

ВЕСЦІ НАЦЫЯНАЛЬнай АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ

СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК. 2017. № 3

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

СЕРИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК. 2017. № 3

Журнал основан в январе 1965 г.

Выходит четыре раза в год

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,
свидетельство о регистрации № 392 от 18.05.2009

*Входит в Перечень научных изданий Республики Беларусь
для опубликования результатов диссертационных исследований,
включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ)*

Главный редактор

Сергей Яковлевич Килин – Президиум Национальной академии наук Беларуси

Редакционная коллегия

- Н. М. Олехнович** – Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь (*заместитель главного редактора*),
- В. А. Орлович** – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь (*заместитель главного редактора*),
- Т. Е. Янчук** – (*ведущий редактор журнала*)
- С. В. Абламейко** – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
- С. М. Абрамов** – Институт программных систем Российской академии наук, Москва, Россия
- В. М. Анищик** – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
- А. И. Белоус** – Холдинг «ИНТЕГРАЛ», Минск, Беларусь
- И. В. Гайшун** – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- С. В. Гапоненко** – Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований, Минск, Беларусь
- А. М. Гончаренко** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
- А. П. Достанко** – Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь
- Н. А. Изобов** – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

- Н. С. Казак** – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
В. И. Корзюк – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
Ф. П. Коршунов – Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь
Ю. А. Курочкин – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
Н. А. Поклонский – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
С. А. Тихомиров – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
Л. М. Томильчик – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
А. В. Тузиков – Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
Ю. С. Харин – Научно-исследовательский институт прикладных проблем математики и информатики Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь
А. Ф. Чернявский – Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь
Л. А. Янович – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
В. И. Янчевский – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

Редакционный совет

- С. Я. Клини** – Президиум Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
С. В. Абламейко – Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
Ж. И. Алферов – Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия
А. Л. Асеев – Президиум Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия
Й. Врахтруп – Институт физики (3) Штутгартского университета, Штутгарт, Германия
И. В. Гайшун – Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
А. М. Желтиков – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия
В. В. Козлов – Математический институт имени В. А. Стеклова Российской академии наук, Москва, Россия
Г. Лёйхс – Институт физики света имени М. Планка, Эрланген, Германия
Д. С. Могилевцев – Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
В. А. Орлович – Отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь
А. Цайлингер – Институт квантовой оптики и квантовой информатики Австрийской академии наук, Вена, Австрия

Адрес редакции:

ул. Академическая, 1, к. 119, 220072, г. Минск, Республика Беларусь.

Тел.: + 375 17 284-19-19; e-mail: fmvesti@mail.ru

vestifm.belnauka.by

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ.

Серия физико-математических наук. 2017. № 3.

Выходит на русском, белорусском и английском языках

Редактор *Т. Е. Янчук*

Компьютерная верстка *О. Л. Смольской*

Подписано в печать 13.09.2017. Выход в свет 26.09.2017. Формат 60×84¹/₈. Бумага офсетная.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 16,4. Тираж 68 экз. Заказ 170.

Цена: индивидуальная подписка – 10,34 руб., ведомственная подписка – 25,29 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220141, г. Минск, Республика Беларусь

© РУП «Издательский дом «Беларуская навука»,
Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук, 2017

PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

PHYSICS AND MATHEMATICS SERIES, 2017, no. 3

The Journal was founded in January 1965

Periodicity is 4 issues per annum

Founder is the National Academy of Sciences of Belarus

The journal is registered on May 18, 2009 by the Ministry of Information of the Republic of Belarus
in the State Registry of Mass Media, reg. no. 392

*The Journal is included in The List of Journals for Publication
of the Results of Dissertation Research in the Republic of Belarus
and in the database of Russian Science Citation Index (RSCI)*

Editor-in-Chief

Sergei Ya. Kilin – Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Editorial Board

Nikolai M. Olekhovich – The Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus (*Associate Editor-in-Chief*)

Valentin A. Orlovich – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus (*Associate Editor-in-Chief*)

Tatiana E. Yanchuk (*lead editor*)

Sergey V. Ablameyko – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Sergei M. Abramov – Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Viktor M. Anishchik – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Anatoliy I. Belous – “INTEGRAL” Holding, Minsk, Belarus

Ivan V. Gaishun – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Sergey V. Gaponenko – Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research, Minsk, Belarus

Andrei M. Goncharenko – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Anatolii P. Dostanko – Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

Nikolai A. Izobov – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Nikolai S. Kazak – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Viktor I. Korzyuk – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Fyodor P. Korshunov – The Scientific and Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Yurii A. Kurochkin – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Nikolai A. Poklonskii – Belarusian State University, Minsk, Belarus

Sergei A. Tikhomirov – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Lev M. Tomil'chik – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Aleksandr V. Tuzikov – United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Yurii S. Kharin – Research Institute for Applied Problems of Mathematics and Informatics of the Belarusian State University, Minsk, Belarus
Aleksandr F. Chernyavskii – A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University, Minsk, Belarus
Leonid A. Yanovich – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Vyacheslav I. Yanchevskii – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

Editorial Council

Sergei Ya. Kilin – Presidium of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Sergei V. Ablameyko – Belarusian State University, Minsk, Belarus
Zhores I. Alferov – St Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia
Aleksandr L. Aseev – Presidium of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
Ivan V. Gaishun – Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Aleksei M. Zheltikov – Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
Valery V. Kozlov – Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
Gerd Leuchs – Max Planck Institute for the Science of Light, Erlangen, Germany
Dmitrii S. Mogilevcev – B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Jörg Wrachtrup – Institute of Physics (3) of the University of Stuttgart, Stuttgart, Germany
Valentin A. Orlovich – Department of Physics, Mathematics and Informatics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
Anton Zeilinger – Institute for Quantum Optics and Quantum Information of the Austrian Academy of Sciences, Vienna, Austria

Address of the Editorial Office:

*1, Akademicheskaya Str., room 119, 220072, Minsk, Republic of Belarus.
Tel.: +375 17 284-19-19; e-mail: fmvesti@mail.ru*

vestifm.belnauka.by

PROCEEDING OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS.

Physics and Mathematics series, 2017, no. 3.

Printed in Russian, Belarusian and English languages

Editor *T. E. Yanchuk*
Computer imposition *O. L. Smolskaya*

It is sent of the press 13.09.2017. Appearance 26.09.2017. Format 60×84¹/₈. Offset paper.
The press digital. Printed pages 14,88. Publisher's signatures 16,4. Circulation 68 copies. Order 170.
Price: individual subscription – 10,34 byn., departmental subscription – 25,29 byn.

Publisher and printing execution:

Republican unitary enterprise "Publishing House "Belaruskaya Navuka".
Certificate on the state registration of the publisher, manufacturer, distributor of printing editions
No. 1/18 dated August 2, 2013. License for the press no. 02330/455 dated December 30, 2013.
Address: F. Scorina Str., 40, 220141, Minsk, Republic of Belarus.

© RUE "Publishing House "Belaruskaya Navuka",
Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series, 2017

СОДЕРЖАНИЕ**МАТЕМАТИКА**

Волков В. М., Гуревский А. Н. Спектральная согласованность разностных схем для уравнения теплопроводности	7
Кот М. Г. Асимптотика собственных вектор-функций операторов, аппроксимирующих дифференциальные уравнения с δ -образными коэффициентами	15
Роўба Я. А., Казлоўская Н. Ю. Аб набліжэнні функцыі $ \sin x $ рацыянальнымі апэратарамі Феера	27
Кузьмич А. В., Гринь А. А. Выделение систем с возмущенным линейным центром, имеющих не более одного предельного цикла	40

ФИЗИКА

Курочкин Ю. А. Интерпретация свободного движения частиц в пространстве Лобачевского в терминах теории рассеяния	49
Веко О. В., Войнова Я. А., Овсиюк Е. М., Редьков В. М. Частица Кокса во внешнем магнитном поле: анализ в пространстве Лобачевского	56
Крылова Н. Г., Грушевская Г. В., Редьков В. М. Динамика фазовых переходов 1-го рода в финслеровом конфигурационном пространстве лэнгмюровского монослоя	66
Белый В. Н., Хило П. А., Казак Н. С., Хило Н. А. Низкочастотное обратное акустооптическое рассеяние бесселевых световых пучков	78
Левчук Е. А., Макаренко Л. Ф. Анализ электронной структуры электрически индуцированной квантовой точки во внешнем магнитном поле	87
Баранова М. С., Скачкова В. А., Стемпицкий В. Р., Гвоздовский Д. Ч. Энергетическая зонная диаграмма слоистых гетеросистем графен-ZnO, графен-ZnS: квантово-механическое моделирование	99
Макаренко Л. Ф., Ластовский С. Б., Якушевич А. С., Молл М., Пинтилие И. Инжекционный отжиг радиационных дефектов междоузельного типа в легированных бором кристаллах кремния	108
Лебядок Я. В., Кабанаў Д. М. Шырыня забароненай зоны і Ажэ-рэкамбінацыя ў святлодыёдах на аснове GaInAsSb пры тэмпературах 10–300 К	118

УЧЕННЫЕ БЕЛАРУСИ

Достанко Анатолий Павлович (К 80-летию со дня рождения)	127
--	-----

CONTENTS**MATHEMATICS**

Volkov V. M., Hureuski A. N. Spectral-like resolution of finite-difference schemes for the heat conduction equation	7
Kot M. G. Asymptotic behavior of the vector-functions of operators approximating the differential equations with δ -shaped coefficients	15
Rovba E. A., Kozlovskaya N. Yu. Approximation of $ \sin x $ by rational operators of Fejér type	27
Kuzmich A. V., Hryn A. A. Construction of the systems with a perturbed linear center having no more than one limit cycle	40

PHYSICS

Kurochkin Yu. A. Interpretation of the free motion of particles in the Lobachevsky space in the term of the scattering theory	49
Veko O. V., Voynova Ya. A., Ovsyuk E. M., Red'kov V. M. Cox particle in the applied magnetic field: analysis in Lobachevsky space	56
Krylova N. G., Grushevskaya H. V., Red'kov V. M. First-order phase transition dynamics in the Finsler configuration space of the Langmuir monolayer	66
Belyi V. N., Khilo P. A., Kazak N. S., Khilo N. A. Low-frequency backward acousto-optic scattering of Bessel light beams	78
Levchuk E. A., Makarenko L. F. Analysis of the electronic structure of an electrically induced quantum dot in the external magnetic field	87
Baranova M. S., Skachkova V. A., Stempitsky V. R., Hvazdousky D. C. Band structure of the layered graphene–ZnO, graphene–ZnS heterosystems: quantum-mechanical simulation	99
Makarenko L. F., Lastovskii S. B., Yakushevich H. S., Moll M., Pintilie I. Injection annealing of radiation-induced interstitial defects in boron doped silicon crystals	108
Lebiadok Y. V., Kabanau D. M. Amplified luminescence and Auger recombination in GaInAsSb-based LEDs in the temperature range of 10–300 K	118

SCIENTISTS OF BELARUS

Dostanko Anatolii Pavlovich (To the 80 th Anniversary)	127
--	-----

МАТЕМАТИКА
MATHEMATICS

УДК 519.63

Поступила в редакцию 24.05.2017
Received 24.05.2017**В. М. Волков, А. Н. Гуревский***Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь***СПЕКТРАЛЬНАЯ СОГЛАСОВАННОСТЬ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ**

Аннотация. Исследована спектральная согласованность схемы с весами для уравнения теплопроводности. Посредством аналогии между частотными характеристиками уравнения теплопроводности и фильтра низкой частоты найдено эквивалентное представление разностной схемы в виде пары рекурсивных цифровых фильтров первого порядка с компенсированной групповой задержкой. На основе спектральной согласованности получены оценки точности дискретной модели фильтрации. Найдены оптимальные значения коэффициентов фильтра, обеспечивающие минимальную среднеквадратичную погрешность его частотной характеристики в заданном спектральном диапазоне. Примечательно, что оптимальное соотношение пространственно-временных шагов сетки в схеме с весами совпадает с соотношением, которое обеспечивает схема фильтрации с коэффициентами, отвечающими минимальной среднеквадратичной погрешности частотной характеристики в заданном спектральном диапазоне. Показано, что оптимизированная модель фильтрации обеспечивает многократное уменьшение среднеквадратичной погрешности частотной характеристики (в 5–7 раз) по сравнению с разностной схемой 6-го порядка точности. Значение шага по времени в оптимизированной схеме фильтрации несколько больше, по сравнению с его значением в разностной схеме 6-го порядка точности и стремится к последнему, когда диапазон наилучшего спектрального разрешения стремится к нулю. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации соотношения шагов сетки в разностных методах для уравнения теплопроводности.

Ключевые слова: разностные схемы, уравнение теплопроводности, спектральное разрешение, рекурсивный цифровой фильтр

Для цитирования. Волков, В. М. Спектральная согласованность разностных схем для уравнения теплопроводности / В. М. Волков, А. Н. Гуревский // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 7–14.

V. M. Volkov, A. N. Hureuski*Belarusian State University, Minsk, Belarus***SPECTRAL-LIKE RESOLUTION OF FINITE-DIFFERENCE SCHEMES
FOR THE HEAT CONDUCTION EQUATION**

Abstract. The spectral resolution of the finite-difference theta-method for the heat conduction equation is investigated. By analogy between the frequency response of the heat conduction equation and a low pass filter, we have found an equivalent representation of the finite-difference scheme in the form of two first-order IIR filters with zero group delay. On the basis of the spectral consistency, the error estimate of the discrete filtering model is obtained. The optimal parameters of the IIR filters providing a minimum error of the frequency response within a given spectral range are found. It is remarkable that the optimal ratio of spatial and temporal steps for the theta-method coincides with the ratio provided by the filtering model with coefficients corresponding to a minimum root-mean-square error of the frequency response for the given spectral range. It is shown that the optimized scheme provides a manifold (by a factor of 5–7) reduction in the root-mean-square error of the frequency response in comparison with the 6th order accuracy theta-method. The optimal time step is a little bit larger in comparison with its value in the 6th order accuracy scheme and tends to the last one when the spectral resolution range tends to zero. The obtained results can be used to optimize discretization parameters using the finite-difference methods for the heat conduction equation.

Keywords: finite-difference schemes, heat conduction equation, spectral-like resolution, IIR filter

For citation. Volkov V. M., Hureuski A. N. Spectral-like resolution of finite-difference schemes for the heat conduction equation. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 7–14 (in Russian).

Введение. Спектральный анализ погрешности численных методов имеет важное значение для оценки адекватности дискретных моделей дифференциальных задач в условиях ограниченной гладкости решения. Среди результатов, показывающих возможности существенного улучшения точности разностных схем путем согласования частотных характеристик дискретной и дифференциальной моделей, можно отметить работы [1–3]. Говоря о спектральной согласованности численных методов, естественным представляется использование аналогии разностных схем и цифровых фильтров, являющихся незаменимым инструментом современных цифровых технологий (см., напр., [4]). Данное сходство дискретных моделей позволяет использовать методы цифровой обработки сигналов для улучшения частотных характеристик разностных схем, в частности, для повышения их спектрального разрешения [5, 6] и определения оптимальных соотношений шагов сетки [7]. Отмеченная аналогия представляется столь глубокой, что позволяет предположить возможность представления любой линейной разностной схемы с постоянными коэффициентами на равномерной сетке в виде эквивалентной дискретной модели, основанной на цифровых фильтрах. Использование схемы цифровой фильтрации в качестве прототипа метода решения дифференциальной задачи позволяет изначально реализовать желаемые качественные особенности частотных характеристик дискретной модели (консервативность, асимптотическую устойчивость и др.), а оптимизация параметров фильтра открывает возможность для наилучшего согласования данных характеристик дискретной и дифференциальной задачи. Например, консервативность схемы фильтрации для уравнения Шредингера реализуется автоматически в классе всепропускающих фильтров [6], а асимптотическая устойчивость разностных схем для уравнения теплопроводности может быть ассоциирована с монотонностью амплитудно-частотных характеристик фильтров низких частот Баттерворта или Бесселя [4].

В настоящей работе показано, что схемы с весами четвертого и шестого порядков точности для уравнения теплопроводности с постоянными коэффициентами при определенном соотношении на шаги сетки имеют эквивалентное представление в виде пары сопряженных цифровых фильтров первого порядка. Использование схемы цифровой фильтрации позволяет найти оптимальные коэффициенты фильтра, обеспечивающие минимизацию погрешности функции передачи в заданном спектральном диапазоне. На основе численного анализа установлено, что схема с оптимальными параметрами обеспечивает в 5–7 раз меньшую среднеквадратичную ошибку по сравнению со схемой шестого порядка точности. Получены оценки скорости сходимости приближенного решения на основе спектральной согласованности дискретной модели.

Постановка задачи. Дисперсионное соотношение. Рассмотрим уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in (-L, L), \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями вида

$$u(0, x) = u_0(x), \quad u(t, -L) = u(t, L). \quad (2)$$

Фундаментальную роль играют частные решения задачи (1)–(2) вида

$$u(t, x) = e^{i(\omega_m t - k_m x)}, \quad (3)$$

где k_m – волновое число, ω_m – циклическая частота. Подстановка (3) в уравнение (1) приводит к характеристическому уравнению, решение которого принято называть дисперсионным соотношением:

$$\omega_m = ik_m^2. \quad (4)$$

Произвольное решение задачи (1)–(2) может быть приближенно представлено в виде отрезка ряда Фурье:

$$u(t, x) = \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} c_m(t) e^{ik_m x}, \quad c_m(t) = c_m(0) e^{i\omega_m t} = c_m(0) e^{-k_m^2 t}, \quad k_m = m \frac{\pi}{L}. \quad (5)$$

Здесь $c_m = c_m(t)$, $m = \overline{-N/2, N/2-1}$ – коэффициенты Фурье. Не нарушая общности, будем полагать далее $L = \pi$. Как следует из представления (5), динамика гармонических составляющих решения, заданного вектором коэффициентов Фурье, $c(t) = (c_{-N/2}, \dots, c_{N/2-1})^T$, выражается эволюционным оператором H :

$$c(t + \Delta t) = H \cdot c(t), \quad (6)$$

где $H = H(k)^{\Delta t} = \text{diag}(H_{-N/2}, \dots, H_{N/2-1})$ – диагональная матрица,

$$H_m = H_m^{\Delta t} = e^{-k_m^2 \Delta t}, \quad (7)$$

причем диагональные компоненты матрицы H могут быть интерпретированы как коэффициенты передачи некоторого цифрового фильтра. Данные коэффициенты определяют частотные характеристики дифференциальной задачи.

Для достаточно гладких периодических решений коэффициенты Фурье быстро убывают. В силу этого представление (5), при надлежащем выборе N , можно рассматривать как точное и использовать для анализа погрешности приближенных численных методов.

Частотные характеристики разностной схемы. Рассмотрим разностную схему с весами (см., напр., [8]) для уравнения (1):

$$\frac{y_m^{n+1} - y_m^n}{\tau} = \sigma \frac{y_{m+1}^{n+1} - 2y_m^{n+1} + y_{m-1}^{n+1}}{h^2} + (1 - \sigma) \frac{y_{m+1}^n - 2y_m^n + y_{m-1}^n}{h^2}, \quad m = 1, N - 2, \quad (8)$$

$$y_0^m = y_{N-1}^m = 0, \quad y_n^0 = u_0(x_n).$$

Здесь $y_m^n = y(x_m, t_n)$, $(x_m, t_n) \in \omega_h \times \omega_\tau$, $\omega_h = \{x_m = -L + hm, h = 2L / (N - 1), m = \overline{0, N - 1}\}$, $\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = \overline{0, 1, \dots}\}$, $0 \leq \sigma \leq 1$.

Подстановка решения (3) в схему (8), учитывая собственные значения разностного оператора с периодическими граничными условиями, дает следующее выражение для диагональных компонент оператора перехода гармонических составляющих разностного решения на новый временной слой:

$$\begin{aligned} \overline{H}_m &= \overline{H}_m(h, \tau, \sigma) = \left(1 - (1 - \sigma) \frac{4\tau}{h^2} \sin^2 \frac{\pi mh}{2L} \right) \left(1 + \frac{4\tau\sigma}{h^2} \sin^2 \frac{\pi mh}{2L} \right)^{-1} = \\ &= \left(1 - (1 - \sigma) \frac{4\tau}{h^2} \sin^2 \frac{k_m h}{2} \right) \left(1 + \frac{4\tau\sigma}{h^2} \sin^2 \frac{k_m h}{2} \right)^{-1}, \quad m = \overline{-N/2, N/2-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Локальная погрешность разностного решения определяется близостью коэффициентов передачи $\overline{H}_m(h, \tau, \sigma)$ и H_m^τ .

Теорема. Пусть для разности коэффициентов передачи эволюционного оператора дифференциальной задачи H_m^τ и ее дискретной модели $\overline{H}_m(h, p)$, $\|\overline{H}_m(h, p)\| \leq 1$, где h – шаг пространственной дискретизации, p – вектор параметров дискретной модели, имеет место оценка

$$\left| \overline{H}_m(h, p) - H_m^\tau \right| \leq Gh^n k_m^n, \quad 0 < G < \infty.$$

Тогда, если решение дифференциальной задачи имеет достаточную гладкость $u(t, x) \in W_2^n[-L, L]$ и $\tau = Mh^2$, для погрешности решения дискретной задачи имеет место оценка

$$\|\delta^j\| = \|y^j - u^j\| \leq Rh^{n-2}, \quad 0 < R < \infty. \quad (10)$$

Доказательство. В пространстве сеточных функций и коэффициентов Фурье определим нормы:

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)} = \left(\sum_{j=0}^{N-1} h |u(t, x_j)|^2 \right)^{1/2}, \quad \|c\| = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} |c_j(t)|^2 \right)^{1/2}.$$

Учитывая, что $\delta_m^0 = y_m^0 - u_0(x_m) = 0$, $m = \overline{0, N-1}$, оценим локальную погрешность коэффициентов Фурье решения дискретной задачи на одном шаге по времени при $t = \tau$:

$$\Delta_m^1 = \overline{H}_m c_m(0) - H_m c_m(0) = (\overline{H}_m - H_m) c_m(0).$$

Переходя к нормам в последнем равенстве, приходим к оценке локальной погрешности:

$$\|\Delta^1\| \leq h^n G \left(\sum_{m=-N/2}^{N/2-1} |c_m|^2 m^{2n} \right)^{1/2}. \quad (11)$$

Для коэффициентов Фурье функции $u(t, x) \in W_2^n[-L, L]$ имеет место

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} |c_m|^2 m^{2n} = G_0 \leq \infty,$$

на основании чего из неравенства (11) следует оценка локальной погрешности

$$\|\Delta^1\| \leq h^n G G_0^{1/2}. \quad (12)$$

Принимая во внимание эффект накопления ошибки в устойчивой дискретной модели $\|\overline{H}_m(h, p)\| \leq 1$, с учетом равенства Парсеваля $\|c^j\| = \|u^j\|$, имеем

$$\|y^j - u^j\| = \|\delta^j\| \leq j \|\Delta^1\| \leq \frac{t_j}{\tau} G G_0^{1/2} h^n \leq R h^{n-2}, \quad R = t_j G G_0^{1/2},$$

что и требовалось доказать.

Для оценки погрешности коэффициентов передачи и оптимизации параметров разностной схемы (8) используем представление $\overline{H}_m(h, p) = \overline{H}_m(h, \tau, \sigma)$ в виде степенного ряда относительно переменной k_m :

$$\overline{H}_m(h, \tau, \sigma) = 1 - \tau k_m^2 + \left(\sigma \tau^2 + \frac{\tau h^2}{12} \right) k_m^4 - \left(\frac{\sigma h^2 \tau^2}{6} + \frac{\tau h^4}{360} + \sigma^2 \tau^3 \right) k_m^6 + O(h^8 k_m^8). \quad (13)$$

Несложно получить аналогичное представление коэффициентов передачи для дифференциальной задачи (1), (2):

$$H_m^\tau = 1 - \tau k_m^2 + \frac{\tau^2}{2} k_m^4 - \frac{\tau^3}{6} k_m^6 + O(\tau^4 k_m^8). \quad (14)$$

С учетом (13), (14) погрешность коэффициентов передачи имеет вид

$$\overline{H}_m(h, \tau, \sigma) - H_m^\tau = \left[\left(\sigma - \frac{1}{2} \right) \tau^2 + \frac{\tau h^2}{12} \right] k_m^4 - \left[\frac{\sigma h^2 \tau^2}{6} + \frac{\tau h^4}{360} + \left(\sigma^2 - \frac{1}{6} \right) \tau^3 \right] k_m^6 + O(h^8 k_m^8).$$

Приравнивая к нулю слагаемые в прямоугольных скобках последнего равенства, получим

$$|\overline{H}_m(h, \tau, \sigma) - H_m| = \begin{cases} O(h^6 k_m^6), & \sigma = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\tau}, \quad \tau = O(h^2), \\ O(h^8 k_m^8), & \sigma = \frac{1}{2} - \frac{h^2}{12\tau}, \quad \tau = \frac{h^2}{\sqrt{20}}. \end{cases} \quad (15)$$

Согласно теореме, соотношения (15) определяют условия четвертого и шестого порядка точности разностной схемы (8). Отметим, что аналогичные результаты могут быть получены на основе оценки невязки рассмотренной разностной схемы [9].

Эквивалентное представление разностной схемы на основе рекурсивных цифровых фильтров. Рассмотрим трехпараметрическую схему цифровой фильтрации, основанную на последовательном применении рекурсивного фильтра в прямом и обратном направлении оси x :

$$\begin{aligned} \overline{y}_m^{n+1} &= a_1 \overline{y}_{m-1}^{n+1} + b_0 y_m^n + b_1 y_{m-1}^n, & m = 1, 2, \dots, N-1; \\ y_m^{n+1} &= a_1 y_{m+1}^{n+1} + b_0 \overline{y}_m^n + b_1 \overline{y}_{m+1}^n, & m = N-2, N-3, \dots, 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Использование двух сопряженных фильтров требуется для устранения группового запаздывания решения [4]. Функция передачи схемы (16) вычисляется как произведение функций передачи двух секций первого порядка:

$$H_F(z) = \frac{b_0 + b_1 z^{-1}}{1 + a_1 z^{-1}} \cdot \frac{b_0 + b_1 z}{1 + a_1 z} = \frac{b_0 b_1 + (b_0^2 + b_1^2) z^{-1} + b_0 b_1 z^{-2}}{a_1 + (1 + a_1^2) z^{-1} + a_1 z^{-2}}, \quad z = \exp(ihk_m). \quad (17)$$

При введении обозначений $p_1 = \frac{b_0 b_1}{a_1}$, $p_2 = \frac{b_0^2 + b_1^2}{a_1}$, $p = \frac{1 + a_1^2}{a_1}$ амплитудно-частотная характеристика схемы фильтрации (16) принимает вид

$$|H_F(z)| = |\overline{H}_m(h, p)| = \left| \frac{p_1 + p_2 z^{-1} + p_1 z^{-2}}{1 + p z^{-1} + z^{-2}} \right| = \left| \frac{p_2 + 2p_1 \cos(hk_m)}{p + 2 \cos(hk_m)} \right|. \quad (18)$$

Разлагая функцию $H_F(z)$ в степенной ряд и приравнивая коэффициенты данного ряда до восьмого порядка включительно к соответствующим коэффициентам разложения (14), приходим к условиям согласованности частотной характеристики схемы фильтрации (17) и дифференциальной задачи (1), (2):

$$1 = \frac{p_2 + 2p_1}{p + 2}, \quad \frac{p_1 p - p_2}{p + 2} = \frac{(p-10)}{6}, \quad \frac{(p_1 p - p_2)^2}{(p+2)^2} = \frac{(p^2 - 56p + 244)}{60}, \quad (19)$$

$$\tau = h^2 \frac{p_1 p - p_2}{(p+2)^2} = h^2 \frac{(p-10)}{6(p+2)}. \quad (20)$$

Решение системы уравнений (19) дает следующие значения коэффициентов:

$$p = p_0 = -17 - 9\sqrt{5}, \quad p_1 = 1 + (p-10)/6, \quad p_2 = p - 2p_1 + 2. \quad (21)$$

Выполнение условий (19), (20) обеспечивает восьмой порядок локальной точности коэффициентов передачи (17)

$$|\overline{H}_m(h, p) - H_m^\tau| = O(h^8 k_m^8),$$

что, согласно доказанной выше теореме, соответствует шестому порядку точности решения дискретной задачи (16) относительно шага h .

С учетом введенных ранее обозначений, коэффициенты схемы фильтрации (16), обеспечивающие шестой порядок точности, находятся по следующим формулам:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{p \pm \sqrt{p^2 - 4}}{2}, \\ b_0 &= \frac{\sqrt{a_1(p_2 + 2p_1)} + \sqrt{a_1(p_2 - 2p_1)}}{2}, \\ b_1 &= \frac{\sqrt{a_1(p_2 + 2p_1)} - \sqrt{a_1(p_2 - 2p_1)}}{2}. \end{aligned} \quad (22)$$

Поскольку условие устойчивости требует, чтобы полюс фильтра (16), (22) $p = -a_1$ находился в пределах единичного круга на комплексной плоскости $|a_1| \leq 1$, то в силу того, что $p < 0$, в выражении для коэффициента a_1 следует использовать знак «+». С точностью до граничных условий рассмотренная схема (16), (22), основанная на последовательном применении двух сопряженных фильтров, (16) эквивалентна разностной схеме шестого или четвертого порядка точности (8), (15) при соответствующем соотношении шагов сетки (20).

Схема фильтрации (16) не имеет каких-либо практических преимуществ по сравнению с разностной схемой (8). Напротив, использование рекурсивных фильтров затрудняет моделирование граничных условий и неоднородных коэффициентов, что ограничивает круг непосредственного использования данного класса алгоритмов задачами Коши. Тем не менее данная схема представляется интересной с точки зрения оптимизации параметров дискретной модели с целью улучшения ее спектральной согласованности. В самом деле, спектральные характеристики схемы цифровой фильтрации (16), (22) эквивалентны разностной схеме с весами (8) при условиях

$$\tau = h^2 \frac{(p-10)}{6(p+2)}, \quad \sigma = \frac{1}{2} - \frac{(p+2)}{2(p-10)}. \quad (23)$$

Второе из условий (23) относительно величины σ несложно получить из сравнения передаточных функций схемы с весами (9) и цифрового фильтра (18). Исследуем возможность улучшения спектральных характеристик дискретных моделей на основе выбора оптимального значения параметра p , обеспечивающего минимум погрешности функции передачи в заданном спектральном диапазоне.

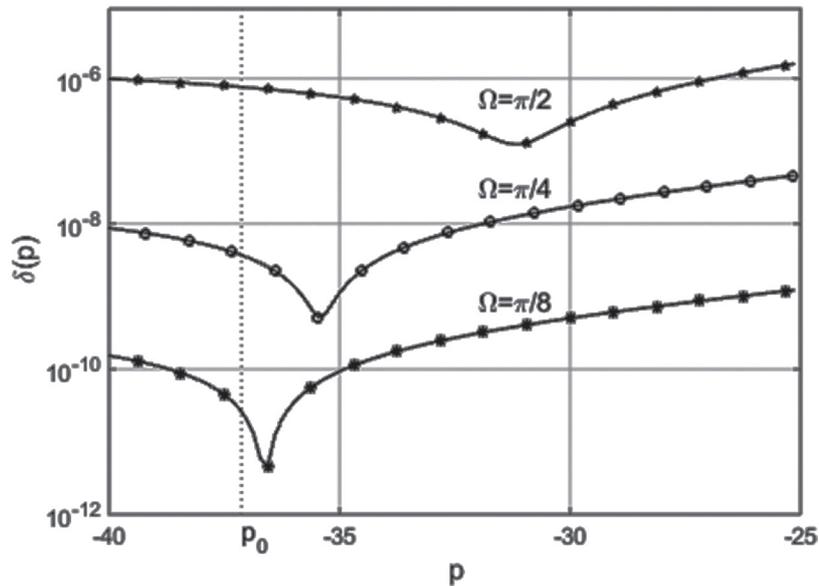
Спектральное разрешение схемы цифровой фильтрации. В качестве критерия оптимальности параметров дискретной модели определим условие минимума погрешности передаточной функции в заданном спектральном диапазоне. Рассмотрим среднеквадратичную погрешность функции передачи (18) схемы цифровой фильтрации (16), (22) на единичном отрезке по времени $t \in [0, 1]$, используя соответствующую норму с весовой функцией, близкой по структуре к спектру типичных решений задачи. В качестве такой весовой функции разумно использовать модуль самой передаточной функции решаемой задачи (1),(2):

$$\delta(p) = \|H - H_F(p)\| = \sqrt{\frac{1}{2\Omega} \int_{-\Omega}^{\Omega} |H(\xi)| \cdot |H(\xi) - H_F(\xi, p)|^2 d\xi}, \quad 0 < \Omega \leq \pi. \quad (24)$$

Заметим, что если в качестве весовой функции использовать амплитуду спектра решения, то норма погрешности функции передачи (24) приобретает смысл среднеквадратичной погрешности решения в заданном спектральном диапазоне на единичном отрезке по времени.

Результаты численного анализа спектральных характеристик дискретной модели приведены на рисунке, где изображены зависимости нормы погрешности (24) от параметра p для различных спектральных диапазонов шириной от $\Omega/\pi = 1/8$ до $\Omega/\pi = 1/2$.

Представленные на рисунке результаты показывают, что для произвольной ширины спектрального диапазона существует единственное значение $p = p_{\text{opt}} \geq p_0$, обеспечивающее минимум погрешности передаточной функции (18). Примечательно, что при уменьшении диапазона



Зависимости нормы погрешности (24) передаточной функции схемы цифровой фильтрации (16), (22) от параметра p для разной ширины спектрального диапазона
 Dependences of the root mean square error (24) of the frequency response for the filtering scheme (16), (22) on the parameter p at the different spectral ranges

спектральной согласованности оптимальное значение параметра p , обеспечивающее минимум погрешности частотных характеристик, стремится к значению p_0 , соответствующему схеме шестого порядка точности. Важно подчеркнуть также, что согласно условию (23)

$$\frac{d\tau}{dp} = h^2 \frac{2}{(p+2)^2} > 0. \tag{25}$$

Учитывая то, что оптимальное значение параметра $p = p_{\text{opt}} > p_0$, и шаг по времени схемы фильтрации возрастает с ростом p , улучшение спектральных характеристик дискретной модели происходит при увеличении величины шага по времени. Последнее обстоятельство свидетельствует в пользу эффективности использования дискретной модели с оптимальным значением параметра, что гарантирует уменьшение среднеквадратичной погрешности приближенного решения в 5–7 раз при одновременном сокращении вычислительных затрат за счет применения большего шага по времени.

Выводы. Представленные выше результаты показывают, что традиционный аппарат теории разностных схем [9] в ряде частных случаев допускает альтернативную трактовку аппроксимации в терминах спектрального разрешения вместо традиционно используемого понятия невязки. Для анализа спектрального разрешения дискретных моделей естественно воспользоваться возможностью эквивалентного представления разностной схемы в виде цифрового фильтра с последующим применением для его настройки методов теории цифровой обработки сигналов. Как для нестационарного уравнения Шредингера [5–7], так и для рассмотренного в данной работе уравнения теплопроводности, условия эквивалентности двухслойных разностных схем и соответствующих схем фильтрации порождают строгое соотношение пространственного и временного шагов сетки вида (23). Несмотря на кажущуюся жесткость данного соотношения, оно представляется оптимальным [7] и позволяет упростить соответствующий выбор остальных параметров дискретной модели. В частности, задача оптимизации схемы фильтрации с использованием критерия спектрального разрешения (минимизации погрешности функции передачи в заданном спектральном диапазоне) сводится к однопараметрической. Применение схемы максимального спектрального разрешения обеспечивает многократное сокращение ее погрешности по сравнению со схемой максимального порядка точности на заданном минимальном шаблоне.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Lele, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution / S. K. Lele // *J. Comput. Phys.* – 1992. – Vol. 103, № 1. – P. 16–42.
2. Tam, C. K. W. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics / C. K. W. Tam, J. C. Webb // *J. Comput. Phys.* – 1993. – Vol. 107, № 2. – P. 262–281.
3. Волков, В. М. Консервативные разностные схемы с улучшенными дисперсионными свойствами для нелинейных уравнений Шредингера / В. М. Волков // *Дифференц. уравнения.* – 1993. – Т. 29, № 7. – С. 1156–1162.
4. Сергиенко, А. Г. Цифровая обработка сигналов / А. Г. Сергиенко. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 768 с.
5. Improved split-step method for efficient fiber simulations / M. Plura [et al.] // *Electron. Lett.* – 2001. – Vol. 37, № 5. – P. 286–287.
6. Волков, В. М. Метод дробных шагов с использованием рекурсивных цифровых фильтров для решения нелинейных уравнений Шредингера / В. М. Волков, А. С. Циунчик // *Докл. Нац. акад. наук Беларуси.* – 2009. – Т. 53, № 5. – С. 22–25.
7. Волков, В. М. Оптимизация компактных разностных схем спектрального разрешения для нестационарного уравнения Шредингера на основе методов цифровой обработки сигналов / В. М. Волков, А. Н. Гуревский, И. В. Жукова / *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика.* – 2015. – № 3. – С. 84–89.
8. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
9. Саульев, В. К. О методах повышения точности и двухсторонних приближениях к решению параболических уравнений / В. К. Саульев // *Докл. АН СССР.* – 1958. – Т. 118. – С. 1088.

References

1. Lele S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 1992, vol. 103, no. 1, pp. 16–42. Doi: 10.1016/0021-9991(92)90324-r
2. Tam C. K. W., Webb J. C. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics. *Journal of Computational Physics*, 1993, vol. 107, no. 2, pp. 262–281. Doi: 10.1006/jcph.1993.1142
3. Volkov V. M. Conservative difference schemes with improved dispersion properties for nonlinear equations of Schrödinger type. *Differential Equations*, 1993, vol. 29, no. 7, pp. 1004–1009.
4. Sergienko A. G. *Digital signal processing*. Saint Petersburg, BHV-Petersburg Publ., 2011. 768 p. (in Russian).
5. Plura M., Kissing J., Gunkel M., Lenge J., Elbers J.-P., Glingener C., Schulz D., Voges E. Improved split-step method for efficient fiber simulations. *Electronics Letters*, 2001, vol. 37, no. 5, pp. 286–287. Doi: 10.1049/el:20010212
6. Volkov V. M., Tsiunchik H. S. Split-step method with the use of infinite impulse response filters for solving nonlinear Schrodinger equations. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2009, vol. 53, no. 5, pp. 22–25 (in Russian).
7. Volkov V. M., Gurevskii A. N., Zhukova I. V. Optimization of compact finite difference schemes with spectral-like resolutiona for the non-stationary Schrodinger equation on the base of digital signal processing methods. *Vestnik BGU. Ser. 1. Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series 1: Physics. Mathematics. Informatics*, 2015, no. 3, pp. 84–89 (in Russian).
8. Samarskii A. A. *The theory of Finite Difference schemes*. Moscow, Nauka Publ., 1989. 616 p. (in Russian).
9. Saul'ev V. K. About the methods for increasing accuracy and about double-side approximations for solving parabolic equations. *Doklady Akademii nauk SSSR = Doklady of the Academy of Sciences of the USSR*, 1958, vol. 118, p. 1088 (in Russian).

Информация об авторах

Волков Василий Михайлович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор, кафедра веб-технологий и компьютерного моделирования, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: v.volkov@tut.by

Гуревский Алексей Николаевич – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: alexey.gurevskiy@gmail.com

Information about the authors

Vasily M. Volkov – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Professor of the Department of Web-Technologies and Computer Modeling, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.volkov@tut.by

Aliaksei N. Hureuski – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexey.gurevskiy@gmail.com

М. Г. Кот

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь***АСИМПТОТИКА СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОР-ФУНКЦИЙ ОПЕРАТОРОВ,
АППРОКСИМИРУЮЩИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ
С δ -ОБРАЗНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ**

Аннотация. Уравнения и системы, которые записываются в виде $L_0 u = -\Delta u + a(\varepsilon)\delta u = f$, возникают в разных приложениях и интенсивно изучаются. Входящее в это уравнение произведение δu не определено в классической теории обобщенных функций, поэтому одной из основных задач является придание смысла выражению в левой части уравнения, т. е. фактически построение оператора, который соответствует данному формальному выражению. Это достигается с помощью специальных аппроксимаций оператора умножения на δ -функцию. Для исследования уравнений с δ -образными коэффициентами мы применили подход, основными этапами которого являются: построение аппроксимаций рассматриваемого выражения с помощью операторов конечного ранга; нахождение явного вида резольвенты аппроксимирующего семейства; нахождение предела резольвенты и выделение случаев резонанса, когда предельный оператор не совпадает с $-\Delta$; описание спектра построенных предельных операторов; исследование поведения собственных значений аппроксимирующих операторов. Цель настоящей работы заключается в нахождении асимптотики собственных вектор-функций для аппроксимаций, построенных в [2]. Таким образом, основным результатом данного исследования является построение асимптотики собственных вектор-функций в различных случаях резонанса.

Ключевые слова: обобщенная функция; собственные значения; собственные вектор-функции, метод Ньютона; асимптотика, резонанс, оператор

Для цитирования. Кот, М. Г. Асимптотика собственных вектор-функций операторов, аппроксимирующих дифференциальные уравнения с δ -образными коэффициентами / М. Г. Кот // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 15–26.

M. G. Kot

*Belarusian State University, Minsk, Belarus***ASYMPTOTIC BEHAVIOR OF THE VECTOR-FUNCTIONS OF OPERATORS
APPROXIMATING THE DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH δ -SHAPED COEFFICIENTS**

Abstract. The equations can be written as $L_0 u = -\Delta u + a(\varepsilon)\delta u = f$ which appear in different applications and are studied intensively. In this equation, δu is not determined in the classical theory of generalized functions, so one of the main objectives is to give meaning to the expression on the left-hand side of the equation, that is, it is an actual construction of the operator that corresponds to a given formal expression. This is achieved by special approximations of multiplication of the operator by the δ -function. To study equations with δ -shaped coefficients we have applied the approach, the main steps of which are: constructing the approximations of the considered expressions with operators of finite rank; finding the explicit form approximating a resolvent family; determining a resolvent limit and allocating resonance cases; describing the spectrum of the constructed limit of operators; studying the behavior of the eigenvalues of approximating operators. The purpose of this work is to find the asymptotic behavior of vector-functions for approximations, built in [2]. Thus, the main result of this work is the construction of the asymptotic behavior of the vector-functions in different cases of resonance.

Keywords: generalized function; eigenvalues; behavior of vector-functions, Newton's method; asymptotic behavior, resonance, operator

For citation. Kot M. G. Asymptotic behavior of the vector-functions of operators approximating the differential equations with δ -shaped coefficients. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 15–26 (in Russian).

Введение. Уравнения, которые записываются в виде

$$L u \equiv -\Delta u + a(\varepsilon)\delta u = f, \quad (1)$$

где коэффициент δ есть обобщенная δ -функция Дирака, $u = (u_1, u_2)$, $a(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & a_1(\varepsilon) \\ a_2(\varepsilon) & 0 \end{pmatrix}$, а $\Delta = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial x_3}\right)^2$ – оператор Лапласа, возникают в разных приложениях [1] и интенсивно изучаются. Входящее в (1) произведение δu не определено в классической теории обобщенных функций, поэтому одной из основных задач является придание смысла выражению в левой части (1), т. е. фактически построение оператора, соответствующего формальному выражению (1).

Специальный вид матрицы коэффициентов $a(\varepsilon)$ соответствует тому, что в рассматриваемой системе вторая компонента воздействует на первую, а первая – на вторую. Заметим, что системы с такими матрицами коэффициентов возникают в квантовой механике.

Один из основных подходов к решению этой задачи основан на аппроксимации выражения семейством корректно заданных операторов L_ε :

$$L_\varepsilon u = -\Delta u + a(\varepsilon) \int u(y) \varphi_\varepsilon(y) dy \varphi_\varepsilon(x).$$

Это семейство не имеет предела, и поэтому находится предел резольвент

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (L_\varepsilon - \lambda)^{-1} := R(\lambda).$$

Если такой предел существует, то операторно-значная функция $R(\lambda)$ оказывается резольвентой некоторого оператора, который соответствует рассматриваемой аппроксимации формального выражения. В случае операторов в пространстве $L_2(R^3)$ скалярных функций было обнаружено, что в типичных случаях $R(\lambda)$ есть резольвента невозмущенного оператора $R(\lambda) = (-\Delta - \lambda I)^{-1}$, но возможны случаи *резонанса*, когда $R(\lambda)$ есть резольвента некоторого оператора, отличного от $-\Delta$. Резольвента $R(\lambda)$ действует по формуле

$$R(\lambda) f = E_\lambda * f,$$

где $*$ – свертка функций, а $E_\lambda(x)$ – фундаментальное решение для оператора $-\Delta u - \lambda u$, заданное формулой

$$E_\lambda(x) = \frac{1}{4\pi\|x\|} e^{-\mu\|x\|},$$

где $\mu^2 = -\lambda$, $\operatorname{Re} \mu > 0$. Отметим, что $E_\lambda \in L_2(R^3)$.

Анализ систем уравнений обычно оказывается более сложным по сравнению с анализом одного уравнения и содержит большее число возможных вариантов.

Наиболее простыми являются аппроксимации с помощью операторов конечного ранга. Мы применили подход, развитый в [3, 4], для исследования уравнений с δ -образными коэффициентами. Он включает в себя следующие этапы: 1) построение аппроксимаций рассматриваемого выражения операторами конечного ранга; 2) нахождение явного вида резольвенты аппроксимирующего семейства; 3) нахождение предела резольвенты и выделение случаев резонанса; 4) описание спектра построенных предельных операторов; 5) исследование поведения собственных значений и собственных функций аппроксимирующих операторов. Первые четыре этапа изложены в [3, 5]. Цель данной работы заключается в нахождении асимптотики собственных вектор-функций для аппроксимаций

$$L_{\varepsilon 1}(u) = -\Delta u_1 + a_1(\varepsilon) \int u_2(y) \varphi_\varepsilon(y) dy \varphi_\varepsilon(x),$$

$$L_{\varepsilon 2}(u) = -\Delta u_2 + a_2(\varepsilon) \int u_1(y) \varphi_\varepsilon(y) dy \varphi_\varepsilon(x),$$

построенных в [2].

В работе приведено описание поведения семейства собственных вектор-функций для каждой из полученных в [5] ветвей собственных значений $\lambda_j(\varepsilon)$.

1. Резольвентная сходимость и случаи резонанса. В работе [2] мы рассматривали формальную систему

$$\begin{aligned} -\Delta u_1 + a_1(\varepsilon)\delta u_2 &= f_1, \\ -\Delta u_2 + a_2(\varepsilon)\delta u_1 &= f_2. \end{aligned} \tag{2}$$

Пусть φ – финитная функция из пространства Шварца $D(R^3)$ [1], такая что $\int \varphi(x)dx = 1$. Тогда семейство гладких функций $\varphi_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon^3} \varphi\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)$ задает аппроксимацию δ -функции как элемента пространства обобщенных функций, а семейство функционалов $\Phi_\varepsilon(u) = \int u(x)\varphi_\varepsilon(x)dx$ – аппроксимация δ -функции как функционала. Поэтому для гладких функций u имеем $\Phi_\varepsilon(u)\varphi_\varepsilon \rightarrow u(0)\delta = \delta u$ [4], т. е. на гладких функциях семейство операторов $\Phi_\varepsilon(u)\varphi_\varepsilon$ сходится к произведению δu .

Таким образом, оператор

$$L_\varepsilon u = -\Delta u + a(\varepsilon) \int u(y)\varphi_\varepsilon(y)dy\varphi_\varepsilon(x)$$

задает аппроксимацию формального выражения $-\Delta u + a(\varepsilon)\delta u$. В покоординатной записи это семейство имеет вид

$$\begin{aligned} L_{\varepsilon 1}(u) &= -\Delta u_1 + a_1(\varepsilon) \int u_2(y)\varphi_\varepsilon(y)dy\varphi_\varepsilon(x), \\ L_{\varepsilon 2}(u) &= -\Delta u_2 + a_2(\varepsilon) \int u_1(y)\varphi_\varepsilon(y)dy\varphi_\varepsilon(x). \end{aligned}$$

В [2] была построена резольвента аппроксимирующего семейства $L_\varepsilon(u)$.

Лемма. Резольвента $(L_\varepsilon - \lambda)^{-1}$ аппроксимирующего семейства $L_\varepsilon(u)$ записывается в виде

$$(L_\varepsilon - \lambda)^{-1} f = R_0(\lambda)f - S(\varepsilon, \lambda) \cdot \tilde{f} \cdot (R_0(\lambda)\varphi_\varepsilon)(x),$$

где

$$R_0(\lambda)f = \begin{bmatrix} R_0(\lambda)f_1 \\ R_0(\lambda)f_2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{f} = \begin{bmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \end{bmatrix}, \quad \tilde{f}_1 = \int (R_0(\lambda)f_2)(y)\varphi_\varepsilon(y)dy, \quad \tilde{f}_2 = \int (R_0(\lambda)f_1)(y)\varphi_\varepsilon(y)dy;$$

а $S(\varepsilon, \lambda)$ есть матрица вида

$$S(\varepsilon, \lambda) = \frac{1}{1 - a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)b^2(\varepsilon, \lambda)} \begin{bmatrix} a_1(\varepsilon) & -a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda) \\ -a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda) & a_2(\varepsilon) \end{bmatrix},$$

$$b(\varepsilon, \lambda) = \int (R_0(\lambda)\varphi_\varepsilon)(y)\varphi_\varepsilon(y)dy.$$

Резольвента определена, если $\lambda \notin R^+ = (0; +\infty)$ и $1 - a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)b^2(\varepsilon, \lambda) \neq 0$.

Функция $b(\varepsilon, \lambda)$ является аналитической при $\varepsilon \neq 0$, и для нее имеет место разложение [4]

$$b(\varepsilon, \lambda) = \frac{M_{-1}}{\varepsilon} - \frac{\mu}{4\pi} + \sum_{k=1}^{\infty} M_k \mu^{k+1} \varepsilon^k,$$

где $M_k = \frac{1}{4\pi} \int \left(\int \varphi(y)\overline{\varphi}(x-y)dy \right) \|x\|^k dx$.

Ниже считаем, что

$$\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-2}^1 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1, \quad \frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-2}^2 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2, \tag{3}$$

так как в этой тематике содержательные результаты получаются именно для таких коэффициентов.

Если предел

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} S(\varepsilon, \lambda) := D(\lambda) \quad (4)$$

есть нуль, то предел резольвент есть резольвента невозмущенного оператора $-\Delta$. В [2] показано, что предел (4) может быть ненулевым только в трех случаях, которые называются *случаями резонанса*.

Теорема 1. Для коэффициентов $a_1(\varepsilon)$ и $a_2(\varepsilon)$ вида (3) предел $D(\lambda)$ может быть ненулевым только в трех случаях:

$$1) \frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_0^1 + k_1^1 \varepsilon + k_2^1 \varepsilon^2 + o(\varepsilon), \quad \frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-2}^2 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + o(\varepsilon),$$

т. е. $k_{-2}^1 = 0, k_{-1}^1 = 0$.

Тогда

$$D(\lambda) = \begin{bmatrix} \frac{k_{-2}^2}{k_0^1 k_{-2}^2 - M_{-1}^2} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

если $k_0^1 k_{-2}^2 - M_{-1}^2 \neq 0$.

В случае, когда $k_0^1 k_{-2}^2 = M_{-1}^2$, предел (4) равен бесконечности.

$$2) \frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + k_1^1 \varepsilon + o(\varepsilon), \quad \frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + k_1^2 \varepsilon + o(\varepsilon),$$

т. е. $k_{-2}^1 = 0, k_{-2}^2 = 0$ и при этом выполнено условие резонанса $k_{-1}^1 k_{-1}^2 = M_{-1}^2$.

Тогда

$$D(\lambda) = \frac{1}{k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2 + \frac{M_{-1} \mu}{2\pi}} \begin{bmatrix} k_{-1}^2 & -M_{-1} \\ -M_{-1} & k_{-1}^1 \end{bmatrix}.$$

$$3) \frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-2}^1 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + o(\varepsilon), \quad \frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_0^2 + k_1^2 \varepsilon + k_2^2 \varepsilon^2 + o(\varepsilon),$$

т. е. $k_{-2}^2 = 0, k_{-1}^2 = 0$.

Тогда

$$D(\lambda) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_{-2}^1}{k_0^2 k_{-2}^1 - M_{-1}^2} \end{bmatrix},$$

если $k_0^2 k_{-2}^1 - M_{-1}^2 \neq 0$.

В случае, когда $k_0^2 k_{-2}^1 = M_{-1}^2$, предел (4) равен бесконечности.

Для всех остальных коэффициентов вида (3) предел (4) нулевой.

2. Поведение собственных значений при стремлении ε к нулю. Из построения резольвенты видно, что при фиксированном ε собственные значения для L_ε определяются из равенства

$$f(\varepsilon, \lambda) := \frac{1}{a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)} - b^2(\varepsilon, \lambda) = 0, \quad (5)$$

где $b(\varepsilon, \lambda)$ зависит от способа аппроксимации. Таким образом, данное равенство позволяет выявить зависимость собственных значений от ε для каждого вида рассматриваемых коэффициентов.

Здесь левая часть, $f(\varepsilon, \lambda)$, есть аналитическая функция от ε, μ , при $\varepsilon \neq 0$. У уравнений вида (5) с аналитической функцией f , как правило, имеется несколько гладких ветвей решений.

В [5] было исследовано поведение этих ветвей в зависимости от выбранных коэффициентов и выбранной функции φ , где $\varphi \in D(\mathbf{R})$, $\varphi(x) \in \mathbf{R}$ и $\int \varphi(x) dx = 1$. Для этого был применен метод диаграмм Ньютона и показано, что разным случаям резонанса соответствуют разные диаграммы. Рассмотрим наиболее важные моменты этого подхода, который позволяет найти асимптотику не только ветвей решений уравнения (5), но и собственных функций при стремлении ε к нулю.

Пусть переменные x и y связаны уравнением

$$f(x, y) = 0, \tag{6}$$

где $f(x, y) = \sum c_{kj} x^k y^j$ – аналитическая функция. Задача заключается в построении неявных функций, заданных этим уравнением, которые представимы в виде рядов по дробным степеням независимой переменной:

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k x^{\nu_k}.$$

В этой записи предполагается, что показатели степени x – числа ν_k возрастают ($\nu_{k+1} > \nu_k$) и коэффициенты α_k ненулевые.

Если f является полиномом, сформулированная задача решается с помощью метода диаграмм Ньютона, главный принцип которого описывается в работах [6–9].

Основной шаг заключается в нахождении главного члена разложения, т. е. чисел ν_0 и α_0 . Для краткости обозначим эти коэффициенты через ν и α ; будем искать решения вида

$$y(x) = \alpha x^{\nu} + o(x^{\nu}), \alpha \neq 0. \tag{7}$$

Подставив $y(x)$ вида (7) в уравнение (6) и преобразовав его, получаем выражение вида

$$\sum c_{kj} x^k (\alpha x^{\nu})^j = \sum \sum c_{kj} \alpha^j (x^{k+\nu j} + o(x^{k+\nu j})).$$

Далее рассматриваются только те k, j , при которых показатель $k + \nu j$ имеет наименьшее значение, так как главный член разложения зависит только от этих слагаемых. Легко видеть, что если такая пара k, j только одна, то решение требуемого вида не существует. Таким образом, искомое ν может существовать только тогда, когда таких пар несколько.

