$  от процентного содержания микротрещин в конкретном геоматериале.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Предложен и экспериментально реализован лазерный оптико-акустический метод оценки локальной микротрещиноватости лабораторных образцов двух типов полевых шпатов. Метод основан на измерении спектральной мощности импульсов продольных ультразвуковых волн, обратно рассеянных на микротрещинах в образцах (так называемой мощности структурного шума), и позволяет проводить исследования при одностороннем доступе к образцу без измерения его толщины и регистрации донных эхо-сигналов. Исследованы образцы ортоклаза и плагиоклаза с локальными скоплениями микротрещин, которые были выявлены по данным оптической микроскопии поверхности образцов. В участках с визуально наблюдаемыми скоплениями микротрещин обнаружено возрастание коэффициента затухания продольных ультразвуковых волн в спектральном диапазоне 1–15 МГц по сравнению с неповрежденными участками. Такое возрастание объяснялось повышенной концентрацией микротрещин размерами в десятки и сотни микрометров, которые эффективно рассеивают ультразвук в мегагерцовом диапазоне частот. В участках с повышенным затуханием продольных ультразвуковых волн также наблюдалось возрастание мощности структурного шума. Обнаруженная прямая корреляция между увеличением локальной концентрации микротрещин и возрастанием мощности структурного шума может служить основой для разработки систем неразрушающего ультразвукового контроля возникновения и эволюции микротрещин в структуре геоматериалов под действием внешних нагрузок.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. *Wittke W.* Rock mechanics: theory and applications with case histories. Berlin: Springer-Verlag, 1990. 1075 p.
2. The rock physics handbook. Tools for seismic analysis in porous media. N.Y., Melbourne: Cambridge University Press, 2009. 525 p.
3. *Zhu J., Zhai T., Liao Z. et al.* // Rock Mech. Rock Eng. 2020. V. 53. P. 3983.
4. *Kenigsberg A.R., Riviere J., Marone C., Saffer D.M.* // Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 2020. V. 130. Art. No. 104306.
5. *Гусев В.Э., Карабутов А.А.* Лазерная оптоакустика. М.: Наука, 1991. 304 с.
6. *Карабутов А.А., Подымова Н.Б.* // Мех. композит. матер. 1995. Т. 31. № 3. С. 405; *Karabutov A.A., Podymova N.B.* // Mech. Compos. Mater. 1995. V. 31. No. 3. P. 301.
7. *Karabutov A.A., Devichensky A. Yu., Ivochkin A. Yu. et al.* // Ultrasonics. 2008. V. 48. P. 631.
8. *Карабутов А.А., Подымова Н.Б., Беляев И.О.* // Акуст. журн. 2013. Т. 59. № 6. С. 714; *Karabutov A.A., Podymova N.B., Belyaev I.O.* // Acoust. Phys. 2013. V. 59. No. 6. P. 667.
9. *Ciofini D., Mencaglia A.A., Siano S.* // Constr. Build. Mater. 2018. V. 187. P. 610.
10. *Соколовская Ю.Г., Подымова Н.Б., Карабутов А.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 1. С. 127; *Sokolovskaya Yu.G., Podymova N.B., Karabutov A.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 1. P. 93.
11. *Подымова Н.Б., Карабутов А.А.* // Акуст. журн. 2021. Т. 67. № 1. С. 55; *Podymova N.B., Karabutov A.A.* // Acoust. Phys. 2021. V. 67. No. 1. P. 47.
12. *Карабутов А.А., Подымова Н.Б.* // Акуст. журн. 2017. Т. 63. № 3. С. 265; *Karabutov A.A., Podymova N.B.* // Acoust. Phys. 2017. V. 63. No. 3. P. 288.

**Laser optoacoustic technique for estimating a local microcracking in mineral samples**

**N. B. Podymova<sup>a,\*</sup>, Yu. G. Sokolovskaya<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

<sup>\*</sup>*e-mail: npodymova@mail.ru*

A laser optoacoustic technique is proposed and realized experimentally to measure the spectral power of pulses of longitudinal ultrasonic waves backscattered on local microcracks in feldspar samples. The direct correlation between an increased level of this power and a growth in the local concentration of microcracks in the samples is established.

УДК 519.6

## КВАДРАТУРЫ СО СВЕРХСТЕПЕННОЙ СХОДИМОСТЬЮ

© 2022 г. М. А. Тинтул<sup>1, \*</sup>, В. С. Хохлачев<sup>1</sup>, А. А. Белов<sup>1, 2</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Физический факультет, Москва, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Российский университет дружбы народов”, Москва, Россия

\*E-mail: maksim.tintul@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Вычисление квадратур возникает во многих физических и технических приложениях. Предложена замена переменных интегрирования, кардинально повышающая точность формулы средних. Для бесконечно гладких подинтегральных функций закон сходимости становится сверхстепенным. Он существенно быстрее степенного и близок к экспоненциальному. Для подинтегральных функций с ограниченной гладкостью реализуется степенная сходимость с максимально достижимым порядком точности.

DOI: 10.31857/S0367676522110308

### ВВЕДЕНИЕ

Во многих физических задачах требуется приближенно вычислять интегралы, не берущиеся в элементарных функциях. Приведем некоторые примеры:

1) Вычисление специальных функций математической физики: функции Ферми–Дирака, равные моментам фермиевского распределения, гамма-функция, цилиндрические функции и ряд других.

2) Расчет фурье-коэффициентов заданной функции, преобразования Фурье и Лапласа.

3) Численное решение интегральных уравнений, как корректно поставленных, так и некорректных.

4) Решение краевых задач для уравнений в частных производных (включая задачи на собственные значения), записанных в интегральной форме и т.д.

Такие интегралы необходимо вычислять с высокой точностью вплоть до ошибок компьютерного округления.

Как правило, для сеточного вычисления квадратур используют методы трапеций, средних и Симпсона на равномерной сетке. Для этих методов хорошо известна мажорантная оценка погрешности. Для формул трапеций и средних она составляет  $O(h^2)$ , для формулы Симпсона –  $O(h^4)$ , где  $h$  – шаг сетки. Существуют способы повышения точности: расчет на наборе сгущающихся се-

ток и экстраполяционное уточнение по методу Ричардсона, уточнение по формуле Эйлера–Маклорена и др. [1, 2]. Все эти способы дают степенную зависимость погрешности от шага сетки  $O(h^m)$ .

Если подинтегральная функция является периодической, и интеграл вычисляется по полному периоду, то зависимость погрешности от шага становится не степенной, а экспоненциальной  $\sim \exp(-1/h)$  [3–5]. Это означает, что при уменьшении шага вдвое число верных знаков в ответе примерно удваивается. Такая скорость сходимости намного быстрее степенной. Однако соответствующий класс подинтегральных функций довольно узок. В литературе предпринимались попытки расширить этот класс [6–9], однако они были признаны [7] неудачными.

В данной работе предложен подход, кардинально ускоряющий сходимость формулы средних. Он основан на специальной замене переменных интегрирования. Подынтегральная функция может быть непериодической. Если она бесконечно гладкая, то предлагаемая замена обеспечивает сверхстепенную сходимость квадратуры. Такая скорость сходимости существенно быстрее степенной и близка к экспоненциальной.

Если подинтегральная функция имеет ограниченную гладкость, то предлагаемый метод дает степенную сходимость с максимально достижимым порядком точности.

Предлагаемый подход не требует априорной информации о характере подынтегральной функции и единообразно применим к широкому кругу задач. Класс подынтегральных функций, для которых реализуется сверхстепенная сходимость квадратур, существенно расширяется.

**ЗАМЕНА  
ПЕРЕМЕННЫХ ИНТЕГРИРОВАНИЯ**

Рассмотрим интеграл

$$I = \int_0^1 f(x)dx. \tag{1}$$

Выполним замену переменных интегрирования в два этапа. Сначала с помощью дробно-полиномиального преобразования  $t(x)$  отобразим отрезок  $x \in (0, 1)$  на прямую  $t \in (-\infty, +\infty)$ . Затем эту прямую отобразим на отрезок  $\xi \in (0, 1)$  с помощью преобразования  $t(\xi)$ , производные которого стремятся к нулю вблизи  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$  быстрее любой степени  $\xi^m$ .

Такие замены можно составить различными способами. В данной работе рассматривалось преобразование

$$t(\xi) = \frac{A(\xi - 0.5)}{\xi^\alpha(1 - \xi)^\alpha}, \quad x(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{th}(Bt), \tag{2}$$

где  $A, B, \alpha$  – постоянные. Отображение (2) приведено на рис. 1 в виде зависимости  $x(\xi)$ . Она практически линейна в середине отрезка, но на его концах производные  $x_\xi$  быстро стремятся к нулю. Возможна также реализация замены (2), в которой вместо гиперболического тангенса берется функция ошибок  $\Phi(Bt)$ .

После замены (2) интеграл преобразуется к виду

$$I = \int_0^1 \tilde{f}(\xi) d\xi, \quad \tilde{f}(\xi) = f\{x[t(\xi)]\}x_t[t(\xi)]t_\xi(\xi). \tag{3}$$

*Периодическое продолжение*

Покажем, что новая подынтегральная функция  $\tilde{f}(\xi)$  допускает бесконечно гладкое периодическое продолжение за границы отрезка  $\xi \in (0, 1)$ .

Выражение  $t_\xi(\xi) \sim \xi^{-\alpha-1}(1 - \xi)^{-\alpha-1}$  имеет полюсы на концах отрезка  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$ . Однако при  $\xi \rightarrow 0 + 0$  и  $\xi \rightarrow 1 - 0$  производная  $x_t \sim \exp(-\xi^{-\alpha}(1 - \xi)^{-\alpha})$  стремится к нулю существенно быстрее. В результате  $x_t t_\xi \rightarrow 0$  при стремлении к точкам  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$  внутри отрезка. Поэтому  $\tilde{f}(\xi)$  обращается в нуль на границах отрезка.

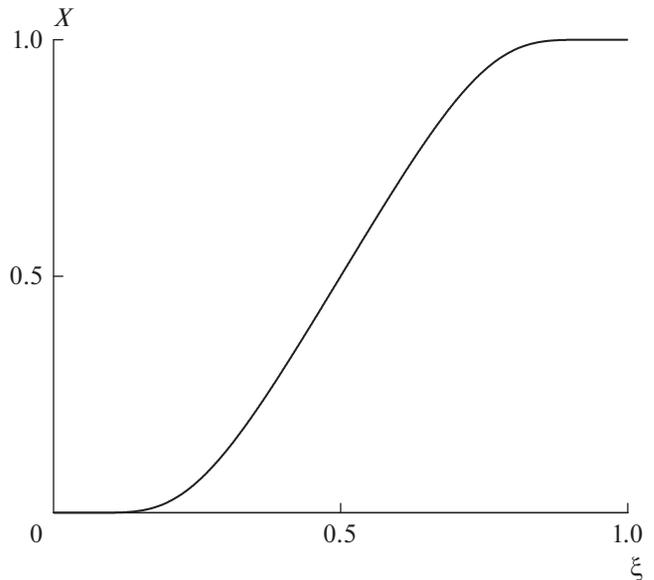


Рис. 1. Преобразование (2). Параметры  $A, B$  и  $\alpha$  равны единице.

Аналогично можно показать, что все производные этой функции стремятся к нулю при  $\xi \rightarrow 0 + 0$  и  $\xi \rightarrow 1 - 0$ . Например, первая производная имеет вид

$$\tilde{f}_\xi = f_x x_t^2 t_\xi^2 + f x_{tt} t_\xi^2 + f x_t t_{\xi\xi}. \tag{4}$$

Все производные  $dt^m/d\xi^m \sim \xi^{-\alpha-m}(1 - \xi)^{-\alpha-m}$  на границах отрезка имеют полюсы, которые умножаются на выражение  $\sim \exp(-\xi^{-\alpha}(1 - \xi)^{-\alpha})$  в различных степенях. Поэтому при  $\xi \rightarrow 0 + 0$  и  $\xi \rightarrow 1 - 0$  имеем  $\tilde{f}_\xi \rightarrow 0$ . То же верно и для более высоких производных  $d\tilde{f}_\xi^m/d\xi^m$ . Таким образом, подынтегральная функция  $\tilde{f}$  может быть бесконечно гладко периодически продолжена за границы отрезка  $\xi \in (0, 1)$ .

**СХОДИМОСТЬ ФОРМУЛЫ СРЕДНИХ**

На отрезке  $\xi \in (0, 1)$  введем равномерную сетку с шагом  $h = 1/N$ . Полуцелые узлы обозначим через  $\xi_{n+1/2} = (n - 1/2)h, n = 1, \dots, N$ . Запишем квадратуру средних

$$I_N = \sum_{n=1}^N \tilde{f}(\xi_{n+1/2}). \tag{5}$$

Справедлива

*Теорема*

А) Если  $f(x)$  является бесконечно гладкой на отрезке  $x \in (0, 1)$ , то квадратура (5) имеет сверхстепенную сходимость. Б) Если  $f(x)$  имеет  $j$  не-

прерывных производных на  $x \in (0, 1)$ ,  $(j + 1)$ -я производная имеет разрыв в точке  $x = a \in (0, 1)$ , и эта точка является узлом сетки, то квадратура (5) имеет степенную сходимость. Порядок точности равен  $j + 2$ , если  $j$  четно, и  $j + 3$ , если  $j$  нечетно. Такой порядок точности является максимальным при данной гладкости подинтегральной функции.

#### Доказательство

Докажем утверждение А). Степенная часть погрешности квадратуры средних (5) описывается формулой Эйлера–Маклорена [1]. Она содержит разности нечетных производных на концах отрезка интегрирования

$$\delta = \sum_{k=1}^{\infty} b_k h^{2k} \left( \tilde{f}^{(2k-1)}(1) - \tilde{f}^{(2k-1)}(0) \right), \quad b_k = \text{const.} \quad (6)$$

Как отмечалось выше, после замены переменных (2) производные  $\tilde{f}^{(k)}(\xi) \rightarrow 0$  при  $\xi \rightarrow 0 + 0$  и  $\xi \rightarrow 1 - 0$ . Все слагаемые в сумме (6) обращаются в нуль. Поэтому в погрешности формулы средних не остается степенных членов, и сходимость оказывается сверхстепенной.

Докажем утверждение Б). При указанных предположениях степенной вклад в погрешность формулы средних имеет вид

$$\begin{aligned} \delta &= \sum_{k=1}^{\infty} b_k h^{2k} \left( \tilde{f}^{(2k-1)}(1) - \tilde{f}^{(2k-1)}(0) \right) + \\ &+ \sum_{k=1}^K b_k h^{2k} \left( \tilde{f}^{(2k-1)}(a-0) - \tilde{f}^{(2k-1)}(a+0) \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Первая сумма в (7) аналогична (6). После замены переменных (2) она обращается в нуль.

Вторая сумма есть погрешность, возникающая из-за особенности в точке  $a$ . Если  $2k - 1 \leq j$ , то в силу непрерывности правые и левые предельные значения производных порядка  $2k - 1$  одинаковы  $\tilde{f}^{(2k-1)}(a-0) = \tilde{f}^{(2k-1)}(a+0)$ . Каков предел суммирования  $K$ ? Поскольку  $\tilde{f}^{(j+1)}$  разрывна в точке  $a$ , и в (7) входят только нечетные производные, то возможны два случая. Если  $j$  нечетное, то  $2K - 1 = j + 2$ . Тогда  $\delta = O(h^{j+3})$ . Если  $j$  четное, то  $2K - 1 = j + 1$ , и  $\delta = O(h^{j+2})$ . Очевидно, такой порядок точности является максимальным, т.е. он не может быть повышен. Теорема доказана.

#### Замечание

В литературе описаны [6–9] замены переменных, аналогичные (2). В этих работах использовались формулы трапеций и Симпсона, в которых необходимо вычислять подинтегральную функцию в граничных точках. Однако после замены

(2) подинтегральная функция  $\tilde{f}(\xi)$  имеет существенно особые точки в границах отрезка  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$ . Поэтому вычисление  $\tilde{f}(0)$  и  $\tilde{f}(1)$  представляет проблему; в частности, возникает переполнение компьютерных чисел.

Чтобы этого избежать, в [6] было предложено обрезать отрезок интегрирования, т.е. вместо  $\xi \in (0, 1)$  рассматривать  $\xi \in (\epsilon, 1 - \epsilon)$ , где  $\epsilon$  – некоторое малое число. Такое обрезание внесло существенную погрешность, и реализовать сверхстепенную сходимость не удалось. Авторы работы [7] провели численные эксперименты и установили, что по количественной точности этот подход уступает формуле Симпсона без замены переменных. Поэтому этот подход был признан неперспективным [7].

Мы используем формулу средних, в которой не требуется вычислять  $\tilde{f}(0)$  и  $\tilde{f}(1)$ . Поэтому описанная трудность не возникает, и реализуется сверхстепенная сходимость.

#### АПРОБАЦИЯ МЕТОДА

##### Бесконечно гладкая подинтегральная функция

В качестве примера рассмотрим тестовый интеграл с известным точным значением

$$I = \int_0^1 e^x / (e - 1) dx = 1. \quad (8)$$

Подынтегральная функция является бесконечно гладкой.

Расчет проводился на наборе сеток с различными  $N = 2, 4, 8, \dots$ . На каждой сетке вычислялась квадратура средних и ее погрешность  $\Delta = |I - I_N|$ , равная разности численного и точного интегралов. На рис. 2 приведен график погрешности  $\Delta$  в зависимости от числа шагов сетки  $N$ . Масштаб графика полулогарифмический. В таком масштабе экспоненциальной сходимости соответствует прямая линия, а степенной – логарифмическая кривая.

Темные кружки соответствуют расчету с заменой переменных (2), светлые кружки – расчету без нее. Видно, что предлагаемая замена переменных кардинально повышает точность: уже при  $N \sim 100$  погрешность составляет  $\Delta \sim 10^{-14}$ , что сопоставимо с ошибками округления. Выигрыш по точности по сравнению с расчетом без замены переменных достигает 10 порядков. Скорость сходимости несколько уступает экспоненциальной, но кардинально превосходит степенную.

Из-за наличия существенно особых точек  $\tilde{f}$  на границах отрезка зависимость погрешности от числа шагов является немонотонной и знакопеременной [10, 11]. На данном графике это видно

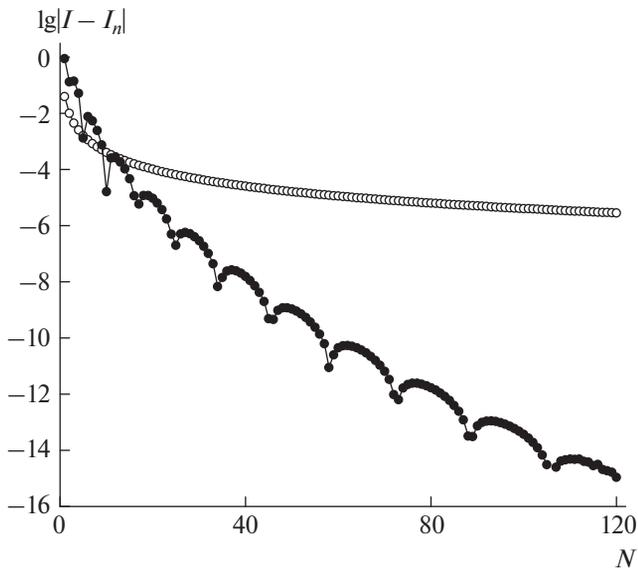


Рис. 2. Погрешность формулы средних в тесте (8). Обозначения – см. текст.

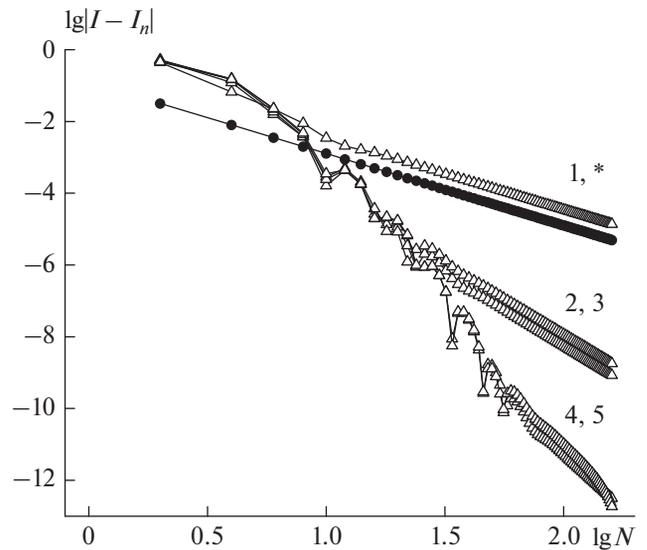


Рис. 3. Погрешность формулы средних в тесте (9). Обозначения – см. текст.

по немонотонному поведению кривой. Локальные минимумы соответствуют смене знака погрешности.

Таким образом, предложенная замена кардинально повышает точность формулы средних. Мы рекомендуем ее к широкому применению в практических вычислениях.

*Подынтегральная функция с ограниченной гладкостью*

Нередко в приложениях нужно вычислять интегралы от кусочно-заданных сплайн-аппроксимаций и интерполянт. Они имеют ограниченную гладкость. Так, простейшая линейная интерполяция непрерывна, но имеет разрывы первой производной. Кубический сплайн непрерывен вместе со второй производной, а третья производная испытывает разрыв.

В качестве примера рассмотрим интеграл от функции

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x < 0.5, \\ 1 + (2x - 1)^m, & x \geq 0.5, \end{cases} \quad (9)$$

при целочисленных  $1 \leq m \leq 5$ . Функция (9) имеет  $m - 1$  непрерывную производную, а  $m$ -я производная испытывает разрыв. Точные значения интеграла  $I$  известны, они перечислены в табл. 1.

Расчет проводился на нескольких сгущающихся сетках. Они выбирались так, чтобы особенность  $x = 0.5$  являлась узлом. Например, для этого достаточно брать только четные  $N$ . Полученные погрешности в зависимости от числа шагов проведены на рис. 3. Масштаб графика двойной логарифмический. Поэтому степенной сходимости соответствует прямая линия, наклон которой равен порядку точности. Цифры около линий – значения  $m$ .

Таблица 1. Тест (9)

$m$	$I$	$q$
1	$1 + 2e^{0.5} - e$	2
2	$1 - 8e^{0.5} + 5e$	4
3	$1 + 48e^{0.5} - 29e$	4
4	$1 - 384e^{0.5} + 233e$	6
5	$1 + 3840e^{0.5} - 2329e$	6

Видно, что на достаточно подробных сетках кривые для каждого  $m$  стремятся к прямым линиям, т.е. реализуется степенная сходимость. Соответствующие порядки точности  $q$  приведены в табл. 1. Они полностью согласуются с теоремой 1.

На грубых сетках поведение кривых является нерегулярным. Погрешность зависит от  $N$  монотонно, меняет знак и убывает существенно быстрее степенного закона. По-видимому, закон сходимости на грубых сетках соответствует сверхстепенному (аналогично рис. 2). Это наблюдение требует теоретического осмысления.

Для сравнения на рис. 3 приведена погрешность расчета по формуле средних без замены переменных. Для всех рассмотренных  $m$  погрешности были примерно одинаковы, поэтому мы показали их одной линией. Она обозначена звездочкой (\*). Эта линия соответствует степенной сходимости со вторым порядком точности. Видно, что при  $m \geq 2$  (т.е. при наличии хотя бы одной непрерывной производной) предложенная замена повышает порядок точности и резко уменьшает количественную погрешность. На рис. 3 выигрыш по точности составил от 3 до 8 порядков.

Мы проводили аналогичный расчет, используя сетки, в которых особенность  $x = 0.5$  не попала в узел. Для этого достаточно брать только нечетные  $N$ . Этот случай не подпадает под теорему 1. Тем не менее, и для него теорема оказалась верна. Полученные погрешности были аналогичны рис. 3. В частности, скорость сходимости для рассмотренных  $m$  оказалась такой же. Количественная точность была несколько хуже рис. 3. Это было наиболее заметно для  $m = 1$ . Для других  $m$  ухудшение точности оказалось несущественным.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена специальная замена переменной интегрирования, которая кардинально повышает точность квадратуры средних. Для бесконечно гладких подынтегральных функций сходимость становится сверхстепенной. Для функций ограниченной гладкости закон сходимости остается степенным, но реализуется максимально достижимый порядок точности.