В случае многочлена для выбора тех значений ν , которые дают решение, Ньютон предложил следующий геометрический прием. На плоскости XU рассматривается множество точек (k, j) , соответствующих ненулевым коэффициентам c_{kj} . Выпуклая оболочка множества таких точек называется многогранником Ньютона для полинома $f(x, y)$. Тогда искомые числа ν могут быть только тангенсами угла наклона сторон полученного многогранника, таких чисел может быть только конечное число и при таких ν уравнение для нахождения коэффициента α содержит конечное число слагаемых, т. е. α находится как корень некоторого многочлена.

При рассмотрении аналитических функций часть из приведенных выше рассуждений сохраняется. Пусть теперь f есть функция из левой части (5). Аналогично случаю полинома, рассмотрим множество M_p , состоящее из точек (k, j) , соответствующих ненулевым коэффициентам c_{kj} . Функция f имеет разложение

$$\begin{aligned} \frac{1}{a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)} - b^2(\varepsilon, \lambda) &= k_{-2}^1 k_{-2}^2 \frac{1}{\varepsilon^4} + (k_{-2}^1 k_{-1}^2 + k_{-1}^1 k_{-2}^2) \frac{1}{\varepsilon^3} + (k_{-2}^1 k_0^2 + k_{-1}^1 k_{-1}^2 + k_0^1 k_{-2}^2 - M_{-1}^2) \frac{1}{\varepsilon^2} + \\ &+ \left(k_{-2}^1 k_0^2 + k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2 + k_1^1 k_{-2}^2 + \frac{M_{-1}\mu}{2\pi} \right) \frac{1}{\varepsilon} + \left(k_{-2}^1 k_2^2 + k_{-1}^1 k_1^2 + k_1^1 k_{-1}^2 + k_0^1 k_0^2 + k_2^1 k_{-2}^2 - \frac{\mu^2}{16\pi^2} \right) + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} C_k \mu^{k+2} \varepsilon^k, \end{aligned} \tag{8}$$

где коэффициенты C_k выражаются через M_k .

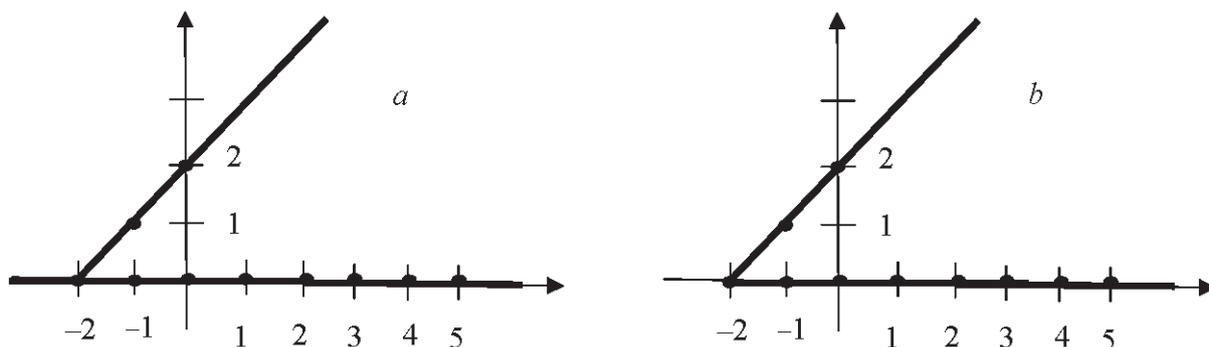


Рис. 1. Диаграмма Ньютона: *a* – диаграмма Ньютона для уравнения (8); *b* – диаграмма Ньютона для уравнения (8) в случае первого резонанса

Fig. 1. Newton’s diagram: *a* – Newton’s diagram for equation (8); *b* – Newton’s diagram for equation (8) for the first resonance

В общем случае диаграмма Ньютона M_f имеет вид, изображенный на рис. 1, *a*. В этом случае первое слагаемое в сумме (8) растет быстрее остальных, откуда следует, что при малых ε оператор L_ε не имеет собственных значений. Геометрически это проявляется в следующем. Граница выпуклой оболочки множества M_f содержит полупрямую $y = x + 3, x \geq -3$, а на этой полупрямой есть только одна точка из множества M_f . Поэтому уравнение для нахождения первого члена асимптотики содержит только одно слагаемое и не имеет решения.

Первому случаю резонанса соответствует диаграмма Ньютона на рис. 1, *b*. Диаграммы на рис. 1, *a* и 1, *b* отличаются только отрезком $[-3; -2]$. Но диаграмма на рис. 1, *b* содержит часть прямой $\mu = 2 + \varepsilon$, лежащую на границе выпуклой оболочки. Поэтому могут существовать решения, у которых главный член асимптотики имеет вид $\mu(\varepsilon) = \alpha\varepsilon^{-1}, \alpha \neq 0$.

Запишем сумму членов разложения функции f из (5), соответствующих прямой $\mu = 2 + \varepsilon$. Получаем, что эта сумма имеет вид

$$\left(k_0^1 k_{-2}^2 - M_{-1}^2\right) \frac{1}{\varepsilon^2} + \left(\frac{M_{-1}\mu}{2\pi}\right) \frac{1}{\varepsilon} + \left(-\frac{\mu^2}{16\pi^2}\right) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \mu^{k+2} \varepsilon^k = \mu^2 \psi(\varepsilon\mu),$$

где $\psi(\varepsilon) = \left(k_0^1 k_{-2}^2 - M_{-1}^2\right) \frac{1}{\varepsilon^2} + \left(\frac{M_{-1}}{2\pi}\right) \frac{1}{\varepsilon} + \left(-\frac{1}{16\pi^2}\right) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \varepsilon^k$.

При подстановке $\mu(\varepsilon) = \alpha\varepsilon^{-1}, \alpha \neq 0$ получаем равенство $\mu^2 \psi(\alpha) = 0$. Таким образом, если $\psi(\alpha) = 0$, то $\mu(\varepsilon) = \alpha\varepsilon^{-1} + o(\varepsilon), \alpha \neq 0$ является главным членом асимптотики собственного значения. Функция ψ определяется способом аппроксимации, каждый корень уравнения $\psi(\alpha) = 0$ порождает собственное значение, стремящееся к бесконечности $\varepsilon \rightarrow \infty$. При этом не существует

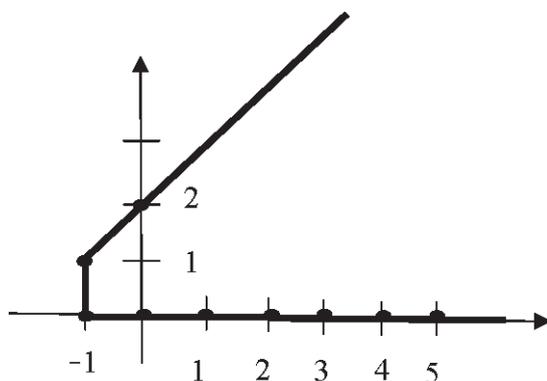


Рис. 2. Диаграмма Ньютона для уравнения (8) в случае второго резонанса

Fig. 2. Diagram of Newton’s equation (8) for the second resonance

других решений, имеющих степенную асимптотику. Это согласовано с тем, что предельный оператор в этом случае резонанса не имеет собственных значений.

Наиболее интересным является второй случай резонанса, когда $k_{-1}^1 k_{-1}^2 = M_{-1}^2$.

В этом примере существует одна ветвь решения уравнения (5), которое имеет конечный предел при $\varepsilon \rightarrow 0$, а остальные ветви уходят на бесконечность со скоростью $\frac{1}{\varepsilon}$.

Действительно, для этого случая диаграмма Ньютона выглядит следующим образом (рис. 2).

Различие в виде диаграмм приводит к разнообразному поведению собственных значений – корней уравнения (5).

На полученной диаграмме Ньютона имеется вертикальный отрезок, которому соответствуют, как и в случае многочленов, ветви решений, имеющие конечный предел при $\varepsilon \rightarrow 0$. Асимптотическое поведение таких ветвей определяется из уравнения, соответствующего этому вертикальному отрезку:

$$\left(k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2 + \frac{M_{-1} \mu}{2\pi} \right) \frac{1}{\varepsilon} = 0.$$

У данного уравнения имеется только одно решение

$$\mu_0 = -\frac{2\pi(k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2)}{M_{-1}}.$$

Заметим, что это число является единственным собственным значением предельного оператора, соответствующего указанному случаю резонанса. Таким образом, у семейства аппроксимирующих операторов существует одна непрерывная ветвь собственных значений, стремящаяся к собственному значению предельного оператора.

Как и в случае первого резонанса, одной из граней выпуклой оболочки является бесконечная полупрямая. Уравнение, для описания этой грани, имеет вид

$$\left(-\frac{\mu^2}{16\pi^2} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \mu^{k+2} \varepsilon^k = \mu^2 \psi_1(\varepsilon \mu).$$

Аналогично получаем, что решениями, соответствующими этой грани, являются функции вида $\mu = \frac{\alpha}{\varepsilon}$, где α – корень уравнения $\psi_1(\alpha) = 0$. Все такие решения уходят на бесконечность при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Как и в классическом случае многочлена, может быть найден второй и последующие члены разложения. Для этого рассматриваются решения вида $\mu(\varepsilon) = \mu_0 + \mu_1 \varepsilon + o(\varepsilon)$, где второй член $\mu_1(\varepsilon)$ определяется из соответствующей диаграммы Ньютона (рис. 3).

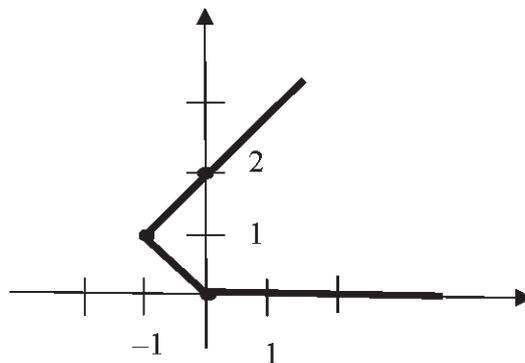


Рис. 3. Диаграмма Ньютона для нахождения $\mu_1(\varepsilon)$
 Fig. 3. Newton's diagram to find $\mu_1(\varepsilon)$

3. Исследование собственных вектор-функций. Каждой из описанных выше ветвей собственных значений соответствует семейство собственных вектор-функций. В прикладных вопросах обычно процесс описывается с помощью оператора L_ε при конкретном фиксированном малом значении ε . Поэтому представляет интерес информация о виде собственных вектор-функций, соответствующих малым значениям ε , т. е. построение асимптотики собственных вектор-функций.

Собственные вектор-функции при фиксированном ε есть ненулевые решения системы

$$\begin{aligned} -\Delta u_1 - \lambda u_1 + a_1(\varepsilon) \int u_2(y, \varepsilon) \varphi_\varepsilon(y) dy \varphi_\varepsilon(x) &= 0, \\ -\Delta u_2 - \lambda u_2 + a_2(\varepsilon) \int u_1(y, \varepsilon) \varphi_\varepsilon(y) dy \varphi_\varepsilon(x) &= 0. \end{aligned}$$

Применяя оператор $R_0(\lambda)$, обратный к $-\Delta u - \lambda u$, получаем: если решение существует, то оно имеет вид (при λ , не лежащих на положительной полуоси)

$$u_1(x, \varepsilon) = C_1(\varepsilon) (R_0(\lambda) \varphi_\varepsilon)(x), \quad (9)$$

$$u_2(x, \varepsilon) = C_2(\varepsilon) (R_0(\lambda) \varphi_\varepsilon)(x);$$

где

$$C_1(\varepsilon) = -a_1(\varepsilon) \int u_2(y, \varepsilon) \varphi_\varepsilon(y) dy,$$

$$C_2(\varepsilon) = -a_2(\varepsilon) \int u_1(y, \varepsilon) \varphi_\varepsilon(y) dy.$$

Преобразовав выражения, получаем систему уравнений

$$\begin{cases} C_1(\varepsilon) + a_1(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda) C_2(\varepsilon) = 0, \\ a_2(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda) C_1(\varepsilon) + C_2(\varepsilon) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

Условием совместности этой системы является равенство $1 - a_1(\varepsilon) a_2(\varepsilon) b^2(\varepsilon, \lambda) = 0$, которое совпадает с условием, что λ является собственным значением. Напомним, что мы рассматриваем λ , не лежащие на положительной полуоси.

Пусть $\lambda_j(\varepsilon)$ есть одна из ветвей собственных значений, описанная выше. Рассмотрим соответствующие ей собственные вектор-функции. Поскольку они определяются с точностью до произвольного множителя, то будем считать $C_2(\varepsilon) = C(\varepsilon)$ произвольным, а $C_1(\varepsilon) = -C_2(\varepsilon) a_1(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda)$ из (10). Тогда

$$u_1(x, \varepsilon) = -C(\varepsilon) a_1(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)) (R_0(\lambda_j(\varepsilon)) \varphi_\varepsilon)(x), \quad (11)$$

$$u_2(x, \varepsilon) = C(\varepsilon) (R_0(\lambda_j(\varepsilon)) \varphi_\varepsilon)(x).$$

Поскольку $C(\varepsilon)$ произвольно, задача о нахождении предела семейства (11) при $\varepsilon \rightarrow 0$ не имеет решений. Чтобы придать смысл этому вопросу, будем выбирать $C(\varepsilon)$ специальным образом. Наиболее простой способ определить $C(\varepsilon)$ заключается в перенормировке семейства (11). Для этого разделим (11) на

$$\sqrt{\int [(u_1(x, \varepsilon))^2 + (u_2(x, \varepsilon))^2] dx} = |C(\varepsilon)| \sqrt{1 + (a_1(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2} \int [(R_0(\lambda_j(\varepsilon)) \varphi_\varepsilon)(x)]^2 dx.$$

Это соответствует выбору $C(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{1 + (a_1(\varepsilon) b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2} \int [(R_0(\lambda_j(\varepsilon)) \varphi_\varepsilon)(x)]^2 dx}$.

Получаем семейство собственных вектор-функций вида

$$\begin{aligned}
 v_1(x, \varepsilon) &= \frac{-a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon))(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)}{\sqrt{\left[1 + (a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2\right] \int \left[(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)\right]^2 dx}}, \\
 v_2(x, \varepsilon) &= \frac{(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)}{\sqrt{\left[1 + (a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2\right] \int \left[(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)\right]^2 dx}}, \tag{12}
 \end{aligned}$$

имеющих в $L_2(R^3)^2$ норму 1 при всех ε .

Поведение семейства функций $(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)$ и выражений $a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon))$ зависит от поведения ветви $\lambda_j(\varepsilon)$ и коэффициента $a_1(\varepsilon)$. В соответствии с качественно различными случаями поведения $\lambda_j(\varepsilon)$ для них возникают разные описания асимптотического поведения собственных вектор-функций (12).

Самый содержательный результат получается в случае второго резонанса, когда одна из ветвей имеет конечный предел, а остальные стремятся к бесконечности.

Теорема 2. Пусть $\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + k_1^1 \varepsilon + o(\varepsilon)$, $\frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + k_1^2 \varepsilon + o(\varepsilon)$, выполнено условие резонанса $k_{-1}^1 k_{-1}^2 = M_{-1}^2$ и $\lambda_0(\varepsilon)$ есть ветвь собственных значений, имеющая конечный предел $\lambda_0 = -\mu_0^2$, где $\mu_0 = \frac{-2\pi(k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2)}{M_{-1}}$. Если $-\mu_0^2$ не лежит на положительной полуоси, то семейство собственных вектор-функций при $\varepsilon \rightarrow 0$ сходится к вектор-функции

$$\begin{pmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{pmatrix} = \tilde{C} \frac{1}{4\pi\|x\|} e^{-\mu_0\|x\|} \begin{pmatrix} \frac{-a_1^1 M_{-1}}{\sqrt{1 + [-a_1^1 M_{-1}]^2}} \\ 1 \\ \sqrt{1 + [-a_1^1 M_{-1}]^2} \end{pmatrix}, \tag{13}$$

которая является собственной вектор-функцией предельного оператора.

Доказательство. Используя то, что $\lambda_0 = -\mu_0^2$ не лежит на положительной полуоси, можно прямыми вычислениями проверить, что $(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)$ сходится к фундаментальному решению $E_{\lambda_0}(x)$ по метрике L_2 .

В частности, $\sqrt{\int \left[(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)\right]^2 dx}$ сходится к $\|E_{\lambda_0}(x)\|$.

Из вышеизложенного получаем, что $\frac{(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)}{\sqrt{\int \left[(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)\right]^2 dx}}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ сходится к $\tilde{C} \frac{1}{4\pi\|x\|} e^{-\mu_0\|x\|}$, где $\tilde{C} = \left\| \frac{e^{-\mu_0\|x\|}}{4\pi\|x\|} \right\|^{-1}$.

Рассмотрим поведение коэффициентов системы (12) для второго случая резонанса

$$\begin{pmatrix} \frac{-a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon))}{\sqrt{\left[1 + (a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2\right]}} \\ 1 \\ \sqrt{\left[1 + (a_1(\varepsilon)b(\varepsilon, \lambda_j(\varepsilon)))^2\right]} \end{pmatrix}, \tag{14}$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$ и где $\lambda_j(\varepsilon)$ – корень уравнения $1 - a_1(\varepsilon)a_2(\varepsilon)b^2(\varepsilon, \lambda) = 0$.

В терминах исходных коэффициентов случай 2) соответствует коэффициентам вида

$$a_1(\varepsilon) = a_1^1 \varepsilon + a_2^1 \varepsilon^2 + o(\varepsilon), \quad a_2(\varepsilon) = a_1^2 \varepsilon + a_2^2 \varepsilon^2 + o(\varepsilon),$$

или

$$\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + k_1^1 \varepsilon + o(\varepsilon), \quad \frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + k_1^2 \varepsilon + o(\varepsilon).$$

Во втором случае резонанса, при $\mu \rightarrow \mu_0$, где $\mu_0 = \frac{-2\pi(k_{-1}^1 k_0^2 + k_0^1 k_{-1}^2)}{M_{-1}}$, получаем, что пре-

дел (14) при $\varepsilon \rightarrow 0$ равен
$$\left(\frac{\frac{-a_1^1 M_{-1}}{\sqrt{1 + [-a_1^1 M_{-1}]^2}}}{1} \right),$$
 а предел собственных вектор-функций имеет вид (13).

Покажем, что во всех остальных случаях предел семейства нормированных собственных вектор-функций не существует.

Напомним, что последовательность функций f_n , заданных на пространстве с мерой, сходится к функции f почти всюду, если $f_n(x) \rightarrow f(x)$ почти для всех $x \in X$, т. е. существует такое множество X_0 меры нуль, что $f_n(x) \rightarrow f(x)$ для всех $x \in X \setminus X_0$.

Последовательность x_n точек банахова пространства X слабо сходится к точке $x_0 \in X$, если для любого $f \in X'$ выполнено $f(x_n) \rightarrow f(x_0)$.

Теорема 3. Пусть $\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + k_1^1 \varepsilon + o(\varepsilon)$, $\frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + k_1^2 \varepsilon + o(\varepsilon)$ и выполнено условие резонанса $k_{-1}^1 k_{-1}^2 = M_{-1}^2$, и $\lambda_j(\varepsilon)$ – одна из ветвей собственных значений, стремящихся к бесконечности. Тогда при $\varepsilon \rightarrow 0$ нормированное семейство собственных вектор-функций сходится почти всюду и слабо к нулю и, следовательно, не имеет предела в пространстве L_2 .

Доказательство. Пусть $\lambda_j(\varepsilon) = \frac{-V}{\varepsilon}$. Тогда $b(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \left(M_{-1} - \frac{V}{4\pi} + \sum_{k=1}^{\infty} M_k V^{k+1} \varepsilon^{k-1} \right)$, а предел системы коэффициентов (14) при $\varepsilon \rightarrow 0$ равен

$$\left(\frac{\frac{-a_1^1 \left(M_{-1} - \frac{V}{4\pi} \right)}{\sqrt{1 + \left[-a_1^1 \left(M_{-1} - \frac{V}{4\pi} \right) \right]^2}}}{1} \right).$$

Поэтому исследование поведения семейства собственных функций сводится к исследованию по-

ведения
$$f_\varepsilon(x) = \frac{(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)}{\sqrt{\int [(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x)]^2 dx}}.$$

Надо проверить, что $f_\varepsilon(x)$ почти всюду стремится к нулю и что

$$\int f_\varepsilon(x)g(x)dx \rightarrow 0 \tag{15}$$

для любой функции $g \in L_2$.

После преобразования Фурье получаем, что норма $\sqrt{\int \left[(R_0(\lambda_j(\varepsilon))\varphi_\varepsilon)(x) \right]^2 dx}$ выражается через величину

$$N(\varepsilon) = \sqrt{\int \left(\frac{\hat{\varphi}(\varepsilon\xi)}{|\xi|^2 + \frac{V}{\varepsilon}} \right)^2 d\xi},$$

и можно показать, что она ведет себя асимптотически как $\sqrt[4]{\varepsilon}$.

После преобразования Фурье интеграл из (15) выражается через

$$\frac{1}{N(\varepsilon)} = \int \frac{\hat{\varphi}(\varepsilon\xi)\hat{g}(\xi)}{|\xi|^2 + \frac{V}{\varepsilon}} d\xi.$$

Здесь в каждой фиксированной точке ξ подынтегральное выражение стремится к 0, как ε , а нормированная функция – как $\sqrt[4]{\varepsilon^3}$, т. е. почти всюду сходится к нулю.

Согласно неравенству Коши – Буняковского,

$$\left| \int \frac{\hat{\varphi}(\varepsilon\xi)\hat{g}(\xi)}{|\xi|^2 + \frac{V}{\varepsilon}} d\xi \right|^2 \leq \int \left(\frac{\hat{\varphi}(\varepsilon\xi)}{|\xi|^2 + \frac{V}{\varepsilon}} \right)^2 d\xi \int |\hat{g}(\xi)|^2 d\xi.$$

Здесь интегралы $\int \left(\frac{\hat{\varphi}(\varepsilon\xi)}{|\xi|^2 + \frac{V}{\varepsilon}} \right)^2 d\xi$ стремятся к нулю, как $\sqrt{\varepsilon}$. Поэтому интегралы (15) стремятся к 0.

Таким образом, семейство нормированных собственных функций $f_\varepsilon(x)$ слабо сходится к 0 в L_2 . Аналогично доказательству теорем 2 и 3 можно провести доказательство следующих теорем.

Теорема 4. Пусть $\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_0^1 + k_1^1\varepsilon + k_2^1\varepsilon^2 + o(\varepsilon)$, $\frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_{-2}^2 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^2 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^2 + o(\varepsilon)$ и $\mu = -\frac{2\pi(k_1^1 k_{-1}^2 + k_0^1 k_0^2 + k_2^1 k_{-2}^2)}{M_{-1}}\varepsilon + o(\varepsilon)$, тогда при $\varepsilon \rightarrow 0$ нормированное семейство собственных вектор-функций сходится почти всюду и слабо к нулю.

Теорема 5. Пусть $\frac{1}{a_1(\varepsilon)} = k_{-2}^1 \frac{1}{\varepsilon^2} + k_{-1}^1 \frac{1}{\varepsilon} + k_0^1 + o(\varepsilon)$, $\frac{1}{a_2(\varepsilon)} = k_0^2 + k_1^2\varepsilon + k_2^2\varepsilon^2 + o(\varepsilon)$ и $\mu = -\frac{2\pi(k_{-2}^1 k_2^2 + k_{-1}^1 k_1^2 + k_0^1 k_0^2)}{M_{-1}}\varepsilon + o(\varepsilon)$, тогда при $\varepsilon \rightarrow 0$ нормированное семейство собственных вектор-функций сходится почти всюду и слабо к нулю.

Список использованных источников

1. Решаемые модели в квантовой механике / С. Альберерио [и др.]. – М.: Мир, 1991. – 568 с.
2. Кот, М. Г. О резольвентной сходимости операторов, аппроксимирующих систему уравнений δ -образными коэффициентами / М. Г. Кот // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. – 2015. – № 3. – С. 111–117.
3. Антоневиц, А. Б. Аппроксимации операторов с дельта-образными коэффициентами / А. Б. Антоневиц, Т. А. Романчук // Актуальные проблемы математики: сб. науч. тр. ГрГУ им. Я. Купалы; редкол.: Е. А. Ровба [и др.]. – Гродно: ГрГУ, 2008. – С. 11–28.
4. Антоневиц, А. Б. Уравнения с дельта-образными коэффициентами: метод конечномерных аппроксимаций / А. Б. Антоневиц, Т. А. Романчук. – Саарбрюккен: Lap Lambert, 2012. – 148 с.
5. Кот, М. Г. Асимптотика собственных значений операторов, аппроксимирующих дифференциальные уравнения с δ -образными коэффициентами / М. Г. Кот // Журн. Бел. гос. ун-та. Математика. Информатика. – 2017. – № 1. – С. 3–10.

6. Кашенко, И. С. Асимптотическое разложение решений уравнений: метод указания / И. С. Кашенко. – Ярославль: ЯрГУ, 2011. – 44 с.
7. Васильев, В. А. Асимптотика экспоненциальных интегралов, диаграмма Ньютона и классификация точек минимума / В. А. Васильев // Функциональный анализ и его приложения. – 1977. – Т. 11, вып. 3. – С. 1–11.
8. Забрейко, П. П. Диаграммы Ньютона и алгебраические кривые / П. П. Забрейко, А. В. Кривко-Красько // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. – 2014. – Т. 22, № 2. – С. 32–45.
9. Забрейко, П. П. Диаграммы Ньютона и алгебраические кривые. II / П. П. Забрейко, А. В. Кривко-Красько // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. – 2015. – Т. 23, № 1. – С. 64–75.

References

1. Albeverio S., Gesztesy F., Hoegh-Krohn R., Holden H., Exner P. *Solvable models in quantum mechanics*. Berlin, Springer, 1988. 458 p. Doi: 10.1007/978-3-642-88201-2
2. Kot M. G. About resolvent convergence of operator approximating systems of equations with δ -shaped coefficients. *Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series 1: Physics. Mathematics. Informatics*, 2015, no. 3, pp.111–117 (in Russian).
3. Antonevich A. B., Romanchuk T. A. Approximation operators with delta -shaped coefficients. *Aktualnye problemy matematiki: sbornik nauchnykh trudov* [Actual problems of mathematics: the collection of scientific papers]. Grodno, Grodno State University, 2008, pp. 11–28 (in Russian).
4. Antonevich A. B., Romanchuk T. A. *Equations with delta-shaped coefficients: method of finite-dimensional approximations*. Saarbrücken, Lap Lambert, 2012. 148 p. (in Russian).
5. Kot M. G. Asymptotics of the eigenvalues of approximating differential equations with δ -different coefficients. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika. Informatika = Journal of the Belarusian State University. Mathematics and Informatics*, 2017, no. 1, pp. 3–10 (in Russian).
6. Kaschenko I. S. *The asymptotic expansion of the solutions of equations: the method of guidance*. Yaroslavl, Yaroslavl State University, 2011. 44 p. (in Russian).
7. Vasil'ev V. A. Asymptotic exponential integrals, Newton's diagram and classification of minimum points. *Functional Analysis and Its Applications*, 1977, vol. 11, no. 3, pp. 163–172. Doi: 10.1007/bf01079460
8. Zabreiko P. P, Krivko-Kras'ko A. V. Newton diagrams and algebraic curves. *Trudy Instituta matematiki = Proceedings of the Institute of Mathematics*, 2014, vol. 22, no. 2, pp. 32–45 (in Russian).
9. Zabreiko P. P, Krivko-Kras'ko A. V. Newton diagrams and algebraic curves II. *Trudy Instituta matematiki = Proceedings of the Institute of Mathematics*, 2015, vol. 23, no. 1, pp. 64–75 (in Russian).

Информация об авторе

Кот Марина Геннадьевна – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: mtorkaylo@mail.ru

Information about the author

Marina G. Kot – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mtorkaylo@mail.ru

Я. А. Роўба, Н. Ю. Казлоўская*Гродзенскі дзяржаўны ўніверсітэт імя Янкі Купалы, Гродна, Беларусь***АБ НАБЛІЖЭННІ ФУНКЦЫІ $|\sin x|$ РАЦЫЯНАЛЬНЫМІ АПЕРАТАРАМІ ФЕЕРА**

Анотацыя. Рацыянальныя шэрагі Фур'е былі пабудаваны М. М. Джрбашанам у 1956 г. У прыватнасці, знойдзена кампактнае прадстаўленне іх ядра Дзірыхле. На гэтай аснове В. М. Русак увёў рацыянальныя аператары Феера, Джэксана і Вале Пусэна. Частковыя сумы рацыянальных шэрагаў Фур'е, аператары Вале Пусэна і Джэксана знайшлі шырокае прымяненне для адшукання класаў функцый, рацыянальная апраксімацыя якіх лепшая за палінаміяльную ў сэнсе парадку. Рацыянальныя аператары Феера заставаліся недаследаванымі. Таму ўяўляе інтарэс даследаваць іх апраксімацыйныя характарыстыкі для элементарных функцый. Пэрыядычная функцыя $|\sin x|$ адыгрывае практычна такую жа ролю, што і функцыя $|x|$. У дадзенай рабоце з дапамогай метаду вываду параметра ў камплексную плоскасць атрыманы некаторыя дакладныя і асімптатычныя судачыненні для набліжэнняў функцыі $|\sin x|$ з дапамогай рацыянальных аператараў Феера. Паказана ў прыватнасці, што такія набліжэнні адлюстроўваюць асаблівасці рацыянальнай апраксімацыі.

Ключавыя словы: рацыянальныя аператары Феера, рацыянальная апраксімацыя

Для цытавання. Роўба, Я. А. Аб набліжэнні функцыі $|\sin x|$ рацыянальнымі аператарамі Феера / Я. А. Роўба, Н. Ю. Казлоўская // Весті Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 27–39.

E. A. Rovba, N. Yu. Kozlovskaya*Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus***APPROXIMATION OF $|\sin x|$ BY RATIONAL OPERATORS OF FEJÉR TYPE**

Abstract. Rational Fourier series were constructed by M. M. Dzhrbashian in 1956. A compact representation of their Dirichlet kernel was also found. Later V. N. Rusak introduced rational operators of Fejér, de la Vallée Poussin and Jackson type. Partial sums of rational Fourier series, operators of de la Vallée Poussin and Jackson type are widely used for finding classes of functions, for which rational approximation is better than polynomial approximation. But in our opinion, rational operators of Fejér type are still unexplored, so it's interesting to investigate their approximation characteristics for elementary functions. The periodic function $|\sin x|$ plays almost the same role in approximation theory as the function $|x|$. In this article, we have obtained some exact and asymptotic ratios for approximation of $|\sin x|$ by Fejér-type rational operators.

Keywords: Fejér-type rational operators, rational approximation

For citation. Rovba E. A., Kozlovskaya N. Yu. Approximation of $|\sin x|$ by rational operators of Fejér type. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 27–39 (in Russian).

Уводзіны. У 1956 г. М. М. Джрбашан [1] пабудоваў рацыянальныя шэрагі Фур'е на адзінкавай акружнасці, якія абагульняюць трыганаметрычныя шэрагі Фур'е. Некалькі пазней В. М. Русак (гл., напр., [2]) увёў рацыянальныя аператары Феера, Джэксана і Вале Пусэна. Частковыя сумы рацыянальных шэрагаў Фур'е, рацыянальныя аператары Джэксана і Вале Пусэна знайшлі шырокае прымяненне ў тэорыі рацыянальных набліжэнняў, у прыватнасці ў знаходжанні класаў функцый, якія адлюстроўваюць асаблівасці рацыянальнай апраксімацыі (гл., напр., [3, 4]). Што датычыцца рацыянальных аператараў Феера, то яны, на наш погляд, асаблівых прымяненняў не знайшлі. Гэтыя аператары, таксама як і ў палінаміяльным выпадку, досыць добра набліжаюць «дрэнныя» функцыі. Але ўзнікае пытанне: ці рэагуюць яны на асаблівасці рацыянальнай апраксімацыі?

Рацыянальныя набліжэнні функцыі $|\sin x|$ вывучаліся ў [5, 6]. У гэтых працах паказана, што раўнамернае набліжэнне функцыі $|\sin x|$ частковымі сумамі рацыянальных шэрагаў Фур'е істотна лепшае за палінаміяльнае набліжэнне ў сэнсе парадку. У дадзенай рабоце даследуюцца набліжэнні функцыі $|\sin x|$ з дапамогай рацыянальных аператараў Феера.

1. Дакладныя роўнасці для набліжэнняў функцыі $|\sin x|$ рацыянальнымі аператарамі Феера.

Няхай α_k – адвольныя камплексныя лікі, $|\alpha_k| < 1$, $k = 1, 2, \dots, 2n$.

Абзначым

$$\lambda_{2n}(u) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2n} \frac{1 - |\alpha_k|^2}{1 - 2|\alpha_k| \cos(u - \arg \alpha_k) + |\alpha_k|^2}.$$

Для адвольнай функцыі $f \in C_{2\pi}$ вызначым аператар Феера (гл. [7])

$$\Phi_{2n}(x, f) = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} f(t) D_{2n}^2(t, x) dt}{\int_{-\pi}^{\pi} D_{2n}^2(t, x) dt}, \quad (1)$$

дзе

$$D_{2n}(t, x) = \frac{\sin \int_x^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du}{\sin \frac{x-t}{2}}.$$

Лема 1. Для функцыі $D_{2n}(t, x)$ праўдзіцца роўнасць

$$\int_{-\pi}^{\pi} D_{2n}^2(t, x) dt = \pi \lambda_{2n}(x).$$

Доказ лемы 1 можна правесці аналагічна, як у артыкуле [7].

З улікам лемы 1 формулу (2) можна перапісаць так:

$$\Phi_{2n}(x, f) = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} f(t) D_{2n}^2(t, x) dt}{\pi \lambda_{2n}(x)}. \quad (2)$$

Паколькі функцыя $\Phi_{2n}(x, f)$ з'яўляецца дакладнай для адзінкі, г. зн.

$$\Phi_{2n}(x, 1) \equiv 1,$$

маем, што

$$f(x) - \Phi_{2n}(x, f) = \frac{1}{\pi \lambda_{2n}(x)} \int_{-\pi}^{\pi} (f(x) - f(t)) D_{2n}^2(t, x) dt, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Лема 2. Функцыя $\Phi_{2n}(x, f)$ з'яўляецца рацыянальнай парадку не вышэй за $2n$, прычым яе полюсы вызначаюцца з ураўнення $\lambda_{2n}(x) = 0$.

Доказ. Лема лёгка вынікае з прадстаўлення

$$D_{2n}^2(t, x) = \frac{1}{4(\xi - z)^2} \left(\xi^2 \prod_{k=1}^{2n} \frac{\xi - \alpha_k}{1 - \overline{\alpha_k} \xi} \frac{1 - \overline{\alpha_k} z}{z - \alpha_k} - 2 + z^2 \prod_{k=1}^{2n} \frac{1 - \overline{\alpha_k} \xi}{\xi - \alpha_k} \frac{z - \alpha_k}{1 - \overline{\alpha_k} z} \right),$$

дзе $z = e^{it}$, $\xi = e^{ix}$. Гэта прадстаўленне няцяжка атрымаць з [1].

Адзначым, што канструкцыя аператара $\Phi_{2n}(x, f)$ некалькі іншая, чым у [7], дзе парадак рацыянальнай функцыі роўны $2n$ пры n параметрах $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. У нашым выпадку мы маем той жа парадак $2n$, але пры $2n$ параметрах $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{2n}$. Больш шырокі выбар параметраў дазваляе ў некаторых выпадках палепшыць парадак набліжэнняў.

Разгледзім функцыю $f(x) = |\sin x|$. Увядзём абазначэнне

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = |\sin x| - \Phi_{2n}(x, |\sin x|), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Паўсюль далей будзем разглядаць наступны выпадак:

$$\alpha_k \in [0, 1), \quad \alpha_{2n-k+1} = -\alpha_k, \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (4)$$

Відавочна, што пры такім выбары параметраў

$$\lambda_{2n}(u) = \sum_{k=1}^n \frac{1 - \alpha_k^4}{(1 + \alpha_k^2)^2 - 4\alpha_k^2 \cos^2 u}.$$

Тэарэма 1. Для набліжэння функцыі $|\sin x|$ рацыянальнымі функцыямі Феера праўдзіцца прадстаўленне

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2n}(\alpha, x) = & \frac{2}{\pi \lambda_{2n}(x)} \cdot \int_{-1}^1 \left[\frac{(1 - \xi^2) \chi_{2n}(\xi)}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} \times \right. \\ & \times \left((\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x) \cos 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du - \sin x (1 - \xi^2) \sin 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) - \\ & \left. - \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} \right] d\xi, \quad x \in \mathbb{R}, \end{aligned} \quad (5)$$

дзе

$$\chi_{2n}(\xi) = \prod_{k=1}^n \frac{\xi^2 - \alpha_k^2}{1 - \alpha_k^2 \xi^2}$$

– здабытак Бляшке парадку $2n$.

Доказ. З улікам роўнасці (4) атрымаем

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{\pi \lambda_{2n}(x)} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{|\sin x| - |\sin t|}{\sin^2 \frac{t-x}{2}} \sin^2 \int_t^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt. \quad (6)$$

Далі, што $x \in (0, \pi)$. Тады пасля некаторых пераўтварэнняў будзем мець

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{\pi \lambda_{2n}(x)} \left(\int_0^{\pi} \frac{\sin x - \sin t}{\sin^2 \frac{t-x}{2}} \sin^2 \int_t^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt + \int_0^{\pi} \frac{\sin x - \sin t}{\sin^2 \frac{t+x}{2}} \sin^2 \int_{-t}^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt \right).$$

Выкарыстоўваючы формулу (гл. [1])

$$\exp \left(2i \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) = e^{ix} \chi_{2n}(e^{ix}),$$

знойдзем

$$\exp \left(2i \int_t^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) = e^{i(x-t)} \frac{\chi_{2n}(e^{ix})}{\chi_{2n}(e^{it})},$$

$$\exp \left(2i \int_{-t}^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) = e^{i(x+t)} \chi_{2n}(e^{ix}) \chi_{2n}(e^{it}).$$

Адсюль і з формул Эйлера будзем мець

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{2\pi i \lambda_{2n}(x)} \left(\int_0^\pi \frac{(e^{ix} - e^{it})(1 + e^{ix} e^{it})}{(e^{ix} - e^{it})^2} \left(\frac{e^{ix}}{e^{it}} \cdot \frac{\chi_{2n}(e^{ix})}{\chi_{2n}(e^{it})} + \frac{e^{it}}{e^{ix}} \cdot \frac{\chi_{2n}(e^{it})}{\chi_{2n}(e^{ix})} - 2 \right) dt + \int_0^\pi \frac{(e^{ix} - e^{it})(1 + e^{ix} e^{it})}{(e^{ix} e^{it} - 1)^2} \left(e^{ix} e^{it} \chi_{2n}(e^{ix}) \chi_{2n}(e^{it}) + \frac{1}{e^{ix} e^{it}} \chi_{2n}(e^{it}) \chi_{2n}(e^{ix}) - 2 \right) dt \right).$$

Зробім замены $z = e^{ix}$, $\xi = e^{it}$, атрымаем

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{2\pi \lambda_{2n}(x)} \int_C \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{\xi^2 z} \cdot \left(\frac{z^2 \chi_{2n}(z) \chi_{2n}(\xi^{-1}) + \xi^2 \chi_{2n}(z^{-1}) \chi_{2n}(\xi) - 2\xi z}{(\xi - z)^2} + \frac{\xi^2 z^2 \chi_{2n}(z) \chi_{2n}(\xi) + \chi_{2n}(z^{-1}) \chi_{2n}(\xi^{-1}) - 2\xi z}{(1 - \xi z)^2} \right) d\xi,$$

дзе

$$C = \{\xi: \xi = e^{it}, 0 \leq t \leq \pi\}.$$

Пакладзем цяпер, што $|z| < 1$, $\text{Im } z > 0$ і запішам наступнае прадстаўленне:

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{2\pi \lambda_{2n}(x)} \left(z \chi_{2n}(z) (I_1 + I_2) + \frac{1}{z \chi_{2n}(z)} (I_3 + I_4) - 2I_5 \right), \quad (7)$$

дзе

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_C \frac{1 + \xi z}{\xi^2 (\xi - z)} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi, \\ I_2 &= \int_C \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{(1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi) d\xi, \\ I_3 &= \int_C \frac{1 + \xi z}{\xi - z} \chi_{2n}(\xi) d\xi, \\ I_4 &= \int_C \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{\xi^2 (1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi, \\ I_5 &= \int_C \frac{(1 + \xi z)((\xi - z)^2 + (1 - \xi z)^2)}{\xi(\xi - z)(1 - \xi z)^2} d\xi. \end{aligned}$$

Пераўтворым цяпер інтэгралы $I_1 - I_5$.

Зоймемся спачатку інтэгралам I_1 . Падінтэгральная функцыя $f_1(\xi)$ інтэграла I_1 аналітычная ў абсягу $|\xi| > 1$, $\text{Im } \xi > 0$, у пункце $\xi = \infty$ яна мае нуль 2-га парадку, таму

$$\text{res}_{\xi=\infty} f_1(\xi) = 0.$$

Такім чынам,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{-1} \frac{1 + \xi z}{\xi^2 (\xi - z)} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi + \int_1^{+\infty} \frac{1 + \xi z}{\xi^2 (\xi - z)} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi.$$

Зробім замену $\xi = \eta^{-1}$, $d\xi = -\eta^{-2} d\eta$. Тады

$$I_1 = \int_{-1}^1 \frac{\xi + z}{1 - \xi z} \chi_{2n}(\xi) d\xi.$$

Разгледзім інтэграл I_2 . Яго падінтэгральная функцыя аналітычная ў абсягу $|\xi| < 1, \text{Im } \xi > 0$. Таму

$$I_2 = -\int_{-1}^1 \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{(1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi) d\xi.$$

Для інтэграла I_3 маем, што яго падінтэгральная функцыя аналітычная ў абсягу $|\xi| < 1, \text{Im } \xi > 0$, за выключэннем пункту $\xi = z$, – простага полюса. Тады

$$I_3 = -\int_{-1}^1 \frac{1 + \xi z}{\xi - z} \chi_{2n}(\xi) d\xi + 2\pi i \operatorname{res}_{\xi=z} \frac{1 + \xi z}{\xi - z} \chi_{2n}(\xi) = \int_{-1}^1 \frac{1 + \xi z}{\xi - z} \chi_{2n}(\xi) d\xi + 2\pi i (1 + z^2) \chi_{2n}(z).$$

Разгледзім інтэграл I_4 . Падінтэгральная функцыя $f_4(\xi)$ інтэграла I_4 аналітычная ў абсягу $|\xi| > 1, \text{Im } \xi > 0$, у пункце $\xi = \infty$ мае нуль 2-га парадку, таму

$$\operatorname{res}_{\xi=\infty} f_4(\xi) = 0.$$

Такім чынам,

$$I_4 = \int_{-\infty}^{-1} \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{\xi^2 (1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi + \int_1^{+\infty} \frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{\xi^2 (1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi^{-1}) d\xi.$$

Зробім замену $\xi = \eta^{-1}, d\xi = -\eta^{-2} d\eta$. Тады

$$I_4 = \int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi z)(\xi + z)}{(\xi - z)^2} \chi_{2n}(\xi) d\xi.$$

Зоймемся інтэгралам I_5 (гэты інтэграл будзем разумець у сэнсе яго галоўнага значэння). Разгледзім контур

$$\Gamma = C \cup [-1, -\varepsilon] \cup C_\varepsilon \cup [\varepsilon, 1], \quad \varepsilon \in (0, 1),$$

дзе

$$C_\varepsilon = \{\xi: |\xi| = \varepsilon, \text{Im } \xi > 0\}.$$

Так як унутры контура Γ пры досыць малым ε ляжыць адзін асаблівы пункт функцыі

$$f_5(\xi) = \frac{(1 + \xi z)((\xi - z)^2 + (1 - \xi z)^2)}{\xi(\xi - z)(1 - \xi z)^2}$$

– просты полюс $\xi = z$, то

$$\int_{\Gamma} f_5(\xi) d\xi = 2\pi i \operatorname{res}_{\xi=z} f_5(\xi) = 2\pi i \lim_{\xi \rightarrow z} \left((\xi - z) \frac{(1 + \xi z)((\xi - z)^2 + (1 - \xi z)^2)}{\xi(\xi - z)(1 - \xi z)^2} \right) = 2\pi i \frac{z^2 + 1}{z}.$$

З іншага боку,

$$\int_{\Gamma} f_5(\xi) d\xi = \int_C f_5(\xi) d\xi + \int_{-1}^{-\varepsilon} f_5(\xi) d\xi + \int_{C_\varepsilon} f_5(\xi) d\xi + \int_{\varepsilon}^1 f_5(\xi) d\xi + \int_{\varepsilon}^1 f_5(\xi) d\xi. \quad (8)$$

Абзначым

$$g(\xi) = \frac{(1 + \xi z)((\xi - z)^2 + (1 - \xi z)^2)}{(\xi - z)(1 - \xi z)^2}.$$

Тады

$$\int_{C_\varepsilon} f_5(\xi) d\xi = \int_{C_\varepsilon} \frac{g(\xi)}{\xi} d\xi = \int_{C_\varepsilon} \frac{g(\xi) - g(0)}{\xi} d\xi + g(0) \int_{C_\varepsilon} \frac{1}{\xi} d\xi.$$

Функцыя $g(\xi)$ аналітычная ў пункце $\xi = 0$, таму, калі давызначыць функцыю

$$h(\xi) = \frac{g(\xi) - g(0)}{\xi}$$

у пункце $\xi = 0$:

$$h(0) = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{g(\xi) - g(0)}{\xi} = g'(0),$$

то функцыя $h(\xi)$ будзе непарыўнай і абмежаванай у наваколлі нуля ($|h(\xi)| < M$) і

$$\left| \int_{C_\varepsilon} \frac{g(\xi) - g(0)}{\xi} d\xi \right| < M \pi \varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

З дапамогай замены $\xi = \varepsilon e^{i\varphi}$ знойдзем

$$\int_{C_\varepsilon} \frac{1}{\xi} d\xi = i \int_{\pi}^0 d\varphi = -\pi i.$$

У выніку атрымаем з улікам таго, што

$$g(0) = -\frac{z^2 + 1}{z},$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\tilde{N}_\varepsilon} f_5(\xi) d\xi = \pi i \frac{z^2 + 1}{z}. \quad (9)$$

Будзем мець

$$\int_{-1}^{-\varepsilon} f_5(\xi) d\xi + \int_{\varepsilon}^1 f_5(\xi) d\xi \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \text{V.p} \int_{-1}^1 f_5(\xi) d\xi = \int_{-1}^1 \frac{(1 + \xi z)((\xi - z)^2 + (1 - \xi z)^2)}{\xi(\xi - z)(1 - \xi z)^2} d\xi.$$

Адсюль пасля некаторых пераўтварэнняў атрымаем, што

$$\int_{-1}^1 f_5(\xi) d\xi = -z \int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2)((z^2 + 1)(1 + \xi^2) - 4\xi z)}{\xi(\xi(z^2 + 1) - (1 + \xi^2)z)^2} d\xi. \quad (10)$$

Тады з формулы (8) з улікам роўнасцей (9), (10) вынікае, што

$$I_5 = \int_C f_5(\xi) d\xi = 2\pi i \frac{z^2 + 1}{z} - \pi i \frac{z^2 + 1}{z} - \int_{-1}^1 f_5(\xi) d\xi = \pi i \frac{z^2 + 1}{z} + 2z \int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2)((z^2 + 1)(1 + \xi^2) - 4\xi z)}{\xi(\xi(z^2 + 1) - (1 + \xi^2)z)^2} d\xi.$$

Вернемся цяпер да формулы (7). Знойдзем спачатку

$$\begin{aligned} I_1 + I_2 &= -\int_{-1}^1 \left(\frac{(\xi - z)(1 + \xi z)}{(1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi) - \frac{\xi + z}{1 - \xi z} \chi_{2n}(\xi) \right) d\xi = 2z \int_{-1}^1 \frac{1 - \xi^2}{(1 - \xi z)^2} \chi_{2n}(\xi) d\xi, \\ I_3 + I_4 &= -\int_{-1}^1 \left(\frac{1 + \xi z}{\xi - z} \chi_{2n}(\xi) - \frac{(1 - \xi z)(\xi + z)}{(\xi - z)^2} \chi_{2n}(\xi) \right) d\xi + 2\pi i (1 + z^2) \chi_{2n}(z) = \\ &= 2z \int_{-1}^1 \frac{1 - \xi^2}{(\xi - z)^2} \chi_{2n}(\xi) d\xi + 2\pi i (1 + z^2) \chi_{2n}(z). \end{aligned}$$

Формула (7) прыме выгляд:

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{\pi \lambda_{2n}(x)} \cdot \left(\int_{-1}^1 \left[(1 - \xi^2) \chi_{2n}(\xi) \cdot \left(\frac{z^2 \chi_{2n}(z)}{(1 - \xi z)^2} + \frac{1}{\chi_{2n}(z)(\xi - z)^2} \right) - 2z \frac{(1 - \xi^2)((z^2 + 1)(1 + \xi^2) - 4\xi z)}{\xi(\xi(z^2 + 1) - (1 + \xi^2)z)^2} \right] d\xi \right). \quad (11)$$

Паколькі

$$\left(\chi_{2n}(e^{ix}) \right)^{\pm 1} = e^{\mp ix} \left(\cos 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \pm i \sin 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right),$$

то, выканаўшы лімітавы пераход у формуле (11) пры $z \rightarrow e^{ix}$, $|z| < 1$, атрымаем

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{1}{\pi \lambda_{2n}(x)} \cdot \int_{-1}^1 \lim_{z \rightarrow e^{ix}, |z| < 1} \left[(1 - \xi^2) \chi_{2n}(\xi) \cdot z \left(\left(\frac{1}{(1 - \xi z)^2} + \frac{1}{(\xi - z)^2} \right) \cos 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du + i \left(\frac{1}{(1 - \xi z)^2} - \frac{1}{(\xi - z)^2} \right) \sin 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) - 2z \frac{(1 - \xi^2)((z^2 + 1)(1 + \xi^2) - 4\xi z)}{\xi(\xi(z^2 + 1) - (1 + \xi^2)z)^2} \right] d\xi.$$

Так як

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow e^{ix}, |z| < 1} \frac{(1 + \xi^2)(z^2 + 1) - 4\xi z}{(\xi(z^2 + 1) - z(1 + \xi^2))^2} &= \frac{2}{e^{ix}} \cdot \frac{\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2}, \\ \lim_{z \rightarrow e^{ix}, |z| < 1} \left(\frac{1}{(1 - \xi z)^2} + \frac{1}{(\xi - z)^2} \right) &= \frac{2}{e^{ix}} \cdot \frac{\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2}, \\ \lim_{z \rightarrow e^{ix}, |z| < 1} \left(\frac{1}{(1 - \xi z)^2} - \frac{1}{(\xi - z)^2} \right) &= \frac{2i}{e^{ix}} \cdot \frac{\sin x(1 - \xi^2)}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2}, \end{aligned}$$

то атрымаем у выніку формулу (5).

2. Ацэнкі набліжэнняў функцыі $|\sin x|$ рацыянальнымі апэратарамі Феера.

Тэарэма 2. Няхай зададзеныя лікі α_k , $\alpha_k \in [0, 1)$, $k = 1, 2, \dots$, такія, што шэраг $\sum_{k=1}^{+\infty} (1 - \alpha_k)$ разбягаецца. Тады праўдзіца судачыненне

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{4}{\pi \lambda_{2n}(x)} \left(1 + \cos x \ln \left| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right| \right) + o \left(\frac{1}{\lambda_{2n}(x)} \right), \quad n \rightarrow \infty, \quad x \in (-\pi, 0) \cup (0, \pi). \quad (12)$$

Заўважым, што ўмова, якая накладваецца на шэраг, з'яўляецца неабходнай і дастатковай умовай поўнаасці адпаведнай сістэмы рацыянальных функцый у прасторы C (гл. [8]).

Доказ. У выпадку, калі $x \in (-\pi, 0) \cup (0, \pi)$, з формулы (5) тэарэмы 1 атрымаем

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{2}{\pi \lambda_{2n}(x)} \cdot \left(\int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2) \chi_{2n}(\xi)}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} \cdot \left((\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x) \cos 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du - \sin x(1 - \xi^2) \sin 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) d\xi - \int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi \right). \quad (13)$$

Заўважым, што

$$|a \cos \alpha + b \sin \alpha| \leq \sqrt{a^2 + b^2}.$$

Скарыстаўшыся гэтай формулай з роўнасці (13), атрымаем наступную ацэнку для першага інтэграла правай часткі:

$$\left| \int_{-1}^1 \frac{(1-\xi^2)\chi_{2n}(\xi)}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} \left((\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x) \cos 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du - \right. \right. \\ \left. \left. - \sin x (1 - \xi^2) \sin 2 \int_0^x \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du \right) d\xi \right| \leq \int_{-1}^1 \frac{(1-\xi^2)|\chi_{2n}(\xi)|}{\xi^2 - 2\xi \cos x + 1} d\xi. \quad (14)$$

Увядзём абазначэнне

$$I_{2n} = \int_{-1}^1 \frac{(1-\xi^2)|\chi_{2n}(\xi)|}{\xi^2 - 2\xi \cos x + 1} d\xi.$$

Заўважыўшы, што

$$\xi^2 - 2\xi \cos x + 1 \geq \sin^2 x, \quad \xi \in [-1, 1],$$

атрымаем

$$I_{2n} \leq \frac{1}{\sin^2 x} \int_{-1}^1 (1-\xi^2)|\chi_{2n}(\xi)| d\xi = \frac{2}{\sin^2 x} \int_0^1 (1-\xi^2)|\chi_{2n}(\xi)| d\xi = \frac{2}{\sin^2 x} I'_{2n}, \quad (15)$$

дзе

$$I'_{2n} = \int_0^1 (1-\xi^2)|\chi_{2n}(\xi)| d\xi.$$

У інтэграле I'_{2n} выканаем замену

$$\xi = \sqrt{\frac{1-t}{1+t}}$$

і знойдзем, што

$$I'_{2n} = 2 \int_0^1 t \prod_{k=1}^n \left| \frac{\beta_k - t}{\beta_k + t} \right| \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}}, \quad \beta_k = \frac{1-\alpha_k^2}{1+\alpha_k^2}, \quad k=1, 2, \dots, n.$$

Зададзім адвольны лік $\varepsilon \in (0, 1)$.