Проведем качественное сравнение предлагаемого подхода с другими методами повышения точности квадратур, перечисленными во введении.

Ни один из них не обеспечивает сверхстепенную сходимость. Поэтому для бесконечно гладких функций предлагаемый подход обеспечивает заведомо более высокую точность.

Использование поправок Эйлера–Маклорена требует большого количества априорной инфор-

мации о подынтегральной функции. Нужно точно вычислять высокие производные и априори задавать число учитываемых поправок. Поэтому максимальный порядок точности реализуется, если известен класс гладкости подынтегральной функции и положение особенностей.

Напротив, предлагаемый подход единообразно применим к подынтегральным функциям как бесконечно гладким, так и имеющим ограниченную гладкость. Класс гладкости и положение особенностей заранее знать не нужно.

Повышать порядок точности с помощью ричардсоновской экстраполяции можно только на достаточно подробных сетках, на которых уже реализуется теоретическая сходимость, но еще не достигнуты ошибки округления. На грубых сетках применение экстраполяции может даже ухудшить точность.

В предлагаемом методе даже на грубых сетках наблюдается сходимость, причем достаточно быстрая. Количественное сравнение экстраполяции по Ричардсону и предлагаемого метода для функций ограниченной гладкости выходит за рамки данной работы.

Работа поддержана грантом Программой стратегического академического лидерства РУДН.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калиткин Н.Н., Альшина Е.А.* Численные методы. Т. 1. Численный анализ. М.: Академия, 2013.
2. *Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В.* Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005.
3. *Trefethen L.N., Weideman J.A.C.* // SIAM Rev. E. 2014. V. 56. No. 3. P. 385.
4. *Kalitkin N.N., Kolganov S.A.* // Dokl. Math. 2017. V. 95. No. 2. P. 157.
5. *Kalitkin N.N., Kolganov S.A.* // Math. Models Comp. Simul. 2018. V. 10. No. 4. P. 472.
6. *Sag T.W., Szekeres G.* // Math. Comp. 1964. V. 18. P. 245.
7. *Sidi A.* // Intern. Ser. Numer. Math. V. 112. P. 359.
8. *Iri M., Moriguti S., Takasawa Y.* // J. Comp. Appl. Math. 1987. V. 17. P. 3.
9. *Mori M.* // Publ. Res. Inst. Math. Sci. Kyoto Univ. 1978. V. 14. P. 713.
10. *Белов А.А., Калиткин Н.Н., Хохлачев В.С.* // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. № 75.
11. *Хохлачев В.С., Белов А.А., Калиткин Н.Н.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 2. С. 282.

**Quadratures with super-power convergence****M. A. Tintul<sup>a, \*</sup>, V. S. Khokhlachev<sup>a</sup>, A. A. Belov<sup>a, b</sup>**<sup>a</sup>*Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*<sup>b</sup>*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, 117198 Russia*<sup>\*</sup>*e-mail: maksim.tintul@mail.ru*

Quadrature calculation arises in many physical and technical applications. A replacement of integration variables is proposed, which dramatically increases the accuracy of the mean rule. For infinitely smooth integrand functions, the convergence law becomes super-power. It is significantly faster than the power law and is close to exponential one. For integrals with bounded smoothness, power convergence is realized with the maximum achievable order of accuracy.

УДК 535.36

## ОБ АНАЛИТИЧЕСКОМ ОПИСАНИИ ДИНАМИКИ ПЛАНАРНЫХ ИМПУЛЬСОВ, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В РЕЖИМЕ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ

© 2022 г. В. А. Халяпин<sup>1, 2, \*</sup>, А. Н. Бугай<sup>3</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
“Балтийский федеральный университет имени И. Канта”, Калининград, Россия<sup>2</sup>Федеральное государственное образовательное бюджетное учреждение высшего образования  
“Калининградский государственный технический университет”, Калининград, Россия<sup>3</sup>Международная межправительственная организация  
“Объединенный институт ядерных исследований”, Дубна, Россия

\*E-mail: slavasxi@gmail.com

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

На основе метода моментов рассмотрена задача о динамике планарного импульса, распространяющегося в режиме туннельной ионизации. Получена система уравнений на параметры сигнала, с помощью метода Ляпунова найдены условия его квазистойчивого распространения.

DOI: 10.31857/S036767652211014X

### ВВЕДЕНИЕ

Исследование динамики интенсивных импульсов, распространяющихся в режиме ионизации, представляет как теоретический, так и практический интерес в связи с их применением в различных областях: дистанционном зондировании атмосферы [1], управлении молниями [2], генерации суперконтинуума [3], генерации терагерцового излучения [4] и др. Хорошо известно, что решение нелинейного уравнения Шрёдингера (НУШ) устойчиво только для одномерного случая  $D = 1$ , который отвечает чисто пространственным или временным сигналам. При размерности  $D = 2$ , что соответствует пучкам или планарным пространственно-временным импульсам и при  $D = 3$ , соответствующей оптическим пучкам, решения не устойчивы [5]. Для стабилизации сигналов с  $D > 1$  были предложены такие механизмы как насыщающая нелинейность [6], конкурирующие нелинейности [7], дифракция или дисперсия более высокого порядка [8], градиентный волновод [9], генерация второй гармоники [10]. Было показано, что ионизация также может стабилизировать сигнал [11–18]. Эта стабилизация обусловлена балансом между самофокусировкой, дифракцией и плазменной расходимостью. Известно, что ионизация приводит к сдвигу спектра импульса в сторону более высоких частот [19–21]. Это обусловлено генерацией свободных электро-

нов и приводит к отрицательному значению показателя преломления и, следовательно, к синему смещению спектра сигнала. Это явление противоположно хорошо известному вынужденному комбинационному саморассеянию (ВКС) [22–26].

Ионизация диэлектрика интенсивным световым импульсом может быть описана с помощью формулы Келдыша [27]. Различают два предельных режима (в зависимости от параметра Келдыша): многофотонный и режим туннельной ионизации. Аналитическое исследование импульсов, распространяющихся в режиме туннельной ионизации, представляет интерес поскольку область аномальной дисперсии групповой скорости для большинства сред относится к инфракрасной полосе пропускания [28]. Предел туннельной ионизации изучался в основном с помощью экспериментов и численного моделирования [28]. Это связано с математическими затруднениями, которые возникают при описании вклада туннельной ионизации в динамику сигнала. В работе [19] формула Келдыша для режима туннельной ионизации была аппроксимирована линейной функцией, а авторы [29] предложили использовать для этой цели степенную зависимость скорости ионизации от интенсивности. Недостатками этих подходов является то, что параметры приближенных формул для скорости ионизации приходится каждый раз подбирать в зависимости от рассматриваемого диапазона интенсивностей. В

настоящей работе мы предлагаем подход к приближенному учету вклада туннельной ионизации, лишенный вышеотмеченных недостатков.

### МЕТОД МОМЕНТОВ

В настоящей работе рассматривается динамика планарных сигналов, распространяющихся в режиме туннельной ионизации, с помощью метода моментов [25, 30, 31]. Уравнения, описывающие соответствующую динамику, имеют вид

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{i\beta_2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} - \frac{\beta_3}{6} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial \tau^3} - i\gamma \Psi |\Psi|^2 + \frac{\gamma}{\omega} \frac{\partial}{\partial \tau} (\Psi |\Psi|^2) + i\gamma T_R \Psi \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial \tau} + i\eta \Psi \int_{-\infty}^{\tau} W d\tau' - \frac{i\mu}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\omega$  – центральная частота сигнала,  $k$  – волновое число на центральной частоте,  $z$  – координата, вдоль которой распространяется сигнал,  $x$  – поперечная координата,  $\tau = t - z/v_g$  – время в сопутствующей системе координат,  $v_g$  – групповая скорость на частоте  $\omega$ ,  $\mu = 1/k$ ,  $\eta = s\omega\tau_c N_0/2$  – параметр, связанный с электронной плазмой,  $s = k_0\omega\tau_c/n_0 N_c (1 + \omega^2\tau_c^2)$  – поперечное сечение лавинной ионизации,  $N_c = \epsilon_0 m_e \omega^2 / e^2$  – критическая плотность плазмы, выше которой плазма перестает быть прозрачной,  $\epsilon_0$  – восприимчивость вакуума,  $\tau_c$  – время столкновения электронов,  $e$  и  $m$  – соответственно заряд и масса электрона,  $N_0$  – концентрация неионизированных молекул,  $W$  – степень ионизации, определяемая формулой Келдыша в пределе малых значений параметра Келдыша (режим туннельной ионизации).  $\beta_2$  – коэффициент дисперсии групповой скорости (ДГС),  $\beta_3$  – положительный параметр, определяющий дисперсию третьего порядка,  $\gamma$  – коэффициент кубической нелинейности,  $T_R$  – характеризует вклад ВКС. Коэффициент  $\beta_2$  положителен, если центральная частота импульса лежит в области нормальной дисперсии групповой скорости, и отрицателен в противоположном случае. Зависимость степени ионизации  $W$  от интенсивности  $I$  для диэлектрика в пределе туннельной ионизации определяется формулой Келдыша [27].

$$W = W_0 \left( \frac{|\Psi|}{B_T} \right)^{5/2} \exp\left(-\frac{B_T}{|\Psi|}\right). \quad (2)$$

Здесь  $W_0 = \sqrt{\pi} U_i^{5/2} m^{3/2} / 9\sqrt{8} \hbar^4 N_0$ ,  $B_T = \pi m^{1/2} U_i^{3/2} / 2e\hbar$ ,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $U_i$  – потенциал ионизации.

Анализ динамики параметров импульса проводился на основе метода моментов. Пробное решение выберем в виде

$$\Psi = B \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{\tau_p}\right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{a}\right)^2 + i\left(\phi - \frac{C\tau^2}{2\tau_p^2} - \frac{\epsilon x^2}{2a^2}\right)\right], \quad (3)$$

где  $B$  – амплитуда сигнала,  $\tau_p$  – его длительность,  $C$  – параметр, определяющий частотную модуляцию,  $\phi$  – фаза,  $a$  – параметр, пропорциональный ширине планарного сигнала,  $\epsilon$  – описывает кривизну волновых поверхностей. Все параметры зависят от координаты  $z$ . Определим моменты импульса в виде

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 d\tau dx, \quad (4)$$

$$\tau_p^2 = \frac{2}{E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tau^2 |\Psi|^2 d\tau dx, \quad (5)$$

$$a^2 = \frac{2}{E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 d\tau dx, \quad (6)$$

$$C = \frac{i}{E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tau \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \tau} \right) |\Psi|^2 d\tau dx, \quad (7)$$

$$\epsilon = \frac{i}{E} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) |\Psi|^2 d\tau dx. \quad (8)$$

Следуя методу моментов, получаем систему уравнений

$$E = B^2 \pi \tau_p a = \text{const}, \quad (9)$$

$$\frac{dv}{dz} = -\frac{C}{L_d v}, \quad (10)$$

$$\frac{d\rho}{dz} = -\frac{\epsilon}{L_D \rho}, \quad (11)$$

$$\frac{dC}{dz} = -\frac{(1+C^2)}{L_d v^2} + \frac{1}{L_N v \rho}, \quad (12)$$

$$\frac{d\epsilon}{dz} = -\frac{1}{L_D \rho^2} (1 + \epsilon^2) + \frac{1}{L_N v \rho} - \frac{\exp(-\sqrt{I_T v \rho} / I_0)}{L_\eta v^{3/4} \rho^{7/4}}. \quad (13)$$

В системе (10)–(13) были введены безразмерные параметры  $v = \tau_p / \tau_0$ ,  $\rho = a / a_0$ , где  $\tau_0$ ,  $a_0$  – начальные значения соответствующих параметров. Характерные дисперсионная, дифракционная, нелинейная и ионизационные длины определяются следующими выражениями  $L_d = \tau_0^2 / |\beta_2|$ ,  $L_D = a_0^2 / \mu$ ,  $L_N = c n_0 / 4\pi \gamma I_0$ ,  $L_\eta = I_T^{7/4} / 2\sqrt{\pi} \eta W_0 \tau_0 I_0^{7/4}$ , где введены обозначения  $I_{0,T} = c n_0 B_{0,T}^2 / 8\pi$ . В выраже-

нии (13) для учета ионизационного слагаемого использовали оценку  $I_T/I \sim (U_i/\hbar\omega)^2 \gg 1$  и ключевое приближение  $\exp(B_T/|\psi|) \approx \exp(B_T/B_0 - (B_T/2B_0)(r^2/R^2 + \tau^2/\tau_p^2))$ , которое позволило нам учесть вклад туннельной ионизации в динамику сигнала.

**СТАЦИОНАРНОЕ РЕШЕНИЕ И ЕГО УСТОЙЧИВОСТЬ**

Для того чтобы найти параметры стационарного состояния и условия его устойчивости, переписем (10)–(13) в виде

$$\frac{dv}{d\xi} = \frac{P_v}{m_v}, \tag{14}$$

$$\frac{dP_v}{d\xi} = -\frac{\partial U}{\partial v}, \tag{15}$$

$$\frac{d\rho}{d\xi} = \frac{P_\rho}{m_\rho}, \tag{16}$$

$$\frac{dP_\rho}{d\xi} = -\frac{\partial U}{\partial \rho} + \tilde{F}. \tag{17}$$

Здесь  $P_v = m_v \partial v / \partial \xi = -C/v$ ,  $P_\rho = m_\rho \partial \rho / \partial \xi = -\epsilon/\rho$ ,  $m_v = 1$ ,  $m_\rho = L_D/L_d$ ,  $\xi = z/L_d$ . Систему (14)–(17) можно трактовать как механическую аналогию, описывающую движение частицы по поверхности с координатными осями  $v$  и  $\rho$  в потенциальном поле

$$U = \frac{1}{2v^2} + \frac{L_d}{2L_D\rho^2} - \frac{L_d}{L_N v \rho}. \tag{18}$$

При этом масса частицы зависит от направления движения. Роль внешней силы, действующей

вдоль координаты  $\rho$ , играет ионизационное слагаемое  $\tilde{F} = L_d \exp(-\sqrt{I_T v \rho / I_0}) / L_\eta v^{3/4} \rho^{11/4}$ . Стационарное решение этой системы уравнений можно записать как

$$L_d = L_N, \tag{19}$$

$$\frac{1}{L_D} = \frac{1}{L_N} - \frac{\exp(-\sqrt{I_T/I_0})}{L_\eta}. \tag{20}$$

Выражения (19), (20) можно переписать в виде

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{2|\beta_2|}{k_0 n_2 I_0}}, \tag{21}$$

$$\frac{1}{a_0} = \sqrt{k_0 n_0 \left( \frac{k_0 n_2 I_T}{2X} - 2\sqrt{\pi} \eta W_0 \sqrt{\frac{2|\beta_2|}{k_0 n_2 I_T}} \frac{\exp(-\sqrt{X})}{X^{5/4}} \right)}. \tag{22}$$

Здесь  $X = I_T/I_0$  и мы использовали соотношение  $8\pi\gamma/cn_0 \equiv k_0 n_2$ , где  $n_2$  – нелинейный показатель преломления среды. Из (21), (22) следует, что с ростом интенсивности длительность сигнала уменьшается, а ширина увеличивается. Подкоренное выражение в (25) должно быть положительным (равенство нулю подкоренного выражения соответствует бесконечной ширине сигнала). Из этого условия находим

$$I_0 < 4I_T / (\tilde{W}(2A^2))^2, \tag{23}$$

где  $A = 4\eta W_0 \sqrt{2\pi|\beta_2|} / (k_0 n_2 I_T)^{3/2}$ ,  $\tilde{W}(x)$  – функция Ламберта [32].

Рассмотрим вопрос устойчивости стационарного решения (21), (22) системы (14)–(17). Следуя методу Ляпунова [33], получаем четыре собственных значения

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{-(U_{,vv} m_2 - dm_1) \pm \sqrt{(U_{,vv} m_2 - dm_1)^2 - 4m_1 m_2 (hU_{,vp} - dU_{,vv})}}{2m_1 m_2}}. \tag{24}$$

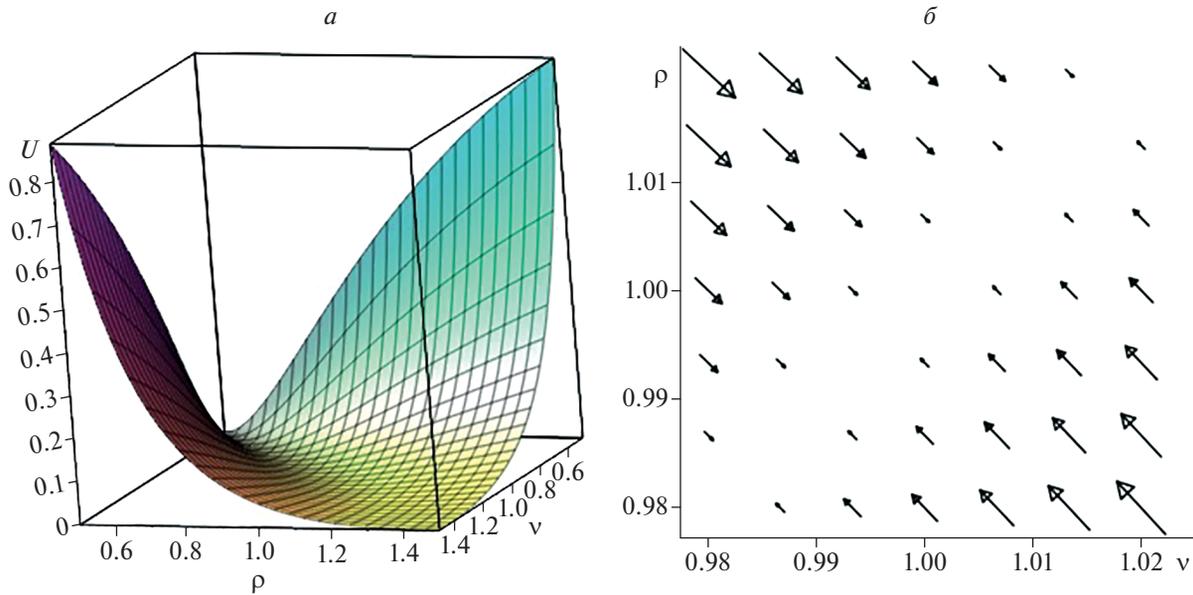
Здесь нижние индексы после запятой обозначают производную по соответствующим переменным,  $h = \tilde{F}_{,v} - U_{,vp}$ ,  $d = \tilde{F}_{,\rho} - U_{,\rho\rho}$ . Стационарное решение будет устойчивым, если  $\lambda$  не имеет положительной действительной части. Легко показать, что  $\lambda$  будет чисто мнимой, если выполняются условия

$$hU_{,vp} - dU_{,vv} > 0, \tag{25}$$

$$U_{,vv} m_2 - dm_1 > 0. \tag{26}$$

Равенство нулю действительной части означает, что вследствие малых возмущений параметры сигнала будут осциллировать в окрестности стаци-

онарных значений. Если убрать ионизационное слагаемое ( $\tilde{F} = 0$ ), то (25), (26) можно записать в виде условия минимума  $U_{,vv} U_{,\rho\rho} - (U_{,vp})^2 > 0$ ,  $U_{,vv} > 0$ . Как и следовало ожидать, потенциальная функция в этом случае не имеет минимума. На рис. 1а представлен вид потенциальной поверхности  $U$  без учета ионизации, а на рис. 1б соответствующее векторное поле  $F_v, F_\rho$ . Если же учесть ионизацию, то в рамках используемого приближения ( $I_T/I_0 \gg 1$ ) условия (25), (26) выполняются при любых интенсивностях. Этот результат согласуется с полученным ранее в работе [34] выво-



**Рис. 1.** Потенциальное поле  $U(v, \rho)$ , определяющее динамику относительной длительности  $v$  и ширины  $\rho$  планарной пули (без вклада ионизации  $L_\eta = \infty$ ) (а). Соответствующее поле сил, проекции, которых определяются выражениями  $F_v = -\partial U/\partial v$ ,  $F_\rho = -\partial U/\partial \rho$  (б).

дом для планарных сигналов, в которой была использована линейная аппроксимация формулы Келдыша в туннельном пределе. Следует отметить, что при рассмотрении вопроса устойчивости мы пренебрегли смещением частоты сигнала. Учет этого эффекта привел бы к выводу систему из равновесия. Однако, поскольку смещение частоты входит в систему уравнений на параметры сигнала через высшую дисперсию ( $\beta_3$ ) и нелинейность ( $\gamma/\omega$ ) [34], то этой дестабилизацией на начальном этапе динамики можно пренебречь. Кроме того, как было показано в работах [28, 35, 36], поглощение, вызванное ионизацией, приводит к тому, что сигнал распространяется в режиме световой пули на расстояниях порядка нескольких миллиметров в диэлектрике.

Исследуем область интенсивностей, удовлетворяющую условию (23), в зависимости от центральной длины волны сигнала. В качестве материала возьмем сапфир. Для сапфира ( $U_I = 7.3$  эВ,  $N_0 = 2.36 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ ,  $\tau_c = 1.59 \cdot 10^{-15} \text{ с}$ ) приближенная зависимость показателя преломления от длины волны в среднем инфракрасном диапазоне может быть записана в виде [37]

$$n_0 = 1.75 \sqrt{1 + \frac{1.73(\lambda_{\text{мкм}})^2}{(\lambda_{\text{мкм}})^2 - 18^2}}, \quad (27)$$

а коэффициент ДГС определяется следующей зависимостью

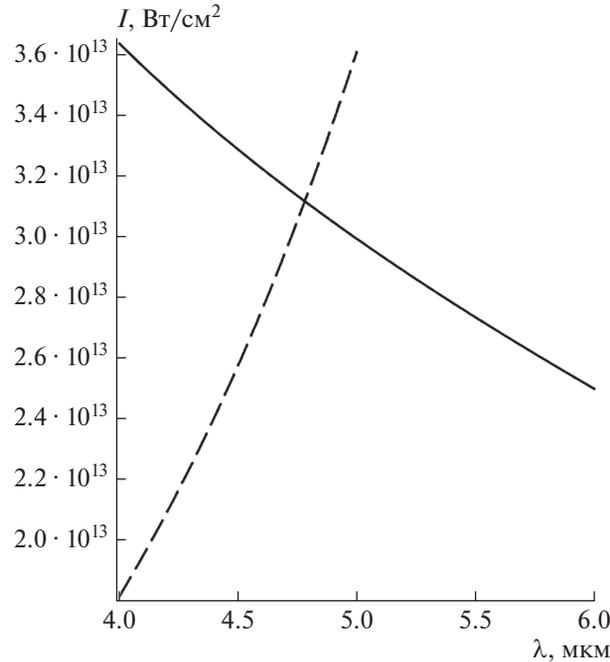
$$\beta_2 = \frac{\lambda^3}{2\pi c^2} \frac{d^2 n_0}{d\lambda^2}. \quad (28)$$

Нелинейный показатель преломления аппроксимируется выражением [38]

$$n_2 = n_2^0 + N_1 \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_1}\right) + N_2 \exp\left(-\frac{(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_2}\right). \quad (29)$$

Здесь  $n_2^0 = 2.5 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$ ,  $N_1 = 2.3 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$ ,  $N_2 = 1.0 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$ ,  $\lambda_0 = 266.0 \text{ нм}$ ,  $\lambda_1 = 46.6 \text{ нм}$ ,  $\lambda_2 = 1086.3 \text{ нм}$ . Подставляя (27)–(29) в (23), находим искомую зависимость (рис. 2). Для области, лежащей правее пунктирной линии выполняется условие  $\omega\tau_p > 10$ , при котором справедливо используемое в работе приближение медленно меняющейся огибающей. Взяв  $I_0 = 2.8 \cdot 10^{13} \text{ Вт}/\text{м}^2$ ,  $\lambda = 5 \text{ мкм}$ , из (21), (22) находим оценки для параметров планарного импульса:  $\tau_0 = 30 \text{ фс}$ ,  $a = 10 \text{ мкм}$ .