Тады

$$I'_{2n} < 2 \int_0^\varepsilon t \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} + 2 \int_\varepsilon^1 \frac{t}{\sqrt{1-t^2}} \prod_{k=1}^n \left| \frac{\beta_k - t}{\beta_k + t} \right| dt. \quad (16)$$

Будзем мець далей

$$\int_0^\varepsilon \frac{t dt}{\sqrt{1-t^2}} = 1 - \sqrt{1-\varepsilon^2} = O(\varepsilon^2), \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (17)$$

і

$$\int_\varepsilon^1 \frac{t}{\sqrt{1-t^2}} \prod_{k=1}^n \left| \frac{\beta_k - t}{\beta_k + t} \right| dt \leq \max_{t \in [\varepsilon, 1]} \prod_{k=1}^n \left| \frac{\beta_k - t}{\beta_k + t} \right|. \quad (18)$$

Няцяжка праверыць, што, калі $\beta \leq \varepsilon$, то

$$\left| \frac{\beta - t}{\beta + t} \right| \leq \frac{1-\beta}{1+\beta} = 1 - \frac{2\beta}{1+\beta} < e^{-\frac{2\beta}{1+\beta}}, \quad t \in [\varepsilon, 1].$$

Калі ж $\beta > \varepsilon$, то

$$\left| \frac{\beta - t}{\beta + t} \right| \leq \frac{\beta - \varepsilon}{\beta + \varepsilon} < e^{-\frac{2\varepsilon}{1+\varepsilon}}, \quad t \in [\varepsilon, 1].$$

Такім чынам,

$$\prod_{k=1}^n \left| \frac{\beta_k - t}{\beta_k + t} \right| \leq \exp \left(-2 \left(\sum_{k \in \Omega} \frac{\beta_k}{1 + \beta_k} + (n - n^*) \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} \right) \right), \quad t \in [\varepsilon, 1],$$

дзе $\Omega = \{k : k = 1, 2, \dots, n, \beta_k < \varepsilon\}$, n^* – колькасць нумароў у мностве Ω .

Адсюль з улікам формул (15)–(18) атрымаем

$$I_{2n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

пры ўмове, што шэраг

$$\sum_{k=0}^{\infty} (1 - |\alpha_k|)$$

разбягаецца.

Вылічым зараз

$$\int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi. \quad (19)$$

Для гэтага падінтэгральную функцыю раскладзём на элементарныя дроби. Шуканае раскладанне мае выгляд

$$\frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} = \frac{\cos x}{\xi} + \frac{-2 \cos x \cdot \xi + 2}{\xi^2 - 2\xi \cos x + 1} + \frac{4 \cos x \sin^2 x \cdot \xi - 4 \sin^2 x}{(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2}. \quad (20)$$

Знойдзем спачатку нявызначаны інтэграл

$$\int \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi.$$

Згодна з формулай (20), пасля шэрагу вылічэнняў атрымаем

$$\int \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi = \cos x \ln \left| \frac{\xi}{\xi^2 - 2\xi \cos x + 1} \right| - 2 \sin^2 x \frac{\xi}{\xi^2 - 2\xi \cos x + 1}.$$

Нарэшце вылічым інтэграл (19), разумеючы яго ў сэнсе галоўнага значэння па Кашы

$$\begin{aligned} \text{V.p.} \int_{-1}^1 \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-1}^{-\varepsilon} \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi + \right. \\ &\left. + \int_{\varepsilon}^1 \frac{(1 - \xi^2)(\xi^2 \cos x - 2\xi + \cos x)}{\xi(\xi^2 - 2\xi \cos x + 1)^2} d\xi \right) = -2 \cos x \ln \left| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right| - 2. \end{aligned} \quad (21)$$

З формул (13), (21) цяпер вынікае, што ў выпадку, калі $x \in (-\pi, 0) \cup (0, \pi)$,

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, x) = \frac{4}{\pi \lambda_{2n}(x)} \left(1 + \cos x \ln \left| \operatorname{tg} \frac{x}{2} \right| \right) + o \left(\frac{1}{\lambda_{2n}(x)} \right), \quad n \rightarrow \infty.$$

Тэарэма 3. Калі $x = 0$ ці $x = \pi$, то праўдзяцца наступныя няроўнасці:

$$\frac{4 \ln \lambda_{2n} \left(\frac{\pi}{2} \right)}{\pi \lambda_{2n}(0)} < \varepsilon_{2n}(\alpha, x) \leq \frac{4(1 + \ln(\pi \lambda_{2n}(0)))}{\lambda_{2n}(0)}. \quad (22)$$

Доказ. Будзем лічыць, напрыклад, што $x = 0$. Тады з формулы (6) маем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2n}(\alpha, 0) &= \frac{2}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^\pi \frac{\sin t}{\sin^2 \frac{t}{2}} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt = \\ &= \frac{4}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^\pi \frac{\cos \frac{t}{2}}{\sin \frac{t}{2}} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt. \end{aligned} \quad (23)$$

Разаб'ём інтэграл (23) на два, распаўсюджаных на прамежкі $[0, \delta_n]$ і $[\delta_n, \pi]$, дзе δ_n – некаторы лік, $0 < \delta_n < \pi$. Атрымаем

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) = \frac{4}{\pi\lambda_{2n}(0)} (I_1 + I_2),$$

дзе

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{\delta_n} \frac{\cos \frac{t}{2}}{\sin \frac{t}{2}} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt, \\ I_2 &= \int_{\delta_n}^\pi \frac{\cos \frac{t}{2}}{\sin \frac{t}{2}} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt. \end{aligned}$$

Ацэнім далей інтэгралы I_1, I_2 зверху. Выкарыстоўваючы няроўнасці

$$\begin{aligned} |\sin x| &\leq |x|, \quad x \in \mathbb{R}, \\ \sin x &\geq \frac{2}{\pi} \cdot x, \quad x \in \left[0, \frac{\pi}{2} \right], \end{aligned} \quad (24)$$

атрымаем

$$I_1 \leq \int_0^{\delta_n} \frac{\pi}{t} \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u) \right) du dt. \quad (25)$$

Заўважым цяпер, што

$$\lambda_{2n}(u) \leq \lambda_{2n}(0), \quad u \in \mathbb{R}. \quad (26)$$

Таму

$$I_1 \leq \int_0^{\delta_n} \frac{\pi}{t} \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(0) \right) du dt = \int_0^{\delta_n} \frac{\pi}{t} t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(0) \right) dt = \pi\delta_n \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(0) \right). \quad (27)$$

Зоймемся інтэгралам I_2 . Будзем мець

$$I_2 \leq \int_{\delta_n}^\pi \frac{\pi}{t} dt = \pi \ln \frac{\pi}{\delta_n}. \quad (28)$$

З няроўнасцей (27) і (28) вынікае, што

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) \leq \frac{4}{\pi\lambda_{2n}(0)} \left(\pi\delta_n \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(0) \right) + \pi \ln \frac{\pi}{\delta_n} \right) = 4 \left(\delta_n + \frac{1}{2\lambda_{2n}(0)} + \frac{\ln \frac{\pi}{\delta_n}}{\lambda_{2n}(0)} \right).$$

Абраўшы $\delta_n = \frac{1}{2\lambda_{2n}(0)}$, атрымаем наступную ацэнку:

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) \leq \frac{4(1 + \ln(\pi\lambda_{2n}(0)))}{\lambda_{2n}(0)}.$$

Ацэнім цяпер інтэграл (23) знізу. Разаб'ём яго на два, распаўсюджаных на прамежкі $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ і $\left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$, і ў другім з атрыманых інтэгралаў зробім замену $s = \pi - t$. У выніку будзем мець

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) = \frac{8}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sin t} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du dt.$$

Выкарыстоўваючы няроўнасць (24), атрымаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2n}(\alpha, 0) &\geq \frac{8}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{t} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du dt = \\ &= \frac{8}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right)} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du \cdot \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right) dt. \end{aligned}$$

Адзначым, што

$$\int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du \geq \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right) du = t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right).$$

І таму

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) \geq \frac{8}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du} \sin^2 \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du \cdot \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right) dt.$$

У апошнім інтэграле выканаем замену

$$z = \int_0^t \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du.$$

Так як пры такой замене $dz = \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(t)\right) dt$, то

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) \geq \frac{8}{\pi\lambda_{2n}(0)} \int_0^A \frac{\sin^2 z}{z} dz, \tag{29}$$

дзе

$$A = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}(u)\right) du.$$

Паколькі

$$\lambda_{2n}(u) = \sum_{k=1}^n \frac{1 - \alpha_k^4}{(1 + \alpha_k^2)^2 - 4\alpha_k^2 \cos^2 u} \geq \lambda_{2n}\left(\frac{\pi}{2}\right), \quad u \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right],$$

будзем мець

$$A \geq \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right),$$

і таму

$$\int_0^A \frac{\sin^2 z}{z} dz \geq \int_0^{\frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{2} + \lambda_{2n}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right)} \frac{\sin^2 z}{z} dz \geq I, \tag{30}$$

дзе

$$I = \int_0^N \frac{\sin^2 z}{z} dz, \quad N = \left[\frac{1}{2} + \lambda_{2n} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right].$$

Цяпер разаб'ём інтэграл I на інтэгралы, распаўсюджаныя на адрэзкі $\left[\frac{\pi(k-1)}{2}, \frac{\pi k}{2} \right]$, $k = 1, 2, \dots, N$:

$$I = \sum_{k=1}^N \int_{\frac{\pi(k-1)}{2}}^{\frac{\pi k}{2}} \frac{\sin^2 z}{z} dz \geq \sum_{k=1}^N \frac{2}{\pi k} \int_{\frac{\pi(k-1)}{2}}^{\frac{\pi k}{2}} \sin^2 z dz = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{k} \geq \frac{1}{2} (\ln N + C),$$

дзе C – пастаянная Эйлера.

Адсюль і з няроўнасцей (29), (30) вынікае, што

$$\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) \geq \frac{4(\ln N + C)}{\pi \lambda_{2n}(0)} > \frac{4 \ln \lambda_{2n} \left(\frac{\pi}{2} \right)}{\pi \lambda_{2n}(0)}.$$

Выпадак, калі $x = \pi$, разглядаецца аналагічна.

Заклучэнне. Ацэнка (12) тэарэмы 2 сведчыць, што набліжэнне функцыі $f(x) = |\sin x|$ з дапамогай апэратараў Феера $\Phi_{2n}(x, f)$ з фіксаванымі рэчаіснымі параметрамі α_k , $k = 1, 2, \dots, n$ з'яўляецца велічынёй парадку $O\left(\frac{1}{n}\right)$ у кожным пункце $x \in (-\pi, 0) \cup (0, \pi)$. Гэты вынік прадказальны і ўзгадняецца з аналагічным вынікам у палінаміяльным выпадку. Вынік тэарэмы 3 таксама прадказальны, калі лічыць параметры α_k , $k = 1, 2, \dots, n$ фіксаванымі.

Зусім іншая сітуацыя складваецца, калі параметры α_k , $k = 1, 2, \dots, n$ лічыць свабоднымі. Калі, напрыклад, у тэарэме 3 выбраць, $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_{n-1} = 0$, $\alpha_n = 1 - \frac{1}{n \ln n}$, то атрымаем, што $\varepsilon_{2n}(\alpha, 0) = O\left(\frac{1}{n}\right)$, $n \rightarrow \infty$, г. зн. тут няма таго эфекту, які назіраецца ў палінаміяльным выпадку, дзе сярэднія Феера набліжаюць гэту функцыю як $O\left(\frac{\ln n}{n}\right)$, $n \rightarrow \infty$.

Такім чынам, у рацыянальным выпадку з дапамогай апэратараў Феера можна наблізіць функцыю $|\sin x|$ у кожным пункце $x \in \mathbb{R}$ з хібнасцю $O\left(\frac{1}{n}\right)$, $n \rightarrow \infty$ пры пэўным выбары рэчаісных параметраў $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. Застаецца адкрытым пытанне, ці магчыма забяспечыць раўнамерную ацэнку на \mathbb{R} больш высокага парадку, чым у палінаміяльным выпадку, адпаведным выбарам вышэйуказаных параметраў.

Падзякі. Работа выканана ў рамках навукова-даследчай работы «Рацыянальная апраксімацыя функцый і яе прымяненне ў лікавым аналізе мадэляў» (2016–2020 гг., № ГР 20162269) пры выкананні Дзяржаўнай праграмы навуковых даследаванняў «Канвергенцыя 2020» (падпраграма «Метады матэматычнага мадэлявання складаных сістэм»).

Acknowledgments. This work was done as part of the research work “Rational approximation of functions and their application in numerical analysis of models” (2016–2020, No. ГР. 20162269) being carried out according to the State Research Program “Convergence 2020” (subprogram “Methods for Mathematical Modeling of Complex Systems”.

Спіс выкарыстаных крыніц

1. Джрбашян, М. М. К теории рядов Фурье по рациональным функциям / М. М. Джрбашян // Изв. АН Арм. ССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1956. – Т. 9, № 7. – С. 3–28.
2. Русак, В. Н. Рациональные функции как аппарат приближения / В. Н. Русак. – Минск: Изд-во БГУ им. В. И. Ленина, 1979. – 176 с.
3. Petrushev, P. P. Rational approximation of real functions / P. P. Petrushev, V. A. Popov. – Cambridge University Press, 1987. – 384 p.
4. Ровба, Е. А. Интерполяция и ряды Фурье в рациональной аппроксимации / Е. А. Ровба. – Гродно: ГрГУ, 2001. – 106 с.

5. Ровба, Е. А. О приближении функции $|\sin x|$ рациональными рядами Фурье / Е. А. Ровба // Мат. заметки. – 1989. – Т. 46. – С. 52–59.
6. Микулич, Е. Г. Точные оценки равномерных приближений функции $|\sin x|$ частными суммами рядов Фурье по рациональным функциям / Е. Г. Микулич // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. – 2011. – № 1. – С. 84–90.
7. Русак, В. Н. О приближении рациональными дробями / В. Н. Русак // Докл. АН БССР. – 1964. – Т. 8, № 7. – С. 432–435.
8. Ахиезер, Н. И. Лекции по теории аппроксимации / Н. И. Ахиезер. – М.: Наука, 1965. – 408 с.

References

1. Dzhrbashian M. M. To Fourier series theory about rational functions. *Izvestiya Akademii Nauk Armyanskoi SSR. Ser. fiziko-matematicheskikh nauk [Proceedings of the Academy of Sciences of the Armenian SSR. Series of physical and mathematical sciences]*, 1956, vol. 9, no.7, pp. 3–28 (in Russian).
2. Rusak V. N. *Rational functions as approximation apparatus*. Minsk, 1979, 176 p. (in Russian).
3. Petrushev P. P., Popov V. A. *Rational approximation of real functions*. Cambridge University Press, 1987, 384 p. Doi: 10.1017/cbo9781107340756
4. Rovba E. A. *Interpolation and Fourier series in rational approximation*. Grodno, Grodno State University, 2001, 106 p. (in Russian).
5. Rovba E. A. An approximation of $|\sin x|$ by rational Fourier series. *Mathematical Notes of the Academy of Sciences of the USSR*, 1989, vol. 46, no. 4, pp. 788–794. Doi: 10.1007/bf01158146
6. Mikulich E. G. Sharp estimates for uniform approximation of $|\sin x|$ by partial sums of Fourier series about rational functions. *Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika = Vestnik BSU. Series 1: Physics. Mathematics. Informatics*, 2011, no. 1, pp. 84–90 (in Russian).
7. Rusak V. N. An approximation by rational fractions. *Doklady Akademii nauk BSSR [Doklady of the Academy of Sciences of the BSSR]*, 1964, vol. 8, no. 7, pp. 432–435 (in Russian).
8. Akhiezer N. I. *Lectures on the theory of approximation*. Moscow, Nauka Publ., 1965, 408 p. (in Russian).

Информация об авторах

Ровба Евгений Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры фундаментальной и прикладной математики факультета математики и информатики, Гродненский государственный университет им. Я. Купалы (ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: rovba.ea@gmail.com

Козловская Наталья Юрьевна – студентка 5-го курса, Гродненский государственный университет им. Я. Купалы (ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: Kozlowskaya_Natalya@tut.by

Information about the authors

Yauhen A. Rouba – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Fundamental and Applied Mathematics, Faculty of Mathematics and Informatics, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Azheshki Str., 230023, Grodno, Republic of Belarus). E-mail: rovba.ea@gmail.com

Natallia Y. Kazlouskaya – 5th year student, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Azheshki Str., 230023, Grodno, Republic of Belarus). E-mail: Kozlowskaya_Natalya@tut.by

А. В. Кузьмич, А. А. Гринь

*Гродненский государственный университет им. Я. Купалы, Гродно, Беларусь***ВЫДЕЛЕНИЕ СИСТЕМ С ВОЗМУЩЕННЫМ ЛИНЕЙНЫМ ЦЕНТРОМ,
ИМЕЮЩИХ НЕ БОЛЕЕ ОДНОГО ПРЕДЕЛЬНОГО ЦИКЛА**

Аннотация. Рассматривается задача выделения систем с возмущенным линейным центром специального вида, имеющих не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости при всех действительных значениях параметра возмущения μ . Для решения поставленной задачи предлагается способ построения функций Дюлака – Черкаса в виде полинома второй степени относительно фазовой переменной y , коэффициенты которого гладко зависят от второй фазовой переменной x и непрерывно – от параметра μ . Построение функции Дюлака – Черкаса основано на редукции вспомогательного полинома $\Phi(x, y, \mu)$ к функции $\Phi_0(x, \mu)$, зависящей только от переменной x и параметра μ . Предложен регулярный способ такой редукции. Представлены примеры выделенных систем, которые имеют единственный предельный цикл во всей фазовой плоскости.

Ключевые слова: возмущенный линейный центр, обобщенная система Кузлеса, предельный цикл, 16-я проблема Д. Гильберта, функция Дюлака – Черкаса, бифуркация

Для цитирования. Кузьмич, А. В. Выделение систем с возмущенным линейным центром, имеющих не более одного предельного цикла / А. В. Кузьмич, А. А. Гринь // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 40–48.

A. V. Kuzmich, A. A. Hryn

*Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus***CONSTRUCTION OF THE SYSTEMS WITH A PERTURBED LINEAR CENTER
HAVING NO MORE THAN ONE LIMIT CYCLE**

Abstract. The problem under our consideration is to construct systems with a perturbed linear center of special form that have no more than one limit cycle in the entire phase plane for all real values of the perturbation parameter μ . To solve this problem, we have proposed a method for constructing a Dulac – Cherkas function as a second-degree polynomial with respect to a phase variable y , whose coefficients smoothly depend on the second-phase variable x and continuously depend on the parameter μ . The construction of the Dulac – Cherkas function is based on reducing the auxiliary polynomial $\Phi(x, y, \mu)$ to the function $\Phi_0(x, \mu)$ depending only on the variable x and the parameter μ . A regular method for such reduction is proposed. Examples of the constructed systems having a unique limit cycle in the entire phase plane are presented.

Keywords: perturbed linear center, generalized Kukles system, limit cycle, 16th Hilbert problem, Dulac – Cherkas function, bifurcation

For citation. Kuzmich A. V., Hryn A. A. Construction of the systems with a perturbed linear center having no more than one limit cycle. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 40–48 (in Russian).

Введение. Рассмотрим автономную дифференциальную систему на плоскости, зависящую от действительного параметра μ :

$$\frac{dx}{dt} = y \equiv P(x, y), \quad \frac{dy}{dt} = -x + \mu \sum_{j=0}^n h_j(x, \mu) y^j \equiv Q(x, y, \mu), \quad X = (P, Q), \quad (1)$$

где функции $h_j(x, \mu): R \times R \rightarrow R, j = 0, \dots, n$, непрерывны по двум переменным и непрерывно дифференцируемы по первой переменной. При $\mu = 0$ система (1) имеет центр в начале координат и представляет собой линейную систему с первым интегралом $H(x, y) \equiv x^2 + y^2 = c^2 > 0$, где c – произвольное действительное число. В системах (1) из некоторых окружностей $x^2 + y^2 = c_i^2$ могут рождаться предельные циклы, наличие которых существующие методы позволяют доказывать

лишь для значений μ , достаточно мало отличающихся от нуля, когда система (1) является близкой к линейной [1]. В этом случае для изучения предельных циклов обычно применяются интеграл Понтрягина, интеграл Пуанкаре – Мельникова, интеграл Абеля, интегрирующий множитель, методы дифференциальных форм и теории усреднения. В случае $n = 3$, когда функция $Q(x, y, \mu)$ является кубическим полиномом относительно фазовых переменных x и y , система (1) представляет собой систему Куклеса [2, 3]. Для нее с помощью вышеуказанных методов получено много интересных результатов по предельным циклам [4], которые, как правило, справедливы не для всей фазовой плоскости. Поэтому актуальной является задача получения нелокальной оценки числа и локализации предельных циклов, которая была бы справедливой для всей фазовой плоскости системы (1) при всех ненулевых значениях $\mu \in I \subseteq \mathbb{R}$. Одним из методов, позволяющих получить решение такой задачи для многих систем, является обобщенный подход Л. А. Черкаса [5–9] к признаку Дюлака, основанный на нахождении в области $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ функции Дюлака – Черкаса $\Psi(x, y, \mu) \in C^1(\Omega, \mathbb{R})$, которая удовлетворяет соотношению

$$\Phi(x, y, \mu) \equiv k\Psi \operatorname{div} X + \frac{\partial \Psi}{\partial x} P + \frac{\partial \Psi}{\partial y} Q > 0 \quad (< 0), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad \forall \mu \in I \setminus \{0\}. \quad (2)$$

В работах [10, 11] с помощью нахождения функции Ψ эффективно решалась задача выделения классов систем вида (1) в случаях $n = 3$ и $n = 5$, имеющих не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости при всех действительных значениях $\mu \neq 0$. Ключевая идея нахождения функции Дюлака – Черкаса основана на редукции условия (2) для вспомогательной функции $\Phi(x, y, \mu)$ в виде полинома по y к знакопостоянству одной или нескольких функций, зависящих только от фазовой переменной x и параметра μ .

Целью настоящей работы является разработка подхода для выделения систем вида (1), имеющих не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости при всех ненулевых вещественных значениях параметра μ . Для достижения этого создан способ построения функции Ψ в виде полинома второй степени относительно переменной y , основанный на редукции полинома $\Phi(x, y, \mu)$ при произвольном натуральном $n \geq 3$ к одной функции $\Phi_0(x, \mu)$, зависящей только от переменной x и параметра μ .

1. Предварительные сведения. При существовании у системы (1) функции Дюлака – Черкаса Ψ в области Ω оценка числа и локализация предельных циклов в ней проводится с помощью кривой

$$W = \{(x, y) \in \Omega : \Psi(x, y) = 0\},$$

которую предельные циклы не могут пересекать, на основе следующих результатов [12, с. 204].

Теорема 1. Пусть Ψ является функцией Дюлака – Черкаса системы (1) в p -связной области Ω , где кривая W состоит из s овалов. Тогда система (1) имеет не более $p - 1 + s$ предельных циклов, целиком расположенных в области Ω . Если предельные циклы существуют, то они все являются грубыми.

З а м е ч а н и е 1. Условие (2) может быть ослаблено, предполагая, что функция Φ может принимать нулевое значение в области Ω на множестве меры нуль, и никакая замкнутая кривая этого множества не является предельным циклом системы (1).

З а м е ч а н и е 2. Пусть Ψ – функция Дюлака – Черкаса системы (1) в области Ω . Тогда любой предельный цикл Γ системы (1), расположенный в Ω , будет устойчивым (неустойчивым), если на нем выражение $k\Phi\Psi$ имеет отрицательный (положительный) знак.

Для доказательства существования предельного цикла у системы (1) при малых значениях $|\mu| \neq 0$ будем применять метод Понтрягина [2, с. 421], изложенный в виде следующей теоремы.

Теорема 2. Если при переходе от системы

$$\frac{dx}{dt} = -y, \quad \frac{dy}{dt} = x \quad (3)$$

к достаточно близкой возмущенной системе

$$\frac{dx}{dt} = -y + \mu p(x, y, \mu), \quad \frac{dy}{dt} = x + \mu q(x, y, \mu) \quad (4)$$

в полярных координатах $x = r \cos \varphi, y = r \sin \varphi$ уравнение

$$\int_0^{2\pi} [p(r \cos \varphi, r \sin \varphi) \cos \varphi + q(r \cos \varphi, r \sin \varphi) \sin \varphi] d\varphi = 0 \quad (5)$$

имеет единственный положительный действительный корень r_1 , удовлетворяющий условию

$$\int_0^{2\pi} [p'_x(r_1 \cos \varphi, r_1 \sin \varphi) + q'_y(r_1 \cos \varphi, r_1 \sin \varphi)] d\varphi \neq 0, \quad (6)$$

то из замкнутой траектории $r = r_1$ системы (3) в достаточно малой окрестности этой окружности рождается, и притом единственный, предельный цикл системы (4).

2. Способ построения функции Дюлака – Черкаса. В дальнейшем будем считать, что Ω – односвязная область, содержащая начало координат. Тогда при построении функции Дюлака – Черкаса Ψ число овалов кривой W будет задавать верхнюю границу для числа предельных циклов системы (1) в области Ω [10, 13].

Учитывая, что правые части системы (1) являются полиномами по переменной y , естественно строить функцию Дюлака – Черкаса Ψ в виде полинома

$$\Psi(x, y, \mu) = \sum_{w=0}^l \Psi_w(x, \mu) y^w. \quad (7)$$

Тогда после подстановки правых частей системы (1) и полинома (7) в соотношение (2) получим

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, \mu) \equiv & \left(\Psi'_0(x, \mu) + \Psi'_1(x, \mu)y + \dots + \Psi'_l(x, \mu)y^l \right) y + \\ & + \left(\Psi_1(x, \mu) + 2\Psi_2(x, \mu)y + \dots + l\Psi_l(x, \mu)y^{l-1} \right) \times \left(-x + \mu \sum_{j=0}^n h_j(x, \mu)y^j \right) + \\ & + k\mu \left(\Psi_0(x, \mu) + \Psi_1(x, \mu)y + \dots + \Psi_l(x, \mu)y^l \right) \times \left(\sum_{j=1}^n j h_j(x, \mu)y^{j-1} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Функцию $\Phi(x, y, \mu)$ из (8) после группировки по переменной y запишем в виде

$$\Phi(x, y, \mu) = \sum_{i=0}^m \Phi_i(x, \mu) y^i, \quad (9)$$

где коэффициентные функции $\Phi_i(x, \mu)$ зависят от неизвестных функций $h_0(x, \mu), \dots, h_n(x, \mu)$, от функций $\Psi_0(x, \mu), \dots, \Psi_l(x, \mu)$, их первых производных и от числа k . Если функции $h_n(x, \mu), \Psi_l(x, \mu)$ не обращаются тождественно в нуль при $x \in R, \mu \in I$, то степени n и m соответственно полиномов $Q(x, y, \mu)$ и $\Phi(x, y, \mu)$ связаны следующим условием:

$$m = \max \{l + 1, l + n - 1\}.$$

Для сведения функции (8) к виду $\Phi_0(x, \mu)$ потребуем выполнения тождеств

$$\Phi_i(x, \mu) \equiv 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (10)$$

Из соотношения (8) вытекает, что в случаях $l = 1$ и $l = 2$ тождества (10) представляют собой систему n и $n + 1$ линейных алгебраических уравнений соответственно, из которых необходимо найти $n - 1$ и n неизвестных в виде функций $h_j(x, \mu)$ и числа k . В случае $l = 1$ кривая W не может

содержать овалов, а следовательно, в соответствии с теоремой 1 система (1) не может иметь предельных циклов в односвязной области Ω . Поэтому рассмотрим случай $l = 2$, когда кривая W может состоять из единственного овала, а знакоопределенность полинома $\Phi(x, y, \mu)$ доказывается за счет его редукции к виду $\Phi(x, y, \mu) = \Phi_0(x, \mu)$. Функцию $\Psi(x, y, \mu)$ будем находить в виде

$$\Psi(x, y, \mu) = \Psi_0(x, \mu) + \Psi_1(x, \mu)y + \Psi_2(x, \mu)y^2. \tag{11}$$

Тогда коэффициентные функции $\Phi_j(x, \mu)$ выражения (9) запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_{n+1}(x, \mu) &= (2 + kn)\mu h_n(x, \mu)\Psi_2(x, \mu), \\ \Phi_n(x, \mu) &= (2 + k(n-1))\mu h_{n-1}(x, \mu)\Psi_2(x, \mu) + (1 + kn)\mu h_n(x, \mu)\Psi_1(x, \mu), \\ &\dots\dots\dots \\ \Phi_i(x, \mu) &= (2 + k(i-1))\mu h_{i-1}(x, \mu)\Psi_2(x, \mu) + (1 + ki)\mu h_i(x, \mu)\Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + (i+1)k\mu h_{i+1}(x, \mu)\Psi_0(x, \mu), \quad i = 4, \dots, n-1, \\ &\dots\dots\dots \\ \Phi_3(x, \mu) &= \Psi_2'(x, \mu) + (2 + 2k)\mu h_2(x, \mu)\Psi_2(x, \mu) + (1 + 3k)\mu h_3(x, \mu)\Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 4k\mu h_4(x, \mu)\Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_2(x, \mu) &= \Psi_1'(x, \mu) + (2 + k)\mu h_1(x, \mu)\Psi_2(x, \mu) + (1 + 2k)\mu h_2(x, \mu)\Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 3k\mu h_3(x, \mu)\Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_1(x, \mu) &= \Psi_0'(x, \mu) + 2\mu h_0(x, \mu)\Psi_2(x, \mu) + (1 + k)\mu h_1(x, \mu)\Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 2k\mu h_2(x, \mu)\Psi_0(x, \mu) - 2x\Psi_2(x, \mu). \end{aligned} \tag{12}$$

При этом функция Φ_0 записывается в виде

$$\Phi_0(x, \mu) = k\mu\Psi_0(x, \mu)h_1(x, \mu) + \mu\Psi_1(x, \mu)h_0(x, \mu) - x\Psi_1(x, \mu). \tag{13}$$

Далее, для достижения условия (2) на множестве $\Omega \times I$ с учетом замечания 1, как и в работе [13], используем структурную зависимость коэффициентных функций $\Phi_j(x, \mu)$ от функций $h_j(x, \mu), \Psi_j(x, \mu), \Psi_j'(x, \mu)$. Из тождеств $\Phi_{n+1} \equiv 0, \Phi_n \equiv 0, \dots, \Phi_1 \equiv 0$ последовательно получаем

$$\begin{aligned} k &= -\frac{2}{n}, \quad h_{n-1}(x, \mu) = \frac{n\Psi_1(x, \mu)h_n(x, \mu)}{\Psi_2(x, \mu)(2n-2)}, \\ &\dots\dots\dots \\ h_{i-1}(x, \mu) &= \frac{2(i+1)\Psi_0(x, \mu)h_{i+1}(x, \mu) - \Psi_1(x, \mu)h_i(x, \mu)(n-2i)}{\Psi_2(x, \mu)(2n-2(i-1))}, \quad i = 4, \dots, n-1, \\ &\dots\dots\dots \\ h_2(x, \mu) &= \frac{8\mu h_4(x, \mu)\Psi_0(x, \mu) - \mu h_3(x, \mu)\Psi_1(x, \mu)(n-6) - n\Psi_2'(x, \mu)}{\mu\Psi_2(x, \mu)(2n-4)}, \\ h_1(x, \mu) &= \frac{6\mu h_3(x, \mu)\Psi_0(x, \mu) - \mu h_2(x, \mu)\Psi_1(x, \mu)(n-4) - n\Psi_1'(x, \mu)}{\mu\Psi_2(x, \mu)(2n-2)}, \\ h_0(x, \mu) &= \frac{4\mu h_2(x, \mu)\Psi_0(x, \mu) - \mu h_1(x, \mu)\Psi_1(x, \mu)(n-2) - n\Psi_0'(x, \mu) + 2nx\Psi_2(x, \mu)}{2n\mu\Psi_2(x, \mu)}. \end{aligned} \tag{14}$$

Таким образом, доказана

Теорема 3. Многочлен $\Phi(x, y, \mu)$ из соотношения (8) для системы (1) при любых числах $n \in N, \mu \neq 0$ и при произвольной функции Ψ вида (11), где $\Psi_2(x, \mu) \neq 0$, всегда можно привести к виду $\Phi(x, y, \mu) = \Phi_0(x, \mu)$.

После подстановки выражений (14) в соотношение (13) получившаяся функция $\Phi_0(x, \mu)$ будет зависеть от функций $\Psi_0(x, \mu), \Psi_1(x, \mu), \Psi_2(x, \mu), h_n(x, \mu)$, и за счет подходящего выбора этих функций всегда можно добиться знакопостоянства функции $\Phi_0(x, \mu)$ при $x \in R$ и $0 \neq \mu \in I$.

3. Выделение систем (1), имеющих не более одного предельного цикла. Рассмотрим случай $n = 7$, т. е. систему (1) будем строить в виде

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = -x + \mu \sum_{j=0}^7 h_j(x, \mu) y^j. \quad (15)$$

Тогда соответствующий полином (9) принимает вид

$$\Phi(x, y, \mu) = \sum_{i=0}^8 \Phi_i(x, \mu) y^i,$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_8(x, \mu) &= (2 + 7k)\mu h_7(x, \mu) \Psi_2(x, \mu), \\ \Phi_7(x, \mu) &= (2 + 6k)\mu h_6(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + (1 + 7k)\mu h_7(x, \mu) \Psi_1(x, \mu), \\ \Phi_6(x, \mu) &= (2 + 5k)\mu h_5(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + (1 + 6k)\mu h_6(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 7k\mu h_7(x, \mu) \Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_5(x, \mu) &= (2 + 4k)\mu h_4(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + (1 + 5k)\mu h_5(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 6k\mu h_6(x, \mu) \Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_4(x, \mu) &= (2 + 3k)\mu h_3(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + (1 + 4k)\mu h_4(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 5k\mu h_5(x, \mu) \Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_3(x, \mu) &= \Psi_2'(x, \mu) + (2 + 2k)\mu h_2(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + (1 + 3k)\mu h_3(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 4k\mu h_4(x, \mu) \Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_2(x, \mu) &= \Psi_1'(x, \mu) + (1 + 2k)\mu h_2(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + (2 + k)\mu h_1(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) + \\ &\quad + 3k\mu h_3(x, \mu) \Psi_0(x, \mu), \\ \Phi_1(x, \mu) &= \Psi_0'(x, \mu) + 2k\mu h_2(x, \mu) \Psi_0(x, \mu) + (1 + k)\mu h_1(x, \mu) \Psi_1(x, \mu) + \\ &\quad + 2\mu h_0(x, \mu) \Psi_2(x, \mu) - 2x \Psi_2(x, \mu). \end{aligned} \quad (16)$$

Чтобы иметь возможность для существования предельного цикла у системы (15), функцию Ψ рассмотрим в виде

$$\Psi(x, y, \mu) = ax^2 + ay^2 - c, \quad a, c \in R^+. \quad (17)$$

Тогда с учетом соотношений $\Psi_0(x, \mu) \equiv ax^2 - c, \Psi_1(x, \mu) \equiv 0, \Psi_2(x, \mu) \equiv a$, а также выражений (16) из тождеств $\Phi_8 \equiv 0, \dots, \Phi_1 \equiv 0$ в соответствии с (14) последовательно находим

$$\begin{aligned} k &= -\frac{2}{7}, \\ h_6(x, \mu) &= 0, \\ h_5(x, \mu) &= \frac{7}{2a}(ax^2 - c)h_7(x, \mu), \\ h_4(x, \mu) &= 0, \\ h_3(x, \mu) &= \frac{35}{8a^2}(ax^2 - c)^2 h_7(x, \mu), \\ h_2(x, \mu) &= 0, \\ h_1(x, \mu) &= \frac{35}{16a^3}(ax^2 - c)^3 h_7(x, \mu), \\ h_0(x, \mu) &= 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Для функции Φ получаем выражение

$$\Phi_0(x, \mu) = -\frac{5}{8a^3} \mu (ax^2 - c)^4 h_7(x, \mu).$$

Отсюда заключаем, что если функция $h_7(x, \mu)$ является знакопостоянной для всех $x \in R$ и $\mu \neq 0$, то справедливо условие $\Phi_0(x, \mu) \geq 0$ (≤ 0) и полином Ψ вида (17) в соответствии с замечанием 1 является функцией Дюлака – Черкаса системы (15) при выполнении соотношений (18). Таким образом, имеет место

Теорема 4. Система

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = -x + \mu h_7(x, \mu) \left(\frac{35}{16a^3} (ax^2 - c)^3 y + \frac{35}{8a^2} (ax^2 - c)^2 y^3 + \frac{7}{2a} (ax^2 - c) y^5 + y^7 \right) \quad (19)$$

при выполнении условия (17) и знакопостоянстве функции $h_7(x, \mu)$ для всех действительных значений параметра μ имеет не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости. Если предельный цикл существует, то он является устойчивым (неустойчивым) при $\Phi_0 > 0$ ($\Phi_0 < 0$).

Теперь с помощью теоремы 2 докажем существование единственного предельного цикла для системы (19) при $h_7(x, \mu) \equiv 1$. Рассматривая функции

$$p(x, y) = 0, \quad q(x, y) = \frac{35}{16a^3} (ax^2 - c)^3 y + \frac{35}{8a^2} (ax^2 - c)^2 y^3 + \frac{7}{2a} (ax^2 - c) y^5 + y^7,$$

уравнение (5) запишем в виде

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \left(-\frac{35}{16a^2} c^2 r \sin^2 \varphi + \frac{105}{16a^2} c^2 r^5 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi - \frac{105}{16a} cr^5 \cos^4 \varphi \sin^2 \varphi + \right. \\ & \quad \left. + \frac{35}{16} r^7 \cos^6 \varphi \sin^2 \varphi + \frac{35}{8a^2} c^2 r^2 \sin^3 \varphi - \frac{35}{4a} cr^4 \cos^2 \varphi \sin^3 \varphi + \right. \\ & \quad \left. + \frac{35}{8} r^6 \cos^4 \varphi \sin^3 \varphi - \frac{7}{2a} cr^5 \sin^6 \varphi + \frac{7}{2} r^7 \cos^2 \varphi \sin^6 \varphi + r^7 \sin^8 \varphi \right) d\varphi = \\ & = \frac{35\pi r}{1024a^3} (29a^3 r^6 - 88a^2 cr^4 + 48ac^2 r^2 - 64c^3) = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

и условие (6) представим следующим образом:

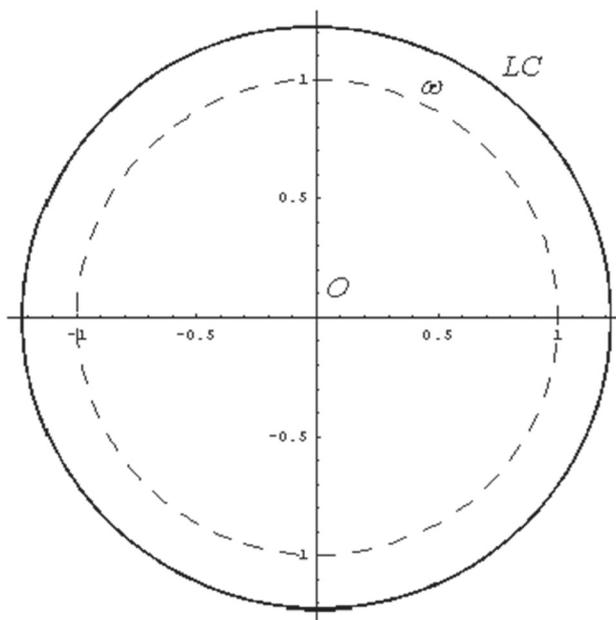
$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \left(-\frac{35c^3}{16a^3} + \frac{105c^2}{16a^2} r^2 \cos^2 \varphi - \frac{105c}{16a} r^4 \cos^4 \varphi + \frac{35}{16} r^6 \cos^6 \varphi + \frac{35c^2}{4a^2} r \sin \varphi - \right. \\ & \quad \left. - \frac{35c}{2a} r^3 \cos^2 \varphi \sin \varphi + \frac{35}{4} r^5 \cos^4 \varphi \sin \varphi - \frac{35c}{2a} r^4 \sin^4 \varphi + \frac{35}{2} r^6 \cos^2 \varphi \sin^4 \varphi + 7r^6 \sin^6 \varphi \right) d\varphi = \\ & = \frac{35\pi}{128a^3} (29a^3 r^6 - 66a^2 cr^4 + 24ac^2 r^2 - 16c^3) \neq 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Уравнение (20) имеет единственный положительный корень

$$r_1 \approx \sqrt{\frac{88c}{77a} + \frac{892c^3 \sqrt{2}}{87a^3 \sqrt{26777 + 87\sqrt{88869}}}} + \frac{2c^3 \sqrt{4(26777 + 87\sqrt{88869})}}{87a},$$

который удовлетворяет неравенству (21). Таким образом, доказана

Теорема 5. Система (19) при $h_7(x, \mu) \equiv 1$, $a, c \in R^+$ и достаточно малых значениях $|\mu| \neq 0$ имеет единственный предельный цикл в фазовой плоскости, который является грубым и стремится к окружности с центром в начале координат радиуса r_1 , когда μ стремится к нулю.



Расположение предельного цикла LC и овала кривой W для системы (19) при $h_7(x, \mu) \equiv 1$, $\mu = 0,1$, $a = 1$, $c = 1$
 Localization of the limit cycle (LC) and the oval of the curve W for system (19) where $h_7(x, \mu) \equiv 1$, $\mu = 0,1$, $a = 1$, $c = 1$

В частном случае для $c = 1$ и $a = 1$ получено $r_1 \approx 1,65054$ при $\mu = 0,1$. Предельный цикл LC системы (19) и овал ω кривой W изображены на рисунке соответственно сплошной и пунктирной линиями.

Аналогично с помощью разработанного способа в случае $n = 9$ доказана
 Теорема 6. Система

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = -x + \mu \left(\frac{315(ax^2 - c)^5}{128a^4} y + \frac{105(ax^2 - c)^4}{16a^3} y^3 + \frac{63(ax^2 - c)^3}{8a^2} y^5 + \right. \\ \left. + \frac{9(ax^2 - c)^2}{2a} y^7 + (ax^2 - c)y^9 \right) \quad (22)$$

при всех действительных значениях параметра μ имеет не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости. Если предельный цикл существует, то он является устойчивым (неустойчивым) при $\mu < 0$ ($\mu > 0$).

Для системы (22) функция Дюлака – Черкаса рассматривалась в виде (17), а соответствующая функция $\Phi_0(x, \mu)$ записывается следующим образом:

$$\Phi_0(x, \mu) = -\frac{35}{64} \mu (ax^2 - c)^6. \quad (23)$$

Очевидно, что условие $\Phi_0(x, \mu) \leq 0$ (≥ 0) будет справедливым при $\mu > 0$ (< 0).

Единственность предельного цикла в конкретных случаях системы (22) доказывается методом Понтрягина, где

$$p(x, y) = 0, \quad q(x, y) = \frac{315(ax^2 - c)^5}{128a^4} y + \frac{105(ax^2 - c)^4}{16a^3} y^3 + \frac{63(ax^2 - c)^3}{8a^2} y^5 + \\ + \frac{9(ax^2 - c)^2}{2a} y^7 + (ax^2 - c)y^9. \quad (24)$$

Используя функции (24), уравнение (5) запишем в виде

$$\frac{105\pi r}{65536a^4}(231a^5r^{10} - 1764a^4cr^8 + 5040a^3c^2r^6 - 7040a^2c^3r^4 + 4992ac^4r^2 - 1536c^5) = 0, \quad (25)$$

и условие (6) представим следующим образом:

$$\frac{315\pi}{16384a^4}(231a^5r^{10} - 1470a^4cr^8 + 3360a^3c^2r^6 - 3520a^2c^3r^4 + 1664ac^4r^2 - 256c^5) \neq 0. \quad (26)$$

Например, уравнение (25) при $a = 1$, $c = 1$, имеет единственный положительный корень $r_1 \approx 1,78633$, который удовлетворяет условию (26). Таким образом, система (22) в этом случае имеет единственный предельный цикл в фазовой плоскости, который является грубым и стремится к окружности с центром в начале координат радиуса $r_1 \approx 1,78633$, когда μ стремится к нулю. Фазовый портрет системы (22) качественно эквивалентен фазовому портрету системы (19), изображенному на рисунке.

Заключение. Таким образом, в настоящей работе разработан подход для выделения систем с возмущенным линейным центром специального вида, имеющих не более одного предельного цикла во всей фазовой плоскости при всех действительных значениях параметра возмущения μ . Для решения поставленной задачи предлагается способ построения функций Дюлака – Черкаса в виде полинома второй степени относительно фазовой переменной y , коэффициенты которого гладко зависят от второй фазовой переменной x и непрерывно – от параметра μ . Построение функции Дюлака – Черкаса основано на редукции вспомогательного полинома $\Phi(x, y, \mu)$ к функции $\Phi_0(x, \mu)$, зависящей только от переменной x и параметра μ . Предложен регулярный способ такой редукции. Представлены примеры выделенных систем, которые имеют единственный предельный цикл во всей фазовой плоскости.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф17М-148).

Acknowledgements. This work was supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Project No. F17M-148).

Список использованных источников

1. Теория бифуркации динамических систем на плоскости / А. А. Андронов [и др.]. – М.: Наука, 1967. – 488 с.
2. Han, M. Normal Forms, Melnikov Functions and Bifurcation of Limit Cycles / M. Han, P. Yu // Appl. Math. Sci. – 2012. – Vol. 181. – P. 401.
3. Куклес, И. С. О некоторых случаях отличия фокуса от центра / И. С. Куклес // Докл. АН СССР. – 1944. – Т. 42, № 5. – С. 208–211.
4. Limit cycles for the Kukles system / H. Zang [et al.] // J. Dynamical and Control Systems. – 2008. – Vol. 14, № 2. – P. 283–298.
5. Гринь, А. А. Функция Дюлака для систем Льенара / А. А. Гринь, Л. А. Черкас // Тр. Ин-та математики НАН Беларуси. – 2000. – Т. 4. – С. 29–38.
6. Черкас, Л. А. О функции Дюлака для системы Куклеса / Л. А. Черкас, А. А. Гринь // Дифференц. уравнения. – 2010. – Т. 46, № 6. – С. 811–819.
7. Grin, A. A. On some classes of limit cycles of planar dynamical systems / A. A. Grin, K. Schneider // Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems Series A: Mathematical Analysis. – 2007. – Vol. 14, № 5. – P. 641–656.
8. Черкас, Л. А. Функция Дюлака полиномиальных автономных систем на плоскости / Л. А. Черкас // Дифференц. уравнения. – 1997. – Т. 33, № 5. – С. 689–699.
9. Черкас, Л. А. Об оценке числа предельных циклов системы Льенара с малым параметром / Л. А. Черкас, О. Н. Мальшева // Дифференц. уравнения. – 2011. – Т. 47, № 2. – С. 225–230.
10. Grin, A. A. On the construction of a class of generalized Kukles systems having at most one limit cycle / A. A. Grin, K. Schneider // J. Math. Analysis and Applications. – 2013. – Vol. 408, № 2. – P. 484–497.
11. Гринь, А. А. О существовании предельного цикла в одном классе обобщенных систем Куклеса / А. А. Гринь, А. В. Кузьмич // Вестн. ГрГУ им. Я. Купалы. Сер. 2, Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2013. – № 3. – С. 33–40.
12. Черкас, Л. А. Конструктивные методы исследования предельных циклов автономных систем второго порядка (численно-алгебраический подход) / Л. А. Черкас, А. А. Гринь, В. И. Булгаков. – Гродно: ГрГУ, 2013. – 489 с.
13. Cherkas, L. A. Dulac-Cherkas functions for generalized Lienard systems / L. A. Cherkas, A. A. Grin, K. Schneider [Electronic resource] // Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations. – 2011. – № 35. – P. 1–23. – Mode of access: <http://www.math.uszged.hu/ejqtde/>

References

1. Andronov A. A., Leontovich E. A., Gordon I. I., Majer A.G. *The theory of bifurcation of dynamical systems in the plane*. Moscow, Nauka Publ., 1967. 488 p. (in Russian).
2. Han M., Yu. P. Normal Forms, Melnikov Functions and Bifurcation of Limit Cycles. *Applied Mathematical Sciences*, 2012, vol. 181, p. 401. Doi: 10.1007/978-1-4471-2918-9
3. Kukles I. S. On some cases of the distinction of focus from the center. *Doklady Akademii nauk SSSR* [Doklady of the Academy of Sciences of the USSR], 1944, vol. 42, no. 5, pp. 208–211 (in Russian).
4. Zang H., Zhang T., Tian Y., Tade M. Limit cycles for the Kukles system. *Journal of Dynamical and Control Systems*, 2008, vol. 14, no. 2, pp. 283–298. Doi: 10.1007/s10883-008-9036-x
5. Grin A. A., Cherkas L. A. Dulac function for Lienard systems. *Trudy Instituta matematiki* [Proceedings of the Institute of Mathematics], 2000, vol. 4, pp. 29–38 (in Russian).
6. Cherkas L. A., Grin A. A. On a Dulac function for the Kukles system. *Differential equations*, 2010, vol. 46, no. 6, pp. 818–826. Doi: 10.1134/s0012266110060066
7. Grin A. A., Schneider K. On some classes of limit cycles of planar dynamical systems. *Dynamics of continuous, discrete and impulsive systems Series A: Mathematical Analysis*, 2007, vol. 14, no. 5, pp. 641–656.
8. Cherkas L. A. Dulac function for polynomial autonomous systems in plane. *Differential equations*, 1997, vol. 33, no. 5, pp. 689–699 (in Russian).
9. Cherkas L. A., Malysheva O. N. How to estimate the number of limit cycles in Lienard systems with a small parameter. *Differential equations*, 2011, vol. 47, no. 2, pp. 224–230. Doi: 10.1134/s001226611102008x
10. Grin A. A., Schneider K. On the construction of a class of generalized Kukles systems having at most one limit cycle. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 2013, vol. 408, no. 2, pp. 484–497. Doi: 10.1016/j.jmaa.2013.05.052
11. Grin A. A., Kuzmich A. V. About existence of a limit cycle in a class of generalized Kukles systems. *Vestnik GrGU im. Ianki Kupaly. Ser. 2. Matematika. Fizika. Informatika, vychislitel'naya tekhnika I upravlenie = Vestnik of Yanka Kupala State University of Grodno. Series 2. Mathematics. Physics. Informatics, Computer Technology and its Control*, 2013, no. 3, pp. 33–40 (in Russian).
12. Cherkas L. A., Grin A. A., Bulgakov V. I. *Constructive methods of investigation of limit cycles of second order autonomous systems (numerical-algebraic approach)*. Grodno, Grodno State University, 2013, 489 p. (in Russian).
13. Cherkas L. A., Grin A. A., Schneider K. Dulac-Cherkas functions for generalized Lienard systems. *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations*, 2011, no. 35, pp. 1–23. Doi: 10.14232/ejqtde.2011.1.35

Информация об авторах

Кузьмич Андрей Викторович – старший преподаватель кафедры фундаментальной и прикладной математики факультета математики и информатики, Гродненский государственный университет им. Я. Купалы (ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: andrei-ivn@mail.ru

Гринь Александр Александрович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математического анализа, дифференциальных уравнений и алгебры факультета математики и информатики, Гродненский государственный университет им. Я. Купалы (ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: grin@grsu.by

Information about the authors

Andrei V. Kuzmich – Senior Lecturer of the Department of Fundamental and Applied Mathematics, Faculty of Mathematics and Informatics, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Ozheshko Str., 230023, Republic of Belarus). E-mail: andrei-ivn@mail.ru

Aliaksandr A. Hryn – D. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Head of the Department of Mathematical Analysis, Differential Equations and Algebra, Faculty of Mathematics and Informatics, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Ozheshko Str., 230023, Republic of Belarus). E-mail: grin@grsu.by

ФИЗИКА
PHYSICS

УДК 530.12

Поступила в редакцию 10.07.2017
Received 10.07.2017

Ю. А. Курочкин

Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

**ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ
В ПРОСТРАНСТВЕ ЛОБАЧЕВСКОГО В ТЕРМИНАХ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ**

Аннотация. Задачи о движении свободной частицы в трехмерном пространстве Лобачевского интерпретируются как рассеяние пространством. Рассмотрены классический и квантово-механический случаи. Дана механическая интерпретация параллельных прямых пространства Лобачевского как траекторий невзаимодействующих материальных точек, вылетевших из точки на бесконечности. В силу свойств параллельных прямых пространства Лобачевского их можно рассматривать как траектории частиц, рассеянных на бесконечно удаленной точке. Введено понятие дифференциальных сечений рассеяния в элемент орисферы для классической и квантово-механической задач. Получено аналитическое выражение для дифференциального сечения в квантово-механической задаче. Для вывода данного выражения использовались решения уравнения Шредингера в орисферических координатах. Отмечается, что часть орисферы, секущая пучок параллельных траекторий, может рассматриваться как модель двумерной плоской вселенной в трехмерном пространстве с кривизной – пространстве Лобачевского.

Ключевые слова: пространство Лобачевского, параллельные прямые, траектории, орисфера, координаты, уравнение Шредингера, рассеяние, сечение рассеяния, модель вселенной

Для цитирования. Курочкин, Ю. А. Интерпретация свободного движения частиц в пространстве Лобачевского в терминах теории рассеяния / Ю. А. Курочкин // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 49–55.

Yu. A. Kurochkin

B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

**INTERPRETATION OF THE FREE MOTION OF PARTICLES
IN THE LOBACHEVSKY SPACE IN THE TERM OF THE SCATTERING THEORY**

Abstract. The problems of the motion of free particles in the three-dimensional Lobachevsky space are interpreted as scattering by space. The classical and quantum-mechanical cases are considered. A mechanical interpretation of parallel straight lines of the Lobachevsky space is given as the trajectories of non-interacting material points emitted from a point at infinity. Due to the properties of parallel lines in the Lobachevsky space, they can be considered as trajectories of particles scattered at an infinitely distant point. The concept of differential scattering cross sections in the horosphere element for the classical and quantum-mechanical problems is introduced. An analytical expression for the differential cross section in the quantum-mechanical problem is obtained. To derive this expression, we used the solutions of the Schrödinger equation in horospherical coordinates. It is noted that some part of a horosphere is a secant beam of parallel trajectories, can be considered as a model of a two-dimensional flat universe in the three-dimensional space with curvature – Lobachevsky space.

Keywords: Lobachevsky space, parallel lines, trajectories, horosphere, coordinates, Schrödinger equation, scattering, cross section, model of universe

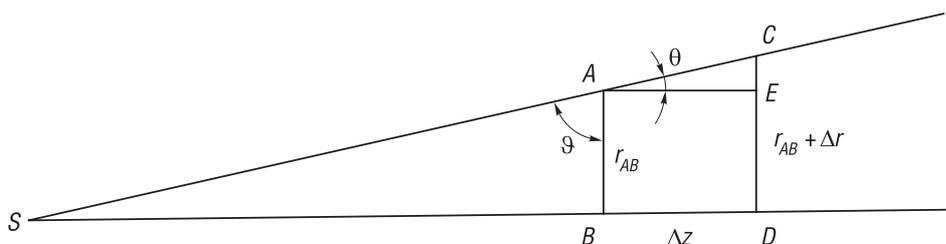
For citation. Kurochkin Yu. A. Interpretation of the free motion of particles in the Lobachevsky space in the term of the scattering theory. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 49–55 (in Russian).