Выше мы получили, что условия устойчивости планарной пули относительно возмущений ее длительности и ширины (25), (26) выполняются для любых интенсивностей. Это означает, что



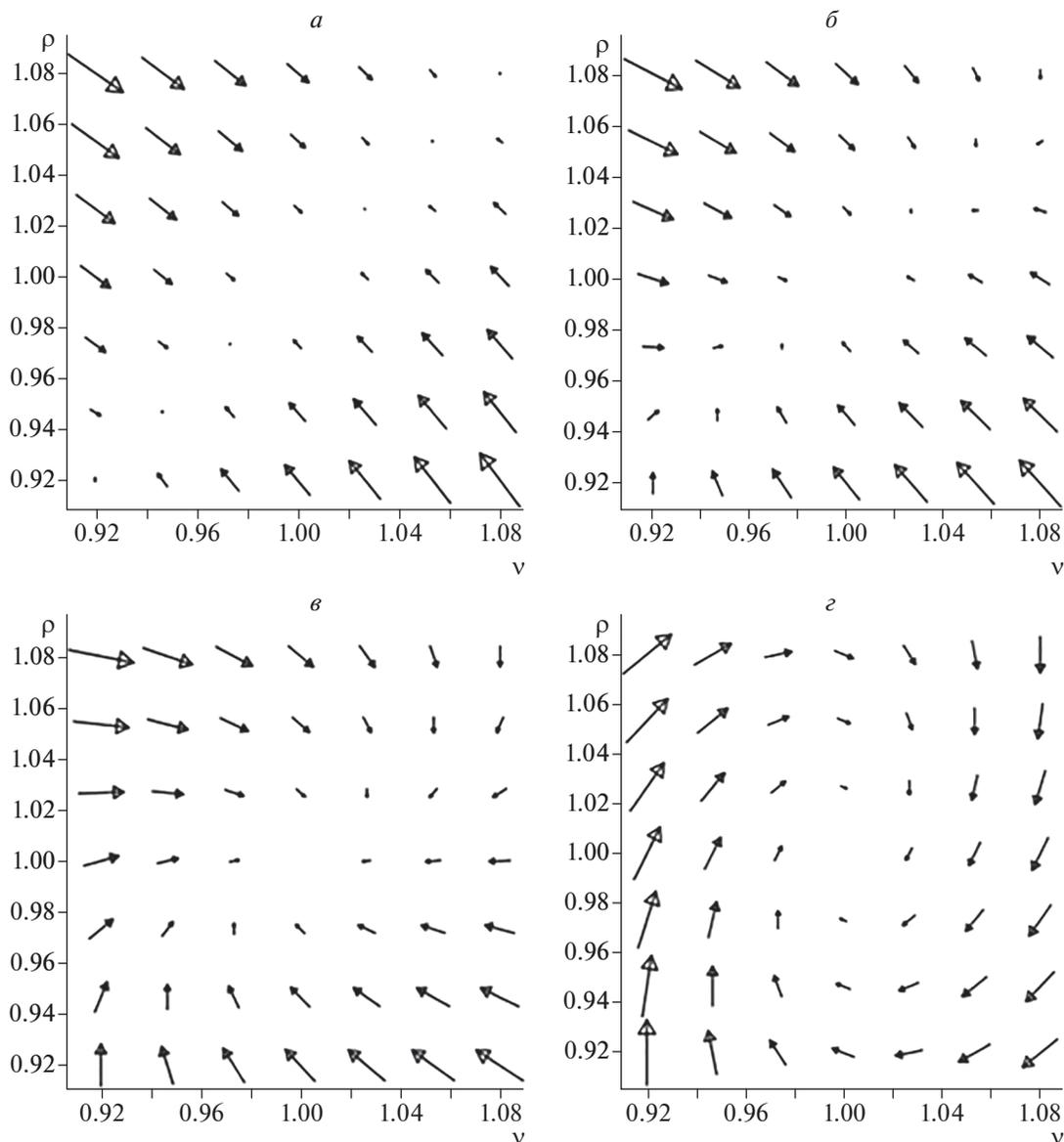
**Рис. 2.** Сплошная линия описывается правой частью условия (23), которое определяет верхнюю границу интенсивности для существования стационарного решения в сапфире. Область правее пунктирной линии, определяющей интенсивность по формуле (21) для случая  $\tau_p \omega = 10$ , соответствует области применимости метода медленно меняющейся огибающей ( $\tau_p \omega \geq 10$ ).

при малых отклонениях частицы из положения равновесия (мы используем механическую аналогию) на нее действуют возвращающие силы, направленные в точку равновесия  $\nu = 1$ ,  $\rho = 1$ . Из анализа векторного поля (с учетом ионизации) можно видеть (см. рис. 3), что возвращающие силы уменьшаются по экспоненциальному закону при уменьшении  $\nu$ . 3а) возвращающие силы таковы, что векторное поле напоминает векторное поле для случая без ионизации (рис. 1). Таким образом, хотя формально условия устойчивости при такой интенсивности выполнены и возвращающие силы не равны нулю, фактически небольшие возмущения, связанные с эффектами, которыми мы пренебрегли, быстро выбьют систему из равновесия. Из анализа векторного поля можно предположить, что квазиустойчивость планарной пули при длине волны  $\lambda = 5$  мкм можно ожидать начиная с интенсивности  $I_0 = 2 \cdot 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup>. Схожая ситуация наблюдалась при исследовании области устойчивости трехмерных световых пульс [39]. В отличие от планарной пули область устойчивости трехмерной пули ограничена и снизу по интенсивности. Здесь мы также проводили анализ векторного поля и показали, что фактическая область устойчивости (ввиду влияния эффектов поглощения и слагаемых следующего порядка

малости) лежит выше нижней границы формального окна устойчивости.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получено аналитическое описание распространения планарных импульсов в режиме взаимной компенсации эффектов дифракции и ионизационной расходимости, с одной стороны, и самофокусировки, с другой. Баланс временной динамики обуславливался компенсацией дисперсионного уширения кубической нелинейностью. С помощью метода моментов проанализирована динамика планарного сигнала в режиме туннельной ионизации. Получены аналитические выражения для квазистационарных длительности и ширины планарного импульса. С помощью метода Ляпунова найдены условия квазиустойчивого распространения. Следует отметить, что учет смещения частоты в красную область спектра за счет явления вынужденного комбинационного саморассеяния или в синюю, если преобладают эффекты ионизации, будет приводить к медленному выходу системы из баланса и возникновению осцилляций. Кроме того, равновесие будет нарушаться и за счет поглощения фотонов в процессе ионизации, которым мы пренебрегли в данном исследовании. Поэтому равновесие, исследованное в работе, имеет квазиустойчивый характер.



**Рис. 3.** Векторное поле  $F_v = -\partial U/\partial v$ ,  $F_\rho = -\partial U/\partial \rho + \tilde{F}$  (с учетом ионизации), определяющее динамику планарного импульса с центральной длиной волны  $\lambda = 5$  мкм, распространяющегося в сапфире, с интенсивностью  $I_0 = 1.5 \cdot 10^{13}$  (а),  $2 \cdot 10^{13}$  (б),  $2.3 \cdot 10^{13}$  (в),  $2.8 \cdot 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup> (г).

Работа Халяпина В.А. выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-02-2021-1748).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Rairoux P., Schillinger H., Niedermeier S. et al. // Appl. Phys. B. 2000. V. 71. P. 573.
2. Diels J.-C., Bernstein R., Stahlkopf K. et al. // Sci. Amer. 1997. V. 277. P. 50.
3. Alfano R.R. The supercontinuum laser source. N.Y.: Springer, 1989. 538 p.
4. D'Amico C., Houard A., Franco M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. Art. No. 235002.
5. Kivshar Yu.S., Agrawal G.P. Optical solitons: from fibers to photonic crystals. N.Y.: Academic Press Inc., 2003. 540 p.
6. Edmundson D.E., Enns R.H. // Opt. Lett. 1992. V. 17. P. 586.
7. Mihalache D., Mazilu D., Crasovan L.-C. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. Art. No. 073902.
8. Fibich G., Ilan B. // Opt. Lett. 2004. V. 29. P. 887.
9. Raghavan S., Agrawal Govind P. // 2000. V. 180. P. 377.
10. Sazonov S.V., Kalinovich A.A., Komissarova M.V. et al. // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. Art. No. 033835.

11. Couairon A. // Eur. Phys. J. D. 1996. V. 27. P. 159.
12. Henz S., Herrmann J. // Phys. Rev. E. 2006. V. 53. P. 4092.
13. Sprangle P., Penano J.R., Hafizi B. // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. Art. No. 046418.
14. Sprangle P., Esarey E., Krall J. // Phys. Rev. E. 1996. V. 54. P. 4211.
15. Penano J., Palastro J.P., Hafizi B. et al. // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. Art. No. 013829.
16. Couairon A., Mysyrowicz A. // Phys. Rep. 2007. V. 441. P. 47.
17. Chekalin S.V., Dokukina E.A., Dormidonov A.E. et al. // J. Phys. B. 2015. V. 48. Art. No. 094008.
18. Воронин А.А., Желтиков А.М. // УФН. 2016. Т. 186. С. 957; Voronin A.A., Zheltikov A.M. // Phys. Usp. 2016. V. 59. P. 869.
19. Saleh M.F., Chang W., Hölzer P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. Art. No. 203902.
20. Hölzer P., Chang W., Travers. J. et al. // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. Art. No. 203901.
21. Facao M., Carvalho M.I., Almeida P. // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. Art. No. 063803.
22. Дианов Е.М., Карасик А.Я., Мамышев П.В. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. № 6. С. 242; Dianov E.M., Karasik A.Y., Mamyshv P.V. et al. // JETP Lett. 1985. V. 41. No. 6. P. 294.
23. Mitschke F.M., Mollenauer L.F. // Opt. Lett. 1986. V. 11. P. 659.
24. Gordon J.P. // Opt. Lett. 1986. V. 11. P. 662.
25. Santhanam J., Agraval G. // Opt. Commun. 2003. V. 222. P. 413.
26. Bugay A.N., Khalyapin V.A. // Phys. Lett. A. 2017. V. 381. P. 399.
27. Келдыш Л.В. // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1945; Keldysh L.V. // Sov. Phys. JETP. 1965. V. 20. P. 1307.
28. Залозная Е.Д., Дормидонов А.Е., Компанец В.О. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113. № 12. С. 817; Zaloznaya E.D., Dormidonov A.E., Kompanets V.O. et al. // JETP Lett. 2021. V. 113. No. 12. P. 817.
29. Talepbour A., Yang J., Chin S.L. // Opt. Commun. 1999. V. 163. P. 29.
30. Власов С.Н., Петрищев В.А., Таланов В.И. // Изв. вузов. Радиофиз. 1971. Т. 14. № 9. С. 1453.
31. Маймистов А.И. // ЖЭТФ. 1993. Т. 104. № 5. С. 3620; Maimistov A.I. // JETP. 1993. V. 77. P. 727.
32. Corless R., Gonnet G., Hare D.E.G. et al. // Adv. Comput. Math. 1996. V. 5. P. 329.
33. Ляпунов А.М. Общая задача об устойчивости движения. М.: Гостехиздат, 1950. 472 с
34. Халыпин В.А., Бугай А.Н. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 12. С. 1781; Khalyapin V.A., Bugay A.N. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2021. V. 85. No. 12. P. 1424.
35. Дормидонов А.Е., Компанец В.О., Чекалин С.В. и др. // Квант. электрон. 2018. Т. 48. № 4. С. 372; Dormidonov A.E., Kompanets V.O., Chekalin S.V. et al. // Quantum Electron. 2018. V. 48. No. 4. P. 372.
36. Bugay A.N., Khalyapin V.A. // Laser Phys. 2022. V. 32. Art. No. 025401.
37. Malitson I.H. // J. Opt. Soc. Amer. 1962. V. 52. P. 1377.
38. Major A., Yoshino F., Nikolakakos I. et al. // Opt. Lett. 2004. V. 15. P. 602.
39. Bugay A.N., Khalyapin V.A. // Chaos Solitons Fractals. 2022. V. 156. Art. No. 111799.

## On the analytical description of the dynamics of planar pulses propagating in the tunnel ionization mode

V. A. Khalyapin<sup>a, b, \*</sup>, A. N. Bugay<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia

<sup>b</sup>Kaliningrad State Technical University, Kaliningrad, Russia

<sup>c</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

\*e-mail: slavasxi@gmail.com

The problem of the planar pulse propagation in the tunnel ionization regime is considered on the basis of the moments method. A system of equations for the signal parameters is obtained and using Lyapunov method conditions for quasi-stable propagation are found.

# **Электромагнитное поле и материалы (фундаментальные физические исследования)**

Редактор тематического выпуска  
канд. техн. наук, канд. экон. наук **Д. В. Михеев**

УДК 537.624:537.632

## ДИФРАКЦИЯ ОБРАТНОЙ ОБЪЕМНОЙ СПИНОВОЙ ВОЛНЫ НА СКВОЗНОМ ОТВЕРСТИИ В ФЕРРИТОВОЙ ПЛАСТИНЕ

© 2022 г. С. В. Герус<sup>1</sup>, \*, Э. Г. Локк<sup>1</sup>, А. Ю. Анненков<sup>1</sup>, А. Б. Хутиева<sup>2</sup>, А. В. Садовников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
“Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова Российской академии наук”,  
Фрязинский филиал, Фрязино, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского”,  
Саратов, Россия

\*E-mail: [svg318@ire216.msk.su](mailto:svg318@ire216.msk.su)

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Экспериментально и теоретически исследована дифракция обратной объемной спиновой волны на сквозном отверстии в ферритовой пластине для случая, когда длина спиновой волны больше диаметра отверстия, а линейный преобразователь, возбуждающий волну, перпендикулярен внешнему однородному магнитному полю. Установлено, что в одном из направлений, в которых возможно сверхнаправленное распространение этой волны, возникает отчетливая тень от отверстия, наблюдаемая на значительном расстоянии от него. Получено хорошее соответствие между экспериментальными и теоретическими результатами.

DOI: 10.31857/S0367676522110126

Как известно, касательно намагниченная ферритовая пленка является одной из немногих реальных сред, в которой может распространяться дипольная спиновая волна (СВ) с обратным характером – обратная объемная спиновая волна (ООСВ), которую в литературе часто называют обратной объемной магнитостатической волной в соответствии с работой [1], где она впервые была описана в магнитостатическом приближении. За прошедшие годы основные характеристики ООСВ и различные устройства, использующие эти волны, описаны в ряде монографий (см. [2–4] и приведенные в этих работах списки литературы), а также в ряде сравнительно недавних статей [5–13], в которых получены новые результаты, касающиеся ООСВ. Отметим, что вплоть до начала 21-го века исследователей интересовали в основном дисперсионная зависимость ООСВ, амплитудно-частотная характеристика коэффициента передачи и время задержки ООСВ между двумя перпендикулярными внешнему магнитному полю  $\vec{H}_0$  преобразователями<sup>1</sup>, что было необходимо для создания различных фильтров, линий

задержки и других устройств аналоговой обработки сигналов на СВЧ.

Однако исследованиям дифракционных свойств ООСВ были посвящены лишь редкие работы [10, 14, 15]. Развивая эти исследования, ниже впервые представлены эксперименты по дифракции ООСВ на сквозном отверстии в ферритовой пленке железиттриевого граната (ЖИГ), имевшей толщину  $s = 16.56$  мкм и намагниченность насыщения  $4\pi M_0 = 1853$  Гс. В экспериментах визуализированные картины распределения энергии ООСВ в интервале частот 2845–2867 МГц<sup>2</sup> измерялись методом зондирования для области пленки ЖИГ, расположенной вокруг отверстия.

О геометрии эксперимента можно судить по рис. 1а, где представлена одна из полученных дифракционных картин, описывающая распределение амплитуды ООСВ с частотой  $f_1 = 2864$  МГц в плоскости пленки ЖИГ. Линейный преобразователь  $I$ , возбуждающий ООСВ, имел длину  $D = 5$  мм и был ориентирован перпендикулярно вектору внешнего магнитного поля  $\vec{H}_0$  (параллельно

<sup>1</sup> Включая случаи, когда использовались преобразователи различной формы или между ними помещались различные неоднородности – решетка проводящих полосок, вытравленные канавки и т.п.

<sup>2</sup> Отметим, что в использованной пленке ЖИГ, в которой были изготовлены отверстия, ООСВ возбуждались не так эффективно, как поверхностные СВ, поэтому эксперименты удалось выполнить лишь для начального участка спектра ООСВ.

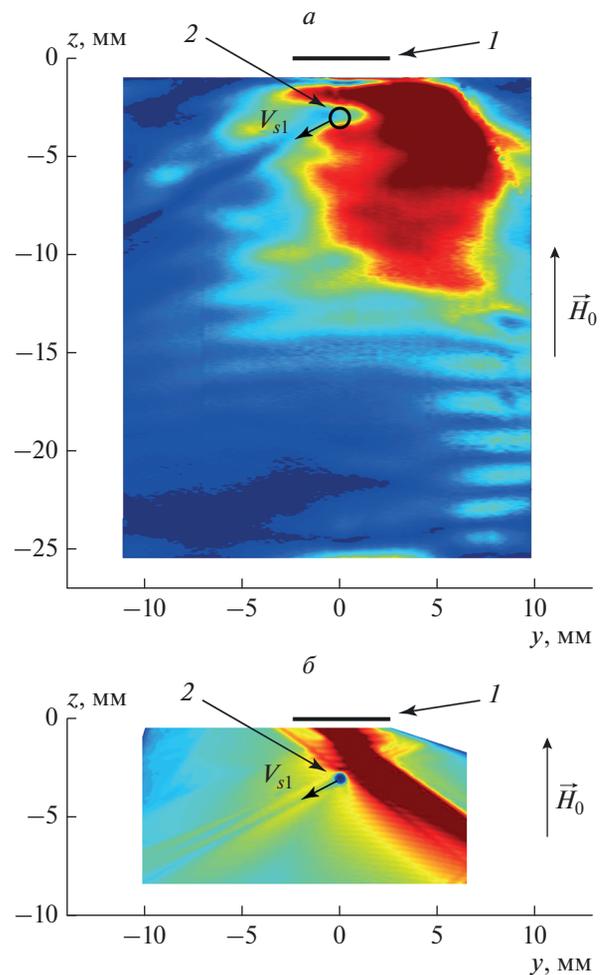
оси  $y$ ), а центр сквозного отверстия 2, имевшего диаметр  $d = 1$  мм, был расположен на расстоянии 3 мм от середины преобразователя вдоль оси  $z$  (рис. 1а). Для приема ООСВ использовался СВЧ зонд, представляющий собой петельку из тонкой позолоченной вольфрамовой проволоки и имеющий апертуру  $\sim 0.5$  мм. Зонд был оснащен датчиком положения и мог свободно перемещаться вдоль поверхности пленки ЖИГ (подробнее метод зондирования описан в [16, 17]).

Измерение характеристик ООСВ производилось следующим образом: для ряда фиксированных координат  $y$  осуществлялось непрерывное перемещение зонда по поверхности пленки вдоль оси  $z$  с одновременной оцифровкой мгновенных значений координаты  $z$  и комплексной амплитуды СВЧ коэффициента передачи между преобразователями [16]. Поскольку именно ООСВ переносит СВЧ сигнал в ферритовой пленке, то, фактически, зонд измеряет комплексную амплитуду ООСВ во время своего перемещения. В результате обработки экспериментальных данных на компьютере можно было получить визуализированные картины по распределению амплитуды или фазы исследуемой ООСВ в области ее распространения на фиксированной частоте.

Фурье анализ полученного распределения комплексной амплитуды ООСВ дал возможность построить экспериментальную дисперсионную зависимость первой моды ООСВ  $f(k_z)$  (см. рис. 2а). Аппроксимируя экспериментальную зависимость  $f(k_z)$  теоретической, было уточнено значение внешнего однородного магнитного поля  $H_0$ , которое оказалось равно 455 Э.

Для найденной величины  $H_0$  и известных параметров пленки была рассчитана дифракционная картина, соответствующая экспериментальной картине на рис. 1а. Рассчитанная дифракционная картина, выполненная на базе пакета программ MUMAX3 с помощью методики микромагнитного моделирования, показана на рис. 1б. Представленное на рис. 1б распределение амплитуды (интенсивности) ООСВ в плоскости ферритовой пленки рассчитано методом конечных разностей на основе уравнения Ландау–Лифшица, которое содержит диссипативный член, записанный в предложенной Гильбертом форме, причем при расчетах параметр диссипации был выбран равным  $10^{-5}$ .

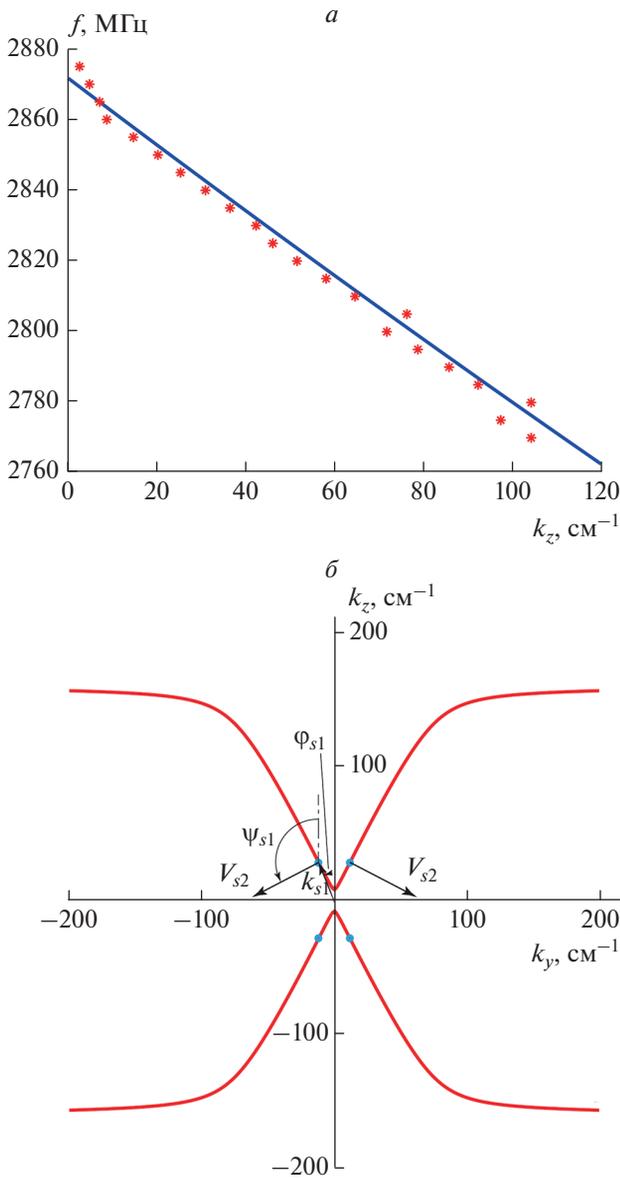
Кроме того, для объяснения полученных результатов была рассчитана изочастотная зависимость ООСВ с частотой  $f_1 = 2864$  МГц, показанная на рис. 2б. Голубым цветом на этой зависимости отмечены точки, которым соответствуют сверхнаправленные волны ( $\sigma = 0$ ), а для одной из таких точек показаны волновой вектор и вектор групповой скорости  $\vec{k}_{s1}$  и  $\vec{V}_{s1}$  (отметим, что на изочастотной зависимости ООСВ на самом деле существует не четыре, а восемь точек, которым соответствуют сверхнаправленные волны с  $\sigma = 0$ :



**Рис. 1.** Экспериментальное (а) и рассчитанное (б) распределения амплитуды ООСВ в плоскости ферритовой пленки при дифракции волны с частотой  $f_1 = 2864$  МГц на сквозном отверстии в ферритовой пластине. Показаны возбуждающий линейный преобразователь (1), отверстие (2) и рассчитанный вектор групповой скорости ООСВ  $\vec{V}_{s1}$ , в направлении которого наблюдается тень от отверстия.