Введение. Как хорошо известно, геодезическим риманова пространства можно дать механическую интерпретацию. Их можно рассматривать как траектории свободно движущихся в этом пространстве материальных точек. Траектории пространства Лобачевского при этом, как отмечено Ж. Адамаром, неустойчивы [1]. Пучок параллельных прямых (геодезических) может интерпретироваться как рассеяние пространством Лобачевского сгустка невзаимодействующих между собой частиц, вылетевших из одной бесконечно удаленной точки.

Квантовая механика материальной точки в пространстве Лобачевского также имеет аналогичные особенности. То есть свободное квантово-механическое движение материальной точки в пространстве Лобачевского можно рассматривать как рассеяние точки самим пространством. Демонстрация описания квантово-механического движения как рассеяния удобно осуществлять на основе использования орисферической системы координат, связанной с орисферой, в данном случае трехмерного пространства Лобачевского [2]. Такой подход делает описание близким к описанию проблемы рассеяния в классическом случае.

Таким образом, задачей настоящей работы является описание классического и квантово-механического движения невзаимодействующих материальных точек в трехмерном пространстве Лобачевского в терминах теории рассеяния. Она также продолжает исследования [3–7] по применению геометрии пространства Лобачевского, учитывающие наличие в данном пространстве таких поверхностей, как орисферы, на которых реализуется геометрия плоскости Евклида, что расширяет возможности для построения физических моделей на основе геометрии Лобачевского.

Классическая задача. Пусть в трехмерном вещественном пространстве Лобачевского из бесконечно удаленной точки (точки на абсолюте) вылетает сгусток невзаимодействующих частиц, движущихся по различным геодезическим. По определению данные геодезические являются параллельными прямыми пространства Лобачевского. Будем считать пучок параллельных, вдоль которых движутся частицы, осесимметричным. В плоскости, проходящей через ось пучка и одну из параллельных из точки данной параллельной прямой на ось пучка (рисунок), опустим перпен-



дикуляр. Угол ϑ – есть угол параллельности, и согласно теореме Лобачевского он связан с длиной перпендикуляра r_{AB} :

$$\cos \vartheta = \operatorname{th} r_{AB}. \quad (1)$$

На рисунке точка S – точка на абсолюте, из которой вылетели частицы. Угол $\angle SAB = \vartheta$ – угол параллельности. Угол $\angle CAE$ между прямой SAC и перпендикуляром к AB назовем углом рассеяния, обозначив его θ . Очевидно, данный угол равен

$$\theta = \frac{\pi}{2} - \vartheta. \quad (2)$$

Отметим, что перпендикуляр AE к отрезку AB в точке A не является прямой, параллельной BD . Тогда с учетом (2) формула (1) переписывается как

$$\sin \theta = \operatorname{th} r_{AB}. \quad (3)$$

В определенном смысле выражение (3) заменяет обычно используемую связь между прицельным параметром и углом рассеяния.

Если через некоторое сечение пучка орисферой-поверхностью, перпендикулярной прямой пучка, прямые (геодезические), по которым движутся частицы, проходят так, что плотность точек пересечения данных прямых с орисферой постоянна, то она в силу однородности пространства также будет постоянна в любом последующем сечении орисферой, хотя и отлична от плотности в предыдущем сечении. Здесь положительное направление вдоль оси пучка выбрано к точке пересечения (точке, из которой вылетают частицы-точки на абсолюте) прямых. При таком выборе направления поверхностная плотность будет уменьшаться при переходе к следующему сечению, что и будет характеризовать расхождение траекторий (рассеяние). Рассмотрим, как будет меняться плотность осесимметричного пучка по мере движения в сторону от источника.

Плотность на некотором сечении

$$n = \frac{N_0}{S_{AB}}, \quad (4)$$

где S_{AB} – площадь сечения орисферой, в которой лежат точки A и B в орисферических координатах, задаваемых в трехмерном пространстве Лобачевского метрическим элементом [7]:

$$dl^2 = \rho^2 [e^{-2z} (dr^2 + r^2 d\varphi^2) + dz^2], \quad (5)$$

который в плоском пределе $\rho \rightarrow \infty$, $\rho r \rightarrow r$, $\rho z \rightarrow z$, переходит в метрический элемент трехмерного пространства Евклида в цилиндрических координатах. Принимается естественное предположение, что число частиц неизменно и равно N_0 . Поскольку бесконечно малый элемент площадки на орисфере, соответствующий элементу (5), равен

$$dS = \rho^2 e^{-2z} r dr d\varphi, \quad (6)$$

где ρ – радиус кривизны пространства Лобачевского, то, соответственно, площадь конечного кругового сечения на орисфере равна

$$\pi \rho^2 e^{-2z} r^2 = \pi R^2, \quad (7)$$

с

$$R = e^{-z} \rho r. \quad (8)$$

Здесь учтено, что для каждого фиксированного сечения z постоянно, ρ также постоянно, поэтому формула (7) площади круга на орисфере совпадает с формулой площади круга на евклидовой плоскости, как и должно быть.

Площадь кольца, на которую увеличилась площадь сечения при изменении радиуса R в результате сдвига dR вдоль оси пучка, по которой ориентирована ось z на бесконечно малое до $R' = R + dR$,

$$d\sigma = \pi(R'^2 - R^2) = \pi(R' + R)(R' - R) = 2\pi R dR.$$

Число пересечений данной площадки параллельными прямыми равно

$$dN = n d\sigma = 2N_0 \frac{dR}{R}. \quad (9)$$

В кольцо, заключенное между радиусами R_0 и R , попадает число частиц, равное

$$N = N_0 \ln \frac{R}{R_0}. \quad (10)$$

Если сечение радиуса R является сечением, полученным в результате сдвига на Δz вдоль оси z сечения радиуса R в отрицательном направлении, то, согласно (8),

$$N = -N_0 \Delta z. \quad (11)$$

Знак «минус» в формуле (11) указывает на уменьшение числа пересечений прямых в диске радиуса R_0 при его сдвиге на Δz и переходе этих точек пересечения в площадь кольца, на которую увеличилась площадь сечения при сдвиге.

Можно ввести понятие дифференциального сечения для рассмотренного выше классического случая. Учтем, что рассеяние происходит в элемент орисферы площадью, определяемой (6), и примем стандартные определения

$$dN = j_{in} d\sigma = n_{in} v d\sigma, \quad dN = \pi \rho^2 n_s v e^{-2z} r dr d\varphi = \pi \rho^2 j_s e^{-2z} r dr d\varphi. \quad (12)$$

Приравняв оба dN , получим формулу для дифференциального сечения рассеяния по аналогии с определением дифференциального сечения в теории рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{\pi r dr d\varphi} = \rho^2 \frac{j_s}{j_{in}} e^{-2z} = \rho^2 \frac{n_s}{n_{in}} e^{-2z}. \quad (13)$$

Здесь $j_{in} = n_{in}v$ и $j_s = n_s v$ – соответственно плотность потока, падающего и рассеянного, n_{in}, n_s – поверхностная плотность точек пересечения прямых, пересекающих орисферы, v – скорость движения частиц вдоль геодезических. Отметим, что скорость v в известном смысле носит условный характер и введена для того, чтобы определение сечения (13) совпадало со стандартным.

Плоский предел в (13) осуществляется для выражения

$$e^{2\Delta z} \frac{d\sigma}{\pi \rho^2 r dr d\varphi} = \frac{n_s}{n_{in}}, \quad (14)$$

когда при $\rho \rightarrow \infty$, $e^{-\Delta z} \rho r \rightarrow r'$ переходит в r' цилиндрической системы координат трехмерного евклидова пространства, φ при этом остается неизменным, а $n_{in} = n_s$. Геометрически плоский предел означает, что конус геодезических пространства Лобачевского с вершиной на абсолюте переходит в цилиндр трехмерного евклидова пространства, и все сечения имеют одинаковую площадь, а следовательно, поверхностные плотности на них одинаковы.

Выше представлена качественная, кинематическая картина. Для динамической интерпретации эффекта расходимости траекторий рассмотрим описание свободной частицы в орисферических координатах на основе нерелятивистского уравнения Гамильтона – Якоби. Общий вид данного уравнения в криволинейных координатах пространственной части

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2m} g^{ik} \frac{\partial W}{\partial x^i} \frac{\partial W}{\partial x^k}, \quad (15)$$

где W – действие частицы, m – ее масса, g^{ik} – тензор, обратный метрическому тензору трехмерного пространства, $(i, k = 1, 2, 3)$. Отметим, что использование релятивистского уравнения Гамильтона – Якоби в данном случае не вносит ничего нового.

В орисферических координатах уравнение (15) примет вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{2m\rho^2} \left\{ e^{2z} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial W}{\partial \varphi} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right\}. \quad (16)$$

Оно допускает разделение переменных и имеет решение

$$W = k^2 t + M\varphi + \int dr \sqrt{k_{\perp}^2 - \frac{M^2}{r^2}} + \int dz \sqrt{k^2 - e^{2z} k_{\perp}^2}, \quad (17)$$

которое после дифференцирования по переменной разделения k_{\perp} приводит к связи переменных r и z при приравнении к нулю возникающих констант интегрирования:

$$\sqrt{\frac{k^2}{k_{\perp}^2} - e^{2z}} = \sqrt{r^2 - \frac{M^2}{k_{\perp}^2}}, \quad (18)$$

где $k^2 = 2mE\rho^2$.

Возведя в квадрат выражение (18), получим зависимость r^2 от z :

$$r^2 = \frac{k^2}{k_{\perp}^2} + \frac{M^2}{k_{\perp}^2} - e^{2z}. \quad (19)$$

Из выражения (19) следует, что качественное кинематическое рассмотрение, проведенное выше, как и следовало бы ожидать, соответствует предельным случаям в динамическом описании на основе уравнения Гамильтона – Якоби (16). Действительно, точке на бесконечности, при $r^2 = 0$, из которой вылетают частицы, отвечает предельный случай, когда $z \rightarrow \infty$, и это возможно только тогда, когда $k_{\perp}^2 \rightarrow 0$, что интуитивно ожидаемо. При этом, когда $k_{\perp}^2 \rightarrow 0$, при $z \rightarrow -\infty$, $r^2 \rightarrow \infty$, что так же соответствует вышеприведенному чисто кинематическому рассмотрению.

Квантово-механическая задача. Рассмотрим движение свободной квантово-механической частицы в трехмерном пространстве Лобачевского как рассеяние. Для этого будем данный процесс описывать с помощью того же общего определения сечения (13). В данном случае плотность рассеянного тока определяется согласно общей формуле

$$j^a_s = \frac{i\hbar}{2m\rho} (\psi^* \nabla^a \psi - \psi \nabla^a \psi^*) \quad (20)$$

для волновой функции, записанной в орисферических координатах ($a = 1, 2, 3$). Выражение для плотности потока падающей плоской (не рассеянной) волны $\exp(-ikz)$, рассчитанное по формуле (20), равно

$$j^a = \left(0, 0, \frac{\hbar k}{m\rho} \right). \quad (21)$$

Плотность потока через секущую пучок орисферу определяется третьей (z -й) компонентой

$$j^3_s = \frac{i\hbar}{2m\rho} (\psi^* \nabla^3 \psi - \psi \nabla^3 \psi^*). \quad (22)$$

Уравнение Шредингера в орисферических координатах трехмерного пространства Лобачевского, задаваемых бесконечно малым интервалом (5), имеет вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi,$$

где гамильтониан выражается как

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \left[e^{2z} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + e^{2z} \frac{\partial}{\partial z} e^{-2z} \frac{\partial}{\partial z} - 1 \right]. \quad (23)$$

Будем рассматривать стационарную задачу рассеяния, описываемую уравнением Шредингера

$$H \psi = E \psi. \quad (24)$$

Подставляя выражение для гамильтониана (23), получим уравнение

$$\left[e^{2z} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + e^{2z} \frac{\partial}{\partial z} e^{-2z} \frac{\partial}{\partial z} - 1 \right] \psi(r, \varphi, z) = k^2 \psi(r, \varphi, z), \quad (25)$$

где $k^2 = -\frac{2mE\rho^2}{\hbar^2}$. Отметим, что введенная здесь k^2 отличается от аналогичной величины в классической задаче знаком и делителем \hbar^2 .

Уравнение (25) допускает разделение переменных так, что

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \chi(r, \varphi) = k_{\perp}^2 \chi(r, \varphi), \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} e^{-2z} \frac{\partial}{\partial z} w(z) = \left[(k^2 - 1) e^{-2z} - k_{\perp}^2 \right] w(z). \quad (27)$$

Здесь введены обозначения $\psi(r, \varphi, z) = \chi(r, \varphi) w(z)$.

Учитывая равенство нулю потока через боковые поверхности, найдем плотность потока через секущую орисферу, которая совпадает с z – компонентой плотности потока и, следовательно, связана с решением уравнения (27). Данное утверждение следует из определения градиента в орисферических координатах (5).

Уравнение (27) для наших целей удобно представить в следующем виде:

$$\frac{d^2 w}{dz^2} - 2 \frac{dw}{dz} - (k^2 - 1)w = -k_{\perp}^2 e^{2z} w, \quad (28)$$

или в результате стандартного преобразования, после исключения первой производной,

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - k^2 \right) \varphi = -k_{\perp}^2 e^{2z} \varphi. \quad (29)$$

Решение уравнения (29) имеет вид $K_{i\sigma}(k_{\perp} e^z)$, где $K_{i\sigma}$ – функция Макдональда, определенная при любых комплексных i , в частности, чисто мнимых значениях индекса $i\sigma = \sqrt{k^2}$, $\sigma^* = \sigma$.

Плотность потока, рассеянного в орисферу, рассчитанная по формуле (20) для данного конкретного решения, равна

$$j_s^3 = \frac{i\hbar k_{\perp} e^z}{4m\rho} \left(K_{i\sigma} K_{i\sigma-1}^* + K_{i\sigma} K_{i\sigma+1}^* - K_{i\sigma}^* K_{i\sigma-1} - K_{i\sigma}^* K_{i\sigma+1} \right),$$

соответственно дифференциальное сечение имеет вид

$$e^{2z} \frac{d\sigma}{\pi\rho^2 r dr d\varphi} = \frac{2m\rho j_s^3}{\hbar k} = \frac{ik_{\perp} e^z}{2k} \left(K_{i\sigma} K_{i\sigma-1}^* + K_{i\sigma} K_{i\sigma+1}^* - K_{i\sigma}^* K_{i\sigma-1} - K_{i\sigma}^* K_{i\sigma+1} \right). \quad (30)$$

Заметим, что выражение (30) обращается в нуль в пределе плоского пространства, когда $\rho \rightarrow \infty, k^2 \rightarrow -\infty, \sigma \rightarrow \infty$. Для обоснования сказанного воспользуемся интегральным представлением $K_{i\sigma}$ (см. [8])

$$K_{i\sigma}(w) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-wcht+i\sigma t} dt, \quad K_{i\sigma\pm 1}(w) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-wcht+(i\sigma\pm 1)t} dt. \quad (31)$$

Каждый из интегралов (31) есть преобразование Фурье, в которых $w = k_{\perp} e^z$ выступает в роли параметра. Воспользуемся методом оценки таких интегралов при $\sigma \rightarrow \infty$, который дан, например, в [9], и сводится к повторному взятию интегралов по частям. Для первого из интегралов (31), полученных таким образом, имеем

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_{-l}^l e^{-wcht+i\sigma t} dt = \lim_{l \rightarrow \infty} e^{-wchl} \frac{e^{i\sigma l}}{2i\sigma} \Big|_{-l}^l + O\left(\frac{1}{\sigma^2}\right) = \lim_{l \rightarrow \infty} e^{-wchl} \frac{\sin \sigma l}{2i\sigma} + O\left(\frac{1}{\sigma^2}\right). \quad (32)$$

Как видно из выражения (32), члены σ^{-1} экспоненциально убывают при всех конечных значениях z безотносительно к величине σ , и только при значениях $z \rightarrow -\infty$ для данного члена существенно значение кривизны. Легко проверить, что для производных функции Макдональда, которые представляют собой комбинации, пропорциональные $K_{i\sigma-1} + K_{i\sigma+1}$, ситуация аналогична. Таким образом, можно ожидать, что эффекты рассеяния, определяемые формулой (30), проявляются в квантовом случае как высшие порядки в разложениях по кривизне.

Заключение. В данной работе задачи классической и квантовой механики о движении свободной материальной точки в трехмерном пространстве Лобачевского рассмотрены как задачи о рассеянии. Для этого использовались представления об орисферах и орисферические координаты. В случае классической задачи сечение осесимметричного пучка орисферой с меняющейся в зависимости от переменной z площадью можно рассматривать как модель эволюции двумерной «вселенной». Роль последней исполняет орисферическое сечение пучка параллельных геодезических при различных значениях z . Таким образом, переменная z исполняет роль «времени».

Дальнейший анализ и сравнение классического и квантового случаев был бы полезен для формирования более точного представления о роли сингулярности как исходной точки эволюции системы в каждом из рассмотренных случаев.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф16-044).

Автор выражает благодарность профессору Е. А. Толкачеву за полезные советы и участникам семинара лаборатории теоретической физики Института физики НАН Беларуси за плодотворное обсуждение работы.

Acknowledgements. This work was supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Project No. F 16-044).

The author would like to thank Professor E.A. Tolkachev for useful advice and participants in the seminar of the Laboratory of Theoretical Physics of the B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus and for fruitful discussions of the work.

Список использованных источников

1. Адамар, Ж. Неевклидова геометрия в теории автоморфных функций / Ж. Адамар. – Москва; Ленинград: ГИТТЛ-(1951). – 138 с.
2. Олевский, М. Н. Триортогональные системы в пространствах постоянной кривизны, в которых уравнение $\Delta_2 U + \lambda U = 0$ допускает полное разделение переменных // *Мат. сб.* – 1950. – Т. 27. – С. 379–426.
3. Курочкин, Ю. А. Когерентные состояния на орисфере пространства Лобачевского / Ю. А. Курочкин, И. Ю. Рыбак, Д. В. Шелковий // *Докл. Нац. акад. наук Беларуси.* – 2014. – Т. 58, № 5. – С. 44–48.
4. Kurochkin, Yu. Coherent states on horospheric three-dimensional Lobachevsky space // Yu. Kurochkin, I. Rybak, Dz. Shoukavy // *J. Math. Phys.* – 2016. – Vol. 57, №. 8. – P. 082111.
5. Hadron as Coherent State on the Horosphere of the Lobachevsky Momentum Space / Y. Kurochkin [et al.] // *Physics of the Particles and Nuclei Letters.* – 2016. – Vol. 13, №.3. – P. 285–288.
6. Овсюк, Е. М. Точно решаемые задачи квантовой механики и классической теории поля в пространствах с неевклидовой геометрией / Е. М. Овсюк. – Минск: РИВШ, 2013. – 406 с.
7. Овсюк, Е. М. О моделировании потенциального барьера в теории Шредингера геометрией пространства Лобачевского / Е. М. Овсюк, О. В. Веко // *Вестн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка.* – 2011. – № 2. – С. 30–37.
8. Виленкин, Н. Я. Специальные функции и теория представлений групп / Н. Я. Виленкин. – М.: Наука. 1965. – 588 с.
9. Мигдал, А. Б. Качественные методы в квантовой теории / А. Б. Мигдал. – М.: Наука, 1975. – 335 с.

References

1. Hadamard J. *Non Euclidean Geometry in the theory of the automorphic functions.* Moskowa, Leningrad, state publishing house of technical literature, 1951. 132 p. (in Russian).
2. Olevskii M. N. Triorthogonal systems in spaces of constant curvature in which the equation $\Delta_2 u + \lambda u = 0$ allows a complete separation of variables. *Matematicheskii Sbornik = Sbornik: Mathematics*, 1950, vol. 27, pp. 379–426 (in Russian).
3. Kurochkin Yu. A., Rybak I. Yu., Shelkovyi D. V. Coherent states on horospheric three-dimensional Lobachevsky space. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2014, vol. 58, no 5, pp. 44–48 (in Russian).
4. Kurochkin Yu. A., Rybak I. Yu., Shoukavy D. V. Coherent states on horospheric three-dimensional Lobachevsky space. *Journal of Mathematical Physics*, 2016, vol. 57, no. 8, p. 082111. Doi: 10.1063/1.4960474
5. Kurochkin Y, Kulchitsky Y., Harkusha S., Russakovich N. Hadron as Coherent State on the Horosphere of the Lobachevsky Momentum Space. *Physics of the Particles and Nuclei Letters*, 2016, vol. 13, no. 3, pp. 285–288. Doi: 10.1134/s1547477116030158
6. Ovsyuk E. M. *Exactly solved problems quantum mechanics and classical theory of the field in space with non-Euclidean geometry.* Minsk, Republican Institute of Higher Education, 2013, 406 p. (in Russian).
7. Ovsyuk E. M., Veco O. V. About modeling of the potential barrier in the Shredinger theory by Lobachevsky space geometry. *Vestnic Brestskogo universiteta. Seriya 4, Fizika. Matematika = Brest University Herald. Seriya 4 Physics. Mathematics*, 2011, no. 2, pp. 30–37 (in Russian).
8. Vilenkin N. Ya. *Special functions and theory of the group representations.* Moscow, Nauka Publ., 1965. 588 p. (in Russian).
9. Migdal A. B. *Quality methods in quantum theory.* Moscow, Nauka Publ., 1975, 335 p. (in Russian).

Информация об авторе

Курочкин Юрий Андреевич – доктор физико-математических наук, заведующий центром «Теоретическая физика» Института физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: yukuroch@dragon.bas-net.by

Information about the author

Yurii A. Kurochkin – D. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Center of Theoretical Physics, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yukuroch@dragon.bas-net.by

О. В. Веко¹, Я. А. Войнова¹, Е. М. Овсиюк², В. М. Редьков¹

¹*Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

²*Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина, Мозырь, Беларусь*

ЧАСТИЦА КОКСА ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ: АНАЛИЗ В ПРОСТРАНСТВЕ ЛОБАЧЕВСКОГО

Аннотация. Исследовано нерелятивистское уравнение Шредингера для скалярной частицы Кокса с внутренней структурой в присутствии магнитного поля на фоне пространства Лобачевского. Проведено разделение переменных. Уравнение, описывающее движение частицы вдоль оси z , оказывается существенно более сложным, чем при рассмотрении частицы Кокса в пространстве Минковского. Форма графика эффективной потенциальной функции свидетельствует о том, что здесь имеем ситуацию сложного потенциального барьера с необходимостью анализировать прохождение частицы через него. Уравнение приводится к уравнению с шестью регулярными особыми точками. В специально выбранных координатах физическим бесконечностям $z = \pm \infty$ соответствуют особые точки 0 и 1 найденного уравнения. Решения этого уравнения построены в виде степенных рядов, сходимость которых исследована методом Пуанкаре – Перрона. Ряды сходятся во всей физической области переменной $z \in (-\infty, +\infty)$. При рассмотрении обычной частицы в магнитном поле в пространстве Лобачевского возникает более простая задача, также с туннельным эффектом через потенциальный барьер, решаемая точно в терминах гипергеометрических функций.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, спин 0, внутренняя структура частицы Кокса, пространство Лобачевского, магнитное поле, разделение переменных, точные решения, метод Пуанкаре – Перрона

Для цитирования. Частица Кокса во внешнем магнитном поле: анализ в пространстве Лобачевского / О. В. Веко [и др.] // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 56–65.

O. V. Veko¹, Ya. A. Voynova¹, E. M. Ovsyuk², V. M. Red'kov¹

¹*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

²*Mozyr State Pedagogical University named after I. P. Shamyakin, Mozur, Belarus*

COX PARTICLE IN THE APPLIED MAGNETIC FIELD: ANALYSIS IN LOBACHEVSKY SPACE

Abstract. The generalized Schrödinger equation for a scalar Cox particle is studied in the presence of a magnetic field on the background of Lobachevsky space. Separation of variables is performed. An equation describing the particle motion along the z axis appears to be much more complex than that when describing the Cox particle in Minkowski space. The form of the effective potential curve says that we have a quantum-mechanical problem of tunneling type. The derived equation has 6 regular singular points. Singular points 0 and 1 of the derived equation correspond to the physical domains $z = \pm\infty$. The solutions of the equation are constructed with the help of power series. Convergence of the series is examined by the Poincaré – Perrone method. These series are convergent within the whole physical domain $z \in (-\infty, +\infty)$. When considering an ordinary particle in Lobachevsky space, a simpler problem of tunneling type arises, which is exactly solved in terms of hypergeometric functions.

Keywords: Schrödinger equation, spin zero, intrinsic structure of the Cox particle, Lobachevsky space, magnetic field, separation of variables, tunneling effect, exact solutions, Poincaré – Perrone method

For citation. Veko O. V., Voynova Ya. A., Ovsyuk E. M., Red'kov V. M. Cox particle in the applied magnetic field: analysis in Lobachevsky space. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 56–65 (in Russian).

Введение. В Коксом была предложена [1] обобщенная релятивистская 20-компонентная модель для скалярной частицы со спином нуль. В присутствии электромагнитного поля волновое уравнение с расширенным набором представлений группы Лоренца после исключения вспомогательных компонент приводит к уравнению для минимального набора компонент, которое модифицировано дополнительным членом взаимодействия с внешним электромагнитным полем. Это дополнительное взаимодействие обусловлено некоторой электромагнитной внутренней структурой, явно проявляющейся во внешних полях. Последняя может быть соотнесена с известным дарвиновским членом в нерелятивистском уравнении Шредингера [2].

В работах [3–8] исследовалось квантово-механическое поведение частицы Кокса во внешних магнитном и электрическом полях в пространствах с неевклидовой геометрией: моделях Лобачевского и Римана. В настоящей работе мы дополнительно исследуем нерелятивистскую частицу Кокса во внешнем магнитном поле на фоне геометрии пространства Лобачевского. После разделения переменных в обобщенном уравнении Шредингера основное внимание уделено построению возможных решений уравнения по переменной z . Здесь существенно влияние геометрии пространства Лобачевского, которое наиболее заметно для больших масштабов расстояния.

В специальной системе координат цилиндрического типа в пространстве Лобачевского аналог однородного магнитного поля задается равенствами (используем безразмерные координаты):

$$\begin{aligned} dS^2 &= c^2 dt^2 - \text{ch}^2 z (dr^2 + \text{sh}^2 r d\varphi^2) + dz^2, \\ \sqrt{-g} &= \rho^3 \text{sh} r \text{ch}^2 z, \quad A_\varphi = -B\rho^2 (\text{ch} r - 1), \quad F_{r\varphi} = -B\rho \text{sh} r, \\ B_3 &= -B\rho \text{sh} r, \quad B^3 = -\frac{B}{\rho \text{sh} r \text{ch}^4 z}, \quad B_i B^i = B^2 \text{ch}^{-4} z. \end{aligned} \quad (1)$$

Исходим из представления обобщенного уравнения Шредингера [4–6]. Ниже используем обозначения $eB\rho^2 / \hbar c = b$, $\gamma \text{ch}^{-2} z = \gamma(z)$, $\gamma = eB\Gamma$; e – заряд частицы; параметр Γ характеризует внутреннюю структуру частицы Кокса. Для разделения переменных применим подстановку

$$\Psi = e^{-iEt/\hbar} e^{im\varphi} Z(z)R(r), \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar^2 / 2M\rho^2}; \quad (2)$$

в результате получим уравнение [7]

$$\left[\frac{\text{ch}^{-2} z}{1 - \gamma^2(z)} \left(\partial_r^2 + \frac{\text{ch} r}{\text{sh} r} \partial_r - \frac{[m - b(\text{ch} r - 1)]^2}{\text{sh}^2 r} + b\gamma(z) \right) + \varepsilon + \left(\partial_z + 2 \frac{\text{sh} z}{\text{ch} z} \right) \partial_z \right] R(r)Z(z) = 0; \quad (3)$$

в нем переменные разделяются:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\text{ch} r}{\text{sh} r} \frac{d}{dr} - \frac{[m - b(\text{ch} r - 1)]^2}{\text{sh}^2 r} + \Lambda \right) R = 0, \quad (4)$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + 2 \frac{\text{sh} z}{\text{ch} z} \frac{d}{dz} + \varepsilon + \frac{b\gamma - \Lambda \text{ch}^2 z}{\text{ch}^4 z - \gamma^2} \right) Z = 0. \quad (5)$$

Решения радиального уравнения. После замены переменной в уравнении (4)

$$\text{ch} r - 1 = -2y, \quad y = -\text{sh}^2 \frac{r}{2} \in (-\infty, 0] \quad (6)$$

приходим к следующему (для определенности, пусть $b = -B$, $B > 0$):

$$\left[y(1-y) \frac{d^2}{dy^2} + (1-2y) \frac{d}{dy} - \frac{1}{4} \left(\frac{m^2}{y} - 4B^2 + \frac{(m-2B)^2}{1-y} \right) - \Lambda \right] R = 0.$$

Используя подстановку $R = y^a (1-y)^b F$ при $a = \pm m/2$, $b = \pm(m-2B)/2$, получаем уравнение гипергеометрического типа. Решения таковы [7] (связанным состояниям отвечают положительные значения параметра a и отрицательные значения параметра b):

$$R = \left(-\text{sh} \frac{r}{2} \right)^{|m|} \left(\text{ch} \frac{r}{2} \right)^{-|m-2B|} F \left(\alpha, \beta, \gamma, -\text{sh}^2 \frac{r}{2} \right), \quad (7)$$

где α и β определены выражениями

$$a = +\frac{|m|}{2}, \quad b = -\frac{|m-2B|}{2}, \quad \gamma = 2a + 1 = +|m| + 1,$$

$$\alpha = a + b + \frac{1}{2} - \sqrt{B^2 + \frac{1}{4}} - \Lambda, \quad \beta = a + b + \frac{1}{2} + \sqrt{B^2 + \frac{1}{4}} - \Lambda. \quad (8)$$

Детальный анализ показывает [7], что здесь имеем конечное число дискретных уровней энергии, которые описываются соотношениями

$$m < 2B, \quad \frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \leq B, \quad n = 0, 1, \dots, N_B, \\ \Lambda - 1/4 = 2B \left(\frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \right) - \left(\frac{m + |m|}{2} + n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (9)$$

В обычных единицах формулы выглядят так:

$$\Lambda - \frac{1}{4} = \rho^2 \Lambda_0 - \frac{1}{4}, \quad \lim_{\rho \rightarrow \infty} \Lambda_0 = \frac{2M}{\hbar^2} \left(E - \frac{P^2}{2M} \right), \quad m < 2B, \quad m + n + 1/2 \leq \frac{eB}{\hbar c} \rho^2, \\ \rho^2 \Lambda_0 - \frac{1}{4} = 2 \frac{eB}{\hbar c} \rho^2 \left(\frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \right) - \left(\frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \right)^2, \quad n = 0, 1, \dots, N_B.$$

Отсюда в пределе исчезновения кривизны получаем известный результат:

$$E - \frac{P^2}{2M} = \frac{eB\hbar}{Mc} \left(\frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \right). \quad (10)$$

Из уравнения (9) следует $\Lambda - 1/4 = 2BN - N^2$, $n = 0, 1, \dots, N_B$, где

$$\frac{1}{2} \leq N = \frac{m + |m|}{2} + n + 1/2 \leq |B| = b;$$

следовательно, параметр Λ подчиняется ограничению

$$b \leq \Lambda \leq b^2 + \frac{1}{4}. \quad (11)$$

Анализ уравнения в переменной z . В уравнении (5) исключим член с первой производной подстановкой $Z = \text{ch}^{-1} z f(z)$:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \varepsilon - 1 - U(z) \right) f(z) = 0, \quad U(z) = -\frac{b\gamma - \Lambda \text{ch}^2 z}{\text{ch}^4 z - \gamma^2}. \quad (12)$$

Полученное уравнение (12) можно рассматривать как одномерное шредингеровское с эффективным потенциалом $U(z)$. Соответствующая сила определяется равенством

$$F_z = -\frac{dU}{dz} = 2 \text{ch} z \text{sh} z \frac{\Lambda \text{ch}^4 z - 2b\gamma \text{ch}^2 z + \gamma^2 \Lambda}{(\text{ch}^4 z - \gamma^2)^2}. \quad (13)$$

Найдем точки локального экстремума потенциала: это $z = 0$ и два корня уравнения:

$$(\text{ch}^2 z)_{1,2} = \frac{b}{\Lambda} \gamma \pm \sqrt{\left(\frac{b^2}{\Lambda^2} - 1 \right) \gamma^2}. \quad (14)$$

Как показано выше, при рассмотрении связанных состояний по радиальной переменной будет всегда выполняться неравенство $\Lambda^2 > b^2$. Это означает, что квадратные корни в (14) являются комплексными числами. Для частицы Кокса имеем ситуацию сложного потенциального барьера с необходимостью анализировать прохождение частицы через него.

Вводим переменную (в ней физически разные точки $z = \pm\infty$ помещаем в разные особые точки дифференциального уравнения)

$$x = \frac{1-z}{2}, \quad z \rightarrow -\infty \rightarrow x \rightarrow 1; \quad z \rightarrow +\infty \rightarrow x \rightarrow 0;$$

уравнение преобразуется к виду

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{1-x} \right) \frac{d}{dx} + \frac{\varepsilon-1}{4x^2} + \frac{1-2\Lambda+\varepsilon-1}{2x} + \frac{\varepsilon-1}{4(1-x)^2} + \frac{\varepsilon-1-2\Lambda}{2(1-x)} + \frac{2\beta+2\Lambda\gamma}{1+4\gamma x(1-x)} + \frac{2\beta-2\Lambda\gamma}{1-4\gamma x(1-x)} \right] f = 0. \quad (15)$$

В переменной $X = x^{-1}$ уравнение (15) в окрестности точки $x = 0$ выглядит так:

$$\left(\frac{d^2}{dX^2} - \frac{d}{dX} - \frac{(\Lambda\gamma+\beta)(4\gamma+1)}{8\gamma^2} + \Lambda + \frac{\varepsilon-1}{4} + \frac{(\Lambda\gamma-\beta)(-4\gamma+1)}{8\gamma^2} \right) f = 0,$$

т. е. $x = \infty$ – обычная (несингулярная) точка. Два квадратичных выражения в знаменателях уравнения (15) дают четыре регулярные особые точки:

$$\frac{1}{1+4\gamma x(1-x)} = -\frac{1}{4\gamma} \frac{1}{(x-x_1)(x-x_2)}, \quad x_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+\gamma^{-1}}}{2};$$

$$\frac{1}{1-4\gamma x(1-x)} = +\frac{1}{4\gamma} \frac{1}{(x-x_3)(x-x_4)}, \quad x_{3,4} = \frac{1 \pm \sqrt{1-\gamma^{-1}}}{2}.$$

Уравнение (15) можно представить в виде

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{1-x} \right) \frac{d}{dx} + \frac{\varepsilon-1}{4x^2} + \frac{-2\Lambda+\varepsilon-1}{2x} + \frac{\varepsilon-1}{4(1-x)^2} + \frac{\varepsilon-1-2\Lambda}{2(1-x)} - \frac{2\beta+2\Lambda\gamma}{4\gamma(x_1-x_2)} \left(\frac{1}{x-x_1} - \frac{1}{x-x_2} \right) + \frac{2\beta-2\Lambda\gamma}{4\gamma(x_3-x_4)} \left(\frac{1}{x-x_3} - \frac{1}{x-x_4} \right) \right] f = 0. \quad (16)$$

Таким образом, имеем уравнение с шестью регулярными особыми точками:

$$0, \quad 1, \quad x_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+\gamma^{-1}}}{2}, \quad x_{3,4} = \frac{1 \pm \sqrt{1-\gamma^{-1}}}{2}. \quad (17)$$

С учетом того, что физический интервал изменения переменной – это

$$z \in (-\infty, +\infty) \rightarrow x \in (0, 1), \quad (18)$$

ввиду малости параметра γ заключаем, что четыре особые точки x_1, x_2, x_3, x_4 (две вещественные и две комплексные) лежат далеко от точек $x = 0, x = 1$, и можно считать, что эти четыре точки не попадают внутрь кругов радиуса 1 около физических особенностей $x = 0$ и $x = 1$.

Находим поведение решений около двух особых точек:

$$x \rightarrow 0, \quad \left(\frac{d^2}{x^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \frac{(\varepsilon-1)/4}{x^2} \right) f = 0, \quad f = x^A, \quad A = \pm \frac{i\sqrt{\varepsilon-1}}{2};$$

$$x \rightarrow 1, \quad \left(\frac{d^2}{x^2} + \frac{1}{x-1} \frac{d}{dx} \frac{(\varepsilon-1)/4}{(x-1)^2} \right) f = 0, \quad f = x^B, \quad B = \pm \frac{i\sqrt{\varepsilon-1}}{2}.$$

Найдем поведение решений около особых точек x_1, x_2, x_3, x_4 . Они однотипны, поэтому достаточно рассмотреть одну точку:

$$f'' + \alpha f' + \frac{\beta}{x-x_1} f = 0, \quad f = (x-x_1)^\rho;$$

для индекса ρ получаем алгебраическое уравнение с простыми решениями:

$$\rho(\rho - 1) = 0 \Rightarrow \rho = 0, 1.$$

Для уравнения (15) ищем решения Фробениуса около точки $x = 0$ в виде $f = x^A(x-1)^B F(x)$. Накладывая уже известные ограничения на параметры A и B :

$$A = \pm \frac{i\sqrt{\varepsilon-1}}{2}, \quad B = \pm \frac{i\sqrt{\varepsilon-1}}{2}, \quad (19)$$

и умножая уравнение на выражение

$$x(x-1) \cdot [1 - 4\gamma x(x-1)] \cdot [1 + 4\gamma x(x-1)],$$

получаем уравнение в виде, пригодном для построения решений в виде степенных рядов:

$$\begin{aligned} & x(x-1) \left[1 - 16\gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] \frac{d^2 F}{dx^2} + \\ & + \left[1 - 16\gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] \left((2A+1)(x-1) + (2B+1)x \right) \frac{dF}{dx} + \\ & + \left\{ (2AB + A + B) \left[1 - 16\gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + \right. \\ & + \frac{1}{2}(\varepsilon - 1 - 2\Lambda)(x-1) \left[1 - 16\gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + \frac{1}{2}(\varepsilon - 1 - 2\Lambda)x \left[1 - 16\gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + \\ & \left. + (2\beta - 2\Lambda\gamma)x(x-1) \left[1 - 4\gamma x(x-1) \right] + (2\beta + 2\Lambda\gamma)x(x-1) \left[1 + 4\gamma x(x-1) \right] \right\} F = 0. \end{aligned}$$

Отметим, что данное уравнение симметрично относительно замены

$$x \longleftrightarrow (x-1), \quad A \longleftrightarrow B,$$

это позволяет одновременно построить разложения в степенной ряд по переменным x и $(x-1)$.

Будем использовать обозначения

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon - 1 - 2\Lambda}{2} = M, \quad 2\beta - 2\Lambda\gamma = K, \quad 2\beta + 2\Lambda\beta = L, \quad 4\gamma = \Gamma; \\ 2A + 2B + 2 = \alpha, \quad 2AB + A + B = \beta. \end{aligned}$$

Уравнение можно переписать так:

$$\begin{aligned} & x(x-1) \left[1 - \Gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] F'' + \\ & + \left[1 - \Gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] \left(\alpha x - 2A - 1 \right) F' + \left\{ \beta \left[1 - \Gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + \right. \\ & + M(x-1) \left[1 - \Gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + Mx \left[1 - \Gamma^2 x^2 (x-1)^2 \right] + \\ & \left. + Kx(x-1) \left[1 + \Gamma x(x-1) \right] + Lx(x-1) \left[1 - \Gamma x(x-1) \right] \right\} F = 0. \end{aligned}$$

Уравнение для функции $F(x)$ можно символически представить в виде

$$PF'' + QF' + RF = 0,$$

где

$$\begin{aligned} P &= -\Gamma^2 x^6 + 3\Gamma^2 x^5 - 3\Gamma^2 x^4 + \Gamma^2 x^3 + x^2 - x = \\ &= p_6 x^6 + p_5 x^5 + p_4 x^4 + p_3 x^3 + p_2 x^2 + p_1 x; \\ Q &= -\Gamma^2 \alpha x^5 + \Gamma^2 (2A+1+2\alpha)x^4 - \Gamma^2 (\alpha + 4A+2)x^3 + \Gamma^2 (2A+1)x^2 + \alpha x - (2A+1) = \\ &= q_5 x^5 + q_4 x^4 + q_3 x^3 + q_2 x^2 + q_1 x + q_0; \\ R &= -2\Gamma^2 Mx^5 + \left(-\Gamma^2 \beta + 5\Gamma^2 M + \Gamma K - \Gamma L \right) x^4 + \left(2\Gamma^2 \beta - 4\Gamma^2 M - 2\Gamma K + 2\Gamma L \right) x^3 + \\ &+ \left(-\Gamma^2 \beta + \Gamma^2 M + K + \Gamma K + L - \Gamma L \right) x^2 + (2M - K - L)x + (\beta - M) = \\ &= r_5 x^5 + r_4 x^4 + r_3 x^3 + r_2 x^2 + r_1 x + r_0. \end{aligned}$$

То есть, имеем уравнение

$$\begin{aligned} & (p_6x^6 + p_5x^5 + p_4x^4 + p_3x^3 + p_2x^2 + p_1x)F'' + \\ & + (q_5x^5 + q_4x^4 + q_3x^3 + q_2x^2 + q_1x + q_0)F' + \\ & + (r_5x^5 + r_4x^4 + r_3x^3 + r_2x^2 + r_1x + r_0)F = 0. \end{aligned}$$

Будем строить решения в виде степенного ряда

$$F = \sum_{n=0}^{n=\infty} c_n x^n, \quad F' = \sum_{n=1}^{n=\infty} n c_n x^{n-1}, \quad F'' = \sum_{n=2}^{n=\infty} n(n-1) c_n x^{n-2};$$

проводя необходимые вычисления, приходим к 7-членным рекуррентным соотношениям:

$$\begin{aligned} & n = 6, \dots \\ & r_5 c_{n-5} + [p_6(n^2 - 9n + 20) + g_5(n-4) + r_4] c_{n-4} + \\ & + [p_5(n^2 - 7n + 12) + g_4(n-3) + r_3] c_{n-3} + \\ & + [p_4(n^2 - 5n + 6) + g_3(n-2) + r_2] c_{n-2} + \\ & + [p_3(n^2 - 3n + 2) + g_2(n-1) + r_1] c_{n-1} + \\ & + [p_2(n^2 - n) + g_1 n + r_0] c_n + [p_1(n^2 + n) + g_0(n+1)] c_{n+1} = 0. \end{aligned}$$

Сходимость ряда исследуем методом Пуанкаре – Перрона [9, 10]. Делим последнее соотношение на c_{n-5} и умножаем его на n^{-2} , устремляем $n \rightarrow \infty$. В результате получим алгебраическое уравнение для величины, связанной с возможными радиусами сходимости степенного ряда:

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{c_n}{c_{n+1}}, \quad R_{\text{conv}} = |R|, \quad p_1 + p_2 R + p_3 R^2 + p_4 R^3 + p_5 R^4 + p_6 R^5 = 0. \quad (20)$$

Это уравнение по-другому переписывается так:

$$(R - 1)[1 - 4\gamma R(R - 1)][1 + 4\gamma R(R - 1)] = 0;$$

корни следующие:

$$R = 1, \quad R_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1 + \gamma^{-1}}}{2}, \quad R_{3,4} = \frac{1 \pm \sqrt{1 + \gamma^{-1}}}{2}. \quad (21)$$

Минимального радиуса сходимости $R_{\text{conv}}^{\min} = 1$ достаточно, чтобы покрыть всю физическую область изменения переменной $x \in (0, 1)$. На основе использованной подстановки можно построить две пары комплексно сопряженных решений. Можно построить решения как через степенные ряды по переменной (x), так и через степенные ряды по переменной ($x - 1$); они имеют простое асимптотическое поведение в разных особых точках. Далее продвинуться с аналитическим исследованием туннельного эффекта для частицы Кокса в пространстве Лобачевского не удалось.

Анализ уравнения для обычной частицы в пространстве Лобачевского. Рассмотрим более простую задачу, возникающую при $\gamma = 0$. Это случай обычной скалярной частицы в пространстве Лобачевского:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \varepsilon - 1 - U(z) \right) f(z) = 0, \quad U(z) = + \frac{\Lambda}{\text{ch}^2 z}, \quad U(z \rightarrow \pm\infty) = +0. \quad (22)$$

Это уравнение шредингеровского типа в простом поле барьерного типа $U = \Lambda \text{ch}^{-2} z$ с возможностью туннельного эффекта. Фактически решение этой математической задачи известно [11] в контексте анализа потенциалов, для которых одномерное уравнение Шредингера решается точно.

Поскольку анализ этой простой задачи обобщен выше на более сложный случай частицы Кокса, то для лучшего понимания ситуации имеет смысл кратко рассмотреть в этом же контексте и простой случай.

Применим переменную $x = (1 - z) / 2$, получим уравнение

$$\left[x(1-x) \frac{d^2}{dx^2} + (1-2x) \frac{d}{dx} - \Lambda + \frac{(\varepsilon-1)/4}{1-x} + \frac{(\varepsilon-1)/4}{x} \right] f = 0. \quad (23)$$

Вводя подстановку $f(x) = x^A(1-x)^B F(x)$, приходим к

$$x(1-x) \frac{d^2 F}{dx^2} + [2A+1 - (2A+2B+2)x] \frac{dF}{dx} + \left[-(A+B)(A+B+1) - \Lambda + \frac{1}{4} \frac{4A^2 + \varepsilon - 1}{x} + \frac{1}{4} \frac{4B^2 + \varepsilon - 1}{1-x} \right] F = 0.$$

При A, B , выбранных согласно

$$A = \pm \frac{i}{2} \sqrt{\varepsilon-1}, \quad B = \pm \frac{i}{2} \sqrt{\varepsilon-1}, \quad (24)$$

уравнение упрощается до гипергеометрического типа

$$x(1-x) \frac{d^2 F}{dx^2} + [2A+1 - (2A+2B+2)x] \frac{dF}{dx} - [(A+B)(A+B+1) + \Lambda] F = 0$$

с параметрами (применяем обозначение $\lambda = \sqrt{4\Lambda-1}$)

$$a = \frac{1}{2} + A + B + \frac{i\lambda}{2}, \quad b = \frac{1}{2} + A + B - \frac{i\lambda}{2}, \quad c = 2A+1, \\ f(x) = x^A(1-x)^B F(x), \quad F(a, b, c; x), \quad x = \frac{1-z}{2}. \quad (25)$$

Выберем решение с заданным поведением в области $z \rightarrow +\infty$ ($x \rightarrow 0$) в виде плоской волны, двигающейся направо:

$$A = -i\sqrt{\varepsilon-1}/2, \quad B = +i\sqrt{\varepsilon-1}/2, \\ f = x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} (1-x)^{+i\sqrt{\varepsilon-1}/2} F(a_1, b, c; x), \\ a = \frac{1}{2} + \frac{i\lambda}{2}, \quad b = \frac{1}{2} - \frac{i\lambda}{2}, \quad c = -i\sqrt{\varepsilon-1} + 1, \\ f(x \rightarrow 0) = x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} = e^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2}. \quad (26)$$

Чтобы найти поведение этого решения при $z \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow 1$), воспользуемся соотношением Куммера

$$u_1 = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} u_2 + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} u_6, \quad (27)$$

где

$$u_1 = F(a, b, c; x), \quad u_2 = F(a, b, a+b+1-c; 1-x), \\ u_6 = (1-x)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c+1-a-b; 1-x).$$

В области $z \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow 1$) соотношение Куммера (27) принимает вид

$$u_1(z \rightarrow -\infty) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-x)^{c-a-b}, \quad c-a-b = -i\sqrt{\varepsilon-1},$$

что после умножения на $x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} (1-x)^{i\sqrt{\varepsilon-1}/2}$ дает нужную асимптотическую формулу:

$$f(z \rightarrow -\infty) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}(1-x)^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}(1-x)^{+i\sqrt{\varepsilon-1}/2}. \quad (28)$$

По-другому она записывается так:

$$f(z \rightarrow -\infty) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}e^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}e^{-iz\sqrt{\varepsilon-1}/2}. \quad (29)$$

Эта формула описывает эффект туннелирования частицы, падающей на барьер слева:

$$(z \rightarrow -\infty)Me^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} + Ne^{-iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} \longrightarrow e^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2}(z \rightarrow +\infty). \quad (30)$$

Коэффициент прохождения D равен

$$D = \frac{|M|^2}{|N|^2} = \left| \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} \right|^2, \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma(a) &= \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{i\lambda}{2}\right), \quad \Gamma(b) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{i\lambda}{2}\right), \\ \Gamma(c-a) &= \Gamma\left(\frac{1}{2} - i(\sqrt{\varepsilon-1} + \lambda/2)\right), \quad \Gamma(c-b) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - i(\sqrt{\varepsilon-1} - \lambda/2)\right). \end{aligned}$$

Можно продолжить вычисления, если воспользоваться известной формулой для Γ -функций:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + iZ\right)\Gamma\left(\frac{1}{2} - iZ\right) = \frac{\pi}{\cos i\pi Z} = \frac{\pi}{\pi Z}.$$

Ситуацию, когда частица падает на барьер справа, можно исследовать аналогично, если выбрать решения со следующей асимптотикой в области $z \rightarrow -\infty (x \rightarrow 1)$:

$$\begin{aligned} A &= -i\sqrt{\varepsilon-1}/2, \quad B = +i\sqrt{\varepsilon-1}/2, \\ g(x) &= x^A(1-x)^B u_6(x) = x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2}(1-x)^{+i\sqrt{\varepsilon-1}/2} \times \\ &\quad \times (1-x)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c+1-a-b; 1-x), \\ a &= \frac{1}{2} + \frac{i\lambda}{2}, \quad b = \frac{1}{2} - \frac{i\lambda}{2}, \quad c = -i\sqrt{\varepsilon-1} + 1, \\ g(z \rightarrow -\infty(x \rightarrow 1)) &= (1-x)^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} = e^{-iz\sqrt{\varepsilon-1}/2}. \end{aligned} \quad (32)$$

Чтобы найти асимптотику этого решения в области $z \rightarrow +\infty (x = 0)$, нужно воспользоваться формулой Куммера

$$\begin{aligned} u_6(x) &= \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(1-c)}{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)}u_1(z) + \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(c-1)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}u_5, \\ u_6 &= F(a, b, a+b+1-c; 1-x), \quad u_1(x) = F(a, b, c; x), \\ u_5 &= x^{1-c}F(a+1-c, b+1-c, 2-c; x). \end{aligned} \quad (33)$$

В области $x \rightarrow 0$ это соотношение принимает вид

$$u_6(x) = \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(1-c)}{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)} + \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(c-1)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}x^{i\sqrt{\varepsilon-1}}, \quad 1-c = +i\sqrt{\varepsilon-1};$$

после умножения на $x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2}$ получаем

$$\begin{aligned} g(z \rightarrow +\infty(x \rightarrow 0)) &= \\ &= \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(1-c)}{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)}x^{-i\sqrt{\varepsilon-1}/2} + \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(c-1)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}x^{+i\sqrt{\varepsilon-1}/2}, \end{aligned} \quad (34)$$

что можно переписать иначе:

$$g(z \rightarrow +\infty (x \rightarrow 0)) = \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(c-1)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} e^{-iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} + \frac{\Gamma(c+1-a-b)\Gamma(1-c)}{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)} e^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2}. \quad (35)$$

Таким образом, волна, двигаясь справа, частично проходит, а частично отражается от барьера:

$$z \rightarrow -\infty \longleftarrow M'e^{-iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} + N'e^{+iz\sqrt{\varepsilon-1}/2} (z \rightarrow +\infty). \quad (36)$$

Коэффициент прохождения $D' = 1 - R'$ налево равен

$$D' = \frac{|M'|^2}{|N'|^2} = \left| \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(1-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} \right|^2, \quad (37)$$

где

$$\Gamma(1-a) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{i\lambda}{2}\right), \quad \Gamma(1-b) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{i\lambda}{2}\right), \\ \Gamma(c-a) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - i(\sqrt{\varepsilon-1} + \lambda/2)\right), \quad \Gamma(c-b) = \Gamma\left(\frac{1}{2} - i(\sqrt{\varepsilon-1} - \lambda/2)\right).$$

Вычисления коэффициента повторять нет необходимости, поскольку результат будет прежним. Это согласуется с симметрией исходного уравнения относительно преобразования $z \rightarrow -z$.

Список использованных источников

1. Cox, W. Higher-rank representations for zero-spin field theories / W. Cox // J. Phys. Math. Gen. – 1982. – Vol. 15, № 2. – P. 627–635.
2. Schweber, S. S. An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory / S. S. Schweber. – New York: Harper&Row, Publ., Inc., 1961. – 905 p.
3. Овсюк, Е. М. Скалярная частица с внутренней структурой в электромагнитном поле в искривленном пространстве-времени / Е. М. Овсюк, О. В. Веко, К. В. Казмерчук // Проблемы физики, математики и техники. – 2014. – № 3 (20). – С. 32–36.
4. Quantum mechanical scalar particle with intrinsic structure in external magnetic and electric fields: influence of geometrical background / O. V. Veko [et al.] // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2014. – Vol. 17, № 4. – P. 464–466.
5. Ovsyuk, E. M. Spin zero Cox's particle with an intrinsic structure: general analysis in external electromagnetic and gravitational fields / E. M. Ovsyuk // Ukr. J. Phys. – 2015. – Vol. 60, № 6. – P. 485–496.
6. Veko, O. V. Cox's particle in magnetic and electric fields on the background of hyperbolic Lobachevsky geometry / O. V. Veko // Proc. of the IX Int. Conf. «Methods of non-Euclidean geometry in physics and mathematics», Bolyai–Gauss–Lobachevsky-9 (BGL-9), Minsk, 27–30 Nov. 2015 / ed. by Yu. Kurochkin, V. Red'kov. – Minsk, 2015. – P. 284–294.
7. Veko, O. V. Cox's particle in magnetic and electric fields on the background of hyperbolic Lobachevsky geometry / O. V. Veko // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2016. – Vol. 19, № 1. – P. 50–61.
8. Веко, О. В. Нерелятивистская частица Кокса с внутренней структурой в электрическом поле: анализ в пространстве Лобачевского / О. В. Веко, Е. М. Овсюк, В. М. Редьков // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 2. – С. 71–81.
9. Ronveaux, A. Heun's Differential Equation / A. Ronveaux. – Oxford: Oxford University Press, 1995. – 380 p.
10. Slavyanov, S. Yu. Special Functions. A Unified Theory Based on Singularities / S. Yu. Slavyanov, W. Lay. – Oxford: Oxford University Press, 2000. – 312 p.
11. Ландау, Л. Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Изд. 3-е, перераб. и доп. – М.: Наука, 1974. – 752 с.