еще четыре точки соответствуют волновым векторам, ориентированным под углами  $\approx \pm 60^\circ$  и  $\pm 120^\circ$  и на рис. 2б не показаны). Также в соответствии с теорией [8, 18] были рассчитаны зависимость угла  $\psi$ , под которым ориентирован вектор групповой скорости ООСВ  $\vec{V}$ , от угла  $\varphi$ , задающего ориентацию волнового вектора ООСВ  $\vec{k}$  (рис. 3а) и зависимость относительной угловой ширины<sup>3</sup> дифракционного луча  $\sigma$  от угла  $\varphi$  (рис. 3б).

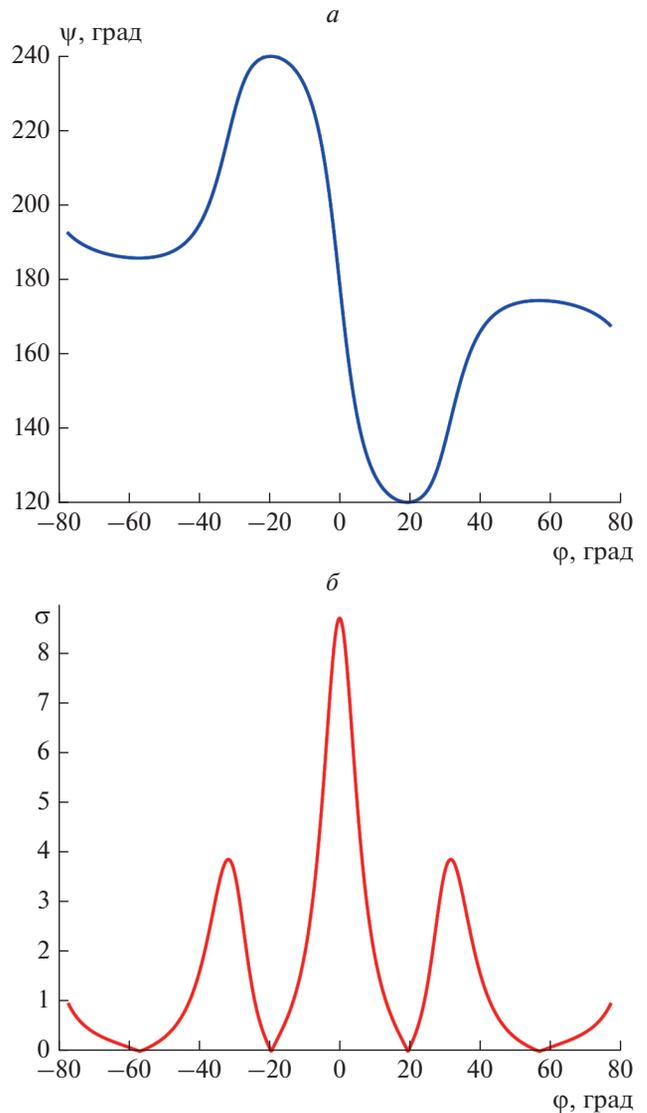
<sup>3</sup> Относительная угловая ширина луча  $\sigma$  показывает, во сколько раз абсолютная угловая ширина луча в анизотропной среде больше или меньше, чем ширина аналогичного луча (с таким же отношением  $\lambda_0/D$ ) в изотропной среде (подробнее о величине  $\sigma$  см. [8, 18]).



**Рис. 2.** Дисперсионная зависимость ООСВ вдоль оси  $z$ , параллельной вектору  $\vec{H}_0$  (а), и изочастотная зависимость ООСВ с частотой  $f_1 = 2864$  МГц (б). На изочастотной зависимости отмечены точки перегиба и показаны векторы групповой скорости  $\vec{V}_{s1}$  и  $\vec{V}_{s2}$ , которым соответствуют значения  $\sigma = 0$  и вдоль которых может возникать сверхнаправленное распространение луча ООСВ. Отмечены также ориентации  $\varphi_{s1}$  и  $\psi_{s1}$  векторов  $\vec{k}_{s1}$  и  $\vec{V}_{s1}$ .

Опишем теперь подробно на примере ООСВ с частотой  $f_1 = 2864$  МГц, как происходит возбуждение, распространение и дифракция волнового пучка (см. рис. 1).

Очевидно, что показанные на рис. 1а картины можно считать интерференцией двух дифракционных картин: дифракционной картины, возникающей



**Рис. 3.** Зависимость ориентации  $\psi$  вектора групповой скорости  $\vec{V}$  (а) и зависимость относительной угловой ширины луча  $\sigma$  (б) от угла  $\varphi$ , задающего ориентацию волнового вектора  $\vec{k}$ , для ООСВ с частотой  $f_1 = 2864$  МГц.

щей из-за ограниченности возбуждаемого волнового пучка по ширине, и картины, возникающей в результате дифракции этого волнового пучка на отверстии. Рассмотрим вначале особенности дифракции, связанные с первой из упомянутых картин.

Основная часть СВЧ энергии, поступающая на преобразователь, расходуется на возбуждение ООСВ с волновыми векторами  $\vec{k}$ , близкими по ориентации к вектору  $\vec{k}_0$  (направленному под углом  $\varphi_0 = 0$  и имеющему величину  $k_0 = 8.36 \text{ см}^{-1}$ ) и групповыми скоростями  $\vec{V}$ , близкими по ориентации к вектору  $\vec{V}_0$  (направленному под углом  $\psi_0 = 180^\circ$ ). Поскольку для волн с такими  $\vec{k}$  величина

$\sigma$ , определяющая дифракционную расходимость, принимает очень большие значения  $\sigma \sim 10 \gg 1$  (см. рис. 3б), и поскольку длина ООСВ  $\lambda(\varphi \sim 0) \sim 7.5$  мм сравнима с длиной преобразователя  $D = 5$  мм, то вся эта энергия волны быстро расплывается по ферритовой пленке и амплитуда волны заметно уменьшается по мере ее распространения (рис. 1). Так как у ООСВ зависимость  $\psi(\varphi)$  всегда немонотонная (см. рис. 3а), то сектор расплывания энергии определяют не углы отсечки<sup>4</sup>, а углы сверхнаправленного распространения волны (соответствующие голубым точкам на рис. 2б), которое возникает при ориентации волнового вектора  $\vec{k}$  под углами  $\varphi_{s1} - \varphi_{s4}$  (для  $f_l = 2864$  МГц  $\varphi_{s1} = 22.1^\circ$ ,  $\varphi_{s2} = -\varphi_{s1}$ ,  $\varphi_{s3} = 180^\circ - \varphi_{s1}$  и  $\varphi_{s4} = -180^\circ + \varphi_{s1}$ ) и происходит в направлении вектора групповой скорости  $\vec{V}$  под углами  $\psi_{s1} - \psi_{s4}$  ( $\psi_{s1} = 117.29^\circ$ ,  $\psi_{s2} = -\psi_{s1}$ ,  $\psi_{s3} = 180^\circ - \psi_{s1}$  и  $\psi_{s4} = -180^\circ + \psi_{s1}$ ). Это наглядно демонстрирует и рис. 3а, из которого видно, что углы  $\psi_{s1}$  и  $\psi_{s2}$ , соответствующие углам  $\varphi = \pm 22.1^\circ$ , гораздо больше по величине, чем углы отсечки  $\psi_{отс1}$  и  $\psi_{отс2}$ , соответствующие углам  $\varphi = \pm 85.2^\circ$ . Таким образом, если на рис. 1а из правого конца преобразователя провести луч под углом, равным  $\psi_{s2} = -117.29^\circ$ , а из левого конца преобразователя – луч под углом  $\psi_{s1} = 117.29^\circ$ , то построенные лучи ограничат область ферритовой пленки, по которой расплывается вся энергия ООСВ.

Теперь следует напомнить, что для данной геометрии в соответствии с работой [12] ООСВ, которым соответствуют положительные ориентации  $\varphi$  и  $\psi$  волновых векторов  $\vec{k}$  и векторов групповой скорости  $\vec{V}$  (такие ориентации будут расположены слева от оси  $k_z$  на рис. 2б), локализованы вблизи нижней поверхности ферритовой пленки, граничащей с подложкой, тогда как энергия волн, которым соответствуют отрицательные ориентации  $\varphi$  и  $\psi$  векторов  $\vec{k}$  и  $\vec{V}$  (такие ориентации будут расположены справа от оси  $k_z$  на рис. 2б), локализована вблизи свободной (верхней) поверхности ферритовой пленки. Поскольку возбуждающий преобразователь также расположен у свободной поверхности ферритовой пленки, то он эффективнее возбуждает ООСВ, энергия которых локализована у этой поверхности. Кроме того, поскольку зондирование СВ проводится со стороны свободной поверхности пленки, то СВЧ-сигнал от волн, локализованных у этой поверхности, оказывается значительно больше, чем СВЧ-сигнал от волн, локализованных у противоположной поверхности. Отмеченные

выше особенности возбуждения, распространения и приема ООСВ приводят к тому, что экспериментальное и теоретическое распределения амплитуды ООСВ, показанные на рис. 1, выглядят несимметрично: в области пленки, лежащей справа от оси  $z$ , амплитуда волн оказывается значительно больше, чем в области пленки, лежащей слева от оси  $z$ .

Рассмотрим теперь особенности дифракции волнового пучка на отверстии в ферритовой пластине. Как видно из рис. 1, тень от отверстия практически не возникает ни вдоль оси  $z$ , ни в других направлениях, отстоящих от отрицательного направления оси  $z$  на  $\sim \pm 60^\circ$ . Это обусловлено тем, что, во-первых, для ООСВ с  $\varphi \sim 0$ , бегущих в направлениях  $\psi \sim 180^\circ$ , длина волны составляет  $\lambda \sim 7$  мм, что в  $\sim 7$  раз больше диаметра отверстия  $d = 1$  мм, и, во-вторых, этим направлениям соответствует наибольшая величина  $\sigma$ , определяющая дифракционную расходимость (см. рис. 3б).

Дифракция ООСВ, характеризующихся большими ориентациями  $\varphi$  волнового вектора  $\vec{k}$  происходит иначе: так, при  $\varphi = \varphi_{s1} = 22.1^\circ$  зависимость  $\psi(\varphi)$  имеет экстремум (рис. 3а), причем  $\psi(\varphi_{s1}) = \psi_{s1} = 117.29^\circ$ , а  $\sigma(\varphi_{s1}) = 0$  (рис. 3б), что означает отсутствие дифракционной расходимости волнового пучка. В результате, на дифракционной картине за отверстием в направлении вектора  $\vec{V}_{s1}$  (ориентированного под углом  $\psi_{s1} = 117.29^\circ$ ) наблюдается отчетливая тень, похожая на отходящую от отверстия “канавку” (см. рис. 1а и 1б), ширина которой равняется диаметру отверстия  $d$  и не меняется по мере распространения волны из-за отсутствия дифракционной расходимости в этом направлении (на рис. 1а протяженность этой “канавки” примерно 12 мм). Однако, наиболее удивительным фактом является то, что в данном эксперименте отсутствует аналогичная “канавка” в направлении вектора  $\vec{V}_{s2}$ , ориентированного под углом  $\psi_{s1} = -117.29^\circ$  (см. рис. 1а). Поскольку отверстие в пленке сквозное, то взаимные свойства ООСВ (то есть, локализация энергии волн, бегущих слева и справа от оси  $z$ , у разных поверхностей пленки) не должны были влиять на дифракцию волны на отверстии, и мы ожидали наблюдать две отчетливые тени от отверстия (в направлениях векторов  $\vec{V}_{s1}$  и  $\vec{V}_{s2}$ ). Возможно, этот факт помогут объяснить дальнейшие численные расчеты на основе программ, которые могли бы рассчитывать распределение параметров волны в поперечном сечении ферритовой пластины.

Отметим также, что для ООСВ, характеризующихся еще большими ориентациями  $\varphi$  волнового

<sup>4</sup> Существование углов отсечки у ООСВ недавно доказано в [9, 11], где приведены формулы для их вычисления.

вектора  $\vec{k}$ , на зависимости  $\psi(\varphi)$  возникает еще один экстремум при  $\varphi = 63.2^\circ$ , причем, как видно из рис. 3а,  $\psi(63.2^\circ) = 178.93^\circ$  и  $k(63.2^\circ) = 352.56 \text{ см}^{-1}$ , а величина  $\sigma$  снова становится равной нулю (см. рис. 3б), что тоже соответствует сверхнаправленному распространению волнового пучка. Поскольку на рис. 1а мы не видим тени от отверстия в направлении  $\sim 180^\circ$ , то можно сделать вывод, что ООСВ с  $k > \sim 300 \text{ см}^{-1}$  не возбуждались в данном эксперименте. Кроме того, следует отметить, что мы, возможно, могли бы видеть тень от отверстия еще в ряде направлений, которым соответствует сверхнаправленное распространение высших мод ООСВ (ведь у каждой высшей моды ООСВ, как и у первой моды ООСВ, на изочастотной зависимости имеется 8 точек, соответствующих сверхнаправленному распространению волны). Однако из-за того, что высшие моды ООСВ характеризуются большими значениями волнового числа и возбуждаются в ферритовой пленке очень неэффективно, в эксперименте не видно теней от отверстия, возникающих из-за дифракции высших мод ООСВ.

Таким образом, для эксперимента и расчета, представленных на рис. 1, можно сделать следующий вывод: поскольку  $k_{s1}(\varphi_{s1} = 22.1^\circ) = 28.19 \text{ см}^{-1}$ , что соответствует длине волны  $\lambda_{s1} = 2229 \text{ мкм}$ , то можно констатировать следующее: в результате дифракции на отверстии диаметром  $d = 1 \text{ мм}$  ООСВ с длиной волны  $\lambda_{s1} = 2229 \text{ мкм}$ , превышающей размер отверстия в  $\lambda_{s1}/d = 2.2$  раза, в направлении  $\psi_{s1} = 117.29^\circ$ , исходящем от отверстия, возникает отчетливая тень шириной  $d$  на расстоянии  $\sim L = 12 \text{ мм}$  от отверстия (и это, по-видимому, не предел), причем расстояние  $L$  превышает диаметр отверстия в  $L/d = 12$  раз.

Отметим, что отчетливая (хотя и не очень контрастная) тень от отверстия в направлении вектора  $\vec{V}_{s1}$  наблюдалась и на дифракционных картинах для ООСВ с другими частотами, поскольку на изочастотной зависимости ООСВ всегда имеются точки перегиба.

Таким образом, эксперимент по дифракции ООСВ на отверстии показал, что из-за наличия у ООСВ направлений, в которых возможно сверхнаправленное распространение волны, в этих направлениях от отверстия в ферритовой пленке возникает отчетливая тень, наблюдаемая на расстоянии, значительно превосходящем оценочное расстояние, полученное на основе критерия разрешимости Рэлея.

Работа выполнена за счет бюджетного финансирования в рамках темы государственного задания Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН и при финансовой

поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-07-00356).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Damon R.W., Eshbach J.R.* // J. Phys. Chem. Solids. 1961. V. 19. № 3/4. P. 308.
2. *Гуревич А.Г., Мелков Г.А.* Магнитные колебания и волны. М.: Наука, 1994.
3. *Вашковский А.В., Стальмахов В.С., Шараевский Ю.П.* Магнитоэлектронные волны в электронике сверхвысоких частот. Саратов: Саратов. гос. ун-т, 1993.
4. *Demokritov S.O., Slavin A.N.* Topics in applied physics. V. 125. Magnonics: from fundamentals to applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2013.
5. *Анненков А.Ю., Герус С.В.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 1. С. 82; *Annenkov A.Yu., Gerus S.V.* // Tech. Phys. 1999. V. 44. No. 1. P. 74.
6. *Локк Э.Г.* // Радиотехн. и электрон. 2003. Т. 48. № 12. С. 1484; *Lokk E.G.* // J. Commun. Technol. Electron. 2003. V. 48. No. 12. P. 1369.
7. *Вашковский А.В., Локк Э.Г.* // УФН. 2006. Т. 176. № 4. С. 403; *Vashkovsky A.V., Lock E.H.* // Phys. Usp. 2006. V. 49. No. 4. P. 389.
8. *Локк Э.Г.* // Радиотехн. и электрон. 2015. Т. 60. № 1. С. 102; *Lokk E.G.* // J. Commun. Technol. Electron. 2015. V. 60. No. 1. P. 33.
9. *Локк Э.Г.* // Радиотехн. и электрон. 2018. Т. 63. № 8. С. 845; *Lokk E.G.* // J. Commun. Technol. Electron. 2018. V. 63. No. 8. P. 915.
10. *Annenkov A.Yu., Gerus S.V., Lock E.H.* // EPJ Web Conf. 2018. V. 185. Art. No. 02006.
11. *Локк Э.Г.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 8. С. 1034; *Lock E.H.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 8. P. 932.
12. *Локк Э.Г.* // Радиотехн. и электрон. 2020. Т. 65. № 3. С. 267; *Lock E.H.* // J. Commun. Technol. Electron. 2020. V. 65. No. 3. P. 265.
13. *Локк Э.Г.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 2. С. 174; *Lock E.H.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 2. P. 134.
14. *Parekh J.P., Tuan H.S.* // J. Appl. Phys. 1981. V. 53. No. 3. P. 2279.
15. *Вашковский А.В., Гречушкин К.В., Стальмахов А.В., Тюлюкин В.А.* // Радиотехн. и электрон. 1987. Т. 32. № 11. С. 2295; *Vashkovsky A.V., Grechushkin K.V., Stalmakhov A.V., Tyulyukin V.A.* // Sov. J. Commun. Technol. Electron. 1987. V. 32. No. 11. P. 2295.
16. *Анненков А.Ю., Герус С.В.* // Радиотехн. и электрон. 2012. Т. 57. № 5. С. 572; *Annenkov A.Yu., Gerus S.V.* // J. Commun. Technol. Electron. 2012. V. 57. No. 5. P. 519.
17. *Annenkov A.Yu., Gerus S.V., Lock E.H.* // EPL. 2018. V. 123. № 4. Art. No. 44003.
18. *Локк Э.Г.* // УФН. 2012. Т. 182. № 12. С. 1327; *Lock E.H.* // Phys. Usp. 2012. V. 55. No. 12. P. 1239.

**Diffraction of backward volume spin waves on a through hole in a ferrite plate****S. V. Gerus<sup>a, \*</sup>, E. H. Lock<sup>a</sup>, A. Yu. Annenkov<sup>a</sup>, A. B. Khutieva<sup>b</sup>, A. V. Sadovnikov<sup>b</sup>**<sup>a</sup>*Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics of the Russian Academy of Sciences (Fryazino Branch), Fryazino, 141190 Russia*<sup>b</sup>*Saratov National Research State University, Saratov, 410012 Russia**\*e-mail: svg318@ire216.msk.su*

Diffraction of a backward volume spin wave on a through hole in a ferrite plate is investigated experimentally and theoretically for the case where the spin wave length is larger than the hole diameter and the linear transducer, exciting the wave, is perpendicular to the external homogeneous magnetic field. It is found that in one of the directions in which super-directional propagation of this wave is possible, the distinct shadow from the hole is observed at a considerable distance from the hole. A good agreement between the experimental and theoretical results is obtained.

УДК 537.613:537.622.4:537.621.4:537.876:530.182

# НЕВЗАИМНЫЙ ХАРАКТЕР СПИН-ВОЛНОВОГО СИГНАЛА В СТРУКТУРЕ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ СВЯЗАННЫХ ИНТЕРФЕРОМЕТРОВ ФАБРИ–ПЕРО С МЕТАЛЛИЗИРОВАННЫМИ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ НАГРУЗКАМИ НА ОТДЕЛЬНО ВЗЯТЫХ ПЛЕЧАХ

© 2022 г. Е. Н. Бегинин<sup>1</sup> \*, А. В. Садовников<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского”,  
Саратов, Россия

\*E-mail: [egbegin@gmail.com](mailto:egbegin@gmail.com)

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Методом связанных волн исследовано влияние невязимного распространения спиновых волн и величины связи на резонансные частоты связанных резонаторов Фабри–Перо, нагруженных проводящими слоями. Показано, что увеличение степени невязимности распространения спиновых волн и величины связи резонаторов приводит к расщеплению резонансных частот системы и их смещению в более высокочастотную область. Полученные результаты могут быть использованы для создания многоканальных частотно-селективных устройств обработки информационного сигнала на принципах магноники.

DOI: 10.31857/S0367676522110047

## ВВЕДЕНИЕ

В последнее время все больший интерес представляет исследование процессов распространения спиновых волн [1–3], [4, 5] в различных магнитных структурах с целью создания на их основе функциональных и логических магнонных элементов обработки информационных сигналов в микроволновом диапазоне радиоволн [6–8]. В оптическом диапазоне широко применяются интерферометры построенные на резонаторах Фабри–Перо (ФП) [9]. С точки зрения расширения функциональных возможностей обработки сигналов в микроволновом диапазоне радиоволн представляет интерес возможность реализации управляемых резонаторов ФП на основе спиновых волноведущих структур. В частности, дисперсионными характеристиками и частотным диапазоном распространения поверхностных спиновых волн (ПСВ) можно эффективно управлять величиной внешнего магнитного поля, состоянием от волноводов до металлических экранов и величиной их удельной проводимости [1, 10]. Важной особенностью распространения ПСВ, проявляющейся в случае несимметричных граничных условий на поверхности магнитных волноводов, является невязимный характер рас-

пространения ПСВ, т.е., зависимость волновых чисел спиновых волн от направления распространения относительно направления магнитного поля [1]. В работах [11–13] показана возможность эффективного управления дисперсией и невязимностью распространения ПСВ в композитной структуре “феррит–полупроводник” модуляцией удельной проводимости полупроводникового слоя оптическим излучением. С целью расширения функциональных возможностей магнонных устройств обработки информации так же интенсивно исследуются связанные спиновые волноведущие структуры и резонаторы спиновых волн [14–17]. Совмещение эффектов невязимного распространения ПСВ в связанных резонаторах ФП потенциально увеличивает возможности по управлению частотными и спектральными характеристиками данного типа устройств.

## МОДЕЛЬ СВЯЗАННЫХ МАГНОННЫХ РЕЗОНАТОРОВ ФАБРИ–ПЕРО

Исследование характеристик связанных резонаторов Фабри–Перо будем проводить для двух спиновых волноводных систем выполненных на основе ферритовых пленок различной толщины. Подсистема 1 представляет собой волновод дли-

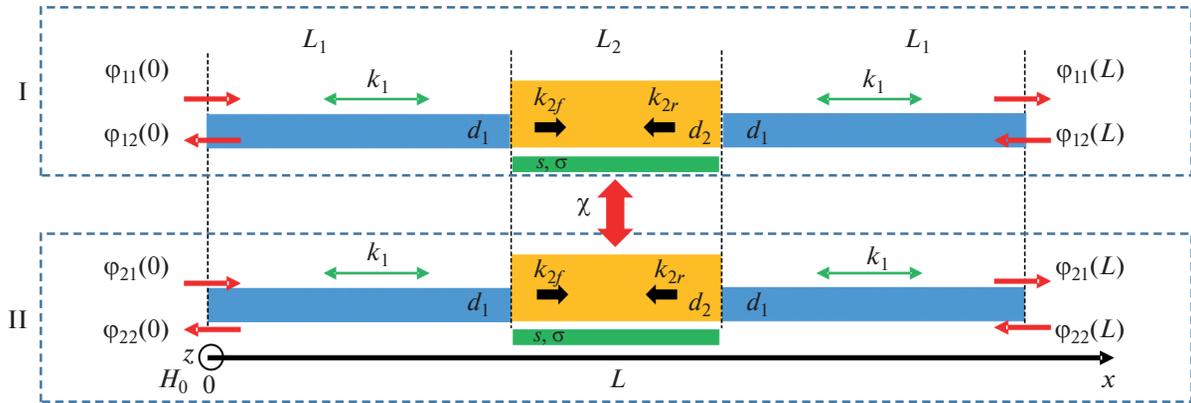


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой структуры.

ной  $L$  на основе пленки толщиной  $d_1$  в центре которой сформирована область длиной  $L_2$  и толщиной  $d_2$ . Ферритовая пленка толщиной  $d_2$  нагружена с одной стороны проводящим слоем с удельной электрической проводимостью  $\sigma$ . Ферритовая пленка и проводящий слой разделены диэлектрическим зазором толщиной  $s$ .

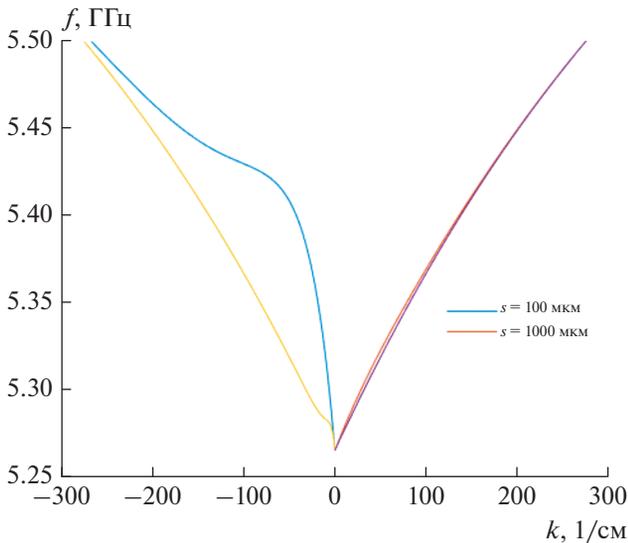
Волноводная подсистема 2 идентична по размерам и параметрам подсистеме 1. Связь между волновыми процессами в различных подсистемах возможна только между областями волноводов длиной  $L_2$ .

С точки зрения волновых процессов рассматриваемую систему можно трактовать следующим образом: в регулярном волноводе первой и второй подсистемы сформированы резонаторы Фабри-Перро (ФП) длиной  $L_2$  нагруженные проводящими слоями и ограниченные с двух сторон сегментами волноводов толщиной  $d_1$ . Границы стыков двух волноводов различной толщины выступают в роли частично-отражающих зеркал с коэффициентами отражения, зависящими от соотношения толщин  $d_2$  и  $d_1$  пленок [11, 12]. Между резонаторами вводится связь, зависящая от степени перекрытия магнитных полей собственных мод резонаторов. В дальнейшем будем полагать, что коэффициент связи  $\chi$  известен. Будем считать, что в сегментах волноводов длиной  $L_1$  процессы распространения спиновых волн взаимны, т.е. волны, распространяющиеся в противоположных направлениях оси  $x$  обладают одинаковыми волновыми числами. В области ФП, за счет влияния проводящих слоев с проводимостью  $\sigma$ , волны, распространяющиеся в противоположных направлениях, в общем случае имеют различные по величине волновые числа. Предлагаемый подход, основанный на методе связанных волн, позволяет исследовать резонансы в системе связанных ФП с учетом невязимного характера распространения спиновых волн.

Материальные параметры магнитных пленок (намагниченность насыщения  $M_0$ , параметры затухания и т.д.) во всех частях подсистем будем считать одинаковыми. Система связанных волноводов помещена в однородное статическое магнитное поле величиной  $H_0$  ориентированное вдоль оси  $z$ . В этом случае в каждой подсистеме могут распространяться только поверхностные спиновые волны (ПСВ). При этом частота  $f$  и постоянная распространения  $k$  ПСВ в регулярных волноводах толщиной  $d_1$  в линейном случае связаны известным дисперсионным соотношением  $D_1(f, k, d_1, H_0, M_0) = 0$  [2]. В области  $d_2$  длиной  $L_2$  дисперсионные характеристики распространяющихся в противоположных направлениях ПСВ невязимны и определяются дисперсионным уравнением  $D_2(f, k, d_2, \sigma, s, H_0, M_0) = 0$  [10–12].

Целью проводимых исследований является исследование резонансных характеристик системы связанных резонаторов ФП с учетом невязимного характера распространения ПСВ и величины связи между ними.

В системе связанных волноводов выделим два сечения: входное сечение с координатой  $x = 0$  и выходное сечение с координатой  $x = L$ . В плоскости входного сечения введем комплексные амплитуды спиновых волн  $\varphi_{mn}(0)$ , где  $m = 1, 2$  – индекс определяющий номер подсистемы,  $n = 1, 2$  – индекс для падающих ( $n = 1$ ) и отраженных волн ( $n = 2$ ). Подобным образом введем амплитуды волн  $\varphi_{mn}(L)$  в выходном сечении системы. Однако, в этом случае, индекс  $n = 1$  соответствует прошедшим волнам, а  $n = 2$  – падающим волнам. Будем считать, что амплитуда  $a_0$  падающей волны на входное сечение первой подсистемы при  $x = 0$  известна. Амплитуды всех остальных падающих волн положим равными нулю. В рамках введенных обо-



**Рис. 2.** Дисперсионные характеристики ПСВ, распространяющихся в ферритовом слое толщиной  $d_2$  при двух значениях величины зазора  $s = 100$  и  $1000$  мкм.

значений граничные условия задачи при  $x = 0$  и  $x = L$  формулируются следующим образом:

$$\varphi_{11}(0) = a_0, \quad \varphi_{21}(0) = 0, \quad \varphi_{12}(L) = \varphi_{22}(0) = 0. \quad (1)$$

Остальные амплитуды волн в различных сечениях  $\varphi_{12}(0)$ ,  $\varphi_{22}(0)$ ,  $\varphi_{11}(L)$ ,  $\varphi_{21}(L)$  необходимо найти. Будем рассматривать только прошедшие волны в первой и второй подсистемах и введем соответствующие частотные коэффициенты прохождения спиновых волн на выходе подсистемы 1 –  $t_1(f) = 20 \lg(|\varphi_{11}(L)/\varphi_{11}(0)|)$  и подсистемы 2 –  $t_2(f) = 20 \lg(|\varphi_{22}(L)/\varphi_{11}(0)|)$ .

Для сокращения математических выкладок рассмотрим постановку задачи только для участков связанных подсистем длиной  $L_2$ . Система уравнений, связанных для выбранного сегмента, будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \varphi_{11} &= ik_{2f} \varphi_{11} + i\chi \varphi_{21}, & \frac{d}{dx} \varphi_{12} &= -ik_{2r} \varphi_{12} - i\chi \varphi_{22}, \\ \frac{d}{dx} \varphi_{21} &= ik_{2f} \varphi_{21} + i\chi \varphi_{11}, & \frac{d}{dx} \varphi_{22} &= -ik_{2r} \varphi_{22} - i\chi \varphi_{12}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $k_{2f}, k_{2r}$  – волновые числа ПСВ распространяющихся в прямом и обратном направлениях в области ФП, соответственно,  $\chi$  – коэффициент связи двух волн распространяющихся в одном направлении в различных подсистемах. Аналогичную систему уравнений (2) можно записать и для остальных сегментов с учетом взаимного характера распространения  $k_{1f} = k_{1r} = k_1$  и отсутствия связи  $\chi = 0$ .

Системы уравнений (2) необходимо дополнить граничными условиями на стыках смежных сегментов. На границе раздела сегментов при  $x = L_1$  непрерывными будут волновые поля и их производные вдоль оси  $x$ :

$$\begin{aligned} \varphi_m^l(x) \Big|_{x \rightarrow L_1} &= \varphi_m^r(x) \Big|_{L_1 \leftarrow x}, \\ \frac{d\varphi_m^l(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow L_1} &= \frac{d\varphi_m^r(x)}{dx} \Big|_{L_1 \leftarrow x}, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $m = 1, 2$  – индекс подсистем,  $\varphi_m^l, \varphi_m^r$  – волновые поля слева и справа от границы раздела сегментов. Аналогичные граничные условия (4) записываются при  $x = L_1 + L_2$ .

Записывая систему уравнений (2) для каждого сегмента, граничные условия (3) на границах сегментов и соответствующих сечениях (1) получаем замкнутую систему уравнений для расчета коэффициентов прохождения ПСВ.

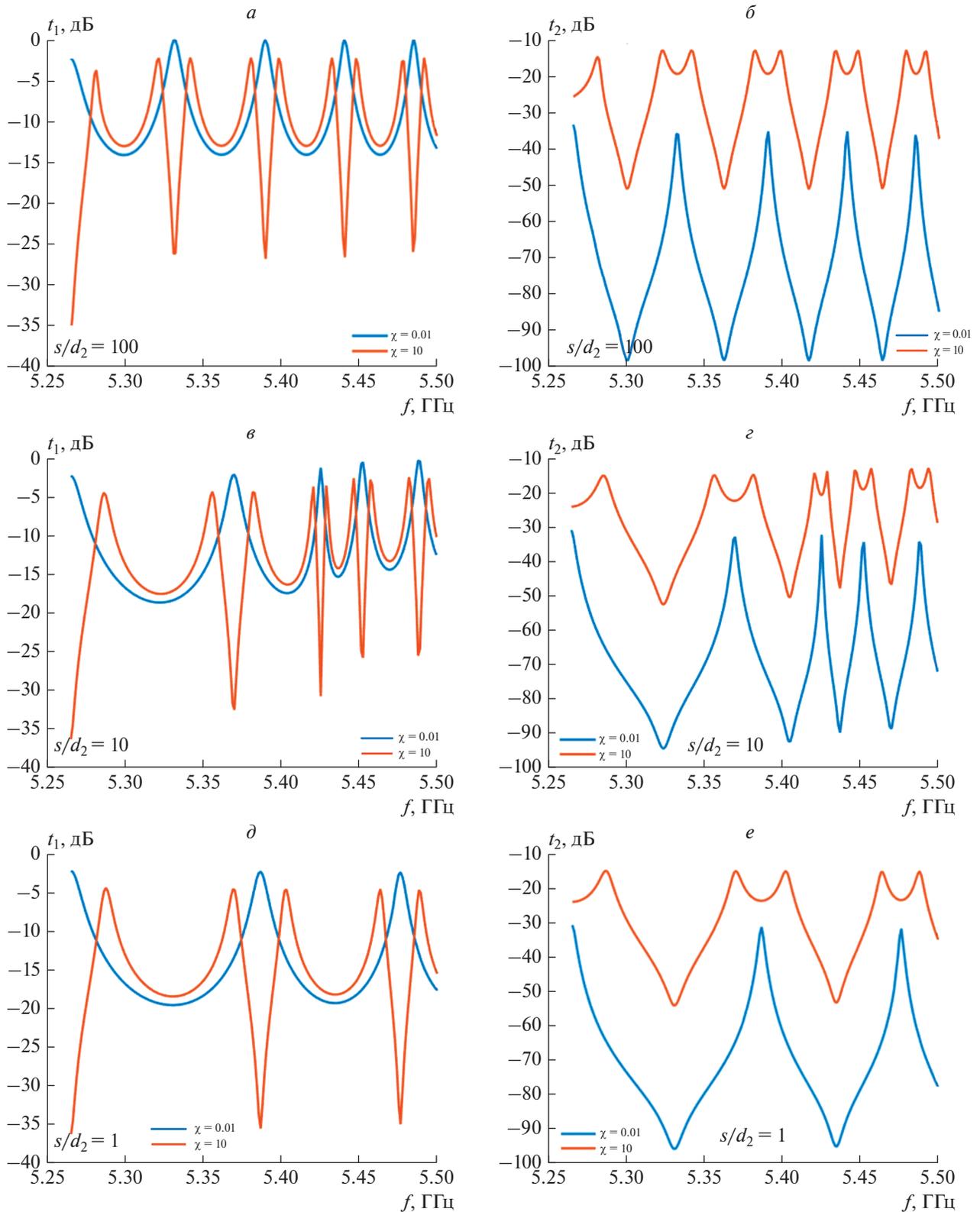
В расчетах использовались следующие материальные параметры и геометрические размеры подсистем: внешнее магнитное поле  $H_0 = 1.2$  кЭ, намагниченность насыщения  $4\pi M_0 = 1750$  Гс,  $L_1 = 0.2$  см,  $L_2 = 0.05$  см,  $d_1 = 1$  мкм,  $d_2 = 10$  мкм, остальные параметры вариативные. В общем случае изолированный резонатор ФП с учетом невязимного характера распространения ПСВ имеет бесконечное число резонансных частот  $f_{res}^j$ , определяемых условием:

$$k_{2f}^j(f_{res}^j) L_2 + k_{2r}^j(f_{res}^j) L_2 = 2\pi j, \quad j = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Рассмотрим проявление невязимного характера распространения ПСВ в слое феррита толщиной  $d_2$  нагруженным проводящим слоем с проводимостью  $\sigma = \infty$  и отделенным от феррита зазором величиной  $s$ .

На рис. 2 представлены дисперсионные характеристики ПСВ распространяющихся в противоположных направлениях для двух значений зазора  $s = 100$  и  $1000$  мкм. Когда слой полупроводника находится на большом расстоянии  $s/d_2 > 100$  невязимный характер распространения ПСВ проявляется только вблизи начала дисперсионных характеристик в области значений волновых чисел  $0 < |k| < 20$  см $^{-1}$  и диапазоне частот 5.27–5.3 ГГц. При сравнительно малых расстояниях  $s/d_2 = 10$  область невязимности увеличивается до значений  $0 < |k| < 250$  см $^{-1}$  в области частот 5.27–5.45 ГГц, при этом волны распространяющиеся в отрицательном направлении оси  $x$  на частоте  $f$  обладают большими значениями фазовых скоростей [1, 10].

Следовательно, эффект невязимности должен приводить к изменению резонансных частот (4) ФП-резонатора. Наличие связи между двумя ФП-резонаторами должно приводить к расщеп-



**Рис. 3.** Частотные коэффициенты прохождения СВ  $t_1(f)$  (левая панель),  $t_2(f)$  (правая панель) связанных ФП-резонаторов с невязанным распространением ПСВ при величине удельной проводимости полупроводника  $\sigma = \infty$ , различных величинах зазора  $s$  и коэффициента связи  $\chi$ .

лению резонансных частот одиночного ФП. Рассмотрим совместное влияние невзаимности и величины коэффициента связи  $\chi$  на частотные коэффициенты прохождения ПСВ в системе связанных ФП-резонаторов. Вначале рассмотрим случай слабой связи ФП-резонаторов с параметром связи  $\chi = 0.01$  1/см. При величине зазора  $s/d_2 = 100$  (рис. 3а и 3б) распространение ПСВ практически взаимно и в двух подсистемах наблюдаются характерные частотные зависимости коэффициентов прохождения  $t_1(f)$ ,  $t_2(f)$  с максимумами на частотах, где выполняются резонансные условия (5). При малой связи основная мощность ПСВ переносится в подсистеме 1 и на резонансных частотах максимумы коэффициентов прохождения различаются на величину порядка 30 дБ. В области частот 5.25–5.5 ГГц дисперсия ПСВ близка к линейной и резонансные частоты формируют практически эквидистантный спектр. При уменьшении зазора до  $s/d_2 = 10$  (рис. 3в и 3г) в области малых волновых чисел начинает проявляться невзаимный характер распространения ПСВ (рис. 2). Это приводит к сдвигу частот резонансов в более высокочастотную область, изменению ширины резонансных кривых и спектр резонансных частот становится не эквидистантным.

Такая особенность поведения резонансов определяется характером дисперсионных зависимостей (рис. 2) при  $s/d_2 = 10$ . В диапазоне частот 5.3–5.4 ГГц ПСВ распространяющиеся в направлении  $-x$  обладают большей фазовой скоростью (меньшими волновыми числами) и условия (5) выполняются для больших значений резонансных частот. В диапазоне частот выше 5.4 ГГц невзаимность практически не оказывает влияние на резонансные частоты прохождения ПСВ. При дальнейшем уменьшении зазора до  $s/d_2 = 1$  (рис. 3д и 3е) невзаимность проявляется во всем частотном диапазоне и это приводит к дальнейшему сдвигу резонансных частот в более высокочастотную область. Это хорошо также видно по изменению числа резонансов в области частот 5.27–5.5 ГГц. При расстоянии  $s/d_2 = 100$  в этом диапазоне наблюдается четыре резонанса, при  $s/d_2 = 1$  — два резонанса. Рассмотрим ситуацию сильно связанных ФП-резонаторов. Как видно из представленных результатов при величине  $\chi = 10$  см<sup>-1</sup> (режим сильной связи) наблюдается расщепление резонансных частот, как и в системах, состоящих из двух связанных резонаторов. Общие закономерности влияния невзаимности в системе двух сильно связанных ФП-резонаторов аналогичны ранее рассмотренному случаю слабой связи. Таким образом, невзаимный характер распространения ПСВ приводит к сдвигу резонансных частот, связанных ФП в более высокочастотную область, а наличие связи приводит к расщеплению резонансных кривых. Эффектами сдвига ре-

зонансных частот и расщепления резонансных кривых можно управлять изменением проводимости  $\sigma$ , величины зазора  $s$  и коэффициента связи  $\chi$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подход, основанный на использовании связанных резонаторов ФП и невзаимного распространения спиновых волн, может быть применен для создания магнотных функциональных элементов с управляемыми частотными и спектральными характеристиками. В частности, влияние невзаимного характера распространения СВ проявляется в сдвиге резонансных частот ФП, а наличие связи между резонаторами ФП к расщеплению резонансных кривых. Показана возможность эффективного управления резонансными частотами за счет изменения толщины диэлектрического зазора и коэффициента связи двух резонаторов ФП.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-79-10191).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sodha M.S., Srivastava N.C.* Microwave propagation in ferrimagnetics. N.Y.: Springer, 1981. P. 143.
2. *Kalinikos B.A., Kostylev M.P., Kozhus N.V., Slavin F.N.* // J. Phys. Cond. Matter. 1999. V. 2. No. 49. P. 9861.
3. *Hurben M.J., Patton C.E.* // J. Magn. Magn. Mater. 1996. V. 163. No. 1–2. P. 39.
4. *Никитов С.А., Калябин Д.В., Лисенков И.В. и др.* // УФН. 2015. Т. 58. № 10. С. 1099; *Nikitov S.A., Kalyabin D.V., Lisenkov I.V. et al.* // Phys. Usp. 2015. V. 58. No. 10. P. 1002.
5. *Никитов С.А., Сафин А.Р., Калябин Д.В. и др.* // УФН. 2020. Т. 58. № 10. С. 1009; *Nikitov S.A., Sa-fin A.R., Kalyabin D.V. et al.* // Phys. Usp. 2020. V. 63. No. 10. P. 945.
6. *Chumak A.V., Serga A.A., Hillebrands B.* // J. Phys. D. 2017. V. 50. Art. No. 244001.
7. *Demokritov S.O., Slavin A.N.* // Top. Appl. Phys. 2013. V. 125. P. 205.
8. *Chumak A.V., Schultheiss H.* // J. Phys. D. 2017. V. 50. Art. No. 300201.
9. *Ismail N., Kores C.C., Geskus D., Pollnau M.* // Opt. Express. 2016. V. 24. No. 15. Art. No. 16366.
10. *Stancil D., Prabhakar A.* Spin waves: theory and applications. N.Y.: Springer, 2009. P. 346.
11. *Kindyak A.S.* // Mater. Lett. 1995. V. 24. No. 9. P. 359.
12. *Fetisov Y.K., Makovkin A.V.* // J. Appl. Phys. 1996. V. 79. No. 8. P. 5721.
13. *Sadovnikov A.V., Beginin E.N., Sheshukova S.E. et al.* // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. No. 5. Art. No. 054424.
14. *Sadovnikov A.V., Beginin E.N., Sheshukova S.E. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 107. Art. No. 202405.
15. *Sadovnikov A.V., Grachev A.A., Beginin E.N. et al.* // Phys. Rev. Appl. 2017. V. 7. Art. No. 014013.
16. *Arai H., Imamura H.* // J. Appl. Phys. 2018. V. 124. Art. No. 152131.
17. *Sharaevskaya A.Y., Beginin E.N., Sharaevskii Y.P.* // IEEE Trans. Magn. 2017. V. 53. Art. No. 262405.

## **Non-reciprocal character of a spin-wave propagation in a structure consisting of coupled Fabry–Perot interferometers with metallized and semiconductor layers**

**E. N. Beginin<sup>a, \*</sup>, A. V. Sadovnikov<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup>Saratov National Research State University, Saratov, 410012 Russia*

*\*e-mail: ebegin@gmail.com*

The effect of non-reciprocal propagation of spin waves and the coupling magnitude on the resonant frequencies of coupled Fabry-Perot resonators with loaded conducting layers has been studied by the coupled wave method. It is shown that an increase in the degree of non-reciprocity of the propagation of spin waves and the magnitude of the coupling of resonators leads to splitting of the resonant frequencies of the system and their displacement to a higher frequency region. From an applied point of view, the results obtained can be used to create multichannel frequency-selective information signal processing devices based on the principles of magnonics.

УДК 681.7:528.8

## ОПТИМИЗАЦИЯ УЗКОПОЛОСНОЙ ШИРОКОУГОЛЬНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В ГЕОСТАЦИОНАРНОМ ДЕТЕКТОРЕ МОЛНИЙ

© 2022 г. А. Л. Филатов\*

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова Российской академии наук, Фрязинский филиал, Фрязино, Россия

\*E-mail: a.filatov@fireras.su

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Рассмотрены проблемы в геостационарных детекторах молний, возникающие при использовании узкополосной оптической фильтрации, выполняемой для выделения самого яркого триплета в оптическом спектре излучения молнии 777.19, 777.42 и 777.54 нм на фоне отраженного от облаков солнечного света. С геостационарной орбиты Земля видна под углом  $\approx 17.5^\circ$  и возникают существенные различия спектров пропускания узкополосного интерференционного фильтра для разных углов падения света. Рассмотрено оптимальное сочетание ширины и положения спектра фильтрации для минимизации смещения центральной полосы фильтрации и расщепления спектров фильтрации *s*- и *p*-поляризованного света при больших углах отклонения фильтра. Предложены новые технические решения на основе акустооптических фильтров.

DOI: 10.31857/S0367676522110114

Первое детектирование молний с использованием космических аппаратов было выполнено со спутника ОСО-В2, выведенного в 1965 г. на околоземную орбиту (600 км). На этом аппарате были установлены три телескопа, оснащенные фотометрами оптического диапазона, спроектированными для исследования корреляции между интенсивностью свечения атмосферы и геомагнитной аномалией Южной Атлантики [1]. Искомая корреляция не была обнаружена, но был получен положительный результат при проверке идеи, которая была высказана в нескольких конвенционных докладах. Pierce E.T., Coroniti S.C. и Larson G.S. предположили, что местоположения областей с сильной грозовой активностью можно определить с помощью аппаратуры, расположенной на космических аппаратах. Зарегистрированное спутником ОСО-В2 оптическое излучение позволило локализовать положения ночных гроз и сделать вывод, что над сушей бывает в десять раз больше гроз, чем над морем [2].

Солнечный свет, отраженный от облаков и земной поверхности, мешал фиксации дневных гроз. Поэтому был проделан большой объем исследований оптического спектра грозовой активности для того, чтобы найти спектральную полосу для ее круглосуточного наблюдения. Были проанализированы [3] данные двух детекторов,

работавших в спектральных диапазонах 375–695 нм [4] и 650–880 нм [5] и зафиксировавших излучение от одной и той же молнии. В спектральном диапазоне 375–650 нм была зарегистрированная средняя плотность потока энергии излучения  $3.5 \cdot 10^{-5}$  Дж  $\cdot$  м<sup>-2</sup> для одной вспышки. Средняя спектральная освещенность штриха от 650–880 нм для тех же вспышек составляет  $1.2 \cdot 10^{-5}$  Дж  $\cdot$  м<sup>-2</sup>. Совместный анализ измеренных спектров показал, что интегральная энергия излучения уменьшается с увеличением длины волны от 430 до 850 нм в два раза быстрее, чем уменьшение солнечной энергии в том же диапазоне, причем наиболее интенсивна спектральная линия с длиной волны 744.4 нм. Результат измерений [4, 5] представлен в табл. 1, соответствующей table 1 в публикации [3].