References

1. Cox W. Higher-rank representations for zero-spin field theories. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1982, vol. 15, no. 2, pp. 627–635. Doi: 10.1088/0305-4470/15/2/029
2. Schweber S. S. *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*. New York, Harper&Row, Publishers, Inc., 1961. 905 p.
3. Ovsyuk E. M., Veko O. V., Kazmerchuk K. V. Scalar particle with intrinsic structure in electromagnetic field in curved space. *Problemy fiziki, matematiki i tekhniki = Problems of Physics, Mathematics and Technics*, 2014, no. 3 (20), pp. 32–36 (in Russian).

4. Veko O. V., Kazmerchuk K. V., Kisel V. V., Ovsyuk E. M., Red'kov V. M. Quantum mechanical scalar particle with intrinsic structure in external magnetic and electric fields: influence of geometrical background. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2014, vol. 17, no. 4, pp. 464–466.

5. Ovsyuk E. M. Spin zero Cox's particle with an intrinsic structure: general analysis in external electromagnetic and gravitational fields. *Ukrainian Journal of Physics*, 2015, vol. 60, no. 6, pp. 485–496. Doi: 10.15407/ujpe60.06.0485

6. Veko O. V. Cox's particle in magnetic and electric fields on the background of hyperbolic Lobachevsky geometry. Kurochkin Yu., Red'kov V. (eds.) *Proceedings of the IX International Conference «Methods of non-Euclidean geometry in physics and mathematics», Bolyai – Gauss – Lobachevsky-9 (BGL-9), Minsk, 27–30 November 2015*. Minsk, 2015, pp. 284–294.

7. Veko O. V. Cox's particle in magnetic and electric fields on the background of hyperbolic Lobachevsky geometry. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2016, vol. 19, no. 1, pp. 50–61.

8. Veko O. V., Ovsyuk E. M., Red'kov V. M. Cox nonrelativistic particle of intrinsic structure in the electric field: analysis in the Lobachevsky space. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 2, pp. 71–81 (in Russian).

9. Ronveaux A. *Heun's Differential Equation*. Oxford, Oxford University Press, 1995. 380 p.

10. Slavyanov S. Yu., Lay W. *Special Functions. A Unified Theory Based on Singularities*. Oxford, Oxford University Press, 2000. 312 p.

11. Landau L. D., Lifshits E. M. *Quantum mechanics (non-relativistic theory)*. 3rd ed. Moscow, Nauka Publ., 1974. 752 p. (in Russian).

Информация об авторах

Веко Ольга Владимировна – аспирант, Институт физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vekoolga@mail.ru

Войнова Янина Александровна – аспирант, Институт физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail; E-mail: voinyuschka@mail.ru

Овсюк Елена Михайловна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики и методики преподавания физики, Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина (ул. Студенческая, 28, 247760, г. Мозырь, Гомельская обл., Республика Беларусь). E-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

Ред'ков Виктор Михайлович – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник центра теоретической физики Института физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: redkov@dragon.bas-net.by

Information about the authors

Olga V. Veko – Postgraduate, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vekoolga@mail.ru

Yanina A. Voynova – Postgraduate, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: voinyuschka@mail.ru

Elena M. Ovsyuk – Ph. D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Mozyr State Pedagogical University named after I. P. Shamyakin (28, Studencheskaya Str, 247760, Mozyr, Republic of Belarus). E-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

Viktor M. Red'kov – D. Sc. (Physics and Mathematics), Chief Researcher, Center of Theoretical Physics, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: redkov@dragon.bas-net.by

Н. Г. Крылова¹, Г. В. Грушевская¹, В. М. Редьков²

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

²Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

ДИНАМИКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ 1-ГО РОДА В ФИНСЛЕРОВОМ КОНФИГУРАЦИОННОМ ПРОСТРАНСТВЕ ЛЕНГМЮРОВСКОГО МОНОСЛОЯ

Аннотация. В работе получены уравнения Эйлера – Лагранжа, описывающие динамику фазового перехода 1-го рода в конфигурационном финслеровом пространстве ленгмюровского монослоя. Разработан приближенный метод анализа полученных уравнений, который основан на сочетании аналитического и численного исследований с использованием нулевого приближения при фиксированном времени релаксации и более точного приближения с модельным распределением времен релаксации. Показана гетерогенность динамики системы, что соответствует метастабильному состоянию монослоя при наличии зародышей фаз с различными временами релаксации. Распределение времен релаксации характеризуется наличием максимума, причем его высота зависит от скорости сжатия монослоя. Рост максимума в распределении времен релаксации при повышении скорости сжатия ассоциируется с появлением выраженного плато на изотерме. На этой основе теоретически обосновано характерное поведение изотерм сжатия монослоя в области фазового перехода. Аналитически исследована динамика двумерного фазового перехода при малых скоростях сжатия и проведен сравнительный анализ поведения системы в двух приближениях: в приближении одного времени релаксации и в приближении модельного распределения времен релаксации. Показано, что существование зародышей фаз с различными временами релаксации приводит к появлению эффективной центробежной силы, величина которой зависит от градиента электрокапиллярных сил.

Ключевые слова: фазовый переход первого рода, динамика Эйлера – Лагранжа, пространство Финслера, ленгмюровский монослой, распределение времен релаксации

Для цитирования. Крылова, Н. Г. Динамика фазовых переходов 1-го рода в финслеровом конфигурационном пространстве ленгмюровского монослоя / Н. Г. Крылова, Г. В. Грушевская, В. М. Редьков // Вес. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2017. – № 3. – С. 66–77.

N. G. Krylova¹, H. V. Grushevskaya¹, V. M. Red'kov²

¹Belarusian State University, Minsk, Belarus

²B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

FIRST-ORDER PHASE TRANSITION DYNAMICS IN THE FINSLER CONFIGURATION SPACE OF THE LANGMUIR MONOLAYER

Abstract. In the article, the Euler – Lagrange equations, which describe first-order phase transition dynamics in a configuration Finsler space of a Langmuir monolayer, have been obtained. An approximate method for analysis of the equations has been developed. The method is based on a combination of analytical and numerical calculations using the zero-order approximation with a fixed relaxation time and the more exact approximation with a model distribution of relaxation times. Heterogeneous dynamics of the system has been demonstrated. Such dynamics corresponds to the monolayer metastable state with different relaxation times of phase nuclei. The relaxation time distribution has a maximum and a maximum height depends on a monolayer compression rate. The increase of the maximum height at enhancement of a compression rate is accompanied by an explicit plateau of the isotherm that displays the characteristic behavior of the monolayer isotherm in the region of phase transition. The dynamics of a two-dimensional phase transition has been numerically studied at the compression rate as being sufficiently low, and a comparative analysis of the system behavior at two approximations (the approximation of fixed relaxation time and the approximation of model distribution of relaxation times) has been made. It has been found that the presence of phase nuclei with different relaxation times causes an effective centrifugal force, the magnitude of which depends on the gradient of electrocapillary forces.

Keywords: first-order phase transition, Euler – Lagrange dynamics, Finsler space, Langmuir monolayer, relaxation time distribution

For citation. Krylova N. G., Grushevskaya H. V., Red'kov V. M. First-order phase transition dynamics in the Finsler configuration space of the Langmuir monolayer. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series, 2017, no. 3, pp. 66–77 (in Russian).

Введение. В настоящее время для изготовления высокоупорядоченных наноматериалов на основе органических амфифильных молекул применяется технология Ленгмюра – Блоджетт (ЛБ) [1]. Получаемые с использованием ЛБ-технологии тонкопленочные материалы применяются для создания композитных сенсорных и сегнетоэлектрических наноструктур для электроники [2].

В процессе сжатия ленгмюровского слоя толщиной в одну молекулу (монослоя) на поверхности полярной жидкости наблюдаются последовательные двумерные (2D) фазовые переходы 1-го рода из состояния растянутой жидкости в жидкокристаллическое, а затем – в кристаллическое состояние [1, 3, 4].

Фазовый переход первого рода протекает в три стадии: две из них представляют собой быстрый и медленный релаксационные процессы соответственно с малым и большим временем жизни. Третья стадия – это промежуточное метастабильное состояние, для динамики которого характерно существование зародышей фаз (релаксационных единиц) с различными временами жизни (т. е. динамика этой стадии гетерогенна). При определенных условиях вещество в переходном метастабильном состоянии из одной фазы в другую может существовать достаточно долго [5]. Так, стеклообразное состояние является метастабильным состоянием с распределением времен релаксации [6]. В рамках теории случайных графов в [7] было установлено, что фазовый переход первого рода проявляется как сужение распределения возможных конфигураций ансамбля частиц и протекает через гетерогенную фазу (метастабильное состояние). Известная теория [8–12] фазовых переходов 1-го рода базируется на предположении о существовании двух временных масштабов до и после перехода в стеклообразное состояние, при этом не учитывается возможность распределения зародышей фаз по различным временам релаксации [13, 14].

Экспериментально показано, что 2D-фазовые переходы 1-го рода существенно зависят от условий формирования монослоев: ионного состава субфазы, температуры, величины скорости сжатия [4, 17–23]. Влияние скорости сжатия на протекание 2D-фазовых переходов обусловлено поворотом диполей на границе раздела фаз и перераспределением плотности заряда двойного электрически заряженного слоя Гельмгольца [17, 19, 22, 23]. Эти процессы носят название электрокапиллярных явлений. Ранее, при построении моделей фазовых переходов в ленгмюровских монослоях, электрокапиллярные явления на границе раздела фаз не учитывались [17, 24]. Однако экспериментальные исследования [17–21] показывают, что их влияние существенно, что делает теоретическое описание этих явлений важным для понимания процессов структуризации и формирования доменной структуры ЛБ-пленок.

В работах [23, 25, 26] был найден эффективный потенциал, описывающий электрокапиллярные явления и определяющий суммарный эффект взаимодействия молекул субфазы с молекулами ленгмюровского монослоя. С использованием этого потенциала было предложено геометрическое описание конфигурационного пространства системы и построена финслерова метрическая функция такого пространства. При этом рассмотрение финслерова конфигурационного пространства позволяет моделировать возможность распределения зародышей кристаллической фазы по временам релаксации.

Целью настоящей работы является изучение особенностей динамики двумерных фазовых переходов 1-го рода в ленгмюровских монослоях при наличии зародышей фаз с различными временами релаксации. Такая гетерогенная динамика моделируется в финслеровом конфигурационном пространстве.

Геодезические в конфигурационном финслеровом пространстве. Фазовое пространство $\{\vec{r}, \vec{r}, t, \xi\}$ определяет расширенное конфигурационное пространство монослоя. Здесь координаты $\vec{r} \equiv \{r, \varphi\}$ и t определяют радиус-вектор и время возникновения зародыша кристаллической фазы; $\dot{\xi}$, \dot{r} и $\dot{\varphi}$ обозначают производные от координат t , r , φ по эволюционному параметру s . Величина $\dot{\xi}$ обозначает время релаксации, а \dot{r} и $\dot{\varphi}$ – радиальную и угловую компоненты скорости зародыша фазы. При таком рассмотрении эволюционный параметр s определяет число образовавшихся фазовых элементов макроскопической системы [23].

Метрическая функция F^2 3-мерного финслерова пространства задается выражениями [23, 25, 26]

$$F^2 = A \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B \dot{\xi}^2 - C \frac{(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2)}{2}, \quad (1)$$

$$B = \Lambda^2 - \tilde{p} \left(P_1 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{2}{3} (Vt)^5 \left(6 - \frac{Vt}{r} \right) Ei \left[\frac{2Vt}{r} \right] \right), \quad A = \tilde{p} V \left(P_2 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{3} (Vt)^5 Ei \left[\frac{2Vt}{r} \right] \right), \quad (2)$$

$$C = m a_c^2 n_c, \quad \tilde{p} = \frac{p}{n_c} = \frac{q^2 k}{5 \epsilon \epsilon_0 n_c} \frac{n_0^2}{R_0^2};$$

где

$$P_1 = -\frac{3}{4} r^5 + (Vt) r^4 + \frac{3}{4} (Vt)^2 r^3 + \frac{5}{6} (Vt)^3 r^2 + \frac{11}{6} (Vt)^4 r - \frac{1}{3} (Vt)^5, \\ P_2 = r^5 + \frac{1}{2} (Vt) r^4 + \frac{1}{3} (Vt)^2 r^3 + \frac{1}{3} (Vt)^3 r^2 + \frac{2}{3} (Vt)^4 r;$$

Λ – вспомогательная константа, имеющая размерность энергии и позволяющая ввести метрическую функцию как положительно определенную и однородную 2-го порядка по скоростям; V – скорость сжатия монослоя; Ei – интегральная показательная функция; n_0 и R_0 – поверхностная плотность и радиус монослоя в начальный момент времени $t_0 = 0$; k – коэффициент, характеризующий ориентационную релаксацию поверхностных диполей; q – заряд гидрофильной части молекулы в водной субфазе; n_c и a_c – поверхностная плотность и критический размер зародыша кристаллической фазы; m – масса молекулы монослоя. Используем обозначения $x^j = (t, r, \phi)$ и $y^j = (\dot{\xi}, \dot{r}, \dot{\phi})$. Финслеров метрический тензор g_{ij} задается формулой [27, 28]

$$g_{ij}(x^k, y^k) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F^2}{\partial y^i \partial y^j} = \begin{pmatrix} 3A \frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} + B & -\frac{3}{2} A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^2 & 0 \\ -\frac{3}{2} A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^2 & A \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^3 - \frac{C}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{C}{2} r^2 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Геодезические в финслеровом пространстве определяются уравнениями Лагранжа – Эйлера [27]:

$$\frac{dy^i}{ds} + 2G^i = 0, \quad G^i = \frac{1}{4} g^{il} \left\{ 2 \frac{\partial g_{jl}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^l} \right\} y^j y^k. \quad (4)$$

Для метрики (3) компоненты вектора G^i записываются так:

$$G^1 = \frac{A}{4\Delta_2} \left[\frac{1}{2} A_t \frac{\dot{\xi}^6}{\dot{r}^4} + B_t \frac{\dot{\xi}^5}{\dot{r}^3} + \frac{1}{2} B_r \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + \frac{3}{2} C r \frac{\dot{\xi}^2 \dot{\phi}^2}{\dot{r}^2} \right] - \frac{C}{8\Delta_2} \left[2A_t \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B_t \dot{\xi}^2 + 3A_r \dot{\xi}^2 + 2B_r \dot{\xi} \dot{r} \right], \\ G^2 = \frac{3}{4} \frac{A}{\Delta_2} \left[-\frac{1}{2} A_r \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + \frac{1}{2} B_t \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + C r \frac{\dot{\xi} \dot{\phi}^2}{\dot{r}} \right] - \frac{B}{4\Delta_2} \left[A_t \frac{\dot{\xi}^4}{\dot{r}^2} + 2A_r \frac{\dot{\xi}^3}{\dot{r}} + B_r \dot{\xi}^2 - C r \dot{\phi}^2 \right], \\ G^3 = \frac{1}{r} \dot{r} \dot{\phi}, \quad (5)$$

где использованы обозначения

$$\Delta_2 = \frac{3A^2}{4} \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^4 + AB \left(\frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} \right)^3 - \frac{3AC}{2} \frac{\dot{\xi}}{\dot{r}} - \frac{BC}{2},$$

$$A_t = \frac{\partial A}{\partial t}, A_r = \frac{\partial A}{\partial r}, B_t = \frac{\partial B}{\partial t}, B_r = \frac{\partial B}{\partial r}.$$

Уравнения (4)–(5) являются сложными. Рассмотрим их численное решение. Начальные условия выбираем такими: $\dot{\xi}(s=0) := 1$ и $\dot{r}(s=0) := \dot{r}_0$. Эти условия означают, что рассматриваем начало эволюции макроскопической системы с появления зародыша фазы критического размера. Начальная скорость \dot{r}_0 оценивается из равенства кинетической энергии зародыша и разности энергий поверхностного натяжения до и после распада гидратного комплекса. При этом получаем $mn_c a_c^2 \dot{r}_0^2 = \tilde{\pi}_c a_c^2$, где значение коэффициента поверхностного натяжения $\tilde{\pi}_c$ находится из эксперимента. Таким образом, величина \dot{r}_0 может лежать в диапазоне 10^{-6} – 10^{-5} м/с (для определенности оценка делалась для случая монослоя стеариновой кислоты).

Результаты численного анализа при различных скоростях сжатия V показаны на рис. 1 и 2. Зависимость $\dot{\xi}(s)$ имеет максимум, который сдвигается в сторону малых значений параметра s с увеличением скорости сжатия. До и после экстремального значения s релаксационные процессы протекают с большими и малыми временами соответственно. В области экстремального значения s динамика системы гетерогенна. Резкий максимум в $\dot{\xi}(s)$ при больших V (см. рис. 1, *a, b*) ассоциируется с ярко выраженным плато на кривой $s(r)$ (см. рис. 2, *a, b*).

Чтобы проанализировать зависимость координаты r от параметра эволюции s , найдем связь между приращением поверхностного давления $\Delta\tilde{\pi}$ (обусловленным появлением в метастабильном монослое зародышей кристаллической фазы) и параметром s . В случае слабо взаимодействующих зародышей можно воспользоваться двумерным уравнением состояния идеального газа

$$\Delta\tilde{\pi}S = N k_B T, \tag{6}$$

где S – площадь монослоя; N – число зародышей фазы; T – температура; k_B – постоянная Больцмана. Пусть в начальный момент времени t_0 образуются зародыши в точках монослоя r_0^i . Количество зародышей в произвольный момент времени t задается соотношением

$$N = \sum_i s(t, r_0^i),$$

переходя к непрерывному пределу и используя теорему о среднем, получаем

$$N = \iint_S s(t, r_0) r_0 dr_0 d\varphi \approx s(t, \langle r_0 \rangle) S.$$

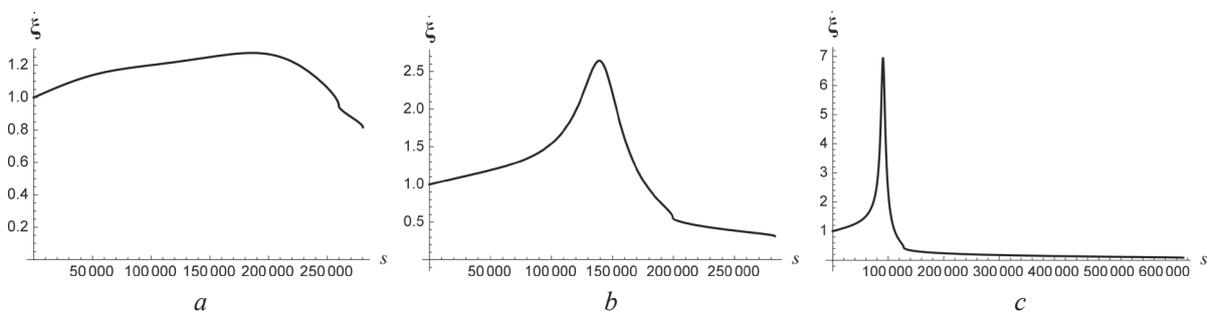


Рис. 1. Распределение времен релаксации при различных скоростях сжатия монослоя; начальные условия:

$$\dot{\xi}(s=0) = 1, \dot{r}(s=0) = -5 \cdot 10^{-6} \text{ м/с}, \xi(s=0) = 0, r(s=0) = 1 \text{ м}; \text{ значения скорости сжатия:}$$

$$V = 2 \cdot 10^{-6} \text{ м/с (a); } V = 3 \cdot 10^{-6} \text{ м/с (b); } V = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м/с (c)}$$

Fig. 1. Distribution of relaxation times at different monolayer compression rates; initial conditions: $\dot{\xi}(s=0) = 1$, $\dot{r}(s=0) = -5 \cdot 10^{-6}$ m/s, $\xi(s=0) = 0$, $r(s=0) = 1$ m; compression rates: $V = 2 \cdot 10^{-6}$ m/s (a); $V = 3 \cdot 10^{-6}$ m/s (b); $V = 4 \cdot 10^{-6}$ m/s (c)

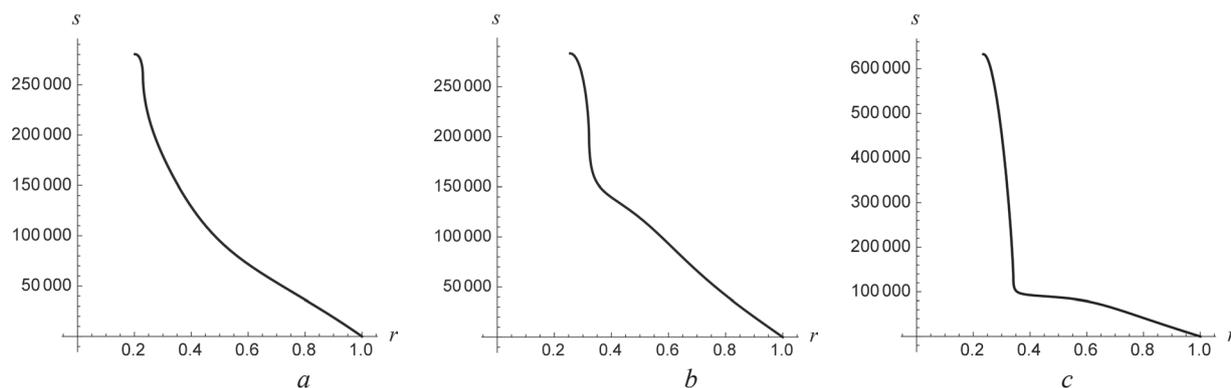


Рис. 2. Зависимость параметра эволюции от координаты r ; начальные условия: $\dot{\xi}(s=0)=1$, $\dot{r}(s=0)=-5 \cdot 10^{-6}$ м/с, $\xi(s=0)=0$, $r(s=0)=1$ м; значения скорости сжатия: $V=2 \cdot 10^{-6}$ м/с (а); $V=3 \cdot 10^{-6}$ м/с (б); $V=4 \cdot 10^{-6}$ м/с (с)

Fig. 2. Dependence of the evolution parameter on the radial coordinate r ; initial conditions:

$\dot{\xi}(s=0)=1$, $\dot{r}(s=0)=-5 \cdot 10^{-6}$ m/s, $\xi(s=0)=0$, $r(s=0)=1$ m;
compression rates: $V=2 \cdot 10^{-6}$ m/s (a); $V=3 \cdot 10^{-6}$ m/s (b); $V=4 \cdot 10^{-6}$ m/s (c)

Учитывая последнее равенство в уравнении состояния (6), находим

$$\Delta\tilde{\pi} \sim s.$$

Таким образом, можно сделать вывод, что представленные на рис. 2 зависимости $s(r)$ также описывают поведение изотерм $\Delta\tilde{\pi}(r)$ в процессе фазового перехода при различных скоростях сжатия монослоя. При низких скоростях V с уменьшением r происходит постепенное возрастание поверхностного давления $\Delta\tilde{\pi}$, при этом изотерма $\Delta\tilde{\pi}(r)$ «негоризонтальна» в области фазового перехода (см. рис. 2, а, б). При увеличении скорости V появляется ярко выраженное плато (см. рис. 2, с). Теоретическое объяснение «негоризонтальности» плато изотерм для двумерных систем является важной задачей, поскольку такого типа поведение наблюдается экспериментально [17, 18, 21, 29, 30]. Зависимость этого эффекта от скоростей сжатия также наблюдалась экспериментально для изотерм сжатия монослоев производных дитионилпирролового ряда [29].

Как видно из рис. 1, времена релаксации при малых скоростях сжатия и $s < 10\,000$ распределены в узком диапазоне в окрестности $\dot{\xi} = 1$. Поэтому приблизительно можно считать, что при малых значениях параметра s все фазовые элементы распадаются с одним временем релаксации, а распределение $\dot{\xi} = 1$ может быть использовано для описания конфигураций монослоя в приближении одного времени релаксации. Это соответствует образованию зародышей кристаллической фазы только одного критического размера.

Повышение скорости сжатия приводит к существенно нелинейной зависимости $\dot{\xi}(s)$. Как следует из рис. 3, модельное распределение времен релаксации в форме

$$\dot{\xi} = 1 + \frac{\alpha}{r(s)} \quad (7)$$

можно выбрать как первое приближение при невысоких скоростях сжатия V .

Далее сравним динамику в приближении одного времени релаксации с динамикой в случае модельного распределения времен релаксации (7).

Динамика системы с одним временем релаксации. С учетом явной зависимости $\dot{\xi}(t, r(t))$ выполним анализ системы, перейдя от финслеровой функции к функции Лагранжа $L(t)$ в соответствии с соотношением [23]

$$F^2 = \Lambda^2 \dot{\xi}^2 - L(t(s)) \dot{\xi}. \quad (8)$$

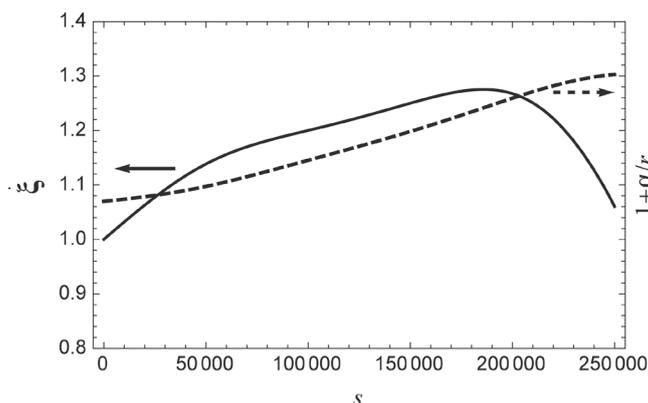


Рис. 3. Эволюция $\dot{\xi}(s)$ (сплошная кривая) и ее аппроксимация (7) (пунктирная кривая); начальные условия: $\dot{\xi}(s=0)=1, \dot{r}(s=0)=-5 \cdot 10^{-6}$ м/с, $\xi(s=0)=0, r(s=0)=1$ м; значения параметров: $V=2 \cdot 10^{-6}$ м/с, $qn_0=0,3$ Кл/м², $\epsilon_{H_2O}=81, R_0=10$ м, $k=0,1$ м², $ma_c^2 n_c=10^{-5}, \tilde{p}=\Lambda^2=1$; параметр аппроксимации: $\alpha=0,07$

Fig. 3. Evolution of $\dot{\xi}(s)$ (solid line) and its approximation (7) (dash line); initial conditions: $\dot{\xi}(s=0)=1, \dot{r}(s=0)=-5 \cdot 10^{-6}$ m/s, $\xi(s=0)=0, r(s=0)=1$ m; monolayer parameters: $V=2 \cdot 10^{-6}$ m/s, $qn_0=0.3$ C/m², $\epsilon_{H_2O}=81, R_0=10$ m, $k=0.1$ m², $ma_c^2 n_c=10^{-5}, \tilde{p}=\Lambda^2=1$; approximation parameter: $\alpha=0.07$

С использованием приближения $\dot{\xi}=1$ в метрической функции (8) следует заменить s на t , при этом слагаемое Λ^2 в (8) можно опустить. Тогда трехмерное финслерово пространство сводится к двумерному пространству (r, ϕ) с функцией Лагранжа в виде

$$L(t, r, \dot{r}, \dot{\phi}) = \frac{M}{2} \dot{r}^2 + \frac{Mr^2}{2} \dot{\phi}^2 - \tilde{p}V \left(P_2 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{3} (Vt)^5 Ei \left[\frac{2Vt}{r} \right] \right) \cdot \dot{r}^{-1} + \\ + \tilde{p} \left(P_1 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{2}{3} (Vt)^5 \left(6 - \frac{Vt}{r} \right) Ei \left[\frac{2Vt}{r} \right] \right),$$

где M – масса зародыша кристаллической фазы.

В работах [23, 25] показано, что потенциал электрокапиллярных сил можно упростить без существенного изменения особенностей его поведения. Поэтому далее будем использовать упрощенный лагранжиан

$$L(t, r, \dot{r}, \dot{\phi}) = \frac{M}{2} \dot{r}^2 + \frac{Mr^2}{2} \dot{\phi}^2 - \tilde{p}r^5 V e^{\frac{2Vt}{r}} \cdot \dot{r}^{-1} + U_{1a}(t, r), \quad (9)$$

где

$$U_{1a}(t, r) = \tilde{p} \left(P_3 e^{\frac{2Vt}{r}} - \frac{4}{45} (Vt)^5 \left(-1 + 1,14 \frac{Vt}{r} \right) Ei \left[\frac{2Vt}{r} \right] \right). \quad (10)$$

Лагранжиану (9) соответствуют уравнения движения:

$$\frac{d^2 x^i}{dt^2} + 2G^i(t, x^k, y^k) = 0, \quad \{y^k, i=1\} = \left\{ \frac{dx^k}{dt}, \frac{dt}{ds} = 1 \right\}; \quad (11)$$

метрический тензор g_{ij} имеет следующий вид [31]:

$$g_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial y^i \partial y^j} = \begin{pmatrix} \frac{M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2Vt}{r}} \cdot \dot{r}^{-3}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{Mr^2}{2} \end{pmatrix},$$

где $x^i = \{r, \varphi\}$ и $y^i = \frac{dx^k}{dt} = \dot{x}^k = \{\dot{r}, \dot{\varphi}\}$. Функции G^i определяются выражением [31]

$$G^i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{g^{is}}{4} \left[\frac{\partial^2 L}{\partial x^j \partial y^s} y^j - \frac{\partial L}{\partial x^s} + \frac{\partial^2 L}{\partial t \partial y^s} \right], \quad (12)$$

явный вид компонент вектора G^i следующий:

$$G^1 = \frac{\tilde{p}r^3 Ve \frac{2Vt}{r} \left(5r\dot{r}^{-1} - 2Vt\dot{r}^{-1} + Vr\dot{r}^{-2} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial U_{1a}}{\partial r} - \frac{Mr}{2} \dot{\varphi}^2}{M - 2\tilde{p}r^5 Ve \frac{2Vt}{r} \cdot \dot{r}^{-3}}, \quad G^2 = \frac{\dot{r}}{r} \dot{\varphi}. \quad (13)$$

Тогда уравнение для φ из (11) представимо так:

$$2\dot{\varphi}\dot{r}/r + \ddot{\varphi} = 0. \quad (14a)$$

Отсюда следует выражение для φ :

$$\dot{\varphi}(t) = \frac{\dot{\varphi}(0)}{r(t)^2}. \quad (14b)$$

С учетом (14b) и выражения для G^1 (13) радиальное уравнение принимает вид

$$\ddot{r} + \frac{2}{M - 2\tilde{p}r^5 Ve \frac{2Vt}{r} \cdot \dot{r}^{-3}} \left(\tilde{p}r^3 Ve \frac{2Vt}{r} \left(5r\dot{r}^{-1} - 2Vt\dot{r}^{-1} + Vr\dot{r}^{-2} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial U_{1a}}{\partial r} - \frac{M}{2} \frac{\dot{\varphi}(0)^2}{r^3} \right) = 0. \quad (15)$$

При $V = 0$ система уравнений (11)–(12) существенно упрощается:

$$-\dot{\varphi}(0)^2/r^3 + 20\tilde{p}r^4/3C + \ddot{r} = 0, \quad \dot{\varphi}(t) - \dot{\varphi}(0)/r^2 = 0. \quad (16)$$

Ее решение – это периодическая квазиэллиптическая траектория (рис. 4, *a*). Соответственно частицы монослоя в гидратном комплексе движутся вокруг базисной точки по вытянутым и повернутым относительно друг друга орбитам, переходя с течением времени с одной орбиты на другую. Поскольку при $V = 0$ потенциальная энергия U_{1a} не зависит от времени явно, частицы остаются в гидратном комплексе.

Монослой, сжимаемый с достаточно большой скоростью, может рассматриваться как устойчивая динамическая система с предельным циклом (рис. 4, *b*) [32]. При достаточно больших скоростях V геодезические характеризуются наличием точек перегиба. Такие конфигурации описывают выход частиц из гидратного комплекса. Отмеченная особенность означает, что скорость сжатия монослоя V является так называемым управляющим параметром рассматриваемой динамической системы [32].

Динамика системы с модельным распределением времен релаксации. Распределение времен релаксации в приближении (7) для малых α можно учесть посредством следующих замен:

$$t \approx t(s), \quad \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{ds} \frac{ds}{dt} = \dot{r} \dot{\xi}^{-1} \approx \dot{r} \left(1 - \frac{\alpha}{r} \right), \quad \dot{\varphi}_\xi = \dot{\varphi}_t \dot{\xi}^{-1} \approx \dot{\varphi}_t \left(1 - \frac{\alpha}{r} \right).$$

Из соотношения (7) и теоремы о среднем следует, что

$$t = s + \alpha \int_0^s \frac{ds}{r(s)} = s + \alpha \frac{s}{r(s_{cp})} \approx s, \quad \alpha \ll 1,$$

поэтому можно считать, что различие между эволюционными параметрами t и s сводится к некоторому малому сдвигу (при численных расчетах этим сдвигом будем пренебрегать).

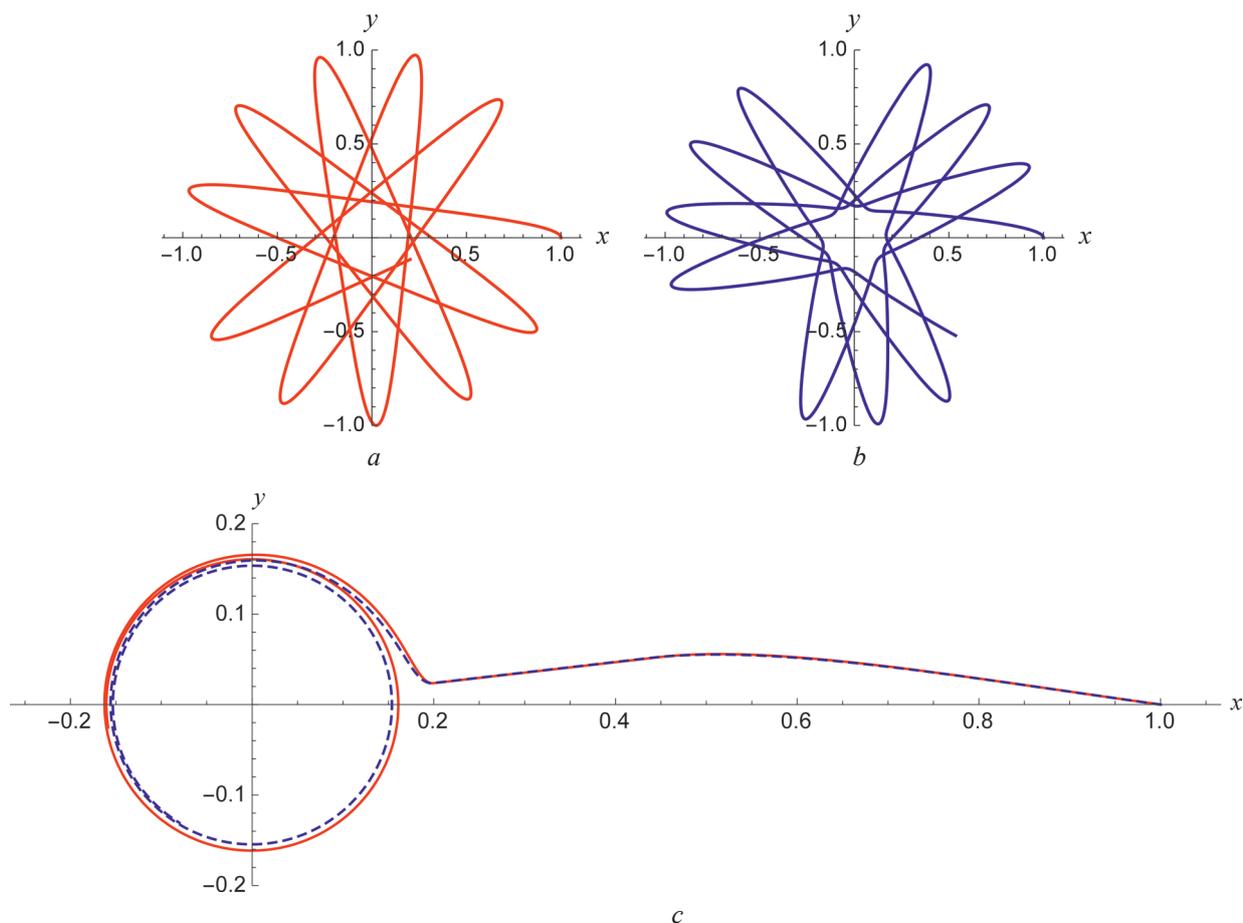


Рис. 4. Геодезические для системы с одним временем релаксации (красные кривые) и для модельного распределения времен релаксации (синие кривые); начальные условия: $\dot{r}(t=0) = -5 \cdot 10^{-6}$ м/с, $r(t=0) = 1$ м; значения параметров: $M = 10^{-5}$, $\tilde{p} = 1$ (a-c); $V = 0$, $\alpha = 0$ (a); $V = 0$, $\alpha = 0,07$ (b); $V = 17 \cdot 10^{-5}$ м/с, $\alpha = 0$ (красная кривая) и $\alpha = 0,1$ (синяя кривая) (c)
 Fig. 4. Geodesics of the system with fixed relaxation time (red curves) and of the system with model distribution of relaxation times (blue curves); initial conditions: $\dot{r}(t=0) = -5 \cdot 10^{-6}$ m/s, $r(t=0) = 1$ m; monolayer parameters and approximation parameter; $M = 10^{-5}$, $\tilde{p} = 1$ (a-c); $V = 0$, $\alpha = 0$ (a); $V = 0$, $\alpha = 0.07$ (b); $V = 17 \cdot 10^{-5}$ m/s, $\alpha = 0$ (red curve) and $\alpha = 0.1$ (blue curve) (c)

Тогда лагранжиан, учитывающий распределение времен релаксации зародышей фаз, имеет вид

$$L(t, r, \dot{r}, \dot{\phi}) = \frac{M}{2} \dot{r}^2 (1 - 2\alpha/r) + \frac{Mr^2}{2} \dot{\phi}^2 (1 - 2\alpha/r) - \tilde{p} r^5 |V| e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-1} (1 + \alpha/r) + U_{1a}(t, r), \quad (17)$$

где α – малый параметр; при $\alpha = 0$ возвращаемся к приближению одного времени релаксации.

Компоненты вектора G^i задаются формулами

$$G^1 = \frac{-\partial U_{1a} / \partial r - M \dot{\phi}^2 (r - \alpha) + M \alpha \dot{r}^2 r^{-2} + 2 \tilde{p} r^3 V e^{\frac{2tV}{r}} \left((\alpha + r) \left(V - \frac{2Vt\dot{r}}{r} + 4\dot{r} \right) \dot{r}^{-2} + r \dot{r}^{-1} \right)}{2M(1 - 2\alpha/r) - 4\tilde{p}r^4 V (\alpha + r) e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3}}, \quad (18)$$

$$G^2 = \frac{\dot{r}\dot{\phi}(r - \alpha)}{r(r - 2\alpha)} \approx \frac{\dot{r}\dot{\phi}}{r} \left(1 + \frac{\alpha}{r} \right). \quad (19)$$

С учетом (19) уравнение для угловой переменной ϕ из (11) представляем так:

$$\ddot{\phi} = -\frac{2\dot{\phi}\dot{r}}{r} - \frac{2\alpha\dot{\phi}\dot{r}}{r^2}. \quad (20)$$

Сопоставим уравнение (20) с аналогичным уравнением (146) в случае одного времени релаксации. В (20) присутствует зависящая от параметра α эффективная сила $F_\phi = -2\alpha\dot{\phi}/r^2$, которая будет давать дополнительное угловое ускорение при $\dot{r} < 0$ и торможение при $\dot{r} > 0$. Интегрирование уравнения (20) приводит к выражению для $\dot{\phi}$:

$$\dot{\phi}(t) = \frac{\dot{\phi}(0)}{r(t)^2} e^{2\alpha/r(t)}. \quad (21)$$

Проведем аналогичный анализ для радиального уравнения (18). Обозначим через $G_{(1)}^1$ радиальную компоненту вектора G^i для случая одного времени релаксации (13) и выделим вклад, обусловленный наличием в системе распределения релаксационных времен: $\Delta G^1 = G^1 - G_{(1)}^1$. Перепишем G^1 из (18) в виде

$$\begin{aligned} G^1 &\approx \left(G_{(1)}^1 + \alpha \frac{2\tilde{p}r^3 V e^{\frac{2tV}{r}} \left(V\dot{r}^{-2} - \frac{2Vt\dot{r}^{-1}}{r} + 4\dot{r}^{-1} \right) + M \left(\phi^2 + \frac{\dot{r}^2}{r^2} \right)}{2 \left(M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)} \right) \left(1 + 2\alpha \frac{\left(M + \tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)}{r \left(M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)} \right) \approx \\ &\approx G_{(1)}^1 + \alpha \left(2G_{(1)}^1 \frac{\left(M + \tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)}{r \left(M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)} + \frac{2\tilde{p}r^3 V e^{\frac{2tV}{r}} \left(V\dot{r}^{-2} - \frac{2Vt\dot{r}^{-1}}{r} + 4\dot{r}^{-1} \right) + M \left(\phi^2 + \frac{\dot{r}^2}{r^2} \right)}{2 \left(M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)} \right) \approx \\ &\approx G_{(1)}^1 + \alpha \left(-\frac{G_{(1)}^1}{r} + \frac{2\tilde{p}r^3 V e^{\frac{2tV}{r}} \left(V\dot{r}^{-2} - \frac{2Vt\dot{r}^{-1}}{r} + 4\dot{r}^{-1} \right) + M \left(\phi^2 + \frac{\dot{r}^2}{r^2} \right)}{2 \left(M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3} \right)} \right). \end{aligned}$$

Учитывая $G_{(1)}^1$ из (13), находим приращение ΔG^1 :

$$\Delta G^1 = \frac{\alpha}{2r^2} \frac{2M \left(r^2 \dot{\phi}^2 + \dot{r}^2 \right) + \partial U_{1a} / \partial r}{M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3}}. \quad (22)$$

С учетом $\dot{\phi}$ (21) находим выражение для дополнительной центробежной силы

$$F_r = -\frac{\alpha}{r^4} \frac{2M \left(\dot{\phi}(0)^2 e^{2\alpha/r} + r^2 \dot{r}^2 \right) + r^2 \partial U_{1a} / \partial r}{M - 2\tilde{p}r^5 V e^{\frac{2tV}{r}} \dot{r}^{-3}}. \quad (23)$$

В предельном случае $V = 0$ имеем

$$\partial U_{1a} / \partial r = 20/3 \tilde{p}r^4, \quad F_r = -2\alpha \left(\frac{\dot{\phi}(0)^2 e^{2\alpha/r}}{r^4} + \frac{\dot{r}^2}{r^2} + \frac{10}{3} \frac{\tilde{p}r^2}{M} \right) < 0. \quad (24)$$

Сила в (24) приводит к эффективному дополнительному отталкиванию. В соответствии с этим, сравнивая рис. 4, *a* при $\dot{\xi} = 1$ и рис. 4, *b* при $\dot{\xi} = 1 + \alpha/r(s)$, отмечаем, что во втором случае траектории сильнее искривляются вблизи центра, причем их кривизна отрицательная (имеем эффективную отталкивающую силу).

Теперь рассмотрим случай ненулевой скорости сжатия. Примем во внимание, что $\dot{r} < 0$ и знаменатель в (23) положительный. Следовательно, знак дополнительной силы F_r будет определяться величиной $\partial U_{1a} / \partial r$. На предельном цикле при $\dot{r} = 0$ (см. рис. 4, *c*) имеем

$$F_r = \alpha \frac{M\dot{\phi}(0)^2 e^{2\alpha/r} + r^2 \partial U_{1a} / \partial r}{\tilde{p} r^9 V e^{-\frac{2rV}{r}}}. \quad (25)$$

Численный расчет траекторий показывает, что при больших скоростях радиус предельного цикла (см. рис. 4, *c*) для случая $\xi = 1 + \alpha/r(s)$ уменьшается по сравнению с ситуацией одного времени релаксации, т. е. в системе наблюдается дополнительное эффективное притяжение.

Заключение. В работе получены уравнения Эйлера – Лагранжа в конфигурационном финслеровом пространстве монослоя и проведен численный анализ динамики фазового перехода. Показана гетерогенность динамики системы, что соответствует метастабильному состоянию монослоя при наличии зародышей фаз с различными временами релаксации. Распределение времен релаксации зародышей фаз характеризуется наличием максимума, при увеличении скорости сжатия монослоя высота этого максимума возрастает, причем он появляется при меньших значениях эволюционного параметра. Рост максимума в распределении времен релаксации при повышении скорости сжатия ассоциируется с появлением выраженного плато на изотерме.

В рамках лагранжевого формализма исследована динамика двумерного фазового перехода при малых скоростях сжатия и проведено сравнение поведения системы в двух приближениях: в приближении одного времени релаксации и в приближении модельного распределения времен релаксации. Показано, что существование зародышей фаз с различными временами релаксации приводит к появлению эффективной центробежной силы, величина которой зависит от градиента электрокапиллярных сил.

Список использованных источников

1. Moehwald, H. From Langmuir monolayers to multilayer films / H. Moehwald, G. Brezesinski // *Langmuir*. – 2016. – Vol. 32, № 41. – P. 10445–10458.
2. Acharya, S. Soft Langmuir – Blodgett technique for hard nanomaterials / S. Acharya, J. P. Hill, K. Ariga // *Adv. Mater.* – 2009. – Vol. 21, № 29. – P. 2959–2981.
3. Блинов, Л. М. Лэнгмюровские пленки / Л. М. Блинов // *Успехи физ. наук*. – 1988. – Т. 155, № 3. – С. 443–480.
4. Structures and phase transitions in Langmuir monolayers / D. Andelman [et al.] // *Micelles, Membranes, Microemulsions, and Monolayers* / eds.: W. M. Gelbart, A. Ben-Shaul, D. Roux. – New York: Springer, 1994. – P. 559–602.
5. Anderson, P. W. Physics: The opening to complexity / P. W. Anderson // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 1995. – Vol. 92, № 15. – P. 6653–6654.
6. Mezard, M. Spin Glass Theory and Beyond / M. Mezard, G. Parisi, M. A. Virasoro. – Singapore: World Scientific Lecture Notes in Physics, 1986. – 476 p.
7. Ostilli, M. Statistical mechanics of random geometric graphs: Geometry-induced first-order phase transition / M. Ostilli, G. Bianconi // *Phys. Rev. E*. – 2015. – Vol. 91, № 4. – P. 042136.
8. Avrami, M. Kinetics of phase change. I General Theory / M. Avrami // *J. Chem. Phys.* – 1939. – Vol. 7. – P. 1103–1112.
9. Avrami, M. Kinetics of phase change. II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei / M. Avrami // *J. Chem. Phys.* – 1940. – Vol. 8. – P. 212–224.
10. Avrami, M. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III / M. Avrami // *J. Chem. Phys.* – 1941. – Vol. 9. – P. 177–184.
11. Johnson, W. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth / W. Johnson, R. F. Mehl // *Trans. AIME*. – 1939. – Vol. 135. – P. 416–442.
12. Колмогоров, А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А. Н. Колмогоров // *Изв. АН СССР. Сер. мат.* – 1937. – Vol. 3. – P. 355–359.
13. Shur, V. Ya. Dynamics of domain structure in uniaxial ferroelectrics / V. Ya. Shur, A. L. Gruverman, E. L. Romyantsev // *Ferroelectrics*. – 1990. – Vol. 111, № 1. – P. 123–131.
14. Shur, V. Ya. Fast polarization reversal process: evolution of ferroelectric domain structure in thin films // *Ferroelectric Thin Films: Synthesis and Basic Properties* / eds.: C. A. Paz de Araujo, J. F. Scott, G. W. Taylor. – Gordon & Breach Sci. Publ., 1996. – Vol. 10, Ch. 6 – P. 153–192. – (Ferroelectricity and Related Phenomena Ser.).
15. Gutierrez-Campos, A. Domain growth, pattern formation, and morphology transitions in Langmuir monolayers. A new growth instability / A. Gutierrez-Campos, G. Diaz-Leines, R. Castillo // *J. Phys. Chem. B*. – 2010. – Vol. 114. – P. 5034–5046.
16. pH-Dependent appearance of chiral structure in a Langmuir monolayer / A. Datta [et al.] // *J. Phys. Chem. B*. – 2000. – Vol. 104, № 24. – P. 5797–5802.
17. Vollhardt, D. Kinetics of two-dimensional phase transition of Langmuir monolayers / D. Vollhardt, V. B. Fainerman // *J. Phys. Chem. B*. – 2002. – Vol. 106, № 2. – P. 345–351.

18. Грушевский, В. В. Термодинамика фазовых состояний в монослоях Лэнгмюра – Блэджетт / В. В. Грушевский, Г. В. Крылова // Низкоразмерные системы-2: Физико-химия элементов и систем с низкоразмерным структурированием (получение, диагностика, применение новых материалов и структур): сб. науч. работ. – Гродно: ГрГУ, 2005. – Вып. 4. – С. 30–36.
19. Nandi, N. Anomalous temperature dependence of domain shape in Langmuir monolayers: Role of dipolar interaction / N. Nandi, D. Vollhardt // *J. Phys. Chem. B*. – 2004. – Vol. 108, № 49. – P. 18793–18795.
20. Lopez, J. M. Influence of coexisting phases on the surface dilatational viscosity of Langmuir monolayers / J. M. Lopez, M. J. Vogel, A. H. Hirska // *Phys. Rev. E*. – 2004. – Vol. 70, № 5. – P. 056308.
21. Domain-growth kinetic origin of nonhorizontal phase coexistence plateaux in Langmuir monolayers: Compression rigidity of a raft-like lipid distribution / L. R. Arriaga [et al.] // *J. Phys. Chem. B*. – 2010. – Vol. 114, № 13. – P. 4509–4520.
22. Ruckenstein, E. Surface equation of state for insoluble surfactant monolayers at the air/water interface / E. Ruckenstein, B. Li // *J. Phys. Chem. B*. – 1998. – Vol. 102, № 6. – P. 981–989.
23. Multiple-relaxation-time Finsler-Lagrange dynamics in a compressed Langmuir monolayer / V. Balan [et al.] // *Non-linear Phenomena in Complex Systems*. – 2016. – Vol. 19, № 3. – P. 223–253.
24. Kaganer, V. M. Structure and phase transitions in Langmuir monolayers / V. M. Kaganer, H. Möhwald, P. Dutta // *Rev. Mod. Phys.* – 1999. – Vol. 71, № 3. – P. 779–819.
25. Грушевская, Г. В. Эффекты финслеровой геометрии в физике поверхностных явлений: случай монослойных систем / Г. В. Грушевская, Н. Г. Крылова // Гиперкомплексные числа в геометрии и физике. – 2011. – Т. 8. – С. 128–146.
26. Balan, V. Finsler geometry approach to thermodynamics of first order phase transitions in monolayers / V. Balan, H. Grushevskaya, N. Krylova // *Differential Geometry – Dynamical Systems*. – 2015. – Vol. 17. – P. 24–31.
27. Bao, D. An Introduction to Riemann-Finsler Geometry / D. Bao, S.-S. Chern, Z. Shen. – Berlin: Springer, 2000. – 435 p.
28. Lagrange and Finsler Geometry: Application to Physics and Biology / eds.: P. L. Antonelli, R. Miron. – Springer, 1996.
29. Modeling of the behavior and statistical analysis of compressibility in the process of Langmuir monolayer structuration / H. V. Grushevskaya [et al.] // *J. Phys.: Conf. Series*. – 2015. – Vol. 643. – P. 012015.
30. Vollhardt, D. Progress in characterization of Langmuir monolayers by consideration of compressibility / D. Vollhardt, V. B. Fainerman // *Advances in Colloid and Interface Science*. – 2006. – Vol. 127. – P. 83–97.
31. Balan, V. Jet single-time Lagrange geometry and its application / V. Balan, M. Neagu. – Wiley, 2011. – 194 p.
32. Анищенко, В. С. Сложные колебания в простых системах / В. С. Анищенко. – М.: Наука, 1990. – 312 с.