Спектральные измерения, выполненные с борта высокоорбитального самолета U-2, показали [6], что линии 777.4 и 868.3 нм имеют наибольшую спектральную энергию. Полученный спектр излучения молний, который в настоящее время рассматривается как типичный [7], приведен на рис. 1.

Круглосуточное непрерывное отслеживание оптического излучения света из верхних слоев облаков оказалось важным инструментом в метео-

**Таблица 1.** Спектральное распределение солнечной радиации и интенсивности излучения молний (соответствует табл. в [3])

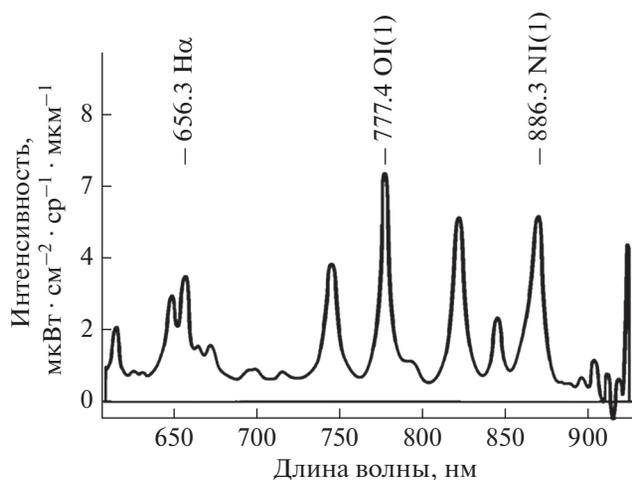
Длина волны, нм	Средняя мощность 10 молний, Вт · м <sup>-2</sup>	Относительное спектральное распределение для молний	Относительное спектральное распределение солнечной радиации вне атмосферы*
380–430	$4.9 \cdot 10^{-6}$	2.6	1.4
430–480	$7.2 \cdot 10^{-6}$	3.9	2.0
480–530	$8.2 \cdot 10^{-6}$	4.4	2.0
530–580	$6.6 \cdot 10^{-6}$	3.6	1.8
580–630	$5.0 \cdot 10^{-6}$	2.7	1.7
630–680	$6.1 \cdot 10^{-6}$	3.3	1.5
650–700	$3.4 \cdot 10^{-6}$	1.8	1.4
700–750	$2.3 \cdot 10^{-6}$	1.3	1.3
750–800	$2.7 \cdot 10^{-6}$	1.5	1.1
800–850	$1.8 \cdot 10^{-6}$	1.0	1.0

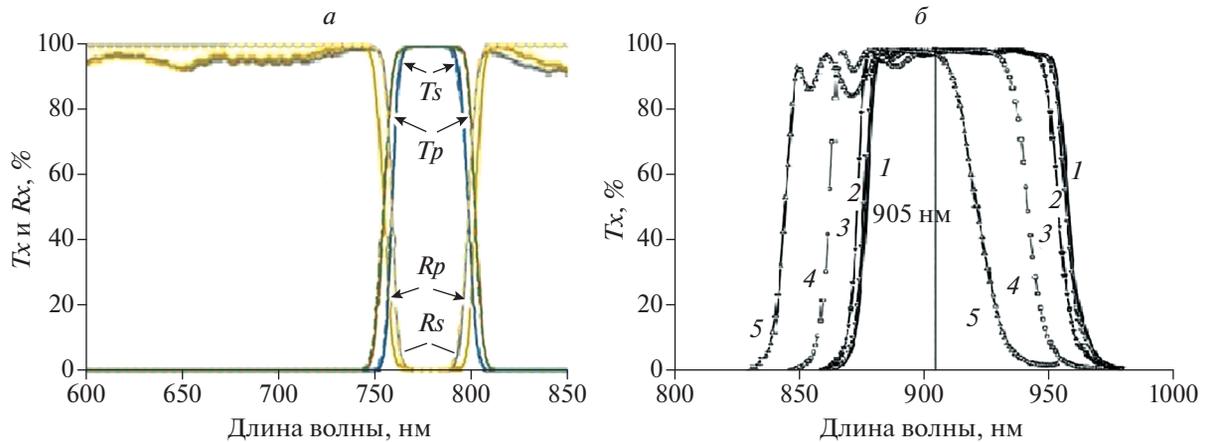
\* По монографии List R.J. Smithsonian Meteorological Tables. Washington: Smithsonian Institution, 1958. 416 p.

рологических исследованиях. Для того, чтобы иметь возможность регистрировать грозовую активность, используется узкополосный интерференционный фильтр, который повышает контрастность линии 777.4 нм на фоне отраженного от облаков солнечного света. Эта линия является триплетом излучения ионизированного кислорода с длинами волн 777.19, 777.42 и 777.54 нм. Для ее выделения при нормальном падении излучения на поверхность фильтра достаточно иметь полосу пропускания 0.35 нм. Однако, при исследовании с низкоорбитальных спутников расходящегося излучения использовались более широкая

полоса от 0.85 до 1.2 нм. [8]. Варьируя полосу пропускания, разработчики компенсировали ее смещение при отклонении от нормального падения излучения на интерференционный фильтр [9].

Анализ данных за несколько лет доказал корреляцию количества зарегистрированных вспышек молний с изменением климата [10]. В результате всемирная метеорологическая организация и Американский геофизический союз (AGU) пришли к выводу, что грозовая активность является симптомом и причиной изменения климата [11]. Национальное управление по аэронавтике и исследованию космического пространства (Nation-

**Рис. 1.** Типичный спектр излучения молнии в оптическом диапазоне.



**Рис. 2.** Спектральные характеристики фильтров: Спектры пропускания  $T_s$ ,  $T_p$  и поглощения  $R_s$ ,  $R_p$  для  $s$ - и  $p$ -поляризованного света, падающего на фильтр под углом  $16.3$  град ( $a$ ). Непрерывные линии соответствуют экспериментальным данным, пунктирные – расчетным. Смещение спектра пропускания  $T_x$  в зависимости от угла падения света:  $1$  – нормальное падение,  $2$  –  $5^\circ$ ,  $3$  –  $10^\circ$ ,  $4$  –  $20^\circ$ ,  $5$  –  $30^\circ$  ( $b$ ).

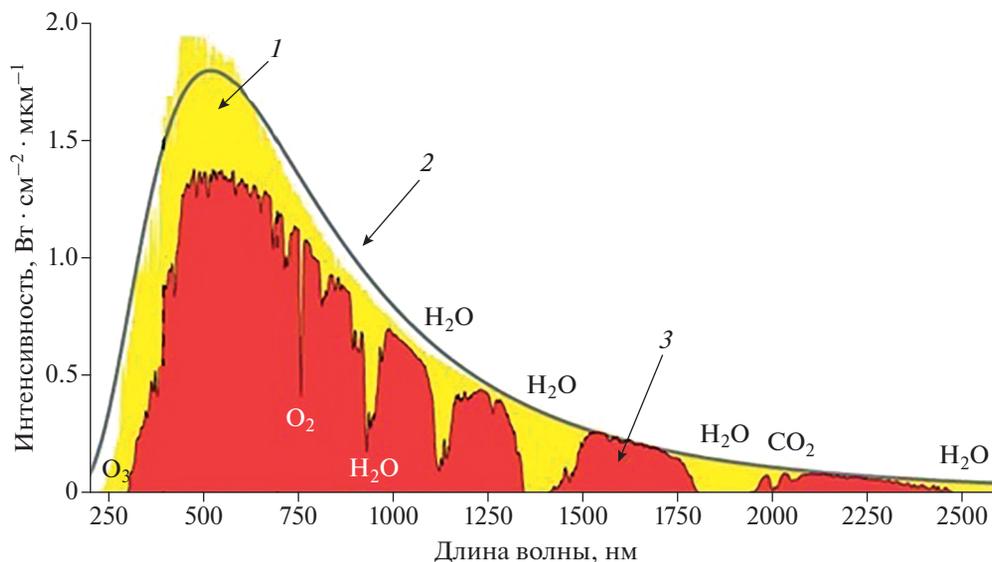
al Aeronautics and Space Administration – NASA) приняла решение разместить на геостационарной орбите (ГСО) картограф молний (Geostationary Lightning Mapper – GLM) [7, 12], предназначенный для следующих целей: обнаружение и предупреждение о сильных штормах, внезапных наводнениях, торнадо, граде; оценка конвективных осадков; отслеживание авиационных опасностей на аэродроме и во время перелета; предупреждение об опасности энергетических компаний, топливных складов, полей для гольфа и т.д. Этот прибор уже работает на геостационарных спутниках GOES-16, GOES-17 [13].

Для наблюдения всей поверхности Земли с ГСО при помощи одного объектива нельзя использовать узкополосные фильтры, которые были разработаны для низкоорбитальных спутников. Эти фильтры корректно функционируют при расходимости света менее  $3^\circ$ – $5^\circ$ . Угловой размер Земли со спутника можно оценить, как  $2 \cdot \arctg(6.35/42.1) \approx 17.4^\circ$  ( $0.072$  ср), исходя из того, что радиус Земли  $\approx 6.4$  тыс. км, расстояние от центра Земли до спутника на ГСО  $6.4 + 35.8 \approx 42.2$  тыс. км. При наклонном падении излучения под углом  $\approx 8.5^\circ$  в узкополосных интерференционных фильтрах происходит расщепление полос фильтрации для  $s$ - и  $p$ -поляризованного света [14].

АО “РКЦ “Прогресс” – НПП “ОПТЭК” разрабатывает геостационарный детектор молний (ГДМ) [15] на базе детектора, который планировалось установить на международной космической станции (МКС) [16]. В обоих приборах планировалось использовать интерференционный фильтр с центральной полосой пропускания  $777.4$  нм. На

МКС предполагалось реализовать фильтрацию в полосе  $1.7$  нм [16] для компенсации сильной зависимости пропускания разрабатываемого светофильтра от угла падения лучей. Создаваемый ГМД должен был обладать следующими характеристиками [15]: проекция пикселя при наблюдении в надире не более  $10$  км; угловой размер изображения, градусы: не менее  $17.5^\circ \times 17.5^\circ$  (вся поверхность диска Земли, видимого с ГСО); спектральный диапазон наблюдения:  $775.9$ – $777.9$  нм. В устном докладе [15] была обозначена проблема узкополосной широкоугольной фильтрации в ГМД и предложено уменьшить поле зрения с  $17.5^\circ$  до  $9^\circ$  и сместить центр кадра с экватора на север.

При разработке Европейским космическим агентством (European Space Agency – ESA) детектора молний (Lightning Imager – LI), который согласно новому этапу программы Метеосат (Meteosat Third Generation – MTG) предполагается разместить на ГСО [17, 18], было предложено расположить солнцезащитный фильтр (Solar Rejection Window – SRW) перед узкополосным фильтром (Narrow Band Filter – NBF) [19]. SRW устанавливается для защиты NBF от прямого воздействия внешней космической среды. При углах падения излучения до  $16.3^\circ$  и при больших температурах солнцезащитный фильтр должен пропускать излучение только в спектральном диапазоне от  $760$ – $780$  нм. Разработчики фильтров демонстрирует понимание, что идеальная ширина полосы NBF должна быть не больше, чем минимальная ширина полосы  $0.34$  нм. Однако реальная полоса пропускания указана  $\sim 1.9$  нм, что позволяет гарантировать требуемый коэффици-



**Рис. 3.** Спектр излучения Солнца: 1 (желтый цвет) — пришедшее от Солнца излучение в верхней атмосфере; 2 (черная линия) — черное тело при температуре 5250°C; 3 (красный цвет) — результаты измерений на уровне моря прошедшего через атмосферу излучения Солнца.

ент пропускания в рабочем диапазоне угла падения (от  $0^\circ$  до  $5.1^\circ$ ). Кроме того, при изготовлении SRW была учтена *s*- и *p*-поляризация света [14]. На рис. 2а показаны расчетные и экспериментальные спектры пропускания и поглощения SRW для излучения, падающего на фильтр под углом  $16.3^\circ$ . Предложенное техническое решение состоит в использовании четырех объективов, для перекрытия углового диапазона, который GLM перекрывает с помощью одного объектива.

На рис. 2б показано смещение спектра пропускания фильтра [20], сходного по параметрам с SRW, в зависимости от угла падения света от  $0^\circ$  до  $30^\circ$ . На рис. 3 показан спектр излучения Солнца [21]. Вышеизложенная информация будет использована при обсуждении оптимального сочетания ширины и положения спектра фильтрации для минимизации смещения центральной полосы фильтрации и расщепления спектров фильтрации *s*- и *p*-поляризованного света при больших углах отклонения фильтра.

Для широкоугольной фильтрации необходимо искать спектральную полосу, а не самую яркую линию, в которой максимально отношение интегральной интенсивности молниевой активности и солнечной радиации, отраженной от облаков. На основании результатов, представленных на рис. 2а и 2б, ширину полосы фильтрации можно оценить в 20 нм. Из данных, представленных на рис. 3, видно, что в районе 950 нм большая часть излучения от Солнца поглощаются молекулами

$H_2O$ . Поэтому отраженный от облаков свет в этой спектральной полосе будет минимальным. Из данных, представленных на рис. 1 видно, что в типичный спектр излучения молнии был прописан только до 920 нм, но в его конце видна достаточно яркая линия. Жидкая вода имеет полосы поглощения вблизи 970, 1200, 1450 и 1950 нм. Спектральная чувствительность кремниевых фотодиодов, которые используются в детекторах молний, лежит в диапазоне 0.4–1.1 мкм [22]. Таким образом, вместо узкоугольных фильтров, выделяющих самую яркую линию 777.4 нм, для широкоугольного детектирования вспышек молний с ГСО целесообразно использовать фильтр с центральной длиной волны соответствующей самой яркой линии молнии в спектральном диапазоне  $\approx 940$ – $980$  нм и шириной  $\approx 20$ – $30$  нм.

Кроме того, необходимо отметить, что в публикации [23] уже было проведено краткое сравнение характеристик интерференционного фильтра и акустооптического фильтра (АОФ) при монохромном детектировании молний с ГСО. Эти фильтры активно используются для дистанционного зондирования Земли [24] и других планет [25]. У АОФ полоса пропускания практически не сдвигается при изменении угла падения света, т.к. при брэгговской дифракции, которая реализуется в таких фильтрах, фотоны рассеиваются на фонах с выполнением законов сохранения энергии и импульса. Стандартная полоса пропускания АОФ  $\approx 2$  нм в видимом диапазоне спектра,

в 1974 г. была показана возможность фильтрации расходящегося с угловой апертурой  $\approx \pm 7^\circ$  [26]. В связи с тем, что, в отличие от интерференционного фильтра, АОФ обладают ограниченным пространственным разрешением, были проведены теоретические исследования [27, 28] с целью поиска условий, которые позволяют получить максимальное разрешение. В результате были созданы перестраиваемые АОФ [29–31], пространственное разрешение фильтрации которых лучше, чем реализует фотодетекторная матрица  $\approx 800 \times 800$  элементов. В статье работе [32] было показано, что многополосная АОФ позволяют формировать сложные спектры. Такие спектры могут эффективно выделить несколько линий спектра излучения молнии.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обоснована целесообразность широкоугольной фильтрации всплеск молний с центральной длинной волны вблизи 970 нм и полосой  $\approx 20$  нм (вместо выделения полосы 777.4 нм, успешно применяемой при узкоугольном детектировании). Предложено применять метод многополосной акустооптической фильтрации в детекторах молний космического базирования для одновременного выделения нескольких линий спектра излучения молнии.

Работа выполнена в рамках государственного задания.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sparrow J.G., Ney E.P., Burnett G.B., Stoddart J.W. // J. Geophys. Res. 1968. V. 73. P. 857.
2. Vorpahl J.A., Sparrow J.G., Ney E.P. // Science. 1970. V. 169. No. 3948. P. 860.
3. Orville R.E., Henderson R.W. // J. Atmosph. Sci. 1984. V. 41. P. 3180.
4. Barasch G.E. // J. Geophys. Res. 1970. V. 75. P. 1049.
5. Connor T.R. 1965 ARPA-AEC joint lightning study at Los Alamos. V. 1. The lightning spectrum, 1967. P. 32.
6. Christian H.J., Goodman S.J. // J. Atmosph. Ocean. Technol. 1987. V. 4. No. 4. P. 701.
7. Christian H.J., Blakeslee R.J., Goodman S.J. // J. Geophys. Res. 1989. V. 94. P. 329.
8. Betz H.D., Schumann U. Lightning: principles, instruments and applications. Springer Science + Business Media B.V., 2009. P. 641.
9. Розенберг Г.В. Оптика тонкослойных покрытий. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1958. 570 с.
10. Bruning E.C., Tillier C.E., Edgington S.F. et al. // J. Geophys. Res. 2019. V. 124. Art. No. 14285.
11. Gao Zi-Yi, Chen Qi-Xiang, Gao Peng et al. // Infrared Phys. Technol. 2022. V. 123. Art. No. 104202.
12. Goodman S.J., Blakeslee R.J., Koshak W.J. et al. // Atmosph. Res. 2013. V. 125–126. P. 34.
13. <https://www.nasa.gov/feature/goddard/2017/flashy-first-images-arrive-from-noaa-s-goes-16-lightning-mapper>.
14. Королев Ф.А., Клементьева А.Ю. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. и астрон. 1980. Т. 21. № 6. P. 56.
15. Квитка В.Е., Дюльдин Р.С., Ключников М.В., Прасолов В.О. // Сб. докл. 17-й Всеросс. конф. “Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса”. М.: ИКИ РАН, 2019. С. 140.
16. Квитка В.Е., Корх А.В. // Вестник РГРТУ. 2018. № 66-1. С. 42.
17. [https://www.researchgate.net/publication/260965450\\_Meteosat\\_Third\\_Generation\\_-\\_The\\_future\\_European\\_geostationary\\_meteorological\\_satellite](https://www.researchgate.net/publication/260965450_Meteosat_Third_Generation_-_The_future_European_geostationary_meteorological_satellite).
18. Tommasi L., Basile G., Romoli A., Stagi M. // Proc. SPIE. 2017. V. 10567. Art. No. 105671I.
19. Montcalm C., Badeen A., Burbidge D. et al. // Proc. SPIE. 2019. V. 11180. Art. No. 111804Z.
20. Baohua Shi, Zaijin Li, Hongyu Li, Yi Qu // Proc. SPIE. 2014. V. 9295. Art. No. 929507.
21. [https://mark4sun.jpl.nasa.gov/report/UT\\_seminar\\_Solar\\_Spectrum\\_Toon.pdf](https://mark4sun.jpl.nasa.gov/report/UT_seminar_Solar_Spectrum_Toon.pdf).
22. Бараночников М.Л. Приемники и детекторы излучений. Справочник. М.: ДМК Пресс, 2012.
23. Филатов А.Л. // Солн.-земн. физ. 2022. Т. 8. № 3. С. 18. // Filatov A.L. // Sol.-Terr. Phys. 2022. V. 8. No. 3. P. 21.
24. Pustovoit V.I., Pozhar V.E. // Proc. SPIE. 1999. V. 3750. P. 243.
25. Korablev O., Fedorova A., Jean-Loup Bertaux et al. // Planet. Space Sci. 2012. V. 65. P. 38.
26. Chang I.C. // Appl. Technol. Appl. Phys. Lett. 1974. V. 25. P. 370.
27. Волошинов В.Б., Москера Х.С. // Опт. и спектроск. 2006. Т. 101. № 4. С. 675; Voloshinov V.B., Mosquera J.C. // Opt. Spectrosc. 2006. V. 101. No. 4. P. 635.
28. Манцевич С.Н., Купрейчик М.И., Балакший В.И. // Сб. статей XXII Междунар. науч. конф. Ч. 1. СПб.: ГУАП, 2020. С. 53.
29. Perchik A.V. // Proc. SPIE. 2013. V. 8888. P. 88880.
30. Епихин В.М., Кияченко Ю.Ф., Мазур М.М. и др. // Физ. осн. приборостр. 2013. Т. 2. № 4. С. 116.
31. Molchanov V.Y., Anikin S.P., Chizhikov S.I. et al. // Proc. SPIE. 2014. V. 9147. Art. No. 91472T.
32. Филатов А.Л. // Письма в ЖТФ. 2021. Т. 47. № 1 С. 20; Filatov A.L. // Tech. Phys. Lett. 2021. V. 47. No. 1. P. 16.

## **Optimization of narrow-band wide-angle filtering for geostationary lightning mapper**

**A. L. Filatov\***

*Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics of the Russian Academy of Sciences, Fryazino Branch,  
Fryazino, 141190 Russia*

*\*e-mail: a.filatov@fireras.su*

Problems of narrow-band optical filtering in geostationary lightning mappers are considered. The filtering is designed to isolate the brightest triplet in the optical response of lightning (777.19, 777.42, and 777.54 nm) against background of sunlight reflected from the clouds. Earth's angle of view is  $\approx 17.5$  degrees from the geosynchronous equatorial orbit and there are significant differences in a narrow band pass of Fabry–Perot filter for different light incidence angles. This paper proposes a comparative analysis of filters for Geostationary Lightning Mapper are reported in the literature. An optimal combination for the width and position of the filtering spectrum is substantiated, which minimizes the shift of the central filtering band and the splitting of the filtering spectra *s*- and *p*- of polarized light for large filter deviation angles. New technical solutions based on acousto-optic filters are proposed.

УДК 621.3.048

## ЛАЗЕРНО-ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МЕТОД КОНТРОЛЯ ДЕФЕКТНОСТИ ВЫСОКОВОЛЬТНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

© 2022 г. В. А. Голенищев-Кутузов<sup>1</sup>, А. В. Голенищев-Кутузов<sup>1</sup>, А. В. Семенников<sup>1</sup>, \*,  
Р. И. Калимуллин<sup>1</sup>, Д. А. Иванов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Казанский государственный энергетический университет”, Казань, Россия

\*E-mail: [catpocbe@gmail.com](mailto:catpocbe@gmail.com)

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

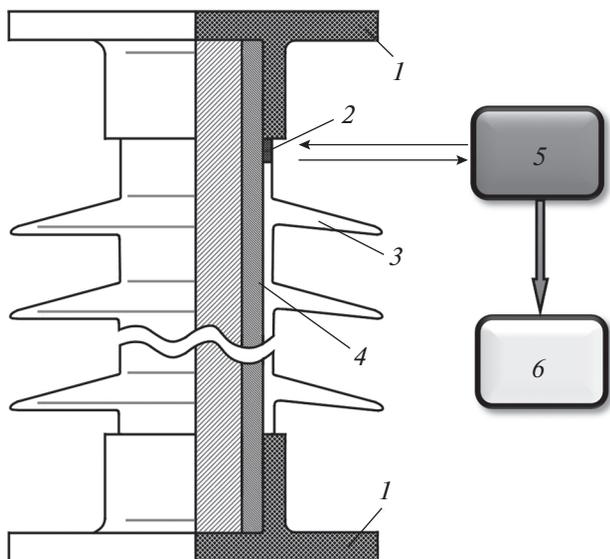
Рассмотрены особенности визуализации и измерения остаточных частичных зарядов, накопленных на дефектах диэлектрического высоковольтного оборудования в процессе эксплуатации, с использованием эффекта Поккельса. С помощью сканирующих остросфокусированных лазерных пучков установлено влияние электрических полей ранее накопленных на дефектах частичных зарядов на скорость старения высоковольтных изоляторов.

DOI: 10.31857/S0367676522110151

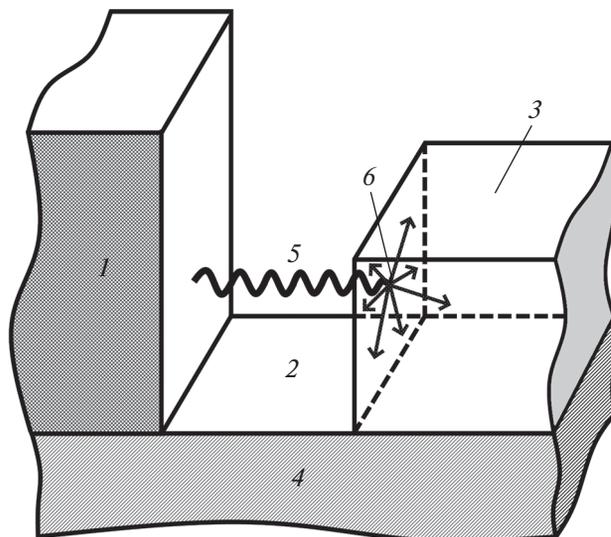
В условиях эксплуатации высоковольтного диэлектрического оборудования воздействие электрических полей с высокой напряженностью приводит к возникновению частичных разрядов (ЧР), т.е. локальных электрических разрядов в местах дефектов, образованных поверхностными или объемными газовыми полостями. Такие ЧР наиболее характерны для высоковольтных изоляторов (ВИ), вводов и переключателей. В последнее десятилетие регистрация набора характеристик ЧР стала одним из основных методов диагностики рабочего состояния высоковольтных диэлектрических элементов при плановых ремонтах или обследовании. К основным экспериментальным методам можно отнести электрический, электромагнитный, акустический и тепловизионный с последующей компьютерной обработкой полученных результатов [1, 2]. Вследствие проблем разброса (стохастичности) получаемых усредненных результатов, используемые ранее методы не позволяли определять конкретный вклад различных ЧР в процессы старения ВИ [3–5]. В настоящее время намечился прогресс в измерении локальных характеристик ЧР и анализе их влияния на электрическую устойчивость различных типов (и особенно полимерных) ВИ. Его можно связать с разработкой более чувствительных и пространственно разрешенных в пределах дефектов измерений, основанных на использовании бесконтактных электрооптических методов [6–10]. Важным элементом использования сканирующих узко сфокусированных лазерных пучков стала возмож-

ность обнаружения неоднородностей в распределении остаточных поверхностных зарядов по металлической и диэлектрической поверхностям дефекта [11]. Особое внимание в ранее разработанном оптоэлектронном методе было обращено на использование в нем активных оптических материалов, обладающих сильным линейным электрооптическим эффектом. Следствием эффекта Поккельса в оптических кристаллах является двулучепреломление. Именно такие кристаллы типа  $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$  (BSO) были использованы уже в первых работах по изучению поверхностного распределения зарядов в полостях дефектов, поскольку их чувствительность к плотности поверхностных зарядов превышала  $1 \text{ пКл/см}^2$  с пространственным разрешением не ниже  $200 \text{ мкм}$  [7]. Однако на протяжении последних лет [12–16] измерение временного и пространственного распределения остаточных полей, наведенных предыдущими ЧР, проводилось только на искусственно сформированных в диэлектрических материалах дефектах в виде неплотного контакта между металлическим высоковольтным электродом, диэлектрическим слоем с отверстием, имитирующим дефект, и заземленным электродом.

Нами впервые были выполнены эксперименты по изучению пространственной и временной зависимости остаточных зарядов на диэлектрической поверхности наиболее опасного дефекта реальных ВИ – между металлическим электродом и диэлектрическим стержнем при наличии газового промежутка. Газовый промежуток можно рас-



**Рис. 1.** Схема лазерно-электрического устройства при исследовании опорного полимерного изолятора: 1 – металлические фланцы изолятора, 2 – полость дефекта, 3 – защитная диэлектрическая оболочка с ребрами, 4 – стеклопластиковая труба, 5 – лазерный излучатель с поляризационным дискриминатором, 6 – фотоприемник.



**Рис. 2.** Конфигурация дефекта между фланцем и оболочкой ВИ: 1 – металлический фланец, 2 – полость дефекта, 3 – защитная диэлектрическая оболочка, 4 – стеклопластиковая труба, 5 – стример, 6 – распространение ЧР по диэлектрической поверхности дефекта.

смагивать в виде замкнутой полости, обладающей пониженной устойчивостью к ЧР, который определяет вероятность последующего электрического пробоя [9]. Подобный вид дефекта вполне эквивалентен рассмотренному в работе модельному дефекту [7], но при изучении серии ВИ может иметь место большее разнообразие форм и размеров полостей дефектов.

В наших экспериментах использовались короткие импульсы ( $10^{-8}$ – $10^{-9}$  с) второй гармоники лазера на иттрий-алюминиевом гранате с длиной волны 532 нм (рис. 1), которые через поляризационный дискриминатор фокусировались в малый диаметр и через волоконный световод, соединенный с фотоприемником, выполнялось сканирование диэлектрической поверхности газовой полости и газового промежутка (рис. 2). Измерение индуцированного ЧР поля выполнялось с помощью тонкой пластины сегнетоэлектрического кристалла BSO, обладающего сильным электрооптическим эффектом (оксид кремния и висмута). В случае проявления линейного эффекта Поккельса изменение фазы поляризованного оптического пучка  $\Phi$  определялось плотностью поверхностных зарядов  $\sigma$ :

$$\Phi = \frac{2\pi n_0^3 r d \sigma}{\lambda \epsilon_0 \epsilon}$$

где  $n_0$  – коэффициент преломления,  $r$  – соответствующий геометрии кристалла электрооптический коэффициент,  $d$  – толщина кристалла.

Таким методом возможно было определять характеристики каждого ЧР, синхронизированные с моментом подачи каждого периода переменного высокого напряжения. Причем было установлено различие в процессе прохождения импульса ЧР через газовую полость, а затем через диэлектрическую поверхность дефекта. На первом этапе ЧР в виде стримера распространяется вдоль приложенного электрического поля и состоит из свободных электронов, а также из положительных и отрицательных ионов. На втором этапе ЧР могут распространяться на всю плоскость диэлектрического стержня изолятора, в то время как на первом этапе стример занимает только часть сечения газовой полости. Однако увеличение размера полости дефекта, приводящее к повышению скорости распространения стримера и количества индуцированных электронов, также повышает интенсивность мощных ЧР.

Поскольку скорость движения электронов на порядок превышает скорость ионов, то стримеры состоят в основном из электронов. На втором этапе поток заряженных частиц ЧР переходит на диэлектрическую поверхность дефекта и может значительно расширяться в пределах всей поверхности дефекта. На этом этапе возникают остаточные заряды, образованные положительными и отрицательными ионами (рис. 3). За счет

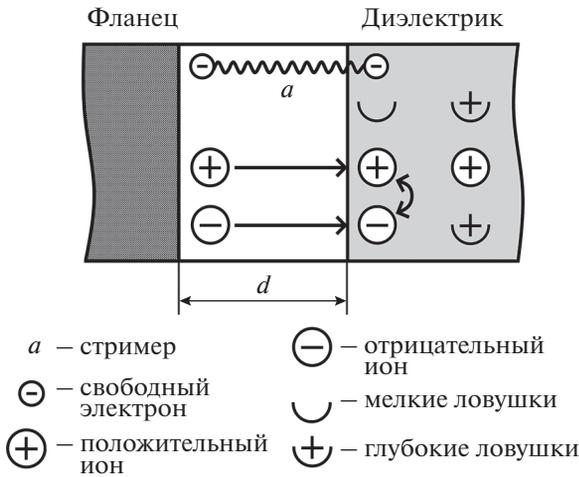


Рис. 3. Диаграмма перемещения индуцированных зарядов в полости дефекта.

повышения интенсивности ЧР на поверхности возникает дополнительное оптическое излучение в ультрафиолетовой области до момента рекомбинации положительных и отрицательных ионов на диэлектрической поверхности.

Значительное возрастание интенсивности ЧР в отрицательной части каждого периода приложенного напряжения вызвано, на наш взгляд, несколькими факторами (рис. 3): возрастанием площади самого ЧР на диэлектрической поверхности, накоплением зарядов от предыдущих ЧР, а также возрастанием поверхностной проводимости. Именно их совокупность создает стохастичность в параметрах последовательности ЧР. Особенно важным в таком процессе является возникновение мощных ЧР ( $q \geq 5-10$  нКл) при сложении в фазовом интервале ( $180^\circ-240^\circ$ ) напряженностей приложенного и индуцированного поля предыдущих ЧР. Постепенное возрастание таких мощных ЧР, по-видимому, является главной причиной ускоренного старения изоляции высоковольтных энергетических систем. Поскольку такие мощные ЧР возникают не более одного за период приложенного высокого напряжения, то их обнаружение было практически невозможным при использовании усредненных методов регистрации вследствие стохастичности их характеристик.

Таким образом, использование в разработанном методе электрооптического эффекта, позволило нам определять интенсивности и распределение ЧР на поверхностных дефектах в ВИ, и более точно оценить степень их работоспособности и остаточный ресурс.

Разработанный лазерно-электрический метод контроля дефектности высоковольтных изоляторов, основанный на использовании сегнетоэлек-

трического кристалла BSO в качестве электрооптического датчика, используется в лабораторных условиях для изучения электрофизических процессов в различных диэлектрических материалах и изделиях под воздействием изменяемых высоких напряжений. Данный метод может найти практическое применение при исследовании электрофизических и физико-химических процессов в изолирующих материалах в условиях эксплуатации и разработки на этой основе новых или модифицированных материалов, более совершенных изолирующих конструкций.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках темы государственного задания на выполнение НИР по теме “Распределенные автоматизированные системы мониторинга и диагностики технического состояния воздушных линий электропередачи и подстанций на основе технологии широкополосной передачи данных через линии электропередач и промышленного интернета вещей” (соглашение № 075-03-2022-151 от 14.01.2022).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коробейников С.М., Овсянников А.Г. Физические механизмы частичных разрядов: монография. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2021. 269 с.
2. Голенищев-Кутузов В.А., Абдуллазянов Э.Ю., Голенищев-Кутузов А.В. и др. // В кн.: Новые технологии, материалы и оборудование в энергетике. Диагностика твердотельной изоляции высоковольтного энергетического оборудования. Т. 3. Казань: Изд-во КГЭУ, 2018. С. 44.
3. Кучинский Г.С. Частичные разряды в высоковольтных конструкциях. Ленинград: Энергия, 1979. 224 с.
4. Кириленко В.М. // В кн.: Электрофизическая аппаратура и электрическая изоляция. Частичные разряды как основной фактор разрушения твердых диэлектриков (основы теории). М.: Энергия, 1970. С. 447.
5. Kawasaki T., Terashima T., Zhu Y., Takada T. // J. Phys. D. 1994. V. 27. P. 1646.
6. Zhu Y., Takada T., Tu D. // J. Phys. D. 1995. V. 28. P. 1468.
7. Wu K., Pan Ch., Meng Y., Cheng Y. // IEEE. Trans. Diel. Electr. Insul. 2013. V. 20. No. 2. P. 612.
8. Голенищев-Кутузов В.А., Голенищев-Кутузов В.А., Марданов Г.Д., Семенников А.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2019. Т. 83. № 1. С. 125; Golenishchev-Kutuzov A.V., Golenishchev-Kutuzov V.A., Mardanov G.D., Semennikov A.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2019. V. 83. No. 3. P. 353.
9. Гайворонский А.С. // Главн. энергетик. 2010. № 2. С. 23.
10. Illias H.A., Tunio M.A., Mokhlis H. et al. // IEEE. Trans. Diel. Electr. Insul. 2015. V. 22. No. 1. P. 463.

11. Голенищев-Кутузов А.В., Исмагилов И.Р., Калимуллин Р.И., Семенников А.В. // *Машиностр. и инж. образование*. 2014. № 3. С. 32.
12. Pan Ch., Wu K., Meng Y. et al. // *IEEE. Trans. Diel. Electr. Insul.* 2017. V. 24. No. 1. P. 217.
13. Li s., Li J. // *High Voltage*. 2017. V. 2. No. 2. P. 82.
14. Stollenwerk L., Laven J.G., Purwins H.G. // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. No. 25. Art. No. 255001.
15. Zhao Z., Huang D.D., Wang Y.N., Li J.T. // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2020. V. 29. Art. No. 015016.
16. Pan Ch., Wu K., Meng Y. et al. // *IEEE. Trans. Diel. Electr. Insul.* 2020. V. 27. No. 6. P. 1951.

## Laser-electrical method for defect control of high-voltage dielectric elements

V. A. Golenishchev-Kutuzov<sup>a</sup>, A. V. Golenishchev-Kutuzov<sup>a</sup>, A. V. Semennikov<sup>a, \*</sup>,  
R. I. Kalimullin<sup>a</sup>, D. A. Ivanov<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Kazan State Power Engineering University, Kazan, 420066 Russia*

<sup>\*</sup>*e-mail: campoce6e@gmail.com*

The features of visualization and measurement of residual partial charges accumulated on defects in dielectric high-voltage equipment during operation using the Pockels effect are considered. With the help of scanning sharply focused laser beams, the influence of electric fields previously accumulated on defects of partial discharges on the aging rate of high-voltage insulators has been established.

УДК 004.3

## МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЛИНИЙ ЭЛЕКТРОПЕРЕДАЧИ С УЧЕТОМ КОЛЕБАНИЙ ПРОВОДА В ВЕРТИКАЛЬНОЙ И ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПЛОСКОСТЯХ

© 2022 г. Д. А. Ярославский<sup>1</sup>, М. Ф. Садыков<sup>1</sup>, М. П. Горячев<sup>1</sup>, \*, Н. К. Андреев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Казанский государственный энергетический университет”, Казань, Россия

\*E-mail: goryachev91@mail.ru

Поступила в редакцию 30.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Рассмотрена задача мониторинга состояния воздушных линий электропередачи по спектральному составу колебаний провода по данным навесных многопараметрических датчиков. Получена система уравнений, позволяющая описывать пространственные колебания провода по всем трем осям и по спектрам колебаний – определять все его основные механические характеристики.

DOI: 10.31857/S0367676522110345

### ВВЕДЕНИЕ

В Российской Федерации высоковольтные линии электропередач (ВЛЭП) являются основным средством передачи электроэнергии от источников генерации до потребителей. Провода линий электропередачи находятся под постоянным воздействием силы тяжести и внешних климатических факторов, которые могут вызвать обрывы и перехлест проводов и, как следствие, короткие замыкания. Для бесперебойного и надежного обеспечения потребителей электрической энергией необходимо осуществлять непрерывный мониторинг состояния ВЛЭП.

Системы мониторинга технического состояния ВЛЭП по их геометрическим и механическим характеристикам строятся обычно путем создания аналитических моделей, включающих по степени важности три механических параметра: стрелу провеса  $f$ , силу тяжения  $T$  и погонную массу провода  $\rho = M/l$ , где  $M$  – масса,  $l$  – длина провода в пролете. Модели связывают эти три параметра ВЛЭП, позволяя проводить их косвенное измерение [1].

На практике используются такие методы определения стрелы провеса, как: инклинометрический [2], оптический [3], на основе колебаний [4] и т.д. Большинство этих методов опирается на измерение статических параметров ВЛЭП. Например, в инклинометрическом методе измеряется угол наклона провода, висящего в пролете вблизи

точки подвеса [2], и по проектным значениям механических и геометрических параметров линии оценивается ее текущее техническое состояние. Однако при этом велика методическая погрешность результатов: не учитывается, например, влияние силы ветра на стрелу провеса. Вместе с тем, в динамическом методе определения стрелы провеса по периоду маятниковых колебаний провода в пролете [4] влияние внешних факторов значительно меньше. В последнее время вошли в практику мониторинга многофункциональные малогабаритные измерительные устройства, размещаемые на фазных проводах и содержащие недорогие интегральные акселерометры. В связи с этим методы, основанные на колебаниях провода [5, 6], представляются наиболее перспективными.

Опыт показывает, что используемых на практике динамических моделей описания движения провода как маятника и как туго натянутой струны недостаточно для описания колебаний провода в трех пространственных координатах. Они не охватывают колебаний с четными гармониками и симметричных колебаний, включая “пляску” и вибрации в вертикальной плоскости.

В данном исследовании ставится задача получения аналитической модели, позволяющей описывать пространственные колебания провода ВЛЭП в горизонтальной и вертикальной плоскостях.

МОДЕЛЬ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРОВОДА

Остановимся на модели колебаний гибкой упругой нити, которая, казалось бы, позволяет решить эту задачу. Однако при анализе этой модели становятся очевидными некоторые проблемы. Во-первых, уравнение колебаний нерастяжимой цепной линии не имеет аналитического решения, а пригодно лишь для численного моделирования. Во-вторых, теряется неголономная связь проекций элемента нити. В-третьих, прямое введение свойства растяжимости в координатные уравнения опять не дает возможности получить его аналитическое решение. Кроме того, при отсутствии растяжимости нити не возникают условия для существования симметричных поперечных колебаний в плоскости провиса, а в эксперименте они фиксируются.

Описанные проблемы могут быть преодолены при использовании метода малых отклонений. Рассмотрим систему координатных уравнений баланса элемента нити  $ds$  для малых отклонений:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial s} \left[ (T + \tau) \left( \frac{dx}{ds} + \frac{\partial u}{\partial s} \right) \right] = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial}{\partial s} \left[ (T + \tau) \left( \frac{dy}{ds} + \frac{\partial v}{\partial s} \right) \right] = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - q, \\ \frac{\partial}{\partial s} \left[ (T + \tau) \frac{\partial w}{\partial s} \right] = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \end{cases} \quad (1)$$

здесь  $s$  – текущая координата вдоль нити;  $T = T(x)$  и  $\tau = \tau(x,t)$  – сила тяжения и малое дополнительное тяжение вдоль оси элемента  $ds$ ;  $\partial u$ ,  $\partial v$  и  $\partial w$  – малое дополнительное удлинение элемента  $ds$  по координатам  $x, y$  и  $z$ , соответственно;  $q = \rho g$  – погонный вес провода;  $g$  – ускорение свободного падения. После упрощений и в пренебрежении членами второго порядка малости, получим систему

$$\begin{cases} H \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\ H \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + h \frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}, \\ H \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \end{cases} \quad (2)$$

здесь,  $H = \text{const}$  и  $h = h(t)$  – статическое и малое дополнительное горизонтальное тяжения. Однако система (2) не имеет совместного решения из-за описанных выше проблем номер два и три.

В [7] был предложен способ решения описанных проблем. Поскольку продольные колебания имеют малые амплитуды, первым уравнением в системе (2) можно пренебречь. Во второе и третье уравнения вносим уравнение растяжения эле-

мента нити по закону Гука, но величинами второго порядка малости пренебрегаем:

$$\begin{cases} H \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + h \frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}, \\ H \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \frac{q}{g} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\ \alpha^* h \left( \frac{ds}{dx} \right)^3 = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{dy}{dx} \frac{\partial v}{\partial x}. \end{cases} \quad (3)$$

здесь  $t$  – время;  $\alpha^*$  – удельное относительное удлинение нити.

Второе уравнение системы (3) – это снова уравнение колебания идеальной струны, на которую действует статическая сила натяжения. Из первого уравнения можно получить два имеет аналитических решения: для асимметричных (А) и для симметричных (Б) колебаний в плоскости провиса.

А) Асимметричные колебания в плоскости провиса можно описать, если принять, что удлинение нити  $h = 0$ , и заменить переменные  $v(x,t) = V(x)e^{j\omega t}$ ,  $u(x,t) = U(x)e^{j\omega t}$  в первом и третьем уравнениях. Тогда имеем два уравнения по координате  $x$

$$\begin{cases} H \frac{d^2 V}{dx^2} + \frac{q}{g} \omega^2 V = 0, \\ \frac{dU}{dx} + \frac{dy}{dx} \frac{dV}{dx} = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Если учесть граничные условия  $V(0) = V\left(\frac{l}{2}\right) = 0$ , для амплитуд и круговых частот гармоник вертикальных асимметричных колебаний получаем:

$$V_n(x) = A_n \sin \frac{2n\pi x}{l}, \quad \omega_n = \frac{2n\pi}{l} \sqrt{ag}, \quad (5)$$

где  $l$  – длина пролета,  $a = H/q$ .

Если проинтегрируем второе уравнение системы от 0 до  $x$  с учетом граничных условий  $U(0) = U(l) = 0$ , получаем амплитуды и частоты  $n$ -й гармоники горизонтальных колебаний провода:

$$U_n(x) = \frac{A_n}{a} \left[ (x - \delta) \sin \frac{2n\pi x}{l} - \frac{l}{2n\pi} \left( 1 - \cos \frac{2n\pi x}{l} \right) \right], \quad (6)$$

где  $\delta$  – координата нижней точки кривой провиса. В случае одинаковых высот точек подвеса  $\delta = l/2$ .

Б) Решение для симметричных колебаний в плоскости провиса получаем путем подстановки  $h(t) = \hbar e^{j\omega t}$ :

$$\begin{cases} H \frac{d^2 V}{dx^2} + \frac{q}{g} \omega^2 V = \frac{\hbar}{a}, \\ \alpha^* \hbar \left( \frac{ds}{dx} \right)^3 = \frac{dU}{dx} + \frac{dy}{dx} \frac{dV}{dx}. \end{cases} \quad (7)$$

Учтем неподвижность точек крепления провода:

$$U(0) = U(l) = 0 \quad \text{и} \quad V(0) = V(l) = 0. \quad (8)$$

Принимаем  $\beta = \frac{\omega}{\sqrt{ag}}$  и ищем решение первого уравнения системы (7) в виде

$$V(x) = \frac{\hbar}{H} \frac{1}{\beta^2} \left( 1 - \text{tg} \frac{\beta l}{2} \sin \beta x - \cos \beta x \right). \quad (9)$$

Исключить неизвестную  $\hbar$  можно интегрированием второго уравнения системы (7) по всей длине пролета  $l$ :

$$\begin{aligned} \alpha^* \hbar L_e &= \int_0^l \frac{dy}{dx} \frac{dV}{dx} dx = \frac{1}{a} \int_0^l V(x) dx = \\ &= \frac{\hbar}{H} \frac{1}{(\beta a)^2} \left( l - \frac{2}{\beta} \text{tg} \frac{\beta l}{2} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Снова пренебрегаем малыми величинами выше второго порядка малости и получаем:

$$L_e = \int_0^l \left( \frac{ds}{dx} \right)^3 dx = l + \frac{3}{2a^2} \left( l \delta^2 - l^2 \delta + \frac{l^3}{3} \right) \cong l + \frac{l^3}{8a^2}. \quad (11)$$

Комбинируя (10) и (11) можно получить уравнение

$$\text{tg} \frac{\beta l}{2} = \frac{\beta l}{2} - \frac{4}{\lambda^2} \left( \frac{\beta l}{2} \right)^3. \quad (12)$$

В уравнении (12) для вычисления  $\lambda^2$  можно использовать выражение:

$$\lambda^2 = \left( \frac{l}{a} \right)^2 \frac{l}{\alpha^* H L_e}. \quad (13)$$

Для решения нелинейного уравнения (12) рассмотрим два предельных случая. Первый случай при  $\lambda^2 = \infty$  соответствует абсолютно нерастяжимой нити. Решениями уравнения

$$\text{tg} \frac{\beta l}{2} = \frac{\beta l}{2} \quad (14)$$

для первых двух и  $n$ -й гармоник являются

$$(\beta l)_1 = 2.86\pi; \quad (\beta l)_2 = 4.92\pi; \quad (\beta l)_n = (2n+1)\pi. \quad (15)$$

Второй случай при  $\lambda^2 = 0$  соответствует туго натянутой струне с решениями

$$(\beta l)_n = (2n-1)\pi. \quad (16)$$

Промежуточные решения полного первого уравнения системы (7) лежат в диапазоне

$$(2n-1)\pi < (\beta l)_n < (2n+1)\pi. \quad (17)$$

Выражения для амплитуд продольных колебаний провода в пролете получаются путем интегрирования второго дифференциального уравнения системы (7) по  $x$  в пределах  $0 - x$ :

$$\begin{aligned} U(x) &= \alpha^* \hbar \int_0^x \left( \frac{ds}{dx} \right)^3 dx - \frac{dy}{dx} V(x) - \frac{1}{a} \int_0^x V(x) dx = \\ &= \alpha^* \hbar \left[ x + \frac{3}{2a^2} \left( x\delta^2 + x^2\delta + \frac{x^3}{3} \right) \right] - \frac{1}{a} \times \\ &\times \left[ (\delta-x)V(x) + \frac{\hbar}{H} \frac{1}{\beta^3 a} \left( \beta x + \text{tg} \frac{\beta l}{2} (\cos \beta x - 1) - \sin \beta x \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Таким образом, представлены система уравнений (3) и ее решения, позволяющие описывать пространственные колебания провода в пролете по всем трем осям с учетом разницы высот подвеса через величину  $\delta$ .