References

1. Moehwald H., Brezesinski G. From Langmuir monolayers to multilayer films. *Langmuir*, 2016, vol. 32, no. 41, pp. 10445–10458. Doi: 10.1021/acs.langmuir.6b02518
2. Acharya S., Hill J. P., Ariga K. Soft Langmuir – Blodgett technique for hard nanomaterials. *Advanced Materials*, 2009, vol. 21, no. 29, pp. 2959–2981. Doi: 10.1002/adma.200802648
3. Blinov L. M. Langmuir films. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 1988, vol. 155, no. 7, pp. 443–480 (in Russian). Doi: 10.3367/ufnr.0155.198807c.0443
4. Andelman D., Brochard F., Knobler C., Rondelez F. Structures and phase transitions in Langmuir monolayers. Gelbart W. M., Ben-Shaul A., Roux D. (eds.). *Micelles, Membranes, Microemulsions, and Monolayers*. New York, Springer, 1994, pp. 559–602. Doi: 10.1007/978-1-4613-8389-5_12
5. Anderson P. W. Physics: The opening to complexity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 1995, vol. 92, no. 15, pp. 6653–6654. Doi: 10.1073/pnas.92.15.6653
6. Mezard M., Parisi G., Virasoro M. A. *Spin Glass Theory and Beyond*. Singapore, World Scientific Lecture Notes in Physics, 1986. 476 p. Doi: 10.1142/0271
7. Ostilli, M., Bianconi G. Statistical mechanics of random geometric graphs: Geometry-induced first-order phase transition. *Physical Review E*, 2015, vol. 91, no. 4, pp. 042136. Doi: 10.1103/physreve.91.042136
8. Avrami M. Kinetics of phase change. I General Theory. *Journal of Chemical Physics*, 1939, vol. 7, pp. 1103–1112. Doi: 10.1063/1.1750380
9. Avrami M. Kinetics of phase change. II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei. *Journal of Chemical Physics*, 1940, vol. 8, pp. 212–224. Doi: 10.1063/1.1750631
10. Avrami M. Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III. *Journal of Chemical Physics*, 1941, vol. 9, pp. 177–184. Doi: 10.1063/1.1750872
11. Johnson W., Mehl R. F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth. *Trans. AIME*, 1939, vol. 135, pp. 416–442.
12. Kolmogorov A. N. To statistical theory of metal crystallization. *Izvestiya AN SSSR. Seriya matematicheskaya* [Izvestiya: Mathematics], 1937, vol. 1, no. 3, pp. 355–359 (in Russian).
13. Shur V. Ya., Gruverman A. L., Romyantsev E. L. Dynamics of domain structure in uniaxial ferroelectrics. *Ferroelectrics*, 1990, vol. 111, no. 1, pp. 123–131. Doi: 10.1080/00150199008224389
14. Shur V. Ya. Fast polarization reversal process: evolution of ferroelectric domain structure in thin films. Paz de Araujo C. A., Scott J. F., Taylor G. W. (eds.). *Ferroelectric Thin Films: Synthesis and Basic Properties. Ferroelectricity and Related Phenomena Ser. Vol. 10, Ch. 6*. Gordon & Breach Sci. Publ., 1996, pp. 153–192.
15. Gutierrez-Campos A., Diaz-Leines G., Castillo R. Domain growth, pattern formation, and morphology transitions in Langmuir monolayers. A new growth instability. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2010, vol. 114, no. 15, pp. 5034–5046. Doi: 10.1021/jp910344h

16. Datta A., Kmetko J., Yu C.-J., A. G. Richter C.-J., Chung K.-S., Bai J.-M., Dutta P. pH-Dependent appearance of chiral structure in a Langmuir monolayer. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2000, vol. 104, no. 24, pp. 5797–5802. Doi: 10.1021/jp0006375
17. Vollhardt D., Fainerman V. B. Kinetics of Two-Dimensional Phase Transition of Langmuir Monolayers. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2002, vol. 106, no. 2, pp. 345–351. Doi: 10.1021/jp012798u
18. Grushevskii V. V., Krylova H. V. The thermodynamics of phase states in Langmuir-Blodgett monolayers. *Nizkorazmernye sistemy-2: Fiziko-khimiya elementov i sistem s nizkorazmernym strukturirovaniem (poluchenie, diagnostika, priemenenie novykh materialov i struktur): sb. nauch. rabot* [Low-dimensional systems-2. Physical chemistry of elements and systems with low-dimensional structuring (acquisition, diagnostics, application of new materials and structures): a collection of scientific papers]. Grodno, Grodno State University, Is. 4, 2005, pp. 30–36 (in Russian).
19. Nandi N., Vollhardt D. Anomalous temperature dependence of domain shape in Langmuir monolayers: Role of dipolar interaction. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2004, vol. 108, no. 49, pp. 18793–18795. Doi: 10.1021/jp0461697
20. Lopez J. M., Vogel M. J., Hirs A. H. Influence of coexisting phases on the surface dilatational viscosity of Langmuir monolayers. *Physical Review E*, 2004, vol. 70, no. 5, p. 056308. Doi: 10.1103/physreve.70.056308
21. Arriaga L. R., Lopez-Montero I., Iñes-Mullol J., Monroy F. Domain-growth kinetic origin of nonhorizontal phase coexistence plateaux in Langmuir monolayers: Compression rigidity of a raft-like lipid distribution. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2010, vol. 114, no. 13, pp. 4509–4520. Doi: 10.1021/jp9118953
22. Ruckenstein E., Li B. Surface equation of state for insoluble surfactant monolayers at the air/water interface. *The Journal of Physical Chemistry B*, 1998, vol. 102, no. 6, pp. 981–989. Doi: 10.1021/jp972748i
23. Balan V., Grushevskaya H. V., Krylova N. G., Neagu M. Multiple-relaxation-time Finsler-Lagrange dynamics in a compressed Langmuir monolayer. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2016, vol. 19, no. 3, pp. 223–253.
24. Kaganer V. M., Möhwald H., Dutta P. Structure and phase transitions in Langmuir monolayers. *Reviews of Modern Physics*, 1999, vol. 71, no. 3, pp. 779–819.
25. Grushevskaya G. V., Krylova N. G. Finsler geometry effects in physics of surface phenomenon: the case of monolayer system. *Giperkompleksnye chisla v geometrii i fizike = Hypercomplex numbers in geometry and physics*, 2011, vol. 8, pp. 128–146 (in Russian).
26. Balan V., Grushevskaya H., Krylova N. Finsler geometry approach to thermodynamics of first order phase transitions in monolayers. *Differential Geometry – Dynamical Systems*, 2015, vol. 17, pp. 24–31.
27. Bao D., Chern S., Shen Z. *An Introduction to Riemann-Finsler Geometry*. Berlin, Springer, 2000. 435 p. Doi: 10.1007/978-1-4612-1268-3
28. Antonelli P. L., Miron R. (eds.). *Lagrange and Finsler geometry: Application to Physics and Biology*. Springer, 1996. Doi: 10.1007/978-94-015-8650-4
29. Grushevskaya H. V., Krylov G. G., Krylova N. G., Lipnevich I. V. Modeling of the behavior and statistical analysis of compressibility in the process of Langmuir monolayer structurization. *Journal of Physics: Conference Series*, 2015, vol. 643, p. 012015. Doi: 10.1088/1742-6596/643/1/012015
30. Vollhardt D., Fainerman V. B. Progress in characterization of Langmuir monolayers by consideration of compressibility. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2006, vol. 127, pp. 83–97. Doi: 10.1016/j.cis.2006.11.006
31. Balan V., Neagu M. *Jet single-time Lagrange geometry and its application*. Wiley, 2011. 194 p. Doi: 10.1002/9781118143759
32. Anishchenko V. S. *Complex oscillations in simple systems*. Moscow, Nauka Publ., 1990. 312 p. (in Russian).

Информация об авторах

Крылова Нина Георгиевна – научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории диэлектрической спектроскопии гетерогенных систем, физический факультет, Белорусский государственный университет (ул. Бобруйская, 5, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: krylovang@bsu.by

Грушевская Галина Владиславовна – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории диэлектрической спектроскопии гетерогенных систем, физический факультет, Белорусский государственный университет (ул. Бобруйская, 5, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: grushevskaja@bsu.by

Редьков Виктор Михайлович – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник центра теоретической физики Института физики им. Б. И. Степанова, Национальная академия наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: redkov@dragon.bas-net.by

Information about the authors

Nina G. Krylova – Researcher of the Laboratory of Dielectric Spectroscopy of Heterogeneous Systems, Physics Faculty, Belarusian State University (5, Bobruiskaya Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: krylovang@bsu.by

Halina V. Grushevskaya – Leading Researcher of the Laboratory of Dielectric Spectroscopy of Heterogeneous Systems, Physics Faculty, Belarusian State University (5, Bobruiskaya Str., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: grushevskaja@bsu.by

Viktor M. Red'kov – D. Sc. (Physics and Mathematics), Chief Researcher of the Center of Theoretical Physics, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: redkov@dragon.bas-net.by

В. Н. Белый¹, П. А. Хило², Н. С. Казак¹, Н. А. Хило¹¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь²Гомельский государственный технический университет им. П. О. Сухого, Гомель, Беларусь**НИЗКОЧАСТОТНОЕ ОБРАТНОЕ АКУСТООПТИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ
БЕССЕЛЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ**

Аннотация. Исследованы особенности акустооптической дифракции бесселева светового пучка (БСП) на бесселевом акустическом пучке (БАП) в поперечно анизотропных кристаллах. Рассмотрена схема акустооптического (АО) взаимодействия, когда ТН-поляризованный (или *e*-поляризованный) БСП падает на оптически одноосный кристалл в направлении оптической оси *c* и за счет анизотропной дифракции ТН→ТЕ падающий *e*-БСП возбуждает в кристалле рассеянный *o*-БСП. Задача АО дифракции решается для поперечно изотропных кристаллов, цилиндрически симметричная геометрия которых полностью согласована по симметрии с БСП и БАП, распространяющихся вдоль оптической оси, и процесс АО взаимодействия происходит без искажения пространственной структуры пучков. Показано, что в процессе обратного акустооптического рассеяния использование бесселевых световых пучков с большим углом конуса позволяет значительно уменьшить необходимую для выполнения условия продольного синхронизма частоту акустической волны (до значений менее 1 ГГц). Установлено, что эффективность АО взаимодействия БСП и БАП определяется не только интенсивностью акустического поля, продольной волновой расстройкой и длиной взаимодействия, как в случае плоских волн, но и поперечной структурой бесселевых пучков. Эта структура определяет величину интегралов перекрытия и, следовательно, эффективные АО параметры. При выполнении условий продольного и поперечного синхронизмов возможно достижение высокой эффективности дифракции, близкой к единице, а угловая ширина основного максимума составляет при этом величину ~0,5 мрад и возрастает при увеличении акустической мощности. Установлено, что при дифракции БСП происходит трансформация порядка его фазовой дислокации на величину, равную порядку фазовой дислокации БАП. Из-за малой ширины углового спектра рассеянного БСП обратное акустооптическое рассеяние бесселевых световых пучков перспективно для разработки низкочастотных акустооптических фильтров и спектроанализаторов, а свойство самореконструкции поперечной структуры перспективно для применений бесселевых пучков в дефектоскопии.

Ключевые слова: бесселевы световые пучки, бесселевы акустические пучки, акустооптическая дифракция, поперечный синхронизм, интегралы перекрытия

Для цитирования. Низкочастотное обратное акустооптическое рассеяние бесселевых световых пучков / В. Н. Белый [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 78–86.

V. N. Belyi¹, P. A. Khilo², N. S. Kazak¹, N. A. Khilo¹¹*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*²*Sukhoi State Technical University of Gomel, Gomel, Belarus***LOW-FREQUENCY BACKWARD ACOUSTO-OPTIC SCATTERING OF BESSEL LIGHT BEAMS**

Abstract. The features of acousto-optic diffraction of a Bessel light beam (BLB) on a Bessel acoustic beam (BAB) in transversely anisotropic crystals are investigated. The scheme of acousto-optic (AO) interaction is considered when the incident TH-polarized BLB propagating along the optical *c* axis of an optically uniaxial crystal is excited in the crystal of the TE-polarized BLB due to the process of anisotropic TH→TE diffraction. The diffraction problem is solved for transversely isotropic crystals, whose cylindrical symmetry is fully consistent with the symmetry of both BLB and BAB propagating along the optical axis and the AO interaction occurs without distortion of the spatial structure of beams. It is shown that in the process of backward acousto-optic scattering, the use of Bessel light beams with a large cone angle makes it possible to significantly reduce the frequency of the acoustic wave necessary for satisfying the longitudinal synchronism condition (values of less than 1 GHz). It is established that the efficiency of the AO interaction of the BLB and the BAB is determined not only by the intensity of the acoustic field, longitudinal wave detuning and the interaction length, but also by the period of transverse oscillations of Bessel beams. These oscillations determine the value of the overlap integrals and, consequently, the effective AO parameters. When the conditions of longitudinal and transverse synchronisms are realized, it is possible to achieve the high diffraction efficiency close to unity. The angular width of transverse synchronism is equal to about 0.5 mrad and increases with increasing acoustic power. It is shown that when the BLB is diffracted, the order of its phase dislocation changes by a value that is equal to the order of BAB phase dislocation. Because of the narrow angular spectrum of a scattered field, the backward AO diffraction of Bessel light beams is promising for the development of low-frequency AO filters and spectrum analyzers. The property of self-reconstruction of the transverse profile of an optical field is promising for applications of Bessel light beams in defectoscopy.

Keywords: Bessel light beams, Bessel acoustic beams, acousto-optic diffraction, transverse synchronism, overlap integrals

For citation. Belyi V. N., Khilo P. A., Kazak N. S., Khilo N. A. Low-frequency backward acousto-optic scattering of Bessel light beams. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 78–86 (in Russian).

Введение. Дифракция света на ультразвуке, или акустооптическое (АО) взаимодействие, представляет значительный интерес для исследований ввиду многочисленных применений данного явления в науке и технике. Акустооптические устройства позволяют эффективно управлять различными характеристиками светового поля, такими как интенсивность, частота, состояние поляризации, направление распространения и др. [1–2]. Использование в акустооптике бесселевых пучков (БП) представляет научный и практический интерес из-за наличия в таких пучках новых свойств, не характерных для пучков гауссова типа. К ним относятся в первую очередь бездифракционность и самовосстановление пространственного профиля за препятствиями. Указанные свойства обусловлены конической структурой пространственного спектра БП и в одинаковой степени присущи как бесселевым световым пучкам (БСП), так и бесселевым акустическим пучкам (БАП). Важно также, что БП соответствуют точным решениям волновых уравнений оптики и акустики и имеют одинаковую функциональную структуру как для параксиальных, так и непараксиальных полей, в том числе для эванесцентных бесселевых пучков, что позволяет применять единый подход при описании различных акустооптических устройств.

Применение БАП позволит значительно расширить возможности акустооптики в преобразовании характеристик БСП, таких как порядок фазовой дислокации волнового фронта, угол конусности, угловая расходимость. Свойство бездифракционности бесселевых световых и акустооптических пучков перспективно для повышения точности функционирования ряда устройств акустооптики, в частности спектроанализаторов, фильтров, а также модуляторов и дефлекторов. Свойство самореконструкции волнового фронта важно для применений БП в дефектоскопии. Коллинеарное акустооптическое взаимодействие в анизотропных кристаллах для разделения ТЕ- и ТН-поляризованных бесселевых пучков из их суперпозиций исследовалось в [3]. В работах [4, 5] проведено обобщение эффекта АО дифракции на случай, когда и световой, и акустический пучки являются бесселевыми.

Одним из режимов акустооптического взаимодействия, который относительно трудно реализовать при дифракции света на объемных акустических волнах, является обратное рассеяние, известное также как брэгговское отражение [6]. Основное препятствие для реализации данного режима – необходимость использовать высокие частоты ультразвука, порядка десяти гигагерц. Снизить акустическую частоту здесь можно только за счет увеличения длины волны электромагнитного излучения, т. е. выхода из видимого в средний инфракрасный диапазон длин волн.

Далее будет показано, что применение бесселевых световых пучков позволяет реализовать брэгговское отражение в видимом диапазоне без перехода в ГГц-область акустических частот.

Задача АО дифракции решается для поперечно изотропных кристаллов, цилиндрически симметричная геометрия которых полностью согласована по симметрии с БСП и БАП, распространяющихся вдоль оптической оси. В этом случае акустооптический процесс происходит без искажения пространственной структуры пучков.

1. Распространение бесселевых световых пучков вдоль оптической оси одноосного кристалла. При распространении вдоль оптической оси векторы электрического поля ТЕ- и ТН-поляризованных БСП в цилиндрической системе координат (ρ, ϕ, z) имеют вид

$$\vec{E}_{TE} = A_m^o (\vec{c}_+ J_{m-1}(qr) + \vec{c}_- J_{m+1}(qr)) \exp(im\phi + ik_{o,z}z), \quad (1)$$

$$\vec{E}_{TH} = A_m^e \left[\vec{c}_+ J_{m-1}(qr) - \vec{c}_- J_{m+1}(qr) - \frac{2iq\epsilon_o}{k_{ez}\epsilon_e} J_m(qr) \vec{e}_z \right] \exp(im\phi + ik_{e,z}z), \quad (2)$$

где $J_n(q_s\rho)$ – бесселева функция порядка n , $\vec{c}_\pm = (\vec{e}_r \pm i\vec{e}_\phi)$ – векторы циркулярной поляризации в цилиндрических координатах,

$$k_{o,z} = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_o - q^2}, \quad k_{e,z} = (n_o/n_e) \sqrt{k_0^2 \varepsilon_e - q^2}. \quad (3)$$

Далее формулы (1) и (2) будем представлять в сокращенном виде

$$\vec{E}_m^{(o)}(r, t) = A_m^o \vec{e}_m^{(o)}(\rho, \phi) \exp(ik_{o,z}z - i\omega t), \quad (4)$$

$$\vec{E}_m^{(e)}(r, t) = A_m^e \vec{e}_m^{(e)}(\rho, \phi) \exp(ik_{e,z}z - i\omega t), \quad (5)$$

где введены обозначения для векторных модовых функций

$$\vec{e}_m^{(o)}(\rho, \phi) = (\vec{c}_+ J_{m-1}(qr) + \vec{c}_- J_{m+1}(qr)) \exp(im\phi), \quad (6)$$

$$\vec{e}_m^{(e)}(\rho, \phi) = \left(\vec{c}_+ J_{m-1}(qr) - \vec{c}_- J_{m+1}(qr) - \frac{2iq\varepsilon_o}{k_{ez}\varepsilon_e} J_m(qr) \vec{e}_z \right) \exp(im\phi). \quad (7)$$

Векторные функции $\vec{e}_m^{(o)}(\rho, \phi)$ и $\vec{e}_m^{(e)}(\rho, \phi)$ взаимно ортогональны, т. е. скалярные произведения $\vec{e}_m^{(o)}(\rho, \phi) \vec{e}_m^{(e)}(\rho, \phi) = 0$ в любой пространственной точке и при любых m .

Как видим, в отличие от плоских волн, два бесселевых пучка, распространяющихся вдоль оптической оси одноосного кристалла, состоят из суперпозиций лево- и право-циркулярно-поляризованных компонент. При этом амплитуды данных компонент неодинаково зависят от радиальной координаты: для БСП m -го порядка эта зависимость, как следует из (1), (2), описывается бесселевыми функциями соответственно $m - 1$ и $m + 1$ порядков. Кроме того, e -пучок содержит, как и в случае плоских волн, продольную компоненту, пропорциональную бесселевой функции m -го порядка.

Отметим, что в частном случае $m = 0$ решения (1), (2) соответствуют азимутально- и радиально-поляризованным ТЕ- и ТН-пучкам. В этом случае ТЕ-поляризация совпадает с поляризацией обыкновенных (o) плоских волн, а ТН- поляризация – с поляризацией необыкновенных (e) плоских волн. В дальнейшем для удобства будем использовать обозначения o -волна и e -волна и для общего случая ТЕ- и ТН-поляризованных БСП при любом m .

2. Бесселевы акустические пучки в поперечно изотропных кристаллах. Для описания БАП будем использовать теоретический подход, описанный в работах [7] и [8]. Для так называемой SH -волны (поперечная волна смещения) в поперечно изотропном кристалле компоненты вектора смещения могут быть представлены в виде [5]

$$\vec{U} = u_0 \left[J_n^+(q_s \rho) \cos(n\phi) \vec{e}_\rho + J_n^-(q_s \rho) \sin(n\phi) \vec{e}_\phi \right] \exp i(k_{s,z}z - \Omega t), \quad (8)$$

где $J_n^\pm(q_s \rho) = J_{n-1}(q_s \rho) \pm J_{n+1}(q_s \rho)$, $q_s = k_s \sin(\gamma_s)$ и $k_{s,z} = \sqrt{k_s^2 - q_s^2}$ – радиальная и продольная компоненты волнового вектора \vec{k}_s , относящегося к БАП; γ_s – угол конуса БАП; $u_0 = \sqrt{\frac{P}{\rho v^3}} \frac{1}{k_{s,z} W}$; P – мощность акустической волны; ρ – плотность кристалла; $v = 2\pi f/k_s$ – фазовая скорость; f – частота; $W_s = 2\pi \int_0^{R_b} (J_{n-1}^2(q_s \rho) + J_{n+1}^2(q_s \rho)) \rho d\rho$; R_b – радиус бесселева акустического пучка.

3. Векторная диаграмма обратного рассеяния. Рассмотрим схему АО взаимодействия, когда ТН-поляризованный (или e -поляризованный) БСП падает на оптически одноосный кристалл в направлении оптической оси c (рис. 1). Далее будет рассматриваться анизотропная дифракция ТН→ТЕ или $e \rightarrow o$ типа, когда падающий e -БСП возбуждает в кристалле рассеянный o -БСП.

Векторная диаграмма, иллюстрирующая рассматриваемую геометрию рассеяния в плоскости (x, z) , показана на рис. 1. Волновые векторы k_e и $k_{o,d}$ относятся к падающему и дифрагированному БСП в кристалле, распространяющимся в направлениях z и $-z$ соответственно. Отметим, что угол между этими волновыми векторами мал и поэтому обратное брэгговское рассеяние может быть реализовано на относительно низких акустических частотах (менее 1 ГГц). В то же время падающий и рассеянный БСП, в отличие от плоских волн с волновыми векторами k_e и $k_{o,d}$,

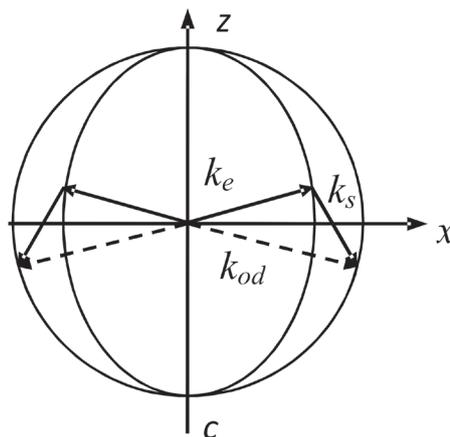


Рис. 1. Взаимная ориентация волновых векторов при обратном рассеянии БСП типа $e \rightarrow o$
 Fig. 1. Orientation of the wave vectors under $e \rightarrow o$ type backscattering of the Bessel light beam

распространяются в противоположных направлениях. Волновой вектор k_s на рис. 1 относится к БАП. Проекции векторов k_e , $k_{o,d}$ и k_s на границу раздела будем называть поперечными волновыми числами БП.

В общем случае в рассматриваемой схеме возможны четыре типа АО взаимодействия, т. е. $e \rightarrow o$; $o \rightarrow e$; $e \rightarrow e$; $o \rightarrow o$, эффективности которых зависят от выполнения условий синхронизма. Применительно к рассматриваемому далее рассеянию $e \rightarrow o$ условие векторного синхронизма имеет вид [5, 8]

$$\vec{k}_e + \vec{k}_s = \vec{k}_{d,o}. \tag{9}$$

Проекция векторных уравнений (9) на ось z и на плоскость (x, y) дает условия так называемых продольного и поперечного синхронизмов.

На рис. 1 показаны волновые векторы, соответствующие анизотропной дифракции $e \rightarrow o$ на бесселевом акустическом пучке. Исходя из (9) рассчитаем частоту f_s БАП и его угол конусности, необходимые для реализации синхронного брэгговского отражения. Из уравнения (9) следует:

$$f_s = \frac{vk_o}{2\pi} \left[n_o^2 + n_e^2(\gamma_e) - 2n_on_e(\gamma_e)\cos(\gamma_{od} - \gamma_e) \right]^{1/2}, \tag{10}$$

$$\text{tg}(\gamma_s) = \frac{k_o \sin(\gamma_{od}) - k_e \sin(\gamma_e)}{k_o \cos(\gamma_{od}) - k_e \cos(\gamma_e)}. \tag{11}$$

Отметим, что все углы в приведенных формулах отсчитываются от положительного направления оси z по часовой стрелке.

На рис. 2 представлены зависимости частоты БАП, необходимой для реализации обратного рассеяния от угла конуса дифрагированного БСП. Как следует из графиков, частота f_s не превышает 1 ГГц при углах дифракции до 100 градусов. Для сравнения, в случае обратного рассеяния БСП на плоской ультразвуковой волне ее частота в условиях синхронизма находится из соотношения

$$f_s = \frac{v}{2\pi} (k_{ez}(\gamma_e) + k_{oz}(\gamma_e)) \tag{12}$$

и для углов падения $\gamma_e = 81$ и 85 град равна соответственно 2,3 и 2,0 ГГц. Если же обратное рассеяние $e \rightarrow o$ осуществляется в схеме с плоскими световой и акустической волнами, распространяющимися перпендикулярно оптической оси, то частота составляет 8,2 ГГц. Таким образом, переход от плоских волн к бесселевым световому и акустическому пучкам приводит к существенному понижению частоты акустического поля.

В общем случае АО взаимодействие БСП и БАП происходит при некоторой отстройке от синхронизма (рис. 3). Легко видеть, что если волновой вектор дифрагированного поля заканчивается в точке I , то имеет место поперечный синхронизм, но максимальная продольная

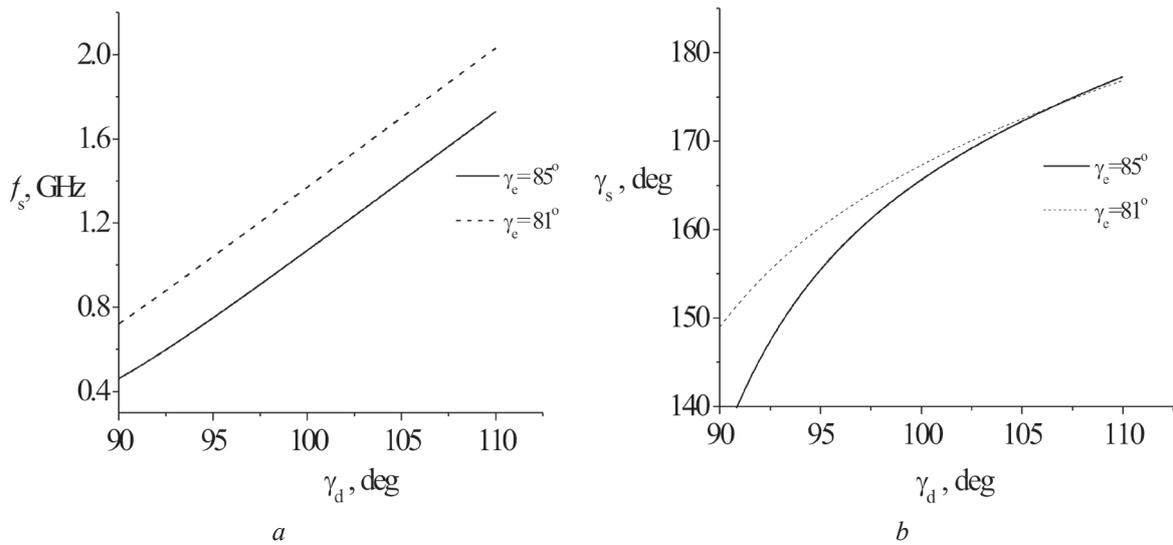


Рис. 2. Зависимость частоты (а) и угла конуса (б) БАП при обратном рассеянии в кристалле LiJO₃: $\gamma_c = 81$ и 85 град; $\lambda = 1,06$ мкм; $\epsilon_o = 3,43$; $\epsilon_e = 2,92$; $\rho = 4,6 \cdot 10^3$ кг/м³; $P = 2$ Вт; $v = 2,35 \cdot 10^3$ м/с; толщина кристалла $L = 3$ мм
 Fig. 2. Frequency (a) and cone angle (b) of the Bessel acoustic beam vs. the cone angle of the diffracted Bessel light beam for backscattering in a LiJO₃ crystal: $\gamma_c = 81^\circ$ and 85° ; $\lambda = 1.06$ μm ; $\epsilon_o = 3.43$; $\epsilon_e = 2.92$; $\rho = 4.6 \cdot 10^3$ kg/m³; $P = 2$ W; $v = 2.35 \cdot 10^3$ m/s; the crystal length L is equal to 3 mm

расстройка. В точке 2, наоборот, имеет место фазовый синхронизм и максимальная поперечная расстройка. В этих условиях невозможно априори сделать вывод о направлении вектора k_{od} рассеянного бesselового светового пучка.

С помощью векторной диаграммы (см. рис. 3) несложно рассчитать продольную и поперечную волновые расстройки [5]. Для произвольной ориентации волнового вектора между точками 1 и 2 величина q изменяется в интервале между q_1 и q_2 , где

$$q_1 = k_{e,in} \sin \gamma_{e,in} + k_s \sin \gamma_s, \quad q_2 = \sqrt{k_0^2 \epsilon_o - k_{z2}^2}, \tag{13}$$

а

$$k_{z2} = k_{e,in} \cos \gamma_{e,in} + k_s \cos \gamma_s.$$

Далее по известной величине q рассчитывается интеграл перекрытия (см. п. 4), интенсивность отраженного поля на выходе кристалла и его угловое распределение.

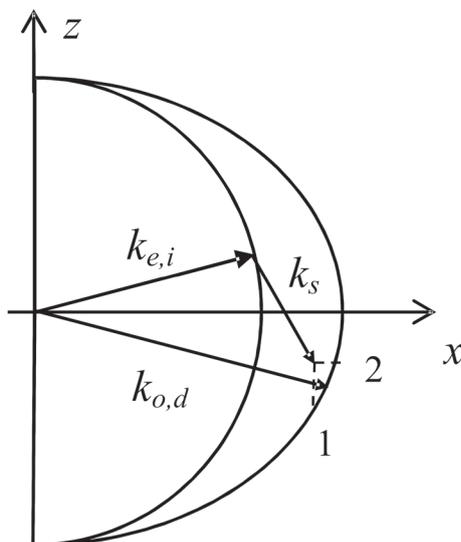


Рис. 3. Векторная диаграмма акустооптического взаимодействия при отсутствии продольного и поперечного синхронизмов
 Fig. 3. Vector diagram of acousto-optic interaction in the absence of longitudinal and transverse synchronisms

4. Уравнения для медленно меняющихся амплитуд (ММА). При наличии АО преобразования взаимодействующие БСП описываются в общем случае уравнением Гельмгольца

$$\left(\Delta - c^{-2}\partial_t^2(\epsilon + \Delta\epsilon)\right)\vec{E} = 0, \tag{14}$$

где $\Delta\epsilon_{ij} = -\epsilon_{ik}^0\epsilon_{je}^0 p_{kenn}u_{mn}$ – изменение тензора диэлектрической проницаемости кристалла, индуцированное акустической волной, ϵ_{ik}^0 – диэлектрическая проницаемость кристалла в отсутствие ультразвука, p_{kenn} – компоненты тензора фотоупругих постоянных, u_{mn} – компоненты тензора упругих деформаций.

Будем предполагать, что АО взаимодействие бesselевых пучков, так же как и плоских волн, приводит в первую очередь к z -модуляции скалярных амплитуд $A_{o,e}$ в формулах (4), (5). В то же время векторные модовые функции $\vec{e}_m^{(o),(e)}(\rho, \phi)$ будем считать неизменными. Для получения ММА-уравнений, описывающих трансформацию падающего БСП m -го порядка e -типа в БСП порядка $m + n$ o -типа при дифракции на БАП n -го порядка, подставляем в уравнение Гельмгольца (14) решения в виде (4), (5) с зависящими от z амплитудами $A_{o,e}$ и получаем

$$\frac{dA_{m+n}^o}{dz} = -i\chi_{m+n,m}^{oe} A_m^e \exp(-i\Delta k_z z), \tag{15}$$

$$\frac{dA_m^e}{dz} = i\chi_{m,m+n}^{eo} A_{m+n}^o \exp(i\Delta k_z z). \tag{16}$$

Акустооптические параметры $\chi_{m+n,m}^{oe}$ и $\chi_{m,m+n}^{eo}$ имеют вид

$$\chi_{m+n,m}^{oe} = \alpha_{m+n}^o g(m, n), \tag{17}$$

$$\chi_{m,m+n}^{eo} = \alpha_m^e g(m, n), \tag{18}$$

где

$$g(m, n) = 2\pi \int_0^{Rb} J_m(q_{in}\rho) [J_{m+n-1}(q\rho)J_{n-1}(q_s\rho) + J_{m+n+1}(q\rho)J_{n+1}(q_s\rho)] \rho d\rho, \tag{19}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{m+n}^o \\ \alpha_m^e \end{pmatrix} = \frac{k_0^2 \Delta\epsilon_0 q_{in} \epsilon_o}{\epsilon_e} \begin{pmatrix} (k_{oz} k_{ez} W_{m+n}^o)^{-1} \\ (k_{ez}^2 W_m^e)^{-1} \end{pmatrix},$$

$$W_m^o(q) = 2\pi \int_0^{Rb} [J_{m-1}(q\rho)^2 + J_{m+1}(q\rho)^2] \rho d\rho, \tag{20}$$

$$W_m^e(q_{in}) = 2\pi \int_0^{Rb} \left[J_{m-1}(q_{in}\rho)^2 + J_{m+1}(q_{in}\rho)^2 + 2 \left(\frac{q_{in} \epsilon_o}{k_{ez} \epsilon_e} \right)^2 J_m(q_{in}\rho)^2 \right] \rho d\rho. \tag{21}$$

Как видим, АО параметры имеют смысл интегралов перекрытия, так как их величина пропорциональна степени пространственного перекрытия бesselевых функций, описывающих БСП и БАП.

Решение системы уравнений (15), (16) для амплитуды дифрагированного бesselева пучка $A_{m+n}^o(z)$ имеет вид

$$A_{m+n}^o(z) = \frac{\chi_{m+n,m}^{oe} \text{sh}[p(L-z)]}{p \text{ch}(pL) + (i\Delta k_z/2) \text{sh}(pL)} A_e \exp(-i\Delta k_z z/2), \tag{22}$$

где L – длина АО взаимодействия, $p^2 = \chi^2 - (\Delta k_z/2)^2$, $\chi^2 = \chi_{m,m+n}^{eo} \cdot \chi_{m+n,m}^{oe}$. При $\chi > \Delta k_z/2$ эффективность обратного рассеяния η_{eo} равна

$$\eta_{eo} = \frac{(\chi_{m+n,m}^{oe})^2 \text{th}^2(pL)}{p^2 + (\Delta k_z/2)^2 \text{th}^2(pL)}. \tag{23}$$

При $\chi < \Delta k_z/2$ имеем

$$\eta_{eo} = \frac{(\chi_{m+n,m}^{oe})^2 \operatorname{tg}^2(p_0 L)}{p_0^2 + (\Delta k_z/2)^2 \operatorname{tg}^2(p_0 L)}, \quad (24)$$

где $p_0 = ip$. При $\Delta k_z = 0$, т. е. в условиях продольного синхронизма, получим

$$\eta_{eo} = \frac{\chi_{m+n,m}^{oe}}{\chi_{m,m+n}^{eo}} \operatorname{th}^2(pL). \quad (25)$$

Отметим, что в наиболее важном случае малых значений Δk_z реализуется процесс дифракции, который характеризуется монотонным увеличением коэффициента преобразования по мере возрастания толщины кристалла и АО параметров $\chi_{m,m+n}^{eo}$ и $\chi_{m+n,m}^{oe}$.

Из полученных формул следует, что эффективность АО взаимодействия БСП и БАП определяется не только интенсивностью акустического поля, волновой расстройкой Δk_z и длиной взаимодействия L , аналогично случаю плоских волн, но и поперечной структурой бesselов пучка. Эта структура определяет величину интегралов перекрытия (17), (18), интегралов мощности (20), (21) и, следовательно, АО параметры $\chi_{m,m+n}^{eo}$ и $\chi_{m+n,m}^{oe}$. При этом в условиях поперечного синхронизма имеем $\chi = \chi_{\max}$.

На рис. 4 показаны зависимости эффективности рассеяния η_{eo} при $\Delta k_z = 0$ от расстройки поперечного волнового числа $\Delta q = q - q_2$. Как видно, графики зависимости эффективности дифракции от поперечной расстройки имеют характерный профиль с максимумом и боковыми осцилляциями. Максимум реализуется в точке $\Delta q = 0$, соответствующей выполнению поперечного синхронизма. Максимальное значение эффективности дифракции достаточно велико и может приближаться к единице при оптимизации оптической схемы. Угловая ширина основного максимума на рис 4, *a* составляет величину $\sim 0,5$ мрад и возрастает при увеличении акустической мощности (рис. 4, *b*). Далее, из рис. 4, *a* следует, что при заданной мощности падающего БСП эффективность преобразования повышается при уменьшении диаметра пучка. Это вызвано тем, что уменьшение диаметра БАП при неизменной его мощности приводит к возрастанию интенсивности поля и, соответственно, к увеличению глубины АО модуляции диэлектрической проницаемости. Влияние акустической мощности на эффективность дифракции показано на рис 4, *b*. Здесь наблюдается горизонтальное плато, вне которого имеет место резкое падение эффек-

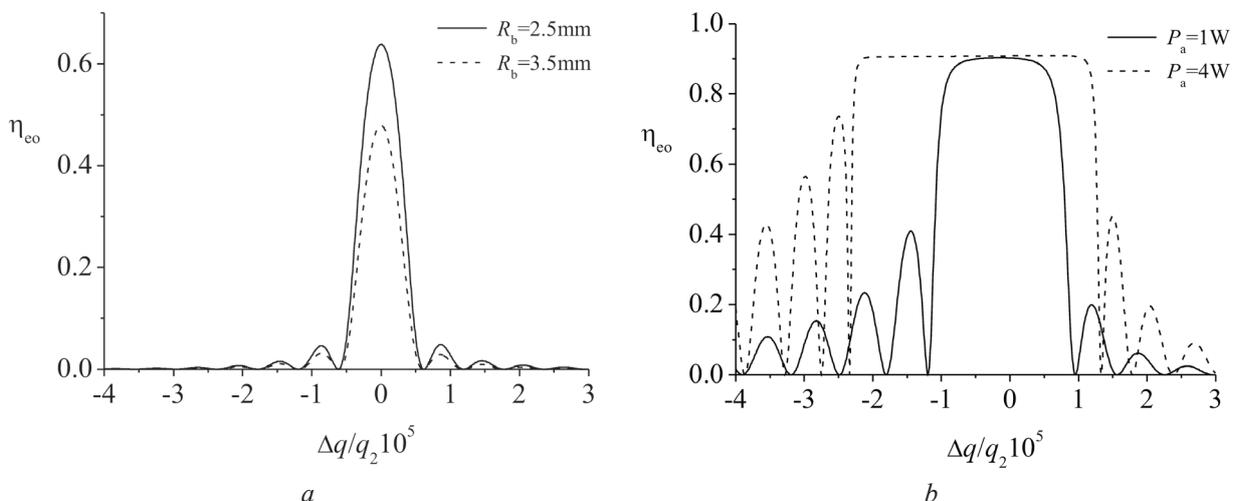


Рис. 4. Зависимость эффективности обратного рассеяния η_{eo} от расстройки поперечного волнового числа Δq . Параметры: $P_a = 1$ Вт, $R_b = 2,5$ и $3,5$ мм (*a*); $P_a = 1,0$ и $4,0$ Вт (*b*); $R_b = 4,5$ мм (*a, b*); $f_s = 0,72$ ГГц (*a, b*); $\gamma_e = 85$ град (*a, b*)

Fig. 4. Backscattering efficiency vs. the detuning of the transverse wave number Δq . The parameters are: $P_a = 1$ W, $R_b = 2.5$ and 3.5 mm (*a*); $P_a = 1.0$ and 4.0 W (*b*); $R_b = 4.5$ mm (*a, b*); $f_s = 0.72$ GHz (*a, b*); $\gamma_e = 85^\circ$ (*a, b*)

тивности. Ширина плато растёт при возрастании акустической мощности, т. е. при увеличении глубины модуляции индуцируемой в среде дифракционной решетки. Кроме того, возрастает уровень боковых осцилляций, что ведет к уширению углового спектра рассеянного БСП. Отметим, что аналогичные эффекты наблюдаются и при дифракции плоских волн (см., напр., [9]).

Заключение. В работе исследован процесс обратного акустооптического рассеяния с участием бесселевых светового и акустического пучков. Рассмотрена схема анизотропной дифракции типа $e \rightarrow o$, когда падающий ТН-поляризованный бесселев световой пучок трансформируется в дифрагированный ТЕ-поляризованный БСП. Показано, что обратное рассеяние может быть реализовано на относительно низких частотах акустического поля, меньших 1 ГГц. При выполнении условий продольного и поперечного синхронизмов возможно достижение высокой эффективности дифракции, близкой к единице. Особенностью дифрагированного БСП является трансформация порядка его фазовой дислокации на величину, равную порядку фазовой дислокации БАП. Малая ширина углового спектра рассеянного БСП позволяет использовать рассмотренную схему для разработки низкочастотных акустооптических фильтров и спектроанализаторов. Свойство самореконструкции поперечной структуры перспективно для применений бесселевых пучков в дефектоскопии.

Список использованных источников

1. Korpel, A. *Acousto-Optics* / A. Korpel. – New York, Taylor & Francis, 1996. – 330 p.
2. Балакший, В. И. Физические основы акустооптики / В. И. Балакший, В. Н. Парыгин, Л. И. Чирков. – М.: Радио и связь, 1985. – 279 с.
3. Generation of TH- and TE-polarized Bessel light beams at acousto-optic interaction in anisotropic crystals / P. A. Khilo [et al.] // *Opt. Commun.* – 2014. – Vol. 325, № 7. – P. 84–91.
4. Transformation of phase dislocations under acousto-optic interaction of optical and acoustical Bessel beams / V. N. Belyi [et al.] // *J. Opt.* – 2016. – Vol. 18. – P. 074002 (6 pp.).
5. Особенности акустооптического взаимодействия световых и акустических бесселевых пучков в поперечно изотропных кристаллах / В. Н. Белый [и др.] // *Опт. журн.* – 2017. – Т. 84. – С. 81–89.
6. Oliveira, E. B. Backward collinear acoustooptic interactions in bulk Materials / E. B. Oliveira, Cheng-Kuei Jen // *Appl. Opt.* – 1990. – Vol. 29, № 6. – P. 836–840.
7. Honarvar, F. Acoustic wave scattering from transversely isotropic cylinders / F. Honarvar, N. N. Sinclair // *J. Acoust. Soc. Am.* – 2003. – Vol. 100, № 1. – P. 57–63.
8. Ahmad, F. Acoustic scattering by transversely isotropic cylinders / F. Ahmad, A. Rahman // *Int. J. Eng. Sci.* – 2000. – Vol. 38, № 8. – P. 325–335.
9. He, J. Resonant acousto-optical interaction in superlattices / J. He, J. Sapriel // *Appl. Phys. Lett.* – 1993. – Vol. 55, № 22. – P. 2292–2294.

References

1. Korpel A. *Acousto-Optics*. New York, Taylor & Francis, 1996. 330 p.
2. Balakshy V. I., Parygin V. N., Chirkov L. E. *Physicals principles of acousto-optics*, Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1985, 279 p. (in Russian).
3. Khilo P. A., Kazak N. S., Khilo N. A. and Belyi V. N. Generation of TH- and TE-polarized Bessel light beams at acousto-optic interaction in anisotropic crystals. *Optics Communications*, 2014, vol. 325, no. 7, pp. 84–91. Doi: 10.1016/j.optcom.2014.03.061
4. Belyi V. N., Khilo P. A., Kazak N. S., Khilo N. A. Transformation of phase dislocations under acousto-optic interaction of optical and acoustical Bessel beams. *Journal of Optics*, 2016, vol. 18, pp. 074002 (6 pp.). Doi: 10.1088/2040-8978/18/7/074002
5. Belyi V. N., Khilo P. A., Kazak N. S., Khilo N. A. Features of the acousto-optic interaction of Bessel light beams and Bessel acoustic beams in transversely isotropic crystals. *Journal of Optical Technology*, 2017, vol. 84, no. 2, pp. 130–136. Doi: 10.1364/jot.84.000130
6. Oliveira E. B., Cheng-Kuei Jen. Backward collinear acoustooptic interactions in bulk Materials. *Applied Optics*, 1990, vol. 29, no. 6, pp. 836–840. Doi: 10.1364/ao.29.000836
7. Honarvar F., Sinclair N. N. Acoustic wave scattering from transversely isotropic cylinders. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2003, vol. 100, no. 1, pp. 57–63. Doi: 10.1121/1.415868
8. Ahmad F., Rahman A. Acoustic scattering by transversely isotropic cylinders. *International Journal of Engineering Science*, 2000, vol. 38, no. 3, pp. 325–335. Doi: 10.1016/s0020-7225(99)00031-2
9. He J., Sapriel J. Resonant acousto-optical interaction in superlattices. *Applied Physics Letters*, 1993, vol. 55, no. 22, pp. 2292–2294. Doi: 10.1063/1.102041

Информация об авторах

Белый Владимир Николаевич – член-корреспондент, доктор физико-математических наук, заведующий центром «Диагностические системы», Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: v.belyi@dragon.bas-net.by

Хило Петр Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики, Гомельский технический университет им. П. О. Сухого (пр. Октября, 48, 246746, г. Гомель, Республика Беларусь). E-mail: khilo_p@tut.by

Казак Николай Станиславович – академик, доктор физико-математических наук, директор Института физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: lod@dragon.bas-net.by

Хило Николай Анатольевич – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории оптической диагностики, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: n.khilo@dragon.bas-net.by

Information about the authors

Vladimir N. Belyi – Corresponding Member, D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Center “Diagnostic Systems”, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.belyi@dragon.bas-net.by

Piotr A. Khilo – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of General Physics, Sukhoy State Technical University of Gomel (48, Oktyabrya Ave., 48, 246746, Gomel, Republic of Belarus). E-mail: khilo_p@tut.by

Nikolai S. Kazak – Academician, D. Sc. (Physics and Mathematics), Director of the B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lod@dragon.bas-net.by

Nikolai A. Khilo – Ph. D. (Physics and Mathematics), Leading Scientific Researcher of the Laboratory for Optical Diagnostics, B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: n.khilo@dragon.bas-net.by

Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко

Белорусский государственный университет, г. Минск, Беларусь

АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Аннотация. Проведено численное моделирование электронной структуры квантовой точки, индуцированной электрическим полем наноразмерного дискообразного затвора и находящейся во внешнем магнитном поле. С помощью метода конечных элементов рассчитаны зависимости энергетического спектра электрона от величины магнитного поля и потенциала на затворе. Обнаружено наличие последовательности точек квазипересечения электронных уровней при относительно слабых магнитных полях, а также существование групп близких уровней энергии (электронных оболочек). Показано, что, несмотря на существенное отличие потенциала затвора от параболического потенциала, для качественного описания электронной структуры электрически индуцированной квантовой точки возможно использование модели приповерхностного анизотропного гармонического осциллятора. На основании этой модели описаны закономерности эволюции структуры волновых функций при изменении потенциала затвора и магнитного поля. В частности, модель анизотропного осциллятора позволяет предсказать появление точек квазипересечения электронных уровней при изменении внешних полей, а также квазивырождение состояний с различными значениями проекции орбитального момента импульса.

Ключевые слова: квантовая точка, численное моделирование, энергетический спектр, квазипересечение, анизотропный гармонический осциллятор

Для цитирования. Левчук, Е. А. Анализ электронной структуры электрически индуцированной квантовой точки во внешнем магнитном поле / Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 87–98.

E. A. Levchuk, L. F. Makarenko

Belarusian State University, Minsk, Belarus

ANALYSIS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF AN ELECTRICALLY INDUCED QUANTUM DOT IN THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD

Abstract. Numerical modeling of the electronic structure of a quantum dot, induced by an electric field of a nanosized disc-shaped gate, is carried out in the presence of external magnetic field. The dependences of an electronic energy spectrum on electric and magnetic fields are calculated using the finite element method. It has been found that a series of anti-crossing points for electronic levels takes place at relatively small magnetic fields. The existence of groups of close-energy levels (electronic shells) has been found. It has been shown that despite the essential distinction of the gate potential from the parabolic one, a model of a near-surface anisotropic harmonic oscillator can be effectively used for a qualitative description of the electronic structure of the electrically induced quantum dot. With the use of this model, the evolution of energy spectrum and wave function structure with magnetic and electric fields is described. In particular, the anisotropic oscillator model allows to predict anti-crossing points of electronic levels in external fields, as well as quasi-degeneracy of states having different values of the angular momentum projection.

Keywords: quantum dot, numerical modeling, energy spectrum, anti-crossing, anisotropic harmonic oscillator

For citation. Levchuk E. A., Makarenko L. F. Analysis of the electronic structure of an electrically induced quantum dot in the external magnetic field. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 87–98 (in Russian).

Введение. Полупроводниковая квантовая точка (КТ) – это область полупроводника, имеющая нанометровые размеры, где движение носителей заряда ограничено электрическими полями. Такие поля могут возникать либо в результате погружения в матрицу более широкозонного полупроводника полупроводниковых нанокристаллов с меньшей шириной запрещенной зоны, либо вследствие приложения внешнего электрического поля посредством наноразмерных электродов. Типичная длина волны де Бройля в полупроводниках составляет ~ 10 нм, и такое ограничение

движения носителей заряда приводит к возникновению дискретных уровней в интервале миллиэлектронвольт. В результате этого имеет место аналогия между энергетическими спектрами квантовых точек и атомами. Поэтому квантовые точки часто называют «искусственными атомами» [1]. Например, одним из проявлений такого сходства является экспериментальное обнаружение оболочечной структуры уровней энергии КТ [2, 3].

Квантовые точки могут использоваться в качестве элемента многих устройств, таких как фотодетекторы, лазеры, солнечные элементы [4], нанoeлектронные приборы [5]. Массивы КТ предлагаются в качестве одной из возможных систем для реализации квантового компьютера [6]. Целенаправленное использование КТ в различных устройствах предполагает знание их электронной структуры, поэтому появилось множество работ, посвященных теоретическому исследованию влияния геометрических параметров и внешних полей на энергетический спектр квантовых точек различной природы (см. обзоры [5, 7]).

При изучении энергетического спектра квантовых точек часто используют упрощенные модели, для которых возможно получить аналитические выражения, описывающие электронные волновые функции и соответствующие им значения энергии. Примерами таких моделей являются в первую очередь КТ с гармоническим ограничивающим потенциалом, как двумерные [8], так и трехмерные, с изотропным [9] и анизотропным потенциалом [10]. Аналитическое решение возможно также для кусочно-постоянного потенциала с бесконечно высокими стенками в случаях КТ относительно простой формы. К таким структурам относятся двумерные прямоугольные, круглые, эллиптические КТ [11], трехмерные, имеющие форму шара, прямоугольного параллелепипеда, сфероида (вытянутого и сплюснутого), а также в виде линзы с параболическими границами [11, 12] и др.

Управление электронными состояниями квантовых точек в некоторых устройствах осуществляется с помощью внешнего магнитного поля, которое также может использоваться как средство экспериментального исследования электронной структуры КТ. Наиболее детально изучен случай действия магнитного поля на системы с гармоническим потенциалом локализации [4, 8], когда решение может быть получено точно. Для более реалистичных моделей КТ применяются численные методы [13].

Во многих приложениях предполагается использование электрически индуцированных КТ, в которых потенциал локализации электрона создается с помощью наноразмерного затвора. В частности, такие квантовые точки возникают в одной из предложенных реализаций твердотельного спинового квантового компьютера [14] и одноатомного транзистора [15]. Для подобных систем аналитическое решение не может быть получено, поэтому при расчете электронных состояний в таких системах следует применять численные методы. Однако при применении численных методов возникают трудности с качественным описанием энергетической структуры электрически индуцированной КТ и предсказанием закономерностей ее изменения при приложении внешних полей. Выявление таких закономерностей имеет важное значение для проектирования приборов, действие которых основано на эффекте туннелирования электронов между квантовой точкой и близлежащим донором (одноатомный транзистор), а также на управлении переходами между соседними КТ с помощью микроволнового излучения [16].

Поскольку создаваемые на практике наноструктуры обладают очень широким многообразием форм и размеров и чрезвычайно трудно точно определить вид потенциала, ограничивающего движение в них заряженных частиц (электронов), нужны математические модели, позволяющие получать точные (или почти точные) решения. Тогда, сравнивая результаты эксперимента и модельного расчета, можно получить значения параметров модельного потенциала для конкретных структур и использовать их в дальнейшем.

В данной работе рассматривается применимость модели трехмерного анизотропного гармонического осциллятора для описания электронной структуры электрически индуцированной КТ, ограничивающий потенциал которой создается электрическим полем затвора в виде тонкого заряженного диска [17]. На основе этой модели представлена классификация возбужденных состояний КТ и описывается качественное изменение структуры волновых функций и уровней энергии при изменении магнитного поля и потенциала затвора.

1. Постановка задачи. Будем рассматривать электронные состояния в двух видах квантовых точек, обладающих цилиндрической симметрией. Первый вид – это КТ, потенциал локализации которой является анизотропным параболическим, а второй – электрически индуцированная КТ. Обе точки будем считать расположенными вблизи поверхности полупроводника в области $z > 0$. Диэлектрическую проницаемость полупроводника будем обозначать ϵ_s , а эффективную массу электрона – m^* . Будем предполагать, что в плоскости $z = 0$ находится слой диэлектрика, создающий бесконечно высокий потенциальный барьер и обеспечивающий равенство нулю волновой функции на плоскости XOY . Однородное магнитное поле B направлено вдоль оси OZ . В рамках приближения эффективной массы исследуемая система описывается стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции Ψ и энергии E , которое в безразмерной форме имеет вид

$$\left(-\nabla^2 - i\mu \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V} \right) \Psi = E\Psi, \quad z > 0, \tag{1}$$

$$\Psi|_{z=0} = 0; \quad \Psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty, \tag{2}$$

где (ρ, z, φ) – цилиндрические координаты, а в качестве параметров безразмеривания используется эффективный боровский радиус $a^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s\hbar^2 / m^*e^2$ для длины и эффективный Ридберг $Ry^* = m^*e^4 / 2\hbar^2\epsilon_s^2$ для энергий. В уравнении (1) μ – безразмерное значение магнитного поля, определяемое выражением

$$\mu = \frac{(a^*)^2}{\lambda_B^2} = \frac{B}{B_0}, \tag{3}$$

где магнитная длина определяется как $\lambda_B = (\hbar / Be)^{1/2}$, а характеристическое магнитное поле B_0 есть

$$B_0 = 2.35 \cdot 10^5 \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\epsilon_s^2} \text{ Тл.}$$

Величина μ связана с циклотронной частотой ω_c выражением $\mu = \hbar\omega_c / 2Ry^*$.

Оператор \hat{V} представляет собой потенциал локализации. Будем предполагать, что потенциал локализации \hat{V}_G электрически индуцированной КТ создается в результате приложения внешнего потенциала к дискообразному затвору, находящемуся на поверхности полупроводника. Поскольку, как показано в [18], заряды изображения не влияют на качественное поведение характеристик рассматриваемой системы, соответствующие им члены в уравнении (1) учитываться не будут.

2. Результаты численных расчетов. *Электронные состояния приповерхностной параболической КТ.* Вначале исследуем модельную задачу, когда электрон движется в полупространстве вблизи поверхности полупроводника в поле параболического потенциала. Такую трехмерную квантовую точку будем называть приповерхностной параболической КТ. Будем рассматривать анизотропный потенциал локализации вида $\hat{V}_H = k_\rho^2 \rho^2 / 4 + k_z^2 z^2 / 4$, где $k_\rho = \hbar\omega_\rho / Ry^*$, $k_z = \hbar\omega_z / Ry^*$, ω_ρ, ω_z – частоты соответствующих гармонических колебаний. Для такого потенциала уравнение (1) преобразуется к виду

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\mu \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \frac{k_\rho^2 \rho^2}{4} + \frac{k_z^2 z^2}{4} \right) \Psi = E\Psi, \quad z > 0. \tag{4}$$

Решение уравнения (4) с учетом граничного условия (2) представляется в виде

$$\Psi(\rho, z, \varphi) = \rho^{|m|} \exp\left(-\left(k_z z^2 + K\rho^2\right)/4\right) H_{n_z} \left(\sqrt{\frac{k_z}{2}} z\right) L_{n_\rho}^{|m|} \left(\frac{K\rho^2}{2}\right) e^{im\varphi}, \quad (5)$$

где H_{n_z} – полиномы Эрмита, $L_{n_\rho}^{|m|}$ – присоединенные полиномы Лагерра [19],

$$K = \sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}, \quad n_\rho = 0, 1, 2, \dots; \quad n_z = 1, 3, 5, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Соответствующие значения энергии определяются выражением

$$E = K(2n_\rho + |m| + 1) + k_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right) + m\mu. \quad (6)$$

Как видно из формул (5)–(6), волновые функции и уровни энергии определяются тройкой квантовых чисел (n_ρ, n_z, m) , и в дальнейшем мы будем использовать их для обозначения состояний цилиндрически симметричной КТ наряду с нумерацией уровней в порядке возрастания энергии E .

Из формулы (5) следует, что нодальными поверхностями (т. е. поверхностями, на которых волновая функция обращается в нуль) являются поверхности цилиндров, образующие которых параллельны оси OZ , и плоскости, перпендикулярные оси OZ . Количество нодальных цилиндров определяется числом положительных корней функции $L_{n_\rho}^{|m|}$ и будет равно квантовому числу n_ρ , количество нодальных плоскостей определяется числом нулей функции H_{n_z} в области $z > 0$ и равно значению $(n_z - 1)/2$. Кроме этого, волновая функция параболической КТ может быть охарактеризована числом экстремумов. Легко определить, что электронная плотность на плоскости $\varphi = \text{const}$ имеет $(n_\rho + 1)(n_z + 1)/2$ локальных экстремумов: по $X_\rho = n_\rho + 1$ экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по $X_z = (n_z + 1)/2$ экстремумов в рядах, параллельных оси OZ .

В качестве характеристики, определяющей форму рассматриваемой квантовой точки, будем далее использовать параметр анизотропии

$$\gamma_\mu = \frac{k_z}{K} = \frac{k_z}{\sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}}. \quad (7)$$

При $\mu = 0$ энергии параболической КТ определяются выражением

$$E = k_\rho(2n_\rho + |m| + 1) + k_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right), \quad (8)$$

а параметр анизотропии примет вид $\gamma_0 = k_z/k_\rho$.

В частном случае $\gamma_\mu = 1$ получаем изотропную приповерхностную параболическую КТ, уравнение которой допускает разделение переменных уже в сферических координатах. Волновые функции имеют вид [9]:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) r^l \exp\left(-\frac{kr^2}{4}\right) M\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, \frac{kr^2}{2}\right), \quad (9)$$

где $k^2 = \mu^2 + k_\rho^2 + k_z^2$, Y_{lm} – сферические функции, M – вырожденная гипергеометрическая функция первого рода [19]. В выражении (9) $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – радиальное квантовое число, $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное число, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ – магнитное число. При этом для удовлетворения граничного условия (2) необходимо, чтобы разность $l - |m|$ была нечетной.

Энергии изотропной приповерхностной параболической КТ определяются выражением

$$E = k \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right) + m\mu. \quad (10)$$

Из (10) следует, что уровни энергии в изотропной КТ являются вырожденными при одинаковых $n = 2n_r + l$ и m , кратность вырождения уровней составляет $n/2$ для четных n и $(n + 1)/2$ – для нечетных. При нулевом магнитном поле состояния являются вырожденными при одинаковых n , независимо от m , кратность вырождения равна $(n + 1)(n + 2)/2$.

Нодальные поверхности волновых функций изотропной параболической КТ могут быть двух типов: сферы $r = \text{const}$ и поверхности конусов $\theta = \text{const}$. Количество нодальных сфер определяется числом положительных корней функции $M(-n_r, l + 3/2, x)$ и равно n_r , количество нодальных конусов определяется числом нулей функции Y_{lm} в области $z > 0$ и равно $(l - |m| - 1)/2$. Общее количество локальных экстремумов электронной плотности на каждой плоскости $\varphi = \text{const}$ будет составлять $(n_r + 1)(l - |m| + 1)/2$: по $n_r + 1$ экстремумов вдоль лучей $\theta = \text{const}$ и по $(l - |m| + 1)/2$ экстремумов вдоль кривых $r = \text{const}$.

Состояния электрически индуцированной квантовой точки. В случае, когда внешний потенциал создается электрическим полем дискообразного металлического затвора, оператор \hat{V}_G в уравнении (1), согласно [20], определяется выражением

$$\hat{V}_G = -\frac{2\Phi_0}{\pi} \arctg \left(\frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4} + \left(\left(\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4} \right)^2 + d^2 z^2 \right)^{1/2}}} \right), \quad (11)$$

где d – диаметр затвора, Φ_0 – потенциал затвора. На малых расстояниях от диска потенциал в направлении оси OZ близок к треугольному потенциалу. При удалении от диска в плоскости XOY потенциал вблизи минимума может быть аппроксимирован параболой. На больших расстояниях от затвора потенциал близок к кулоновскому. Поскольку потенциал \hat{V}_G является цилиндрически симметричным, то решение уравнения (1) можно представить в виде $\Psi(\rho, z, \varphi) = \psi(\rho, z) \exp(im\varphi)$. Тогда задача (1)–(2) сводится к двумерной:

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m^2}{\rho^2} + m\mu + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V}_G \right) \psi = E\psi, \quad z > 0, \quad (12)$$

$$\psi|_{z=0} = 0; \quad \psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty. \quad (13)$$

Задача (12)–(13) решалась численно с помощью метода конечных элементов. При этом полупространство $\rho > 0, z > 0$ заменялось ограниченной областью $0 < \rho < L_\rho, 0 < z < L_z$, а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. На границах $\rho = L_\rho, z = L_z$, функция ψ полагалась равной нулю, а величины L_ρ и L_z выбирались различными для разных состояний из условия минимума значения вычисляемого уровня энергии. Так как потенциал электрически индуцированной КТ при $\mu = 0$ на бесконечности стремится к нулю, то на больших расстояниях асимптотика волновых функций дается выражением $\psi \sim \exp(-\sqrt{-2Er})$, исходя из которого можно оценить погрешность, связанную с заданием нулевых граничных условий на поверхности цилиндра.

Зависимости значений энергий основного и нескольких низших возбужденных состояний электрона от потенциала затвора в нулевом магнитном поле приведены на рис. 1. Состояния нумеровались в порядке возрастания энергии отдельно для случаев $m = 0$ (σ -состояния), $|m| = 1$ (π -состояния). Состояния с $|m| = 2$ и $|m| = 3$ обозначались δ и γ соответственно. Как видно из рис. 1, для некоторых состояний происходит сближение (квазивырождение) уровней, не зависящее от потенциала на затворе Φ_0 (пары состояний σ_2 - δ_1 и σ_4 - δ_2).

Из рис. 2 видно, что состояния с близкими энергиями можно объединить в электронные оболочки. Расчеты, выполненные при других значениях потенциала затвора, показывают, что

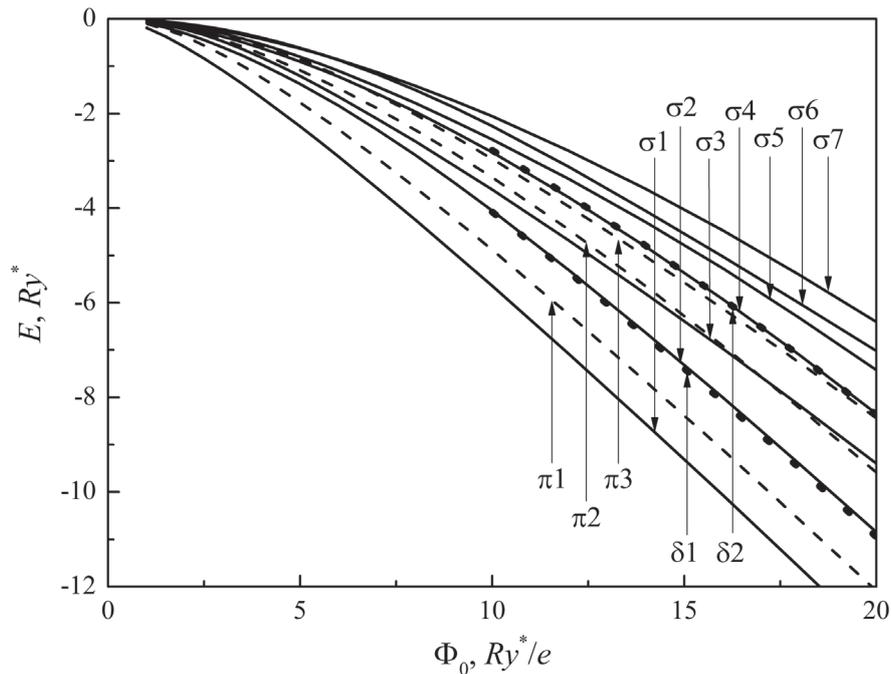


Рис. 1. Энергии основного и возбужденных состояний электрона, который находится в квантовой точке, индуцированной полем дискообразного затвора, в зависимости от потенциала на затворе в отсутствие магнитного поля: сплошные линии – зависимости для σ -состояний ($m = 0$), пунктирные линии – зависимости для π -состояний ($m = 1$), точки – энергии δ -состояний ($m = 2$); диаметр затвора $d = 6a^*$

Fig. 1. Ground and excited state energies of an electron at the quantum dot, induced by the field of the disc-shaped gate, as a function of gate potential at zero magnetic field. The solid lines show the dependences for σ -states ($m = 0$), the dash lines – the dependences for π -states ($m = 1$), the dots – the energies of δ -states ($m = 2$). The gate diameter $d = 6a^*$

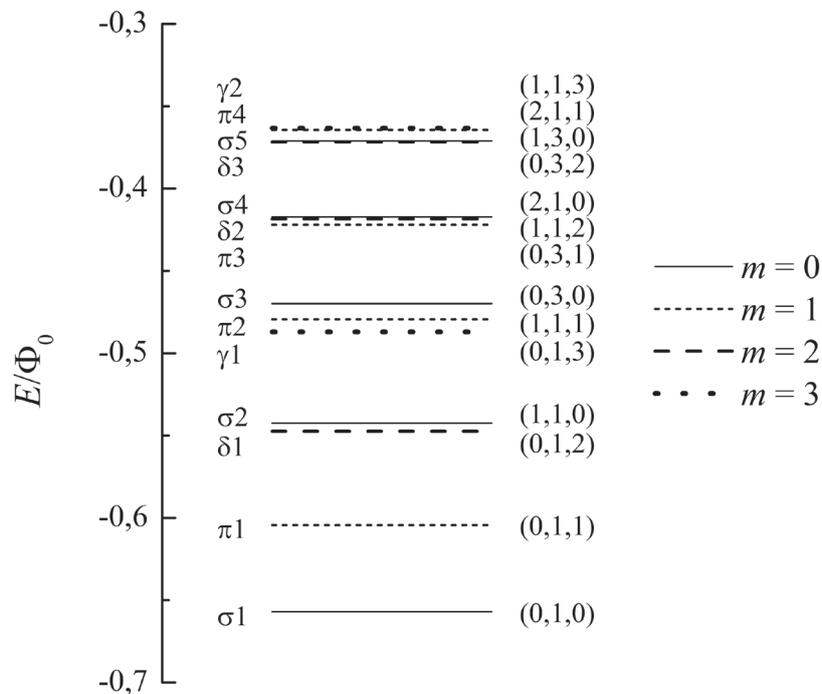


Рис. 2. Уровни энергии 14 низших состояний электрически индуцированной квантовой точки; $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$, $d = 6a^*$; значения энергий нормированы на величину потенциала затвора

Fig. 2. Energy levels of the 14 lowest states of the electrically induced quantum dot; $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$, $d = 6a^*$; energy values are normalized on the gate potential

объединение некоторых состояний в оболочку может как не зависеть от потенциала на затворе (например, пары состояний $\sigma 2\text{-}\delta 1$ и $\sigma 4\text{-}\delta 2$), так и происходить лишь при определенных значениях Φ_0 (как, например, состояние $\pi 3$).

Волновые функции, соответствующие различным значениям энергии и магнитного поля, приведены на рис. 3. Как видно, расположение экстремумов волновых функций электрически индуцированной КТ подобно расположению экстремумов волновых функций анизотропной приповерхностной параболической КТ: по X_ρ экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по X_z экстремумов в рядах, параллельных оси OZ . Поэтому, помимо нумерации состояний в порядке возрастания в пределах одинаковых m , будем пользоваться классификацией, основанной на топологии волновых функций, и обозначать состояния тройкой чисел (n_ρ, n_z, m) , где $n_\rho = X_\rho - 1$, $n_z = 2X_z - 1$. Например, на рис. 3, *b* волновая функция $\sigma 5$ -состояния имеет по два

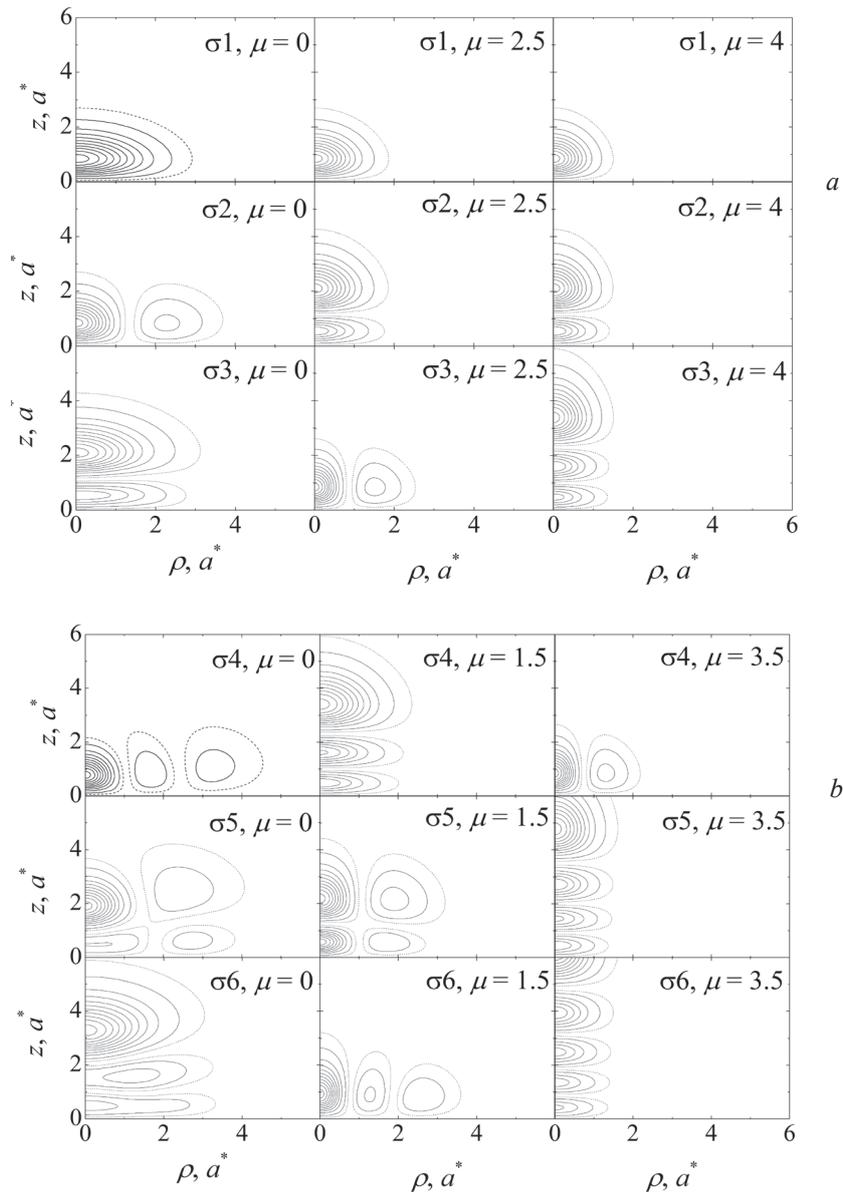


Рис. 3. Распределение электронной плотности $\sigma 1$ -, $\sigma 2$ -, $\sigma 3$ -состояний (*a*) и $\sigma 4$ -, $\sigma 5$ -, $\sigma 6$ -состояний (*b*) электрически индуцированной квантовой точки в отсутствие ($\mu = 0$) и при наличии ($\mu = 1,5; \mu = 2,5; \mu = 3,5; \mu = 4,0$) магнитного поля; расчет проводился при диаметре затвора $d = 6a^*$ и потенциале на затворе $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

Fig. 3. Electronic density distribution of $\sigma 1$ -, $\sigma 2$ -, $\sigma 3$ -states (*a*) and $\sigma 4$ -, $\sigma 5$ -, $\sigma 6$ -states (*b*) of the electrically induced quantum dot in the absence ($\mu = 0$) and in the presence ($\mu = 1.5, \mu = 2.5, \mu = 3.5, \mu = 4.0$) of the magnetic field; the calculations were carried out at the gate diameter $d = 6a^*$ and the gate potential $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

экстремума в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по два экстремума в рядах, параллельных оси OZ . Тогда $n_p = 1$, $n_z = 3$, и $\sigma 5$ -состояние может быть охарактеризовано квантовыми числами $(1, 3, 0)$. Аналогично состояниям $\sigma 4$ и $\sigma 6$ соответствуют квантовые числа $(2, 1, 0)$ и $(0, 5, 0)$.

При увеличении магнитного поля происходит изменение пространственного расположения экстремумов волновых функций. Например, структура волновой функции $\sigma 2$ -состояния меняется с $(1, 1, 0)$ при $\mu = 0$ на $(0, 3, 0)$ при $\mu = 2,5$ (рис. 3, *a*). Для $\sigma 3$ -состояния имеет место обратный переход. Такие изменения происходят в точках квазипересечения (отталкивания) электронных уровней (точки A_1, A_2, A_3, B на рис. 4). Аналогичное отталкивание было обнаружено с помощью численных расчетов и для донорных состояний [21], однако в случае электрически индуцированной КТ квазипересечение происходит при относительно малых магнитных полях. Так, значение $\mu \approx 1,6$ является точкой отталкивания для $\sigma 2$ - и $\sigma 3$ -состояний (см. рис. 4), что соответствует $\sim 9,0$ Т для GaAs. Это магнитное поле значительно меньше, чем поля, при которых происходят квазипересечения донорных состояний [21].

С ростом магнитного поля энергии состояний с $n_p > 0$ (т. е. состояний, волновые функции которых имеют боковые экстремумы в плоскости XOY) возрастают быстрее, чем энергии состояний с $n_p = 0$. В результате, состояния с $n_p > 0$ с увеличением μ становятся более высоколежащими в группе состояний с одинаковыми значениями m . Как видно из рис. 3, состоянию $(1, 1, 0)$ соответствует $\sigma 2$ -состояние при $\mu = 0$, $\sigma 3$ – при $\mu = 2,5$ и $\sigma 4$ – при $\mu = 3,5$. Обратно, состояния с $n_p = 0$ с увеличением μ будут характеризоваться меньшими номерами, чем это было при отсутствии магнитного поля. Так, состоянию $(0, 5, 0)$ отвечает $\sigma 6$ -состояние для $\mu = 0$, $\sigma 4$ – для $\mu = 1,5$, $\sigma 3$ – для $\mu = 4,0$. Таким образом, как и следовало ожидать, при сильных магнитных полях более низкими значениями энергии обладают состояния с квантовыми числами $(0, n_z, m)$.

Отметим также, что для сильных магнитных полей происходит асимптотическое сближение уровней энергии с отрицательными m с соответствующими уровнями энергии с $m = 0$. Например, состояние $\pi 1$ при $m = -1$ асимптотически стремится к состоянию $\sigma 1$ для больших значений μ .

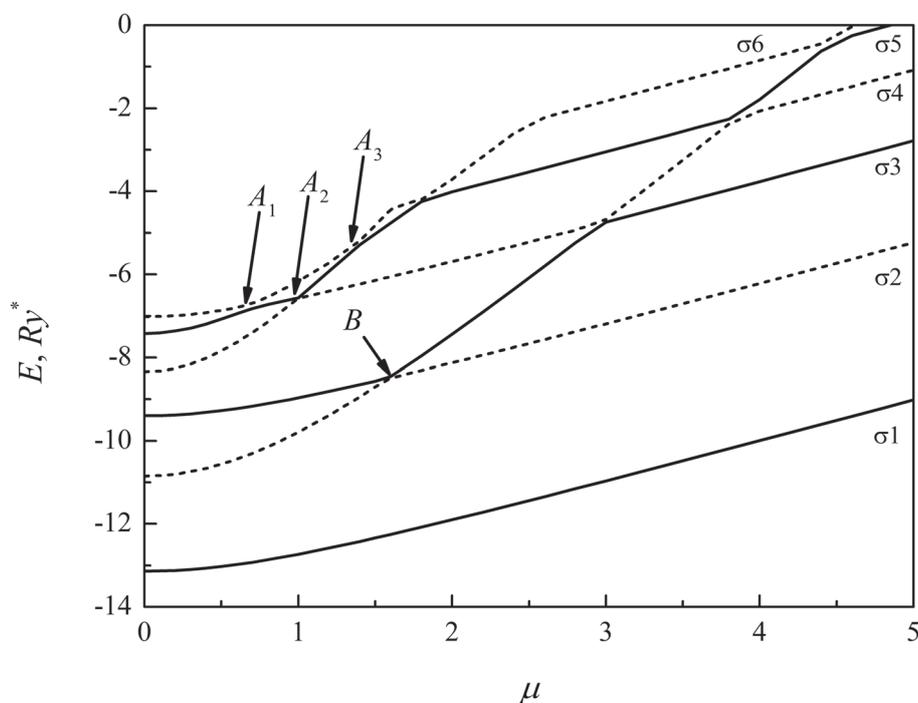


Рис. 4. Энергии основного и низших возбужденных состояний электрически индуцированной квантовой точки в зависимости от величины магнитного поля; расчет проводился для диаметра затвора $d = 6a^*$ и потенциала на затворе $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

Fig. 4. Ground and lowest excited state energies of the electrically induced quantum dot as a function of magnetic field; the calculations were carried out at the gate diameter $d = 6a^*$ and the gate potential $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

3. Обсуждение результатов. Модель анизотропной приповерхностной параболической КТ позволяет качественно описать изменения энергетического спектра и волновых функций при изменении потенциала на затворе и приложении магнитного поля.

Рассмотрим сначала, как можно описать энергетическую структуру электрически индуцированной квантовой точки в отсутствие магнитного поля. Во-первых, модель приповерхностной параболической КТ позволяет предсказать вырождение состояний с одинаковыми $n = 2n_\rho + |m|$ и n_z . Как видно из рис. 2, уровни соответствующих состояний электрически индуцированной КТ также близки друг к другу. То есть уровни состояний σ_2 - δ_1 , π_2 - γ_1 , σ_4 - δ_2 , π_4 - γ_2 , σ_5 - δ_3 можно рассматривать как квазивырожденные. Такое квазивырождение будет иметь место при любых потенциалах на затворе.

Во-вторых, вырождение уровней параболической КТ может возникать при определенных значениях параметра анизотропии. Для двух состояний с квантовыми числами $(n_\rho^{(1)}, n_z^{(1)}, m^{(1)})$ и $(n_\rho^{(2)}, n_z^{(2)}, m^{(2)})$ такие значения определяются выражением

$$\gamma_0 = - \frac{2(n_\rho^{(1)} - n_\rho^{(2)}) + |m^{(2)}| - |m^{(1)}|}{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}}. \tag{14}$$

В качестве примера рассмотрим вырождение уровней при $\gamma_0 = 1,5$. Тогда условию (14) удовлетворяют состояния (1, 3, 0), (2, 1, 1), (0, 3, 2) и (1, 1, 3). Для электрически индуцированной квантовой точки им соответствуют состояния σ_5 , π_4 , δ_3 , γ_2 . Их близость друг к другу (см. рис. 2) свидетельствует о том, что этим уровням электрически индуцированной КТ можно приписать эффективный параметр анизотропии, близкий к 1,5.

Действительно, если ввести для электрически индуцированной квантовой точки понятия эффективных значений k_ρ и k_z , то их можно определить по аналогии с параболической квантовой точкой из рассчитанных значений энергий. Так, из выражения (7) для энергии параболической КТ следует, что $k_{\rho j}^{(m)} = E_j^{(m+1)} - E_j^{(m)}$, где $E_j^{(m)}$ – энергия j -го состояния для магнитного квантового числа m . Эффективное значение $k_{zj}^{(m)}$ для электрически индуцированной КТ можно найти, зная энергии двух состояний со значениями n_z , отличающимися на 1. Вычисленный таким образом эффективный параметр анизотропии $(\gamma_{jeff}^{(m)})$ при $\Phi_0 = 20Ry^*/e$ составляет $\sim 1,78$ для σ_1 -состояния, $\sim 1,45$ для δ_1 -состояния, $\sim 1,24$ для σ_3 -состояния, $\sim 1,11$ для δ_3 -состояния. Видно, что эффективный параметр анизотропии будет убывать для состояний с более высокими значениями энергии. Это отражается и на структуре расположения экстремумов волновых функций. Как показывают численные расчеты, для высоколежащих состояний расположение экстремумов будет соответствовать расположению экстремумов уже изотропной параболической КТ, nodальные поверхности которой представляют собой конусы и сферы.

С ростом потенциала на затворе значение $\gamma_{jeff}^{(m)}$ увеличивается: эффективный параметр анизотропии для σ_1 -состояния составляет $\sim 1,33$ при $\Phi_0 = 10Ry^*/e$ и $\sim 2,11$ при $\Phi_0 = 30Ry^*/e$. В результате для электрически индуцированной КТ с изменением величины потенциала на затворе возможно квазипересечение электронных уровней. Например, расчеты показали, что при $d = 6a^*$ и $\Phi_0 \approx 35Ry^*/e$ находится точка отталкивания уровней σ_6 - и σ_7 -состояний, при этом структура σ_6 -состояния меняется с (0, 5, 0) на (3, 1, 0), структура σ_7 -состояния – с (3, 1, 0) на (0, 5, 0). При больших значениях $\gamma_{jeff}^{(m)}$ минимальными значениями энергии обладают состояния, все экстремумы волновых функций которых будут располагаться вдоль затвора, т. е. самыми низколежащими будут состояния вида $(n_\rho, 1, m)$. В этом случае квантовую точку можно считать квазидвумерной.

При приложении магнитного поля появляются новые точки пересечения состояний параболической КТ. Их положение в зависимости от магнитного поля можно определить из соотношения

$$K\left(2n_p^{(1)} - 2n_p^{(2)} + \left|m^{(1)}\right| - \left|m^{(2)}\right|\right) + k_z\left(n_z^{(1)} - n_z^{(2)}\right) + \mu\left(m^{(1)} - m^{(2)}\right) = 0.$$

При $\gamma_\mu = 1$ происходят пересечения уровней параболической КТ, вызванные вырождением анизотропной параболической КТ в изотропную. Этим пересечениям соответствуют точки отталкивания электрически индуцированной КТ, обозначенные A_1, A_2, A_3 для σ_4 -, σ_5 -, σ_6 -состояний и B для σ_2 -, σ_3 -состояний (см. рис. 4). При этом для различных состояний изменяется значение $\gamma_{\text{eff}}^{(m)}$, поэтому отталкивание, соответствующее $\gamma_\mu = 1$, происходит при различных значениях μ . В результате изменение σ_4 -уровня с состояния $(2, 1, 0)$ при $\mu = 0$ на состояние $(0, 5, 0)$ при $\mu = 1,5$ и σ_6 -уровня с состояния $(0, 5, 0)$ при $\mu = 0$ на состояние $(2, 1, 0)$ при $\mu = 1,5$, показанное на рис. 3, b , происходит в трех точках A_1, A_2, A_3 (см. рис. 4). Точки квазипересечения электрически индуцированной КТ для более высоких магнитных полей (см. рис. 4) соответствуют значениям магнитного поля, определяемого выражением

$$\mu^2 = \left(k_z \frac{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}}{2(n_p^{(1)} - n_p^{(2)})} \right)^2 - k_p^2. \quad (15)$$

Точкам квазипересечения электрически индуцированной КТ, удовлетворяющим этому условию, будут соответствовать разные значения μ , что вызвано отличиями в значениях эффективного параметра анизотропии для различных состояний.

В случае больших магнитных полей получаем $\gamma_\mu \ll 1$, и квантовая точка вырождается в квазиодномерную систему, волновые функции которой имеют экстремумы вдоль оси OZ и только нодальные плоскости, параллельные плоскости $z = 0$. Как и в случае электрически индуцированной КТ, для состояний с одинаковыми значениями n_p и n_z при больших μ происходит приближение уровней с отрицательными m к соответствующему уровню с $m = 0$.

Использование модели анизотропной параболической КТ имеет некоторые ограничения. Так, при малых Φ_0 основная часть области локализации волновых функций высоковозбужденных состояний находится в области $r \gg d$, где потенциал можно приближенно полагать равным $\hat{V}_G \approx 2\Phi_0/\pi r$, поэтому \hat{V}_G плохо аппроксимируется анизотропным параболическим потенциалом.

Проведенные нами численные эксперименты являются в определенной степени аналогом экспериментальных исследований по определению энергетического спектра изолированной квантовой точки, которые, например, можно проводить посредством транспортной спектроскопии, когда изучаются туннельные переходы между квантовой точкой и донором [22]. Однако поскольку в реальности потенциал локализации электрона, создаваемый внешними электродами сложной формы, неизвестен, то необходима разработка подходов к анализу экспериментальных данных. В настоящей работе предложен один из возможных вариантов такого подхода. Например, полученное качественное описание структуры волновых функций и их изменения во внешних полях может применяться для оценки вероятностей переходов при изучении оптических и транспортных свойств квантовых точек. Кроме того, результаты по пространственной структуре волновых функций могут быть использованы для выбора оптимального базиса при моделировании энергетического спектра многоэлектронных состояний КТ, образованных с помощью внешних электродов.

Заключение. В работе проведено численное моделирование возбужденных состояний квантовой точки, индуцированной электрическим полем дискообразного затвора. Показано, что на основе модели анизотропной приповерхностной параболической квантовой точки может быть предложена классификация состояний электрически индуцированной КТ, а также дано качественное описание влияния величины электрического и магнитного полей на волновые функции и энергии электрона. В частности, показано, что использование модели приповерхностной параболической КТ позволяет предсказать точки квазипересечения уровней электрически индуцированной квантовой точки.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Kastner, M. A. Artificial atoms / M. A. Kastner // *Physics Today*. – 1993. – Vol. 46, № 1. – P. 24–31.
2. Ashoori, R. C. Electrons in artificial atoms / R. C. Ashoori // *Nature*. – 1996. – Vol. 379, № 6564. – P. 413–419.
3. Shell filling and spin effects in a few electron quantum dot / S. Tarucha [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, № 17. – P. 3613–3616.
4. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells / J. Wu [et al.] // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2015. – Vol. 48, № 36. – P. 363001.
5. Silicon quantum electronics / F. A. Zwanenburg [et al.] // *Rev. Mod. Phys.* – 2013. – Vol. 85, № 3. – P. 961–1019.
6. Loss, D. Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D. P. DiVincenzo // *Phys. Rev. A*. – 1998. – Vol. 57, № 1. – P. 120–126.
7. Reimann, S. M. Electronic structure of quantum dots / S. M. Reimann, M. Manninen // *Rev. Modern Phys.* – 2002. – Vol. 74. – P. 1283–1342.
8. Ciftja, O. Understanding electronic systems in semiconductor quantum dots / O. Ciftja // *Phys. Scr.* – 2013. – Vol. 88. – P. 058302.
9. Flüge, S. *Practical Quantum Mechanics: in 2 vol.* / S. Flüge. – [S. l.]: Springer-Verlag, 1971. – Vol. 1. – 286 p.
10. Fujito, M. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots / M. Fujito, A. Natori, H. Yasunaga // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 53, № 15. – P. 9952–9958.
11. Willatzen, M. *Separable Boundary-Value Problems in Physics* / M. Willatzen, Lok C. Lew Yan Voon. – [S. l.]: Wiley-VCH, 2011. – 377 p.
12. Lok C. Lew Yan Voon. Confined states in lens-shaped quantum dots / Lok C. Lew Yan Voon, M. Willatzen // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2002. – Vol. 14. – P. 13667–13678.
13. Kumar, A. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field / A. Kumar, S. E. Laux, F. Stern // *Phys. Rev. B*. – 1990. – Vol. 42, № 8. – P. 5166–5175.
14. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // *Nature (London)*. – 1998. – Vol. 393. – P. 133–137.
15. Single-atom transistor / M. Feuchsle [et al.] // *Nature nanotechnology*. – 2012. – Vol. 7, № 4. – P. 242–246.
16. Manipulation of a single charge in a double quantum dot / J. R. Petta [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, № 18. – P. 186802.
17. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G. D. J. Smit [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol. 68, № 19. – P. 193302.
18. Levchuk, E. A. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate / E. A. Levchuk, L. F. Makarenko // *Semiconductors*. – 2016. – Vol. 50, № 1. – P. 89–96.
19. Arfken, G. *Mathematical Methods for Physicists* / G. Arfken. – [S. l.]: Academic Press, 2013. – 985 p.
20. Smythe, W. R. *Static and Dynamic Electricity* / W. R. Smythe. – New York: McGraw-Hill, 1989. – 845 p.
21. Zimmerman, M. L. Evidence of an approximate symmetry for hydrogen in a uniform magnetic field / M. L. Zimmerman, M. M. Kash, D. Kleppner // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45, № 13. – P. 1092–1094.
22. Quantum dot spectroscopy using single phosphorus donor / H. Büch [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2015. – Vol. 92, № 23. – P. 235309.

References

1. Kastner M. A. Artificial atoms. *Physics today*, 1993, vol. 46, no. 1, pp. 24–31. Doi: 10.1063/1.43770
2. Ashoori R. C. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 1996, vol. 379, no. 6564, pp. 413–419. Doi: 10.1038/379413a0
3. Tarucha S., Austing D. G., Honda T., Van der Hage R. J., Kouwenhoven L. P. Shell filling and spin effects in a few electron quantum dot. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, no. 17, pp. 3613–3616. Doi: 10.1103/physrevlett.77.3613
4. Wu J., Chen S., Seeds. A., Liu H. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2015, vol. 48, no. 36, pp. 363001. Doi: 10.1088/0022-3727/48/36/363001
5. Zwanenburg F. A., Dzurak A. S., Morello A., Simmons M. Y., Hollenberg L. C., Klimeck G., Rogge S., Coppersmith S. N., Eriksson M. A. Silicon quantum electronics. *Reviews of Modern Physics*, 2013, vol. 85, no. 3, pp. 961–1019. Doi: 10.1103/revmodphys.85.961
6. Loss D., DiVincenzo D. P. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 1998, vol. 57, no. 1, pp. 120–126. Doi: 10.1103/physreva.57.120
7. Reimann S. M., Manninen M. Electronic structure of quantum dots. *Reviews of Modern Physics*, 2002, vol. 74, pp. 1283–1342. Doi: 10.1103/revmodphys.74.1283
8. Ciftja O. Understanding electronic systems in semiconductor quantum dots. *Physica Scripta*, 2013, vol. 88, p. 058302. Doi: 10.1088/0031-8949/88/05/058302
9. Flüge S. *Practical Quantum Mechanics. Vol. 1.* Springer-Verlag, 1971, 286 p. Doi: 10.1007/978-3-642-61995-3
10. Fujito M., Natori A., Yasunaga H. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots. *Physical Review B*, 1996, vol. 53, no. 15, pp. 9952–9958. Doi: 10.1103/physrevb.53.9952
11. Willatzen M., Lok C. Lew Yan Voon. *Separable Boundary-Value Problems in Physics*. Wiley-VCH, 2011, 377 p. Doi: 10.1002/9783527634927
12. Lok C. Lew Yan Voon, Willatzen M. Confined states in lens-shaped quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, vol. 14, pp. 13667–13678. Doi: 10.1088/0953-8984/14/49/321

13. Kumar A., Laux S. E., Stern F. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field. *Physical Review B*, 1990, vol. 42, no. 8, pp. 5166–5175. Doi: 10.1103/physrevb.42.5166
14. Kane B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature* (London), 1998, vol. 393, pp. 133–137. Doi: 10.1038/30156
15. Fuechsle M., Miwa J. A., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Warschkow O., Hollenberg L. C., Klimeck G., Simmons M. Y. Single-atom transistor. *Nature nanotechnology*, 2012, vol. 7, no. 4, pp. 242–246. Doi: 10.1038/nnano.2012.21
16. Petta J. R., Johnson A. C., Marcus C. M., Hanson M. P., Gossard A. C. Manipulation of a single charge in a double quantum dot. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 93, no. 18, p. 186802. Doi: 10.1103/physrevlett.93.186802
17. Smit G. D. J., Rogge S., Caro J., Klapwijk T. M. Gate-induced ionization of single dopant atoms. *Physical Review B*, 2003, vol. 68, no. 19, p. 193302. Doi: 10.1103/physrevb.68.193302
18. Levchuk E. A., Makarenko L. F. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 1, pp. 89–96. Doi:10.1134/s1063782616010127
19. Arfken G. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 2013, 985 p.
20. Smythe W. R. *Static and dynamic electricity*. New York, McGraw-Hill, 1989, 845 p.
21. Zimmerman M. L., Kash M. M., Kleppner D. Evidence of an approximate symmetry for hydrogen in a uniform magnetic field. *Physical Review Letters*, 1980, vol. 45, no. 13, pp. 1092–1094. Doi: 10.1103/physrevlett.45.1092
22. Büch H., Fuechsle M., Baker W., House M. G., Simmons M.Y. Quantum dot spectroscopy using a single phosphorus donor. *Physical Review B*, 2015, vol. 92, no. 23, p. 235309. Doi: 10.1103/physrevb.92.235309

Информация об авторах

Левчук Елена Александровна – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com.

Макаренко Леонид Федорович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математического моделирования и управления, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: makarenko@bsu.by

Information about the authors

Elena A. Levchuk – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

Leonid F. Makarenko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor of the Mathematical Modeling and Control Department, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: makarenko@bsu.by

М. С. Баранова, В. А. Скачкова, В. Р. Стемпицкий, Д. Ч. Гвоздовский

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗОННАЯ ДИАГРАММА СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСИСТЕМ ГРАФЕН–ZnO, ГРАФЕН–ZnS: КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Аннотация. Исследована возможность придания графеновым пленкам свойств полупроводника в структурах, состоящих из нескольких слоев (гетероструктуры): оксид цинка и графен (ZnO/графен), сульфид цинка и графен (ZnS/графен). Для изучения электронных свойств гетероструктур проведено квантово-механическое моделирование в программном пакете VASP. Посредством моделирования структурных свойств типичного представителя слоистых материалов (черного фосфора) определена эффективность использования поправок к DFT, учитывающих силы Ван-дер-Ваальса и реализованных в программе VASP и, таким образом, обоснован выбор функционала электронной плотности для гетероструктур. Определены межслоевые расстояния для изучаемых систем с подходящим функционалом электронной плотности (DFT-D2). Для черного фосфора это расстояние равно 3,1 Å, а для гетероструктур – 3,16 Å (ZnO/графен) и 3,45 Å (ZnS/графен). Проведено моделирование, конечной целью которого являлся расчет энергетических зонных диаграмм. Исследовано влияние подложки из цинксодержащих материалов на энергетическую зонную структуру графена. Установлено, что взаимодействие монослоя оксида цинка и графена в гетероструктуре ZnO/графен не приводит к возникновению энергетического зазора в зонной структуре графена. Запрещенная зона графена в структуре ZnS/графен составила 0,35 эВ. Поскольку применяемые для проведения моделирования ТФП-методы недооценивают ширину запрещенной зоны, ее экспериментальное значение для исследуемых структур может оказаться выше расчетного.

Ключевые слова: теория функционала плотности, силы Ван-дер-Ваальса, гетероструктура, графен, оксид цинка, сульфид цинка

Для цитирования. Энергетическая зонная диаграмма слоистых гетеросистем графен–ZnO, графен–ZnS: квантово-механическое моделирование / М. С. Баранова [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 99–107.

M. S. Baranova, V. A. Skachkova, V. R. Stempitsky, D. C. Hvazdousky

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

BAND STRUCTURE OF THE LAYERED GRAPHENE–ZnO, GRAPHENE–ZnS HETEROSYSTEMS: QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION

Abstract. Graphene has semiconductor properties in several layers structures (heterostructure). Zinc oxide/graphene (ZnO/graphene) and zinc sulfide/graphene (ZnS/graphene) have been studied by quantum-mechanical simulation using the VASP software. The structural properties of a typical layered material (black phosphorus) have been simulated by different electron density functionals. Thus, the DFT electron density functional implemented in the VASP software was chosen to take into account the Van der Waals forces. Interlayer distances have been determined to study systems by a suitable electron density functional (DFT-D2). The distance is 3.1 Å for black phosphorus, 3.16 Å (ZnO/graphene) and 3.45 Å (ZnS/graphene) for heterostructures. Energy band structures have been calculated. Thus, the influence of a zinc-containing material on the graphene energy band structure has been registered. A band gap has been observed in ZnS/graphene (0.35 eV), but it is absent in ZnO/graphene. Taking into account that the DFT method underestimates the band gap width, this value may be larger in experimental works.

Keywords: density functional theory, Van der Waals force, heterostructure, graphene, zinc oxide, zinc sulfide

For citation. Baranova M. S., Skachkova V. A., Stempitsky V. R., Hvazdousky D. C. Band structure of the layered graphene–ZnO, graphene–ZnS heterosystems: quantum-mechanical simulation. *Vesti Natsyional'noi akademii nauk Belarusi. Seriya fizika-matematichnykh nauk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 99–107 (in Russian).

Введение. В стандартной конфигурации графен имеет нулевую ширину запрещенной зоны и с точки зрения проводимости является полуметаллом [1]. Это ограничивает возможность его эффективного применения в качестве элементов конструкции микро- и нанoeлектронных приборных структур. Существуют технологические и конструктивные решения, которые позволяют

увеличить ширину запрещенной зоны, т. е. придать графеновым пленкам свойства полупроводника. В частности, для образования запрещенной зоны в графене предлагается:

- формировать графеновые наноленты, в которых из-за квантовых ограничений образуется запрещенная зона [1];
- формировать структуры из нескольких слоев (гетероструктуры) [2];
- использовать легированный и напряженный графен [3];
- воздействовать внешним электрическим полем на многослойный графен [4].

Используя зависимость электронных характеристик графена от энергетического влияния другого материала, можно эффективно управлять его свойствами для внедрения в качестве конструктивного элемента полевого транзистора. Предполагается, что формирование гетероструктуры типа графен–цинксодержащий материал приводит к возникновению энергетического зазора в зонной диаграмме графена. В настоящей работе цинксодержащие материалы представляют собой монослой гексагональных структур ZnO и ZnS. Ограничение размерности по кристаллографическому направлению приводит к формированию графеноподобных монослоев ZnO и ZnS [5]. Возможность получения таких систем подтверждена экспериментально [6–9]. В [10] также подтверждается, что для некоторых гетероструктур на основе графена, наряду с возникновением полупроводниковых свойств, у графена сохраняется высокое значение подвижности носителей заряда, что позволяет считать такие системы перспективными для использования во многих областях нанoeлектроники. В [11] исследуется влияние графена на электронные свойства оксида цинка, но не отмечается модификация зонной структуры графена, находящегося под влиянием ZnO.

Таким образом, настоящее исследование ставит своей целью изучение особенностей электронного энергетического спектра графена, являющегося компонентом гетеросистемы. На основании результатов квантово-механического моделирования исследована зависимость электронных свойств графена от энергетического влияния цинксодержащих графеноподобных материалов (ZnS и ZnO).

Особенности моделирования слоистых структур. Выбор функционала. Исследуемые системы представляют собой гетероструктуры, в которых сильные ковалентные связи в плоскости формируют атомные слои, удерживающиеся между собой слабыми силами – силами Ван-дер-Ваальса [12].

Для адекватного описания физических процессов в системе графен–цинксодержащий материал на начальном этапе необходимо обосновать выбор функционала электронной плотности, используемого при квантово-механическом моделировании в программном комплексе VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), который учитывает значительный для данного класса структур вклад сил Ван-дер-Ваальса. Пренебрежение данным этапом, как будет показано далее, приводит к недостоверным результатам.

В современном представлении теории функционала электронной плотности (ТФП) полная энергия записывается следующим образом:

$$E = T_s - V_{ne} + J + E_{xc}, \quad (1)$$

где T_s – кинетическая энергия невзаимодействующей системы, V_{ne} – взаимодействие электронов и ядер; J – классический вклад в энергию межэлектронного отталкивания. Последний член уравнения E_{xc} – обменно-корреляционный функционал, который включает в себе всю разницу между реальной и фиктивной системами.

Теория функционала электронной плотности обеспечивает высокую адекватность описания кристаллов при условии корректного представления обменно-корреляционного функционала. Для обменно-корреляционной энергии, как правило, выбирается наиболее подходящая аппроксимация, которая и обуславливает эффективность теории Кона – Шэма [13] при практических применениях. Одним из подходов является локальная аппроксимация плотности – LDA (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP), предполагающая, что локальная электронная плотность представляет собой однородный электронный газ. Обменно-корреляционный функционал записывается в виде интеграла от некоторой функции пространственных

переменных, определяющихся электронной плотностью и спиновой поляризацией в данной точке:

$$E_{xc} = \int dr v_{xc}(n(r))n(r), \quad (2)$$

где $v_{xc}(n)$ – обменно-корреляционная энергия на одну частицу однородного электронного газа, r – радиус-вектор.

Аппроксимация локальной плотности является грубым приближением, т. е. необходимо применять методы более точного описания функционала локальной плотности. Например, приближение обобщенного градиента, в котором помимо электронной плотности используется информация о неоднородности путем включения абсолютного значения градиента плотности – GGA (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP).

В данном подходе выражение для обменно-корреляционной энергии разлагается по степеням градиента плотности. Выражение для разложения имеет вид

$$E_{xc}^{GGA} = E_{xc}^{LDA} + \int dr f(n(r), |\nabla n(r)|)n(r), \quad (3)$$

где $f(n(r), |\nabla n(r)|)$ – некоторая функция, для которой получено приближенное выражение [14].

Локальные и полулокальные функционалы электронной плотности не описывают силы Ван-дер-Ваальса, так как для этого необходимо использовать нелокальный функционал. Возникает необходимость введения специфических (гибридных) функционалов, которые включают нелокальные дисперсионные взаимодействия, – DFT-D2 (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP):

$$E_{DFT} = E_{KS-DFT} + E_{disp}. \quad (4)$$

В уравнении (4) полная энергия системы представляется в виде двух слагаемых: первое отвечает функционалу электронной плотности в рамках формализма Кона – Шэма [15], а второе – дисперсионная поправка. Одним из приближенных методов расчета коррекционной поправки является так называемый метод Гримма [16], в котором дисперсионный член имеет вид

$$E_{dis} = -s_6 \sum_{i=1}^{N_{atom}} \sum_{j=1}^{N_{atom}} \frac{C_6^{ij}}{R_{ij}^6} f_{dmf}(R_{ij}). \quad (5)$$

Здесь N_{atom} – число атомов в системе; C_6^{ij} – дисперсионный коэффициент для пары атомов i и j ; S_6 – масштабирующий фактор; R_{ij} – межатомное расстояние; f_{dmf} – демпфирующая функция.

В работе [4] было предложено новое представление обменно-корреляционного потенциала – функционал Диона – vdW-DF (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP):

$$E_{xc} = E_x^{PBE} + E_c^{LDA} + E_c^{nl}, \quad (6)$$

где первое слагаемое – обменная энергия, полученная с помощью функционала Пердю – Бурке – Эрнцерахофа, второе – энергия корреляции в приближении локальной плотности, и третье слагаемое – нелинейная корректирующая функция;

$$E_c^{nl} = \iint dr dr' n(r)\phi(r, r')n(r'), \quad (7)$$

где $\phi(r, r')$ – функция, определяющая дисперсионную составляющую многоэлектронной системы.

Для выбора поправок к ТФП, учитывающих силы Ван-дер-Ваальса, проведено моделирование структурных свойств типичного представителя слоистых материалов – черного фосфора [17]. В расчетах использовались функционалы как учитывающие силы Ван-дер-Ваальса (DFT-D2, vdW-DF), так и не принимающие их во внимание (LDA-функционал, основанный на локальной

аппроксимации плотности; GGA-функционал, базирующийся на приближении обобщенного градиента). Взаимодействие между атомными остовами и валентными электронами для каждого метода учета обменно-корреляционной энергии описывалось на языке присоединенных плоских волн (PAW) [18, 19].

Структурная оптимизация считалась достигнутой при разнице полной энергии менее $1 \cdot 10^{-6}$ эВ между двумя последними шагами. Значения энергии обрезания и количества k -точек выбиралось исходя из тестовых расчетов по достижении критерия сходимости.

При моделировании структурных свойств черного фосфора интегрирование в импульсном пространстве проводилось по сетке k -точек $9 \times 4 \times 8$, сгенерированной по Гамма-схеме. Энергия обрезания составляла 450 эВ. Результаты структурной оптимизации приведены в таблице.

Структурные характеристики объемного черного фосфора
Structure parameters of bulk black phosphorus

Параметр Parameter	LDA	GGA-PBE	DFT-D2	vdW-DF	Эксперимент [20] Experiment [20]
a , Å	3,3061	3,3063	3,3229	3,3559	3,3136
b , Å	10,1407	11,2648	10,4693	11,4060	10,478
c , Å	4,1434	4,5603	4,4257	4,6829	4,3763
u , Å	0,1064	0,0940	0,1021	0,0938	0,10168
v , Å	0,07176	0,0868	0,0826	0,0893	0,08056
α_1 , град	96,4387	96,000	96,5476	96,2240	96,34
α_2 , град	100,1920	103,5518	102,4382	104,0713	102,09
d , Å	2,92	3,54	3,10	3,57	3,11

Результаты проведенных расчетов показали, что обменно-корреляционный функционал LDA недооценивает значения параметров элементарной ячейки. Установлено, что параметры b и d , для адекватного описания которых важно проводить моделирование с учетом сил Ван-дер-Ваальса, значительно переоценены при расчете функционалами GGA и vdW-DF. Наилучшие результаты относительно геометрической структуры дает функционал DFT-D2, расхождение с экспериментальными данными не превышает 2,5 % [20].

Результаты моделирования структурных и электронных свойств гетероструктур. Модель гетероструктуры ZnO/графен формировалась из 4×4 элементарных ячеек графена и 3×3 элементарных ячеек ZnO (рис. 1).

Несоответствие решеток составило менее 2 %. Поскольку программный комплекс VASP транслирует заданную ячейку по всем направлениям, для исключения энергетического влияния двухслойных структур друг на друга был задан слой вакуума 20 \AA вдоль нормали к поверхности гетероструктуры.

Значения энергии обрезания и количества k -точек выбиралось исходя из тестовых расчетов по достижении критерия сходимости. Энергия обрезания базисного набора плоских волн составляла 500 эВ. Интегрирование в импульсном пространстве проводилось по сетке k -точек $8 \times 8 \times 1$, сгенерированной по Гамма-схеме. Поскольку ТФП со стандартными методами описания функционала обменно-корреляционной энергии недооценивает корреляционную составляющую, моделирование систем с атомами, в которых суммарный вклад данной составляющей в значение полной энергии системы существенен, проводилось с учетом Хаббард-коррекции (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP, LDA+U) [21].

В результате оптимизации атомной структуры постоянная решетки оксида цинка уменьшилась на 1,85 %, а постоянная решетки графена не изменилась.

Проведены самосогласованные расчеты, использующие обменно-корреляционный функционал с учетом сил Ван-дер-Ваальса (DFT-D2), эффективность применения которого была подтверждена выше на примере черного фосфора. Показано, что адгезия графена на графеноподобном оксиде цинка происходит при межслоевом расстоянии $3,16 \text{ \AA}$ (рис. 2).

Для анализа энергетической зонной диаграммы гетероструктуры ZnO/графен выполнялся несамосогласованный расчет по контуру, соединяющему точки высокой симметрии M-K-G-M,

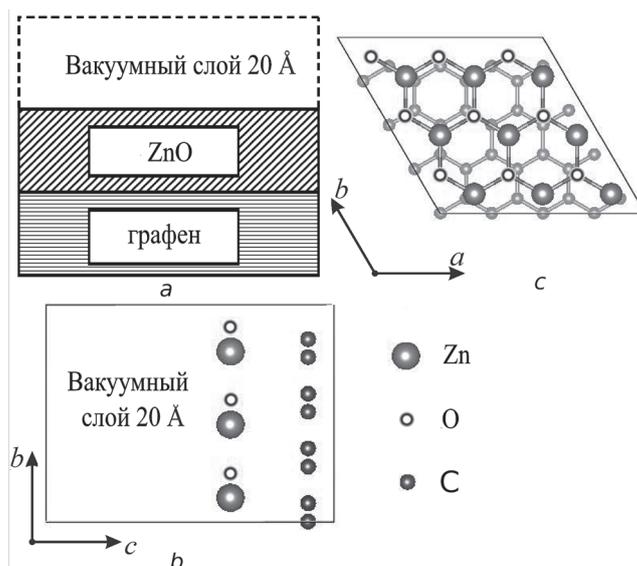


Рис. 1. Гетероструктура ZnO/графен: *a* – схематическое представление; *b* – вид суперячейки (0001); *c* – вид суперячейки (10 $\bar{1}0$)

Fig. 1. Heterostructure of ZnO/graphene: *a* – layered structure; *b* – supercell (0001); *c* – supercell (10 $\bar{1}0$)

первой зоны Бриллюэна графеноподобных материалов. Характерной особенностью зонной диаграммы графена является наличие особенных точек, так называемых точек Дирака (точки К), в которых валентная зона и зона проводимости при нормальных условиях соприкасаются [22]. Вблизи этих точек зонная диаграмма графена приобретает вид конусов (выполняется линейный закон дисперсии для носителей заряда).

По результатам моделирования характер энергетических зон по сравнению со структурированным графеном не изменился: в точке Дирака они имеют вид двух конусов, между которыми наблюдается незначительная энергетическая щель шириной 0,0001 эВ (рис. 3), что является

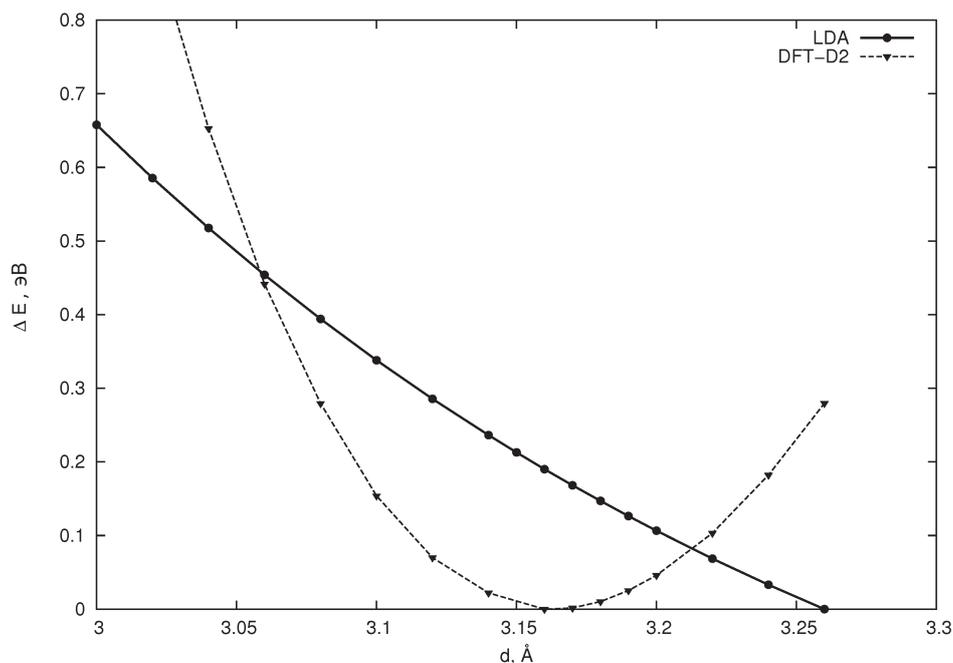


Рис. 2. Зависимость изменения общей энергии системы от расстояния между слоями для гетероструктуры ZnO/графен

Fig. 2. Total energy of the system vs. the interlayer distance for various functionals (ZnO/graphene)

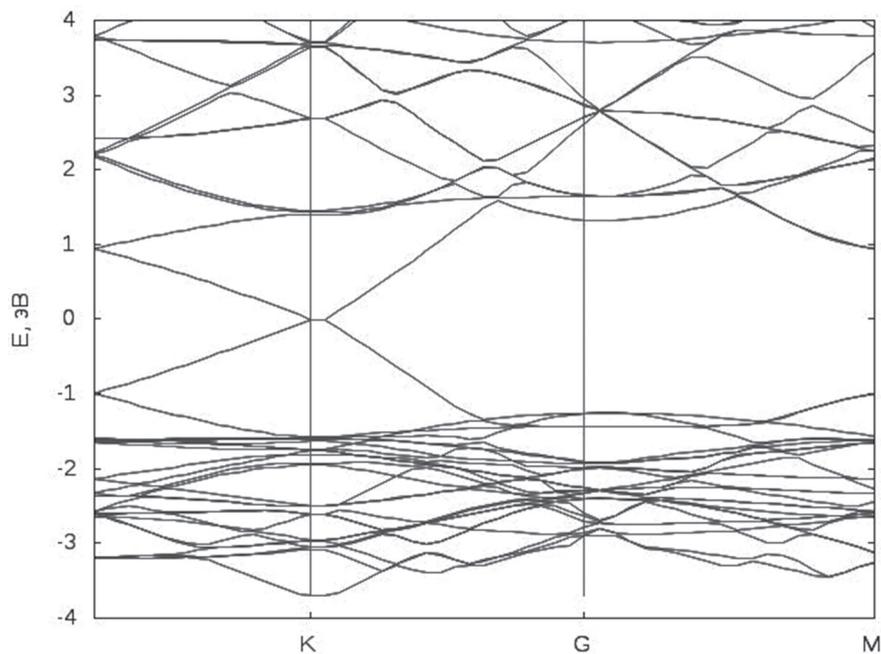


Рис. 3. Зонная диаграмма ZnO/графен

Fig. 3. Band structure of ZnO/graphene

недостаточным, и можно говорить об отсутствии запрещенной зоны в данной гетероструктуре. Энергия связи между слоем графена и оксида цинка составляет 0,5 эВ.