Исходя из системы уравнений (3) и их решений, по данным частот маятниковых колебаний можно определить стрелу провеса, а также изменение силы тяжения провода под действием внешних воздействий.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Каковы преимущества динамических методов мониторинга ВЛЭП? Во-первых, при мониторинге определение стрелы провеса по частотам высших гармоник более целесообразно, так как повышается точность измерения периода колебаний. Во-вторых, надежность результатов измерений выше, поскольку при установке датчика возле точки подвеса можно дополнительно использовать данные инклинометрического способа определения стрелы провеса. В-третьих, по спектрам пространственных колебаний проводов линии электропередачи в пролете с учетом ее температуры можно определять все их основные механические характеристики. Кроме того, при реализации метода мониторинга механических и геометрических параметров высоковольтных линий электропередач на практике нет необходимости изменять аппаратуру, разработанную ранее [1, 2, 4]. Достаточно снабдить ее необходимым количеством акселерометрических датчиков и загрузить дополнительные модули программного обеспечения, предназначенные для спектрального анализа колебаний по всем трем пространственным осям и расчета механических и геометрических параметров ЛЭП по результатам учета динамических эффектов.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего обра-

зования Российской Федерации в рамках темы государственного задания на выполнение НИР “Распределенные автоматизированные системы мониторинга и диагностики технического состояния воздушных линий электропередачи и подстанций на основе технологии широкополосной передачи данных через линии электропередач и промышленного интернета вещей” (соглашение № 075-03-2022-151 от 14.01.2022).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ярославский Д.А., Садыков М.Ф., Конов А.Б. и др. // Изв. вузов. Проблемы энергетики. 2017. Т. 19. № 5–6. С. 89.
2. Садыков М.Ф., Ярославский Д.А., Иванов Д.А. и др. // Нефтяное хозяйство. 2020. № 7. С. 53.
3. Дементьев С.С., Дикарев П.В. // Энерго- и ресурсосбережение: промышленность и транспорт. 2021. № 2(35). С. 6.
4. Yaroslavsky D.A., Nguyen V.Vu, Sadykov M.F. et al. // E3S Web Conf. 2020. V. 220. Art. No. 01036.
5. Макаров А.А. Надежность и долговечность строительных конструкций. Волгоград: ВПТИ, 1974. С. 146.
6. Горошков Ю.И., Гуков А.И., Горошков Ю.И. Ветроустойчивость контактной сети. М.: Транспорт, 1969. 128 с.
7. Irvine H.M., Caughey T.K. // Proc. Royal Soc. London. Ser. A. 1974. V. 341. P. 299.

**Model for determination of geometric and mechanical parameters  
of power lines considering oscillations of the electrical wire  
in a vertical and horizontal planes**

**D. A. Yaroslavsky<sup>a</sup>, M. F. Sadykov<sup>a</sup>, M. P. Goryachev<sup>a,\*</sup>, N. K. Andreev<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>*Kazan State Power Engineering University, Kazan, 420066 Russia*

<sup>\*</sup>*e-mail: goryachev91@mail.ru*

The problem of monitoring the overhead power lines by the spectral composition of electrical wire oscillations according to the data of multi-parameter sensors mounted on them is discussed. The system of equations has been obtained that makes it possible to describe the spatial oscillations of the conductor along all three axes and to determine its main mechanical characteristics from the spectra.

УДК 539.194

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЛАБОСВЯЗАННЫХ ТРЕХАТОМНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

© 2022 г. В. А. Тимошенко<sup>1</sup>, \*, Е. А. Яревский<sup>1</sup><sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
“Санкт-Петербургский государственный университет”, Санкт-Петербург, Россия

\*E-mail: vladimir.timoshenko7@gmail.com

Поступила в редакцию 14.03.2022 г.

После доработки 08.04.2022 г.

Принята к публикации 22.07.2022 г.

Разработан метод дискретных переменных для систем с ненулевым полным угловым моментом, позволяющий значительно сократить время решения квантовой задачи трех тел. С его использованием вычислены энергии связи нескольких слабосвязанных трехатомных систем, включая  $\text{He}_3$ ,  $\text{He}_2\text{-Li}$  и  $\text{He}_2\text{-Na}$ , проведено сравнение с результатами других авторов.

DOI: 10.31857/S0367676522110291

### ВВЕДЕНИЕ

Слабосвязанные трехатомные системы представляют особый интерес не только из-за сложности их изучения и получения аккуратных физических результатов, но и из-за их связи с эффектом Ефимова. Существует множество систем, включая трехатомные молекулы, состоящие из гелия и щелочных металлов, состояния которых близки к состояниям Ефимова. Некоторые из таких систем обладают связанными состояниями с ненулевым полным угловым моментом несмотря на то, что их связанные состояния с нулевым полным орбитальным моментом лежат очень близко к порогу развала. Такие связанные состояния изучены гораздо меньше, чем состояния с нулевым угловым моментом [1].

Еще одна интересная проблема связана с возможными резонансными состояниями обсуждаемых систем [2]. Такие состояния существенно влияют на процессы рассеяния в рассматриваемых системах. Резонансные состояния обычно ассоциируются с полюсами аналитического продолжения резольвенты или  $S$ -матрицы, так что их изучение требует применения методов исследования систем при комплексных энергиях. В данной работе используется метод комплексного вращения [3].

Получение точных безмодельных результатов о слабосвязанных состояниях и резонансах подобных трехчастичных систем требует использования больших вычислительных ресурсов. В случае использования проекционных методов большое время занимает вычисление интегралов,

поэтому для этих вычислений требуется максимально эффективный подход. Для ускорения вычислений, в данной работе используется метод представления дискретных переменных [4] на основе функций, которые специальным образом локализованы на сетке по угловой переменной. Используемый в данной работе метод был обобщен на комплексные функции, так что его можно применять для расчета резонансных состояний.

В данной работе вычислены энергии связи нескольких слабосвязанных трехатомных систем, включая  $\text{He}_3$ ,  $\text{He}_2\text{-Li}$  и  $\text{He}_2\text{-Na}$ , с использованием вариационного подхода и метода представления дискретных переменных. Полученные результаты сравниваются с результатами других авторов.

### УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ТРЕХЧАСТИЧНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Квантово-механическая система описывается оператором Гамильтона. Собственные волновые функции Гамильтониана зависят от межчастичных координат системы. В случае трехчастичных систем можно ограничиться сравнительно небольшим набором координат, используя координаты Якоби (рис. 1). Введем векторы  $\vec{x}_\alpha$ ,  $\vec{y}_\alpha$  — приведенные координаты Якоби в  $\mathbb{R}^3$  для частицы  $\alpha$ . Объединим данные векторы в шестимерный вектор  $\vec{X} = \{\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha\}$ . Гамильтониан  $H$  системы с отде-

ленным движением центром масс определяется выражением:

$$H = H_0 + V(\vec{X}), \quad H_0 = -\Delta_{\vec{X}} = -\Delta_{\vec{x}_\alpha} - \Delta_{\vec{y}_\alpha}. \quad (1)$$

Используем разложение волновой функции  $\Psi(\vec{X})$  по D-функциям Вигнера [5]:

$$\Psi_M^{J\tau}(\vec{X}) = \sum_{M'=0}^J (D_{MM'}^{J\tau})^*(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \theta_\alpha) \Psi_{M'}^{J\tau}(x_\alpha, y_\alpha, \theta_\alpha). \quad (2)$$

Здесь  $\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \theta_\alpha$  – углы Эйлера,  $x_\alpha, y_\alpha$  – модули координат Якоби, а  $\theta_\alpha$  – угол между ними. Используя данное разложение, можно записать уравнение Шрёдингера для ненулевого орбитального момента  $J$  и его проекции  $M$ :

$$\sum_{M'=0}^J (H_{MM'}^{J\tau} - E\delta_{MM'}) \Psi_{M'}^{J\tau}(x_\alpha, y_\alpha, \theta_\alpha) = 0, \quad (3)$$

$$M = 0, \dots, J.$$

В таком представлении диагональные компоненты гамильтониана  $H_{MM}^{J\tau}$  задаются формулой [6]  $H_{MM}^{J\tau} = (1 + (1/2)(\tau(-1)^J - 1)\delta_{M0})\hat{H}_{MM}^{J\tau}$ , где

$$\hat{H}_{MM}^{J\tau} = -\frac{1}{x_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} x_\alpha - \frac{1}{y_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} y_\alpha + \frac{J(J+1) - 2M^2}{y_\alpha^2} + V(x_\alpha, y_\alpha, \theta_\alpha) - \left(\frac{1}{x_\alpha^2} + \frac{1}{y_\alpha^2}\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta_\alpha^2} + \text{ctg} \theta_\alpha \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} - \frac{M^2}{\sin^2 \theta_\alpha}\right). \quad (4)$$

Внедиагональные компоненты гамильтониана:

$$H_{MM'}^{J\tau} = \left(1 + (1/2)(\tau(-1)^J - 1)(\delta_{M0} + \delta_{M'0})\right) \hat{H}_{MM'}^{J\tau},$$

$$\hat{H}_{MM'}^{J\tau} = \hat{H}_{MM'}^{J\tau} \delta_{MM\pm 1} = \pm \frac{\lambda_\pm(J, M)}{y_\alpha} \sqrt{1 + \delta_{M0}\delta_{M'1} + \delta_{M1}\delta_{M'0}} \times \left(\frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} + (1 \mp M) \text{ctg} \theta_\alpha\right). \quad (5)$$

Каждый блок матричного Гамильтониана действует на компоненту блочного вектора волновой функции, отвечающую проекции  $M'$ . Потенциал  $V = V(x_\alpha, y_\alpha, \theta_\alpha)$  в (1) – сумма парных потенциалов, каждый из которых зависит только от расстояния между частицами, и  $\lambda_\pm(J, M) = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}$  [7].

Далее, трехмерное конфигурационное пространство было разделено на набор прямоугольных параллелепипедов (метод конечных элементов). В каждом элементе выбран набор линейно независимых полиномиальных базисных функ-

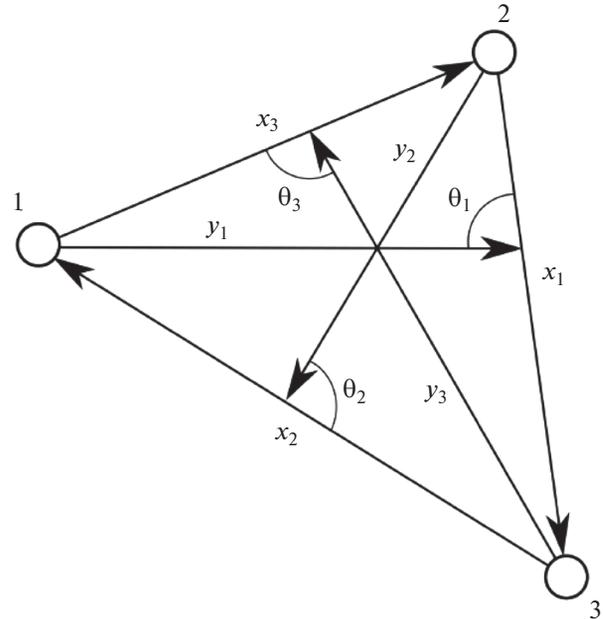


Рис. 1. Координаты Якоби для системы трех тел.

ций. Волновая функция разложена по данным базисным функциям. В случае угловой координаты разложение было произведено по ортогональным полиномам. Таким образом осуществляется переход от уравнения Шрёдингера к задаче на нахождение собственных чисел.

Для вычисления матричных элементов гамильтониана при таком разложении необходимо вычислять интегралы по трем переменным. Для ускорения вычислений по угловой переменной был использован метод представления дискретных переменных.

### МЕТОД ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Интеграл на отрезке  $[-1; 1]$  может быть аппроксимирован при помощи квадратурной формулы Гаусса [8]:

$$\int_{-1}^1 f(z) dz \approx \sum_{i=1}^n \frac{w_i}{\rho(z_i)} f(z_i), \quad (6)$$

где  $\rho(z)$  – весовая функция,  $z_1, \dots, z_n$  – нули полинома  $P_n(z)$ . DVR-функции  $\phi_i(z)$  и их производные  $\phi_i'(z)$  построены при помощи ортогональных полиномов  $P_n(z)$  и соответствующей квадратурной формулы Гаусса [9].

$$\phi_i(z_k) = \frac{P_n(z_k)}{P_n(z_i)(z_k - z_i)}, \quad \phi_i(z_k) = \delta_{ik}. \quad (7)$$

Для вычисления матричных элементов оператора кинетической энергии необходимо опреде-

**Таблица 1.** Энергии связи  $\text{He}_3$ , относительные погрешности и время интегрирования при различном количестве функций в разложении

$n$	10	20	30	40
Разложение по полиномам Лежандра				
$E, \text{см}^{-1}$	$-3.13 \cdot 10^{-3}$	$-7.05 \cdot 10^{-2}$	$-7.99 \cdot 10^{-2}$	$-8.18 \cdot 10^{-2}$
$\delta E$	$9.62 \cdot 10^{-1}$	$1.42 \cdot 10^{-1}$	$2.80 \cdot 10^{-2}$	$5.34 \cdot 10^{-3}$
$t, \text{с}$	12.3	84.4	277.9	662.9
Метод представления дискретных переменных				
$E, \text{см}^{-1}$	$-1.29 \cdot 10^{-2}$	$-9.72 \cdot 10^{-2}$	$-8.35 \cdot 10^{-2}$	$-8.26 \cdot 10^{-2}$
$\delta E$	$5.69 \cdot 10^{-1}$	$1.81 \cdot 10^{-1}$	$1.59 \cdot 10^{-2}$	$4.21 \cdot 10^{-3}$
$t, \text{с}$	2.4	9.5	21.6	40.0
Коэффициент ускорения				
	5.1	8.9	12.9	16.6

лить производные  $\Phi'_i(z)$ . Раскладывая  $P_n(z)$  в ряд Тейлора в точках  $z_i$  и подставляя в выражение (5), получаем [7]:

$$\Phi'_i(z_k) = \frac{P'_n(z_k)}{P'_n(z_i)(z_k - z_i)} \quad (8)$$

$$\text{при } k \neq i, \quad \Phi'_i(z_i) = \frac{-P''_n(z_i)}{2P'_n(z_i)}$$

Свойства DVR-функции позволяют упростить вычисления потенциальной энергии:

$$V_{ij} = \int_{-1}^1 \frac{\Phi_i(z)}{\sqrt{w_i}} V(x, y, z) \frac{\Phi_j(z)}{\sqrt{w_j}} dz \approx \sum_k \frac{w_k}{\rho(z_k)} V(x, y, z_k) \frac{\Phi_i(z_k)}{\sqrt{w_i}} \frac{\Phi_j(z_k)}{\sqrt{w_j}} = \frac{V(x, y, z_i)}{\rho(z_i)} \delta_{ij}. \quad (9)$$

Перепишем оператор кинетической энергии для координаты  $z = \cos\theta$  и применим для нее метод DVR:

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \text{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{M^2}{\sin^2\theta} = (1 - z^2) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{M^2}{1 - z^2}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} + (1 \pm M) \text{ctg}\theta = -\sqrt{1 - z^2} \frac{\partial}{\partial z} + (1 \pm M) \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}}.$$

Для диагональных и внедиагональных частей, содержащих угловую переменную:

$$T_{ij}^{diag} = \sum_k \frac{w_k}{\rho(z_k)} \frac{\Phi'_i(z_k)}{w_i} \frac{\Phi'_j(z_k)}{w_j} (1 - z_k^2) - \frac{M^2}{\rho(z_i)(1 - z_i^2)} \delta_{ij}, \quad (11)$$

$$T_{ij}^{offdiag} = \frac{\sqrt{w_i}}{\rho(z_i)} \frac{\Phi'_j(z_i)}{\sqrt{w_j}} (1 - z_i^2) - \frac{(1 \pm M) z_i}{\rho(z_i)(1 - z_i^2)} \delta_{ij}.$$

## РЕЗУЛЬТАТЫ

С использованием метода представления дискретных переменных, в данном разделе получены и представлены энергии связи нескольких систем, состоящих из атомов гелия, лития и натрия. Благодаря применению данного метода время вычислений значительно сократилось без потери точности.

Для тримера гелия были получены энергии связи и оценено время вычислений. Соответствующие результаты приведены в табл. 1. Максимально точное полученное значение равно  $E = -0.08246 \text{ см}^{-1} = -0.11792 \text{ К}$ . Полученные результаты согласуются с результатами других авторов, представленными в работах [10, 11]. В то же время, благодаря использованию метода дискретных переменных, удалось сократить время вычислений почти в 17 раз.

DVR-метод был также разработан для построения функций, основанных на полиномах Якоби  $P_n^{(\alpha, \beta)}(z)$  [12]. Преимущество данного подхода заключается в возможности выбора параметров таким образом, что весовая функция в квадратурной формуле Гаусса сглаживает особенности потенциала. Данный подход также был применен для определения энергий связи тримера гелия [7]. Результаты представлены в табл. 2. При  $\alpha = \beta = -0.5$  (полиномы Чебышева первого рода) получаем наиболее точный результат:  $-0.08372 \text{ см}^{-1}$ .

Были вычислены энергии связи для систем, состоящих из изотопов лития и двух атомов гелия [12]. В табл. 3 приведены полученные значения в сравнении с результатами других авторов. Заметим, что лучше всего энергии согласуются со значениями, представленными в работе [1]. Для потенциалов ТТУ + КТТУ [13] и LM2M2 + КТТУ [14] наши энергии связи значительно больше. Поскольку наши результаты имеют вариационный характер, мы полагаем, что они ближе к точным значениям.

**Таблица 2.** Энергии связи He<sub>3</sub> и относительные ошибки для различных параметров α и β полиномов Якоби P<sub>n</sub><sup>(α,β)</sup> в DVR-разложении

α = β	-0.75	-0.5	-0.25	0.0	0.25.	0.5	0.75
E, см <sup>-1</sup> · 10 <sup>-2</sup>	-8.648	-8.372	-7.164	-9.716	-8.850	-8.627	-8.544
δE	0.049	0.015	0.131	0.178	0.073	0.046	0.035

**Таблица 3.** Энергия связи системы Li–He<sub>2</sub> в см<sup>-1</sup> для различных потенциалов TTY [13], LM2M2 [14], Svetko [15]

	He-He pot.	Li-He pot.	<sup>6</sup> Li-He <sub>2</sub>	<sup>7</sup> Li-He <sub>2</sub>
J. Yuan, C. D. Lin [16]	TTY	KTTY	-2.18 · 10 <sup>-2</sup>	-3.18 · 10 <sup>-2</sup>
Данная работа	TTY	KTTY	-3.71 · 10 <sup>-2</sup>	-5.41 · 10 <sup>-2</sup>
I. Vaccarelli et al. [17]	LM2M2	Svetko	-3.61 · 10 <sup>-2</sup>	-5.10 · 10 <sup>-2</sup>
Данная работа	LM2M2	Svetko	-2.62 · 10 <sup>-2</sup>	-4.07 · 10 <sup>-2</sup>
E. A. Kolganova [1]	LM2M2	KTTY	-2.46 · 10 <sup>-2</sup>	-3.54 · 10 <sup>-2</sup>
Данная работа	LM2M2	KTTY	-3.71 · 10 <sup>-2</sup>	-5.41 · 10 <sup>-2</sup>

**Таблица 4.** Энергии связи Na–He<sub>2</sub>, относительные погрешности и время интегрирования при различном количестве функций в разложении

n	5	10	15
Разложение по полиномам Лежандра			
E, см <sup>-1</sup>	-9.298 · 10 <sup>-2</sup>	-1.038 · 10 <sup>-1</sup>	-1.034 · 10 <sup>-1</sup>
δE	1.007 · 10 <sup>-1</sup>	2.743 · 10 <sup>-3</sup>	—
t, с	112	802	2641
Метод представления дискретных переменных			
E, см <sup>-1</sup>	-1.211 · 10 <sup>-1</sup>	-1.074 · 10 <sup>-1</sup>	-1.027 · 10 <sup>-1</sup>
δE	1.78 · 10 <sup>-1</sup>	3.849 · 10 <sup>-2</sup>	6.535 · 10 <sup>-3</sup>
t, с	35	130	285
Коэффициент ускорения			
	3.2	6.2	9.3

Было проведено исследование системы Na–He<sub>2</sub>. Были получены энергии связи данной системы, проведено сравнение эффективности DVR-метода и стандартного метода разложения решения по полиномам Лежандра. Результаты приведены в табл. 4. Как и в случае с тримером гелия, разработанный нами алгоритм позволяет значительно сократить время вычислений.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение метода представления дискретных переменных позволяет сократить время работы программы при расчете энергий связи для слабосвязанных систем трех частиц без потери точности в численных результатах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных

исследований (проект № 19-32-90148). Расчеты выполнены в Вычислительном центре СПбГУ.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kolganova E. // Few-Body Syst. 2017. V. 58. P. 57.
2. Kukulin V.I., Krasnopol'sky V.M., Horáček J. Theory of resonances. Principles and applications. Springer: Dordrecht. 1989. V. 3.
3. Elander N., Yarevsky E. // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 3119.
4. Lill J.V., Parker G.A., Light J.C. // J. Chem. Phys. 1986. V. 85. P. 900.
5. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
6. Elander N., Levin S.B., Yarevsky E. // Int. J. Quant. Chem. 2009. V. 109. No. 3. P. 459.

7. Тимошенко В.А., Яревский Е.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2021. Т. 85. № 5. С. 728; Timoshenko V.A., Yarevsky E.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2015. V. 85. No. 5. P. 565.
8. Abramowitz M., Stegun I.A. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. N.Y.: Dover, 1964.
9. Zhang J.Z.H. Theory and application of quantum molecular dynamics. Singapore, New Jersey, London, Hong Kong: World Scientific, 1999.
10. Motovilov A., Sandhas W., Sofianos S., Kolganova E. // Eur. Phys. J. D. 2001. V. 13. P. 34.
11. Esry B.D., Lin C.D., Greene C.H. // Phys. Rev. A 1996. V. 54. P. 394.
12. Тимошенко В.А., Яревский Е.А. // Опт. и спектроск. 2018. Т. 124. № 4. С. 451.
13. Tang K., Toennies J., Yiu C. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 1546.
14. Aziz R., Slaman M. // J. Chem. Phys. 1991. V. 84. Art. No. 8047.
15. Cvetko D., Lausi A., Morgante A., Tommasini F. // J. Chem. Phys. 1994. V. 100. Art. No. 2052.
16. Yuan J., Lin C.D. // J. Phys. B. 1998. V. 31. P. 647.
17. Baccarelli I., Delgado-Barrio G., Gianturco F.A. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2000. V. 2. P. 4067.

## Theoretical study of weakly-bound triatomic systems using discrete variable representation method

V. A. Timoshenko<sup>a, \*</sup>, E. A. Yarevsky<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, 199034 Russia

\*e-mail: vladimir.timoshenko7@mail.ru

The method of discrete variables for systems with nonzero total angular momentum has been developed, which allows one to significantly reduce the time for solving the quantum three-body problem. The binding energies of several weakly coupled triatomic systems, including He<sub>3</sub>, He<sub>2</sub>-Li, and He<sub>2</sub>-Na, have been calculated using this method, and a comparison with the results of other authors has been made.