Модель гетероструктуры ZnS/графен формировалась из 3×3 элементарных ячеек графена и 2×2 элементарных ячеек ZnS. Несоответствие ячеек составило 1,72 %. Интегрирование обратного энергетического пространства выполнялось по сетке $8 \times 8 \times 1$. Расчеты проводились с использованием локального функционала DFT-D2 с учетом Хаббард-коррекции. Согласно расчетам межслоевое расстояние в гетероструктуре ZnS/графен составило 3,45 Å (см. рис. 2).

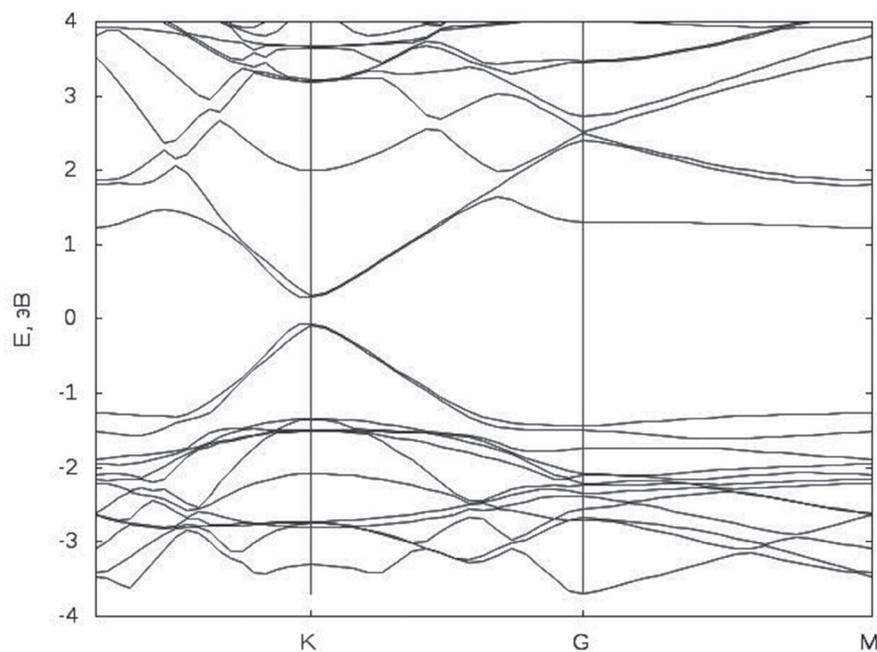


Рис. 4. Зонная диаграмма ZnS/графен

Fig. 4. Band structure of ZnS/graphene

На рис. 4 представлены результаты моделирования зонной структуры для ZnS/графен. Несамосогласованный расчет проводился по контуру M-K-G-M. В энергетической структуре образуется зазор 0,35 эВ. Зоны приобретают параболический характер, но кривизна около точки Дирака сохраняется, что свидетельствует о небольшой потере в значении подвижности, вызванной энергетическим влиянием графеноподобного ZnS. Энергия связи между листом графена и ZnS принимает значение 0,45 эВ. Таким образом, под энергетическим влиянием монослоя ZnS на графен в последнем образуется запрещенная зона.

Заключение. На основании результатов моделирования структурных свойств объемного черного фосфора проведено сравнение различных подходов к описанию обменно-корреляционного функционала. Показана необходимость учета сил Ван-дер-Ваальса при *ab initio* моделировании слоистых структур. Для дальнейших расчетов использовался только обменно-корреляционный функционал DFT-D2, поскольку он дает лучшие значения структурных параметров. Определены межслоевые расстояния для изучаемых слоистых систем. Для черного фосфора это расстояние равно 3,1 Å, а для гетероструктур – 3,16 Å (ZnO/графен) и 3,45 Å (ZnS/графен).

Квантово-механические расчеты электронных свойств гетероструктур ZnO/графен и ZnS/графен показали, что из-за влияния монослоя графеноподобного сульфида цинка на графен в последнем наблюдается образование запрещенной зоны, в то время как в структуре ZnO/графен этого не происходит. Ширина запрещенной зоны для графена в структуре ZnS/графен составила 0,35 эВ.

Принимая во внимание то, что теория функционала электронной плотности со стандартными методами описания функционала обменно-корреляционной энергии недооценивает корреляционную составляющую, моделирование систем с атомами, в которых суммарный вклад данной составляющей в значение полной энергии системы существенен, проводилось с учетом Хаббард-коррекции. Данный подход приводит к увеличению значения ширины запрещенной зоны. Однако в сильнокоррелированных системах достичь экспериментальных значений не удастся [23]. Таким образом, полученное в настоящей работе значение ширины запрещенной зоны может оказаться большим. Приобретение графеном свойства полупроводника открывает возможности для его использования в конструкциях приборов микро- и нанoeлектроники.

Благодарности. Представленные результаты получены в рамках обеспечения задач задания 3.02 ГПНИ «Конвергенция». Для проведения компьютерного моделирования использовался вычислительный кластер учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

Acknowledgments. The presented results were obtained within the framework of Task 3.02 of the GPSR “Convergence”. The BSUIR computing cluster was used for computer simulation.

Список использованных источников

1. Young-Woo Son. Energy gaps in graphene nanoribbons / Young-Woo Son, M. L. Cohen, S. G. Louie // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97, № 21. – P. 216803(1–4).
2. Tunable MoS₂ bandgap in MoS₂-graphene heterostructures / A. Ebnonnasir [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2014. – Vol. 105, № 3. – P. 031603(1–5).
3. Under pressure: Control of strain, phonons and bandgap opening in rippled graphene / U. Monteverde [et al.] // *Carbon.* – 2015. – Vol. 91. – P. 266–274.
4. Kaoru Kanayama. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer graphene / Kaoru Kanayama, Kosuke Nagashio // *Scientific Reports.* – 2015. – Vol. 5, № 1. – P. 15789 (1–8).
5. Ивановский, А. Л. Графеновые и графеноподобные материалы / А. Л. Ивановский // *Успехи химии.* – 2012. – Т. 81, № 7. – С. 571–605.
6. Baojun Li. ZnO@graphene composite with enhanced performance for the removal of dye from water / Baojun Li, Huaqiang Cao // *J. Mater. Chem.* – 2011 – Vol. 21, № 10. – P. 3346–3349.
7. Microwave-assisted synthesis of ZnO-graphene composite for photocatalytic reduction of Cr(VI) / Xinyuan Liu [et al.] // *Catal. Sci. Technol.* – 2011 – Vol. 1, № 7. – P. 1189–1193.
8. Pan, S. ZnS-Graphene nanocomposite: Synthesis, characterization and optical properties / S. Pan, X. Liu // *J. Solid State Chem.* – 2012 – Vol. 191. – P. 51–56.
9. The structure control of ZnS/graphene composites and their excellent properties for lithium-ion batteries / M. Mao [et al.] // *J. Mater. Chem. A.* – 2015. – Vol. 3. – P. 13384–13389.

10. Integration of graphene/ZnS nanowire film hybrid based photodetector arrays for high-performance image sensors / Congjun Wu [et al.] // *2D Materials*. – 2017. – Vol. 4, № 2. – P. 025113.
11. Tu, Z. C. First-principles study on physical properties of a single ZnO monolayer with graphene-like structure / Z. C. Tu // *J. Comput. Theor. Nanosci.* – 2010 – Vol. 7, № 6. – P. 1182–1186.
12. Антонова, И. В. Вертикальные гетероструктуры на основе графена и других монослойных материалов / И. В. Антонова // *Физика полупроводников*. – 2016. – Т. 50, № 1. – С. 67–82.
13. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol. 140, № 4A. – P. A1133–A1138.
14. Арбузников, А. В. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы: развитие концепции / А. В. Арбузников // *Журн. структур. химии*. – 2007. – Т. 48. – С. S5–S38.
15. Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // *J. Comp. Chem.* – 2006. – Vol. 27, № 15. – P. 1787–1799.
16. Van der Waals density functional for general geometries / M. Dion [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92, № 92. – P. 246401-1-4.
17. Morita, A. Semiconducting black phosphorus / A. Morita // *Appl. Phys. A. Solids and Surfaces*. – 1986. – Vol. 39, № 4. – P. 227–242.
18. Blöchl, P. E. Projector augmented-wave method / P. E. Blöchl // *Phys. Rev.* – 1994. – Vol. 50, № 24. – P. 17953.
19. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented wave method / G. Kresse, J. Joubert // *Phys. Rev. B*. – 1999. – Vol. 59, № 3. – P. 1758–1775.
20. Brown, A. Refinement of the crystal structure of black phosphorus / A. Brown, S. Rundqvist // *Acta Crystallogr.* – 1965. – Vol. 19, № 4. – P. 684–685.
21. Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // *Proc. R. Soc. London: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1963. – Vol. 276, № 1365. – P. 238–257.
22. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov [et. al.] // *Nature*. – 2005. – Vol. 438, № 7065. – P. 197–200.
23. Perdew, J. P. Density functional theory and the band gap problem / J. P. Perdew // *Int. J. of Quantum Chem.* – 1985. – Vol. 28, № S19. – P. 497–523.

References

1. Young-Woo Son, Cohen M. L., Louie S. G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, 2006, vol. 97, no. 21, pp. 216803(1–4). Doi: 10.1103/PhysRevLett.97.216803
2. Ebnonnasir A., Narayanan B., S. Kodambaka, Ciobanu C. V. Tunable MoS₂ bandgap in MoS₂-graphene heterostructures. *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 105, no. 3, pp. 031603(1–5). Doi: 10.1063/1.4891430
3. Monteverde U., Pal J., Migliorato M. A., Missous M., Bangert U., Zan R., Kashtiban R., Powell D. Under pressure: Control of strain, phonons and bandgap opening in rippled grapheme. *Carbon*, 2015, vol. 91, pp. 266–274. Doi: 10.1016/j.carbon.2015.04.044
4. Kaoru Kanayama, Kosuke Nagashio. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer grapheme. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, no. 1, pp. 15789 (1–8). Doi: 10.1038/srep15789
5. Ivanovskii A. L. Graphene-based and graphene-like materials. *Russian Chemical Reviews*, 2012, vol. 81, no. 7, pp. 571–605. Doi: 10.1070/rc2012v081n07abeh004302
6. Baojun Li, Huaqiang Cao. ZnO@graphene composite with enhanced performance for the removal of dye from water. *Journal of Materials Chemistry*, 2011, vol. 21, no. 10, pp. 3346–3349. Doi: 10.1039/c0jm03253k
7. Xinjuan Liu, Likun Pan, Tian Lv, Ting Lu, Guang Zhu, Zhuo Sun, Changqing Sun. Microwave-assisted synthesis of ZnO-graphene composite for photocatalytic reduction of Cr(VI). *Catalysis Science & Technology*, 2011, vol. 1, no. 7, pp. 1189–1193. Doi: 10.1039/c1cy00109d
8. Pan S., Liu X. ZnS-Graphene nanocomposite: Synthesis, characterization and optical properties. *Journal of Solid State Chemistry*, 2012, vol. 191, pp. 51–56. Doi: 10.1016/j.jssc.2012.02.048
9. Mao M., Jiang L., Wu L., Zhang M., Wang T. The structure control of ZnS/graphene composites and their excellent properties for lithium-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 2015, vol. 3, pp. 13384–13389. Doi: 10.1039/c5ta01501d
10. Congjun Wu, Fei Wang, Caoyuan Cai, Zhihao Xu, Yang Ma, Fan Huang, Feixiang Jia, Min Wang. Integration of graphene/ZnS nanowire film hybrid based photodetector arrays for high-performance image sensors. *2D Materials*, 2017, vol. 4, no. 2, pp. 025113. Doi: 10.1088/2053-1583/aa735f
11. Tu Z. C. First-principles study on physical properties of a single ZnO monolayer with graphene-like structure. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2010, vol. 7, no. 6, pp. 1182–1186. Doi: 10.1166/jctn.2010.1470
12. Antonova I. V. Vertical heterostructures based on graphene and other 2D materials. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 1, pp. 66–82. Doi: 0.1134/s106378261601005x
13. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 1965, vol. 140, no. 4A, pp. A1133–A1138. Doi: 10.1103/physrev.140.a1133
14. Arbuznikov A. V. Hybrid exchange correlation functionals and potentials: Concept elaboration. *Journal of Structural Chemistry*, 2007, vol. 48, pp. S1–S31. Doi: 10.1007/s10947-007-0147-0
15. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of Computational Chemistry*, 2006, vol. 27, no. 15, pp. 1787–1799. Doi: 10.1002/jcc.20495

16. Dion M., Rydberg H., Schroder E., Langreth D. C., Lundqvist B. I. Van der Waals density functional for general geometries. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 92, no. 24, pp. 246401. Doi: 10.1103/physrevlett.92.246401
17. Morita A. Semiconducting black phosphorus. *Applied Physics A. Solids and Surfaces*, 1986, vol. 39, no. 4, pp. 227–242. Doi: 10.1007/BF00617267
18. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no. 24, pp. 17953–17979. Doi: 10.1103/physrevb.50.17953
19. Kresse G., Joubert J. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented wave method. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no. 3, pp. 1758–1775. Doi: 10.1103/physrevb.59.1758
20. Brown A., Rundqvist S. Refinement of the crystal structure of black phosphorus. *Acta Crystallographica*, 1965, vol. 19, no. 4, pp. 684–685. Doi: 10.1107/s0365110x65004140
21. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1963, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257. Doi: 10.1098/rspa.1963.0204
22. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme. *Nature*, 2005, vol. 438, no. 7065, pp. 197–200. Doi: 10.1038/nature04233
23. Perdew J. P. Density functional theory and the band gap problem. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1985, vol. 28, no. S19, pp. 497–523. Doi: 10.1002/qua.560300314

Информация об авторах

Баранова Мария Сергеевна – аспирант, младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: baranova@bsuir.by

Скачкова Вероника Андреевна – аспирант, младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: skachkova@bsuir.by

Стемпицкий Виктор Романович – кандидат технических наук, доцент кафедры микро- и нанoeлектроники БГУИР, заведующий научно-исследовательской лабораторией 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vstem@bsuir.by

Гвоздовский Дмитрий Чеславович – магистрант, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: mitya.gvozдовskiy@mail.ru

Information about the authors

Maryia S. Baranova – Postgraduate, Junior Researcher of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: baranova@bsuir.by

Veranika A. Skachkova – Postgraduate, Junior Researcher of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: skachkova@bsuir.by

Viktor R. Stempitsky – Ph. D. (Engineering), Assistant Professor of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Head of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vstem@bsuir.by

Dmitryi C. Hvazdousky – Undergraduate, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mitya.gvozдовskiy@mail.ru

Л. Ф. Макаренко¹, С. Б. Ластовский², А. С. Якушевич², М. Молл³, И. Пинтилие⁴

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

²Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь

³ЦЕРН, Женева, Швейцария

⁴Национальный институт физики материалов, Магурел, Румыния

ИНЖЕКЦИОННЫЙ ОТЖИГ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ МЕЖДОУЗЕЛЬНОГО ТИПА В ЛЕГИРОВАННЫХ БОРОМ КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Аннотация. С использованием одних и тех же n^+p диодных структур проведено изучение влияния инъекции электронов в p -область диода на отжиг в ней простейших дефектов междоузельного типа, созданных облучением α -частицами. Обнаружено, что собственные междоузельные атомы Si обладают наиболее высокой чувствительностью к инъекции. При температуре жидкого азота и плотности прямого тока 10–20 мА/см² постоянная времени их отжига составляет единицы секунд. Для активации атомов междоузельного бора при $T \leq 140$ К требуются более высокие плотности прямого тока (≥ 100 мА/см²). В отличие от двух предыдущих случаев, пропускание прямого тока через n^+p -переход не только ускоряет, но даже замедляет отжиг междоузельного углерода. Высказано предположение, что только реакции междоузельных атомов, которые характеризуются сильным электрон-фононным взаимодействием, могут быть ускорены в результате рекомбинационных процессов.

Ключевые слова: кремний, радиационные дефекты, междоузельные атомы, рекомбинационно-ускоренные реакции

Для цитирования. Инжекционный отжиг радиационных дефектов междоузельного типа в легированных бором кристаллах кремния / Л. Ф. Макаренко [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2017. – № 3. – С. 108–117.

L. F. Makarenko¹, S. B. Lastovskii², H. S. Yakushevich², M. Moll³, I. Pintilie⁴

¹Belarusian State University, Minsk, Belarus

²Scientific and Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

³CERN, Geneva, Switzerland

⁴National Institute of Materials Physics, Magurele, Romania

INJECTION ANNEALING OF RADIATION-INDUCED INTERSTITIAL DEFECTS IN BORON DOPED SILICON CRYSTALS

Abstract. Using the same n^+p diode structures, the effect of injection of minority charge carriers on the annealing of various interstitial defects has been studied in silicon irradiated with α -particles. It has been found that the self-interstitial silicon atoms (Si_i) possess the highest sensitivity to forward current injection. At a liquid nitrogen temperature and a forward current density of 10–20 mA/cm², the time constant for Si_i annealing is about a few seconds. To activate the interstitial boron atoms at $T \leq 140$ K, substantially higher direct current densities are required (≥ 100 mA/cm²). However, it has been found that the forward current injection not only enhances, but even causes the retardation of interstitial carbon annealing. It is suggested that only the reactions of interstitial atoms, characterized by a strong electron-phonon coupling, can be enhanced by recombination processes.

Keywords: silicon, radiation defects, interstitial atoms, recombination-enhanced reactions

For citation. Makarenko L. F., Lastovskii S. B., Yakushevich H. S., Moll M., Pintilie I. Injection annealing of radiation-induced interstitial defects in boron doped silicon crystals. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 108–117 (in Russian).

Введение. При облучении заряженными частицами радиационное повреждение, обусловленное удалением подвижных носителей заряда, в кремнии n -типа проводимости происходит преимущественно в результате образования дефектов вакансионного типа (дивакансия A - и E -центров) [1]. В p -Si важную роль в удалении носителей заряда играют дефекты междоузельного типа. При электронном облучении первичные дефекты – собственные междоузельные атомы кремния (Si_i), вытесняют из узлов атомы легирующей примеси III группы уже при температурах ≤ 20 К [2, 3].

В случае облучения более тяжелыми частицами, процессы взаимодействия Si_i с примесными атомами имеют весьма большие характеристические времена даже при комнатных температурах [4–6].

Однако процессы взаимодействия атомов Si_i с атомами примесей могут быть существенно ускорены посредством возбуждения электронной подсистемы кристалла [4–9]. То есть результат воздействия излучений на электрические свойства p -Si будет зависеть не только от вида частиц и дозы облучения, но и, существенным образом, от интенсивности облучения и внешнего возбуждения (подсветки, инжекции неосновных носителей заряда). Влияние последних факторов усложняет анализ кинетики образования радиационных дефектов в p -Si, и имеющихся в настоящее время данных о рекомбинационно-стимулированных дефектных реакциях междуузельного типа недостаточно для прогнозирования радиационного повреждения биполярных транзисторов, облучаемых в различных режимах их работы.

Инжекция неосновных носителей заряд через p - n -переход является эффективным методом исследования рекомбинационно-стимулированных реакций между дефектами [7–9]. Это обусловлено тем, что можно контролируемым образом изменять уровень инжекции неосновных носителей заряда в широких пределах. Некоторый недостаток этого метода заключается в неопределенности, возникающей при сравнении данных разных авторов, когда используются диоды с разными значениями времени жизни неосновных носителей заряда. В частности, нами было установлено, что скорость стимулированного прямым током (СПТ) отжига борсодержащих комплексов зависит от дозы облучения [9]. Поэтому исследование СПТ отжига различных радиационно-индуцированных дефектов желательно проводить с использованием одних и тех же, либо идентичных приборных структур.

Целью настоящей работы является сравнение влияния инжекции электронов через p - n -переход на поведение трех типов дефектов: Si_i , B_i и C_i , образованных в легированных бором кристаллах кремния p -типа в результате облучения α -частицами.

Методика эксперимента. В работе исследовались эпитаксиальные Si n^+ - p -структуры (диоды) с разным содержанием бора. Концентрация дырок в структурах, обусловленная главным образом легированием бором во время эпитаксиального роста используемых кремниевых пластин, оценивалась из измерений вольт-фарадных характеристик и составила $9 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (тип 1), $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (тип 2) и $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (тип 3). Диоды были изготовлены при одинаковых технологических процессах и поэтому содержали одинаковое количество кислорода $[\text{O}] \approx 1,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, которое определялось по скорости отжига междуузельного углерода с применением представленной в работе [10] калибровки. Концентрация углерода оценивалась по соотношению сечения захвата собственных междуузельных атомов к сечению захвата бора и углерода [3] и составила $\leq 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в образцах всех типов.

Облучение осуществлялось α -частицами с помощью источника с изотопами ^{239}Pu при температурах примерно 280–290 К. Энергия α -частиц имела значения 5,144 и 5,157 МэВ, время облучения составляло 40–150 мин. Поверхностная активность источника была около $2 \cdot 10^8 \text{ Бк/см}^2$. Описание распределения повреждения для такого радиационного источника приводится в [10].

Исследование электрически активных радиационно-индуцированных дефектов осуществлялось методом нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) в диапазоне температур 79–270 К. Далее будут использоваться два обозначения для экспериментальных спектров: DLTS, когда заполнение ловушек осуществлялось основными носителями заряда (0 В или заполняющие импульсы обратного смещения диода), и MC-DLTS, когда ловушки заполнялись также и неосновными носителями заряда (заполняющие импульсы прямого смещения).

Отжиг диодов при температурах свыше 100 °С в течение ~30 мин проводился на воздухе в трубчатой печи. Ниже 100 °С образцы отжигались непосредственно в криостате DLTS-спектрометра.

Стимулированный прямым током отжиг собственных междуузельных атомов кремния. Обнаружение образующихся в результате облучения подвижных собственных атомов кремния (Si_i) происходит, как правило, по появлению междуузельных атомов примесей бора (B_i), алюминия (Al_i) и углерода (C_i). Эти междуузельные атомы примесей надежно идентифицированы как методами ЭПР и ИК-поглощения, так и DLTS [3]. В кремнии методом DLTS удобно регистрировать

углеродные центры: C_i (уровень $E(0+) = E_v + 0,28$ эВ) и C_iO_i (уровень $E(0+) = E_v + 0,36$ эВ). А методом MC-DLTS регистрируется также борсодержащий комплекс B_iO_i (уровень $E(0+) = E_c - 0,23$ эВ) [3, 7].

В исследованных нами диодах сразу после облучения α -частицами в спектрах DLTS не наблюдается каких-либо дефектов междоузельного типа, связанных с междоузельным углеродом (рис. 1, кривая 1). Регистрируется только пик H1, связанный с дивакансией [11], и пик H3', имеющий значительно меньшую амплитуду. Природа пика H3' еще не ясна. При измерении спектров MC-DLTS до проведения СПТ отжига, чтобы избежать неконтролируемых инжекционно-стимулированных реакций, приходится ограничивать амплитуду и длительность импульса возбуждения. При использовании коротких ($t_p = 10^{-5}$ с) импульсов возбуждения с малой величиной прямого напряжения ($U_p = +0,66$ В) в спектре MC-DLTS (см. рис. 1, кривая 2) можно наблюдать дополнительный пик E039, который ранее был идентифицирован как связанный с собственным междоузельным атомом кремния (Si_i) [5]. Невозможность использования больших значений прямого напряжения затрудняет определение максимальной амплитуды пика E039 и его анализ для исследования кинетики междоузельных реакций с применением данных MC-DLTS.

Пик E039 исчезает после кратковременного пропускания через диод прямого тока с весьма малой плотностью ($J_f = 0,016$ А/см²) даже при температуре жидкого азота. Одновременно с его исчезновением появляется пик H2, связанный с C_i (см. рис. 1, кривая 3). Стационарная концентрация C_i достигается после проведения такого СПТ отжига в течение 30 с. Скорость образования пика H2 при $J_f = 0,016$ А/см² составляет $0,18$ с⁻¹, которая значительно превышает аналогичную величину для других междоузельных дефектов в *p*-Si, которые в условиях эксперимента можно считать неподвижными.

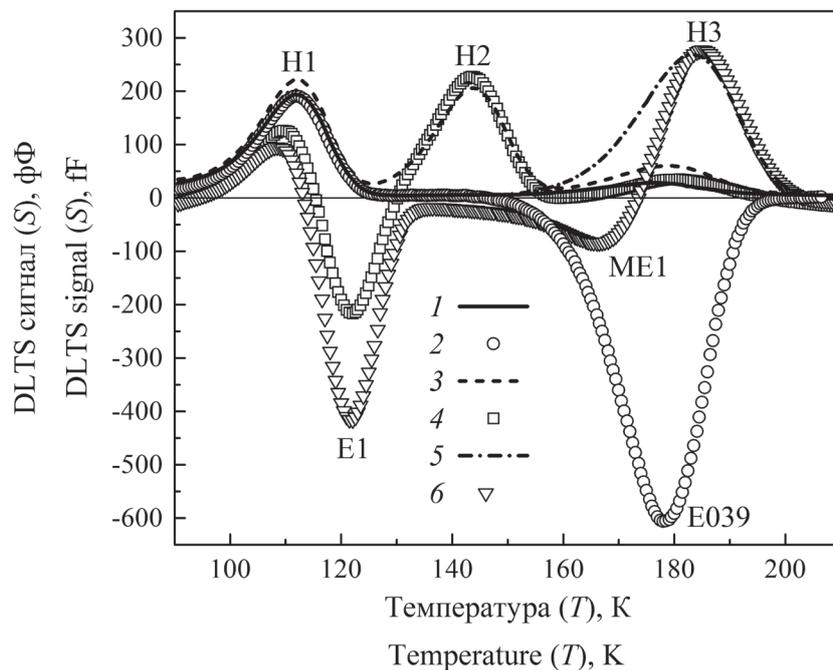


Рис. 1. Стандартные спектры DLTS (линии) и MC-DLTS (точки), полученные сразу после облучения (кривые 1, 2), после отжига прямым током плотностью $J_f = 0,016$ А/см² при 80 К в течение 2 мин (кривые 3, 4) и после последующего термического отжига при 100 °С в течение 30 мин (кривые 5, 6). Условия измерения: окно скоростей эмиссии $e_w = 19$ с⁻¹ для всех спектров; изменение смещения $-3 \rightarrow 0$ В и длительность заполняющего импульса $t_p = 10$ мс для спектров 1, 3, 5; изменение смещения $-3 \rightarrow +0,66$ В и длительность заполняющего импульса $t_p = 10$ мкс для спектра 2; изменение смещения $-3 \rightarrow +1$ В и длительность заполняющего импульса $t_p = 10$ мс для спектров 4, 6.

Fig. 1. Conventional DLTS (lines) and MC-DLTS (points) spectra registered immediately after irradiation (curves 1, 2), after FCE annealing at 80 K with forward current density $J = 0.016$ А/см² during 2 minutes (curves 3, 4) and after subsequent thermal annealing at 100 °C during 30 minutes (curves 5, 6). Measurements settings were: emission rate window $e_w = 19$ s⁻¹ for all spectra; bias change $-3 \rightarrow 0$ V, and filling pulse duration $t_p = 10$ ms for spectra 1, 3, 5; bias change $-3 \rightarrow +0.66$ V, and filling pulse duration $t_p = 10$ μ s for spectrum 2; bias change $-3 \rightarrow +1$ V, and filling pulse duration $t_p = 10$ ms for spectra 4, 6

Тем не менее после такой низкотемпературной инжекции в спектрах MC-DLTS проявляется еще один дефект междоузельного типа, а именно V_iO_i (отрицательный пик E1 на рис. 1) [3]. Естественно ожидать, что в результате захвата подвижных Si_i одновременно с C_i в исследуемых структурах образуется и B_i , который не может быть зарегистрирован в кремнии p -типа методом DLTS [7]. О наличии подвижных атомов междоузельного бора мы можем судить именно по появлению пика E1.

Последующие изменения спектров DLTS и MC-DLTS происходят при нагреве до температур ≥ 300 К. Пик H2 исчезает, а пик H3, связанный с ионизацией комплекса C_iO_i (см. рис. 1, кривые 5, 6) растет. После термического отжига при 120 °С в течение 30 мин образование радиационно-индуцированных дефектов междоузельного типа, стабильных при комнатной температуре, полностью завершается. При этом практически все подвижные атомы C_i захватываются атомами O_i . Также происходит дообразование комплекса V_iO_i (см. рис. 1, кривые 4, 6). Кроме вышеназванных пиков H1, H3 и E1, в спектрах MC-DLTS после отжига при 120 °С проявляется еще одна ловушка для дырок ME1, которая связана с метастабильным дефектом междоузельного типа [12].

Стимулированный прямым током отжиг междоузельного бора. Пик E1 появляется сразу после пропускания очень малого прямого тока ($J_f = 0,016$ А/см²) в течение 5 с при 80 К. Последующий СПТ отжиг с той же плотностью тока не приводит к дальнейшему увеличению амплитуды пика E1. В то же время наблюдается постепенный рост амплитуды пика H2, что свидетельствует о протекании процесса взаимодействия собственных междоузельных атомов с примесями. Очевидно, что при этом должно происходить взаимодействие не только с атомами примеси углерода, но и бора.

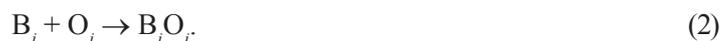
Однако такой плотности тока оказалось недостаточно для ускорения миграции появившихся атомов бора даже при температуре 140 К. Только увеличение плотности прямого тока до $J_f = 0,080$ А/см² при 140 К вызывает увеличение амплитуды пика E1. Результаты последующего изохронного СПТ отжига ($J_f = 0,080$ А/см²) показаны на рис. 2 (кривая 1). Полученные экспериментальные данные были обработаны с учетом, что скорость реакций между дефектами (τ^{-1}) описывается законом Аррениуса:

$$\tau^{-1} = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (1)$$

где ν_0 – частотный фактор, а E_a – энергия активации отжига, что позволило определить значение E_a как 0,077 эВ, а частотный фактор как $1,75$ с⁻¹. Определенное нами значение энергии активации СПТ отжига находится в хорошем согласии с данными работы [7].

Несколько меньшее значение E_a , полученное в [7], связано с тем, что в этой работе использовались более высокие плотности инжекционного тока. Так, было найдено, что скорость отжига возрастает с увеличением плотности прямого тока по степенному закону. При малых плотностях прямого тока показатель степени находится в интервале 1,5–2,0. Если рассчитать кривую изохронного отжига в соответствии с данными указанной работы, то мы увидим, что скорости СПТ отжига междоузельного бора, определенные в ней, значительно ниже полученных нами значений (см. рис. 2, кривая 2'). Очевидно, это связано с использованием нами значительно меньших доз облучения.

В то же время следует отметить, что чисто термический отжиг междоузельного бора в наших образцах протекает в соответствии с данными, опубликованными в [7]. Отжиг V_i происходит в результате его взаимодействия с междоузельным кислородом по реакции



Образующийся в результате комплекс V_iO_i стабилен до температур 180–200 °С [13]. Скорость отжига V_i увеличивается с ростом содержания кислорода. В кристаллах кремния, выращенных методом зонной плавки, содержание кислорода обычно составляет $2\text{--}5 \cdot 10^{16}$ см⁻³, поэтому кривая изохронного отжига в них (кривая 4' на рис. 2) будет смещена в область высоких температур по сравнению с кривой отжига V_i в диффузионных n^+p -структурах (кривые 2' и 3' на рис. 2).

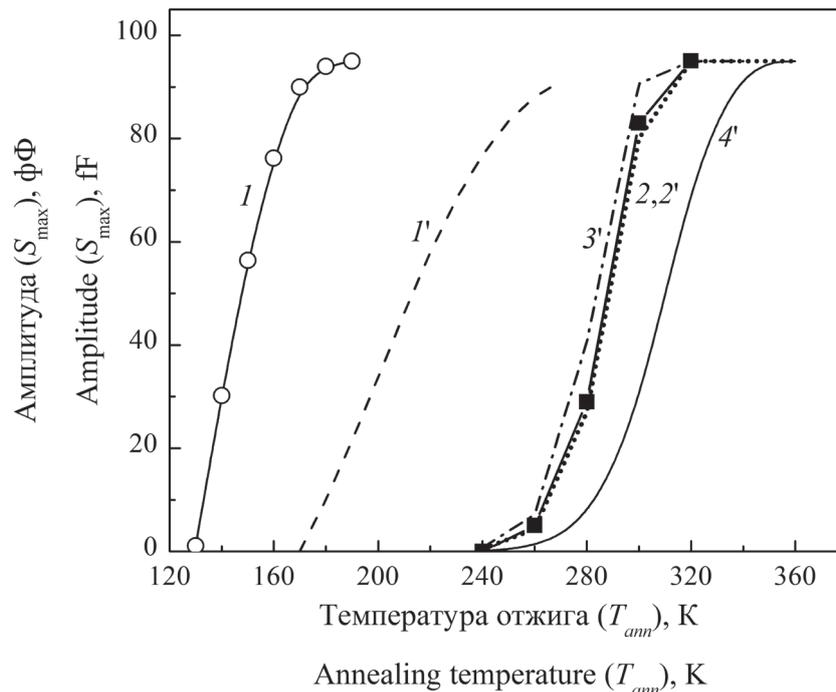


Рис. 2. Рост пика E1 (В) при СПТ отжиге (кривая 1) и термическом отжиге (кривая 2); точки являются экспериментальными данными. Кривая 1' рассчитана согласно уравнению (1); кривая 2' представляет собой результаты подгонки полученных нами экспериментальных данных с использованием энергии активации отжига 0,60 эВ; кривые 3' и 4' получены на основе экспериментальных данных из работы [7] по термическому отжигу, выполненному с использованием кристаллов кремния с разным содержанием кислорода

Fig. 2. Growth of E1 (В) peak under FCE (curve 1) and thermal (curve 2) annealing; the points are experimental data. Curve 1' has been calculated according to equation (1); curve 2' is the result of fitting our experimental data with the use of an activation energy of 0.60 eV; curves 3' and 4' have been obtained on the basis of experimental data from [7] on thermal annealing of Si crystals with a different oxygen content

Однако все эти кривые (2, 2'–4') характеризуются одной и той же энергией активации отжига, равной 0,60 эВ.

Влияние прямого тока на отжиг C_i . Как указывалось выше, термический отжиг C_i происходит путем его миграции до захвата междуузельным кислородом с образованием комплекса C_iO_i . При изучении взаимодействия C_i с O_i мы можем следить как за начальным, так и конечным продуктами реакции. Более того, методом DLTS удастся зарегистрировать и ее промежуточный продукт – метастабильную конфигурацию кислород-углеродного комплекса $C_iO_i^*$ [14].

Поскольку сразу после α -облучения в интервале температур наблюдается пик НЗ', то для более корректного анализа данных по СПТ отжигу C_i предпочтительнее использовать не сами спектры DLTS, полученные на различных этапах отжига, а их разности. В качестве опорного мы выбрали спектр $S_{270K}(T)$, который получен после отжига при $T_{ann} = 270$ К. Тогда в разностном спектре $\Delta S(T) = S_{T_{ann}}(T) - S_{270K}(T)$ уменьшение амплитуды отрицательного сигнала в области 145 К соответствует уменьшению концентрации C_i , а рост амплитуды положительного сигнала в области 185 К – увеличению концентрации C_iO_i (рис. 3). Как видим, в процессе СПТ отжига выполняется соотношение 1:1 для изменений сигналов пиков Н2 и Н3. То есть как при СПТ, так и при чисто термическом отжиге все имеющиеся атомы C_i уходят на образование комплекса C_iO_i (см. рис. 3). При этом не наблюдается образования метастабильного состояния $C_iO_i^*$. Иными словами, инжекция электронов, по-видимому, ускоряет реакцию $C_iO_i^* \rightarrow C_iO_i$.

Результаты изменения концентрации C_i при изохронном отжиге приведены на рис. 4. Совпадение кривых изменения концентрации C_i от температуры термического отжига друг с другом (рис. 4, кривые 1, 2 и 3), полученных при чисто термическом воздействии, свидетельствует об одинаковом исходном содержании кислорода во всех типах диодов. Этот результат ожидаем, поскольку проникновение кислорода происходило в результате его диффузии из окисла при изготовлении

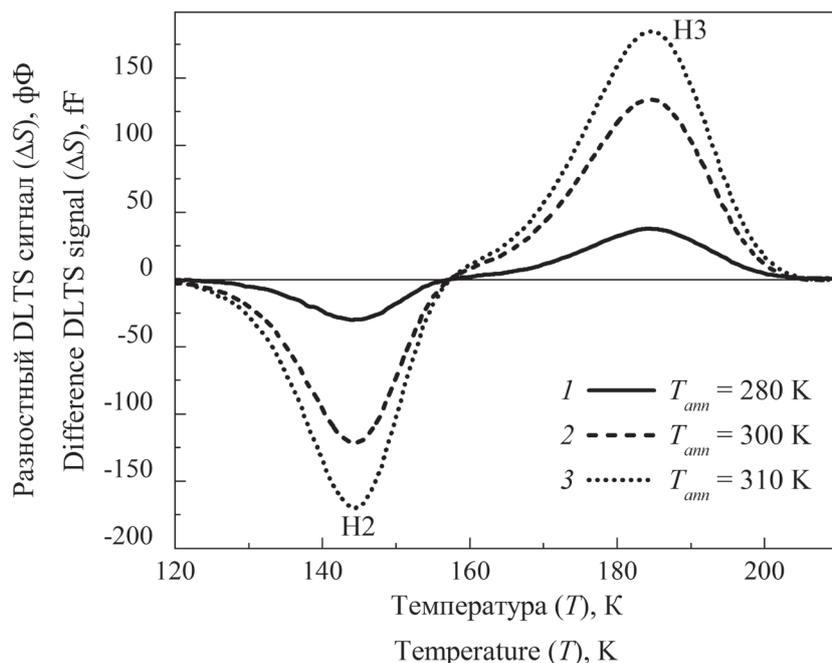


Рис. 3. Разность спектров DLTS ($\Delta S(T) = S_{T_{ann}}(T) - S_{270K}(T)$), записанных до и в ходе изохронного СПТ отжига C_i ; уровень легирования базы $p = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (50 Ом·см); температура отжига: 280 К (кривая 1), 300 К (кривая 2) и 310 К (кривая 3); время отжига 15 мин

Fig. 3. Difference DLTS ($\Delta S(T) = S_{T_{ann}}(T) - S_{270K}(T)$) spectra registered before and in the course of isochronal FCE annealing of C_i ; the doping level of the diode base is $p = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (50 $\Omega \cdot \text{cm}$); annealing temperatures were 280 K (curve 1), 300 K (curve 2) and 310 K (curve 3); the annealing time was 15 min

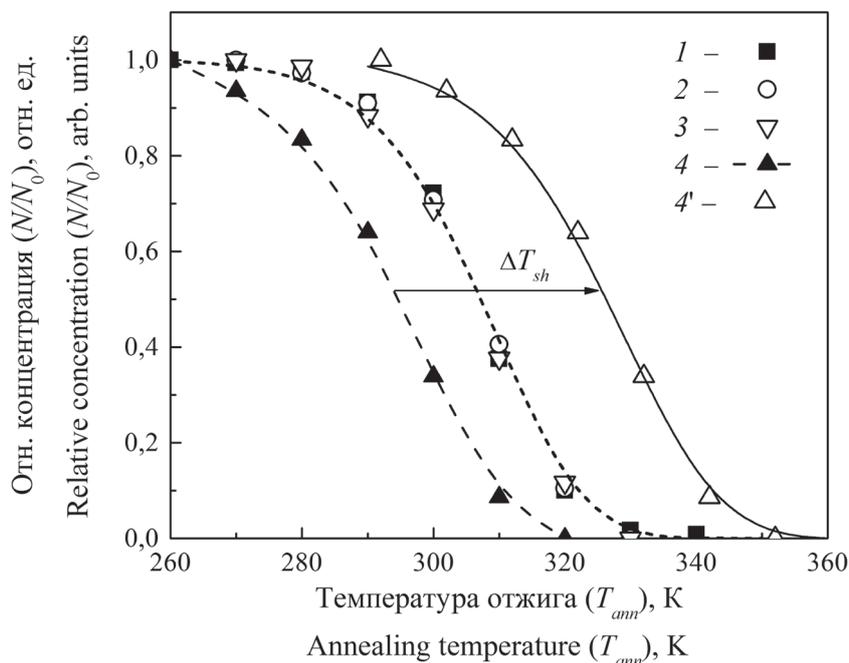


Рис. 4. Поведение DLTS-пика H2 (C) при термическом (кривые 1–3) и СПТ (кривые 4, 4') отжигах: кривая 4 построена с учетом того, что температура образца совпадает с температурой измерительной ячейки; кривая 4' – это перестроенная кривая 4 с учетом температурного сдвига, связанного с саморазогревом диодов при пропускании прямого тока; кривая 1 относится к диодам с удельным сопротивлением базы 10 Ом·см (тип 1); кривая 2 – к диодам с удельным сопротивлением базы 50 Ом·см (тип 2); кривая 3 соответствует диодам с удельным сопротивлением базы 250 Ом·см (тип 3)

Fig. 4. Thermal (curves 1–3) and FCE (curves 4 and 4') annealing behavior of H2 DLTS-peak (C): curve 4 has been plotted with the use of a measuring cell temperature; curve 4' is the same curve 4 re-plotted taking into account the temperature shift related to the diode self-heating during forward current injection; curve 1 is related to the 10 $\Omega \cdot \text{cm}$ diode base (set 1); and curve 2 and 3 are related to the 50 $\Omega \cdot \text{cm}$ (set 2) and 250 $\Omega \cdot \text{cm}$ (set 3) base, respectively

диодов, а все типы используемых диодов были изготовлены в ходе одного и того же технологического процесса.

При построении кривых изохронного СПТ отжига необходимо использовать коррекцию температуры отжига вследствие эффекта саморазогрева (см. рис. 4, кривые 4 и 4'). Как видно, такая коррекция приводит к качественному изменению результатов действия прямого тока на отжиг C_i . Если на основании данных, полученных без использования коррекции, мы можем говорить о незначительном увеличении скорости отжига в результате действия инжектируемых носителей, то, на самом деле, следует сделать вывод, что в прямо смещенном диоде скорость отжига C_i замедляется, что обусловлено изменением предэкспоненциального фактора в выражении для скорости отжига при неизменном значении энергии активации отжига ($E_a \cong 0,77$ эВ).

В целом влияние прямого тока на скорость отжига C_i следует признать незначительным. Так, по сравнению с отжигом V_iO_i , когда температура отжига понижалась более чем на 150 К, для C_i изменение температуры отжига составляло всего лишь ~ 15 К при тех же плотностях прямого тока.

Обсуждение. Как следует из полученных нами данных, наибольшей чувствительностью к инжекции неосновных носителей заряда обладают ловушки, идентифицированные ранее как Si_i , которым может быть приписан уровень $E_C - 0,39$ эВ [5]. Скорость их отжига при температуре 79 К составляет $\tau^{-1} = 0,18$ с⁻¹ при плотности прямого тока через диод $J_f = 0,016$ А/см². Эта скорость выглядит аномально высокой не только по сравнению с комплексом V_iO_i , но и с другими изолированными междоузельными атомами (V_i и Al_i). Так, согласно данным работы [7], скорость отжига V_i при тех же условиях должна быть на несколько порядков ниже ($< 10^{-5}$ с⁻¹). То есть атомы V_i в результате СПТ отжига Si_i должны были бы оставаться неподвижными. Тем не менее в спектрах MC-DLTS наблюдается ловушка E1 (см. рис.1, кривая 4), которая связана с V_iO_i . Этот факт ставит под сомнение предположение о том, что в процессе α -облучения все междоузельные атомы кремния остаются неподвижными. Поэтому в дальнейшем будем предполагать наличие как подвижных, так и связанных форм атомов Si_i . Последние мы будем обозначать Si_i^* . Это могут быть либо какие-то комплексы Si_i , либо междоузельные атомы кремния в конфигурации с высоким потенциальным барьером для миграции.

Обращает на себя внимание очень большое изменение энергии активации отжига Si_i^* . Так, если термический отжиг характеризуется энергией активации отжига 1,2–1,3 эВ [6], то энергия активации СПТ отжига практически близка к нулю. Весьма малая энергия активации СПТ отжига наблюдается также и для V_i [7]. Однако для V_i понижение барьера миграции не столь высоко, поскольку энергия активации термического отжига составляет всего лишь 0,6 эВ [7]. Для V_iO_i понижение энергии активации отжига также весьма велико $\Delta E_a = 0,9$ –1,0 эВ. Такое же большое понижение барьера для миграции в процессе СПТ отжига было обнаружено для междоузельного алюминия (Al_i) [8].

Междоузельные атомы углерода выглядят явным исключением среди других дефектов такого типа. По нашему мнению, качественное отличие C_i от других междоузельных дефектов проявляется и в его энергетической структуре. Рассмотрим эти отличия более подробно. Уровни энергии междоузельного углерода хорошо известны: $E(0/-) = E_C - 0,12$ эВ и $E(0/+) = E_V + 0,28$ эВ, так же, как и уровни V_i [15]. Отличие между C_i и V_i заключается в том, что первый дефект является positive-U, а второй – negative-U центром. Как показано нами экспериментально, комплекс V_iO_i также имеет инверсный порядок следования уровней заполнения. Этот вывод не противоречит результатам теоретических расчетов [16]. Так, во-первых, наличие акцепторного уровня у комплекса у V_iO_i следует из теоретических расчетов, проведенных в работе [16]. При этом, согласно [16], уровень $E(-/0)$ комплекса V_iO_i расположен в том же интервале энергий, в котором находится и донорный уровень $E(0/+)$ этого комплекса. И во-вторых, было также обнаружено наличие у комплекса двух конфигураций, одна из которых, являющаяся более стабильной при комнатной температуре, имеет инверсный порядок следования уровней заполнения.

Теоретические расчеты также предсказывают инверсный порядок следования уровней заполнения и у собственных междоузельных атомов кремния [17]. Менее определенными являются экспериментальные и теоретические данные об энергетической структуре Al_i . Известно, что

этот центр имеет уровень $E(+/\++) = E_v + 0,17$ эВ [8]. Положение второго уровня $E(0/+)$ неизвестно. Тем не менее существуют косвенные признаки возможного инверсного порядка следования уровней заполнения и у Al_i . Один из таких признаков – существование довольно высокого потенциального барьера захвата дырок Al_i^{++} . Согласно данным работы [8], этот барьер равен $\sim 0,08$ эВ. Наличие барьера для захвата носителей заряда характерно для других negative-U центров кремния. Так, для захвата электронов междоузельным бором также требуется преодоление барьера $\sim 0,08$ эВ [15]. Еще более высоким барьером характеризуются бистабильные термодоноры [18]. Кроме этого, следует упомянуть [19], где миграция Al_i рассматривалась теоретически. В этой работе была выдвинута гипотеза, что весьма большое понижение энергии барьера при рекомбинационно-стимулированной миграции связано с двухэлектронным захватом неравновесных носителей заряда, сопровождающимся значительной перестройкой энергетического спектра Al_i . То есть и для Al_i имеет место сильная решеточная релаксация, приводящая, возможно, к изменению порядка следования уровней заполнения.

Таким образом, можно сделать вывод, что C_i , в отличие от ряда других междоузельных дефектов в кремнии, обладает жесткой атомной структурой. Меньшая жесткость Si_i , B_i , Al_i и VO_i проявляется как в структуре их энергетических уровней, так и во влиянии возбуждения электронной подсистемы на дефектные реакции с их участием.

Практический интерес представляют данные о влиянии пост-радиационной обработки на радиационное повреждение *p*-Si в результате α -облучения. По-видимому, использование СПТ отжига может повысить радиационную стойкость легированного бором кремния при низкоинтенсивном облучении тяжелыми заряженными частицами.

Заключение. Использование α -облучения позволило получить новые данные о реакциях дефектов междоузельного типа в кристаллах кремния, легированных бором. Установлено, что инжекция электронов в область *p*-типа не приводит к ускорению отжига междоузельного углерода. Обнаружена корреляция между энергетической структурой междоузельных дефектов и влиянием инжекции электронов на реакции с их участием.

Список использованных источников

1. Емцев, В. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках / В. В. Емцев, Т. В. Машовец; под ред. С. М. Рывкина. – М.: Радио и связь. – 1981. – 248 с.
2. Watkins, G. D. Intrinsic defects in silicon / G. D. Watkins // *Materials science in semiconductor processing*. – 2000. – Vol. 3, № 4. – P. 227–235.
3. Interstitial defect reactions in silicon / L. C. Kimerling [et al.] // *Mater. Sci. Forum*. – 1989. – Vol. 38/41. – P. 141–150.
4. Asghar, M. Study of alpha-radiation-induced deep levels in p-type silicon / M. Asghar, M. Z. Iqbal, N. Zafar // *J. Appl. Phys.* – 1993. – Vol. 73, № 9. – P. 4240–4247.
5. Mukashev, B. N. Self-interstitials in silicon irradiated with light ions / B. N. Mukashev, K. A. Abdullin, Y. V. Gorelinskii // *Phys. Status Solidi A*. – 1998. – Vol. 168, № 1. – P. 73–85.
6. Kinetics of self-interstitials reactions in p-type silicon irradiated with alpha particles / L. F. Makarenko [et al.] // *Phys. B: Condens. Matter*. – 2012. – Vol. 407, № 15. – P. 3016–3019.
7. Troxell, J. R. Interstitial boron in silicon: A negative-U system. / J. R. Troxell, G. D. Watkins // *Phys. Rev. B*. – 1980. – Vol. 22, № 2. – P. 921–931.
8. Recombination-enhanced migration of interstitial aluminum in silicon / J. R. Troxell [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 1979. – Vol. 19, № 10. – P. 5336–5348.
9. Forward current enhanced elimination of the radiation induced boron-oxygen complex in silicon *n*+*p* diodes / L. F. Makarenko [et al.] // *Phys. Status Solidi A*. – 2014. – Vol. 211, № 11. – P. 2558–2562.
10. Reactions of interstitial carbon with impurities in silicon particle detectors / L. F. Makarenko [et al.] // *J. Appl. Phys.* – 2007. – Vol. 101, № 11. – P. 113537 (6 pp.).
11. Kimerling, L. C. Defect states in proton-bombarded silicon at $T < 300$ K / L. C. Kimerling, W. M. Gibson, P. Blood // *Defects and radiation effects in semiconductors, 1978* / ed. J. H. Albany. – London; Bristol: Institute of Physics, 1979. – Ser. № 46. – P. 273–280.
12. Formation and annealing of boron-oxygen defects in irradiated silicon and silicon-germanium *n*+*p* structures / L. F. Makarenko [et al.] // *AIP Conf. Proc.* – 2014. – Vol. 1583, № 1. – P. 123–126.
13. Feklisova, O. V. Annealing kinetics of boron-containing centers in electron-irradiated silicon / O. V. Feklisova, N. A. Yarykin, J. Weber // *Semiconductors*. – 2013. – Vol. 47, № 2. – P. 228–231.
14. Formation and annealing of metastable (interstitial oxygen)-(interstitial carbon) complexes in *n*- and *p*-type silicon / L. F. Makarenko [et al.] // *Semiconductors*. – 2014. – Vol. 48, № 11. – P. 1456–1462.

15. Harris, R. D. Negative-U defect: Interstitial boron in silicon / R. D. Harris, J. L. Newton, G. D. Watkins // *Phys. Rev. B*. – 1987. – Vol. 36, № 2. – P. 1094–1104.
16. First-principles investigation of a bistable boron-oxygen interstitial pair in Si / A. Carvalho [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2006. – Vol. 73, № 24. – P. 245210 (7 pp.).
17. The self-interstitial in silicon and germanium / R. Jones [et al.] // *Mat. Sci. Eng., B*. – 2009. – Vol. 159/160. – P. 112–116.
18. Makarenko, L. F. On the cross section of electron capture into the deep state of thermal U⁻ donors in Si / L. F. Makarenko // *Phys. Status Solidi A*. – 1988. – Vol. 106, № 2. – P. K153–K155.
19. Baraff, G. A. Theory of enhanced migration of interstitial aluminum in silicon / G. A. Baraff, M. Schluter, G. Allan // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 50, № 10. – P. 739–742.

References

1. Emtsev V. V., Mashovets T. V., Ryvkin S. M. (ed.). *Impurities and point defects in semiconductors*. Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1981. 248 p. (in Russian).
2. Watkins G. D. Intrinsic defects in silicon. *Materials Science In Semiconductor Processing*, 2000, vol. 3, no. 4, pp. 227–235. Doi: 10.1016/S1369-8001(00)00037-8.
3. Kimerling L. C., Asom M. T., Benton J. L., Drevinsky P. J., Caefer, C. E. Interstitial defect reactions in silicon. *Materials Science Forum*, 1989, vol. 38–41, pp. 141–150. Doi: 10.4028/www.scientific.net/msf.38-41.141
4. Asghar M., Iqbal M. Z., Zafar N. Study of alpha-radiation-induced deep levels in p-type silicon. *Journal of Applied Physics*, 1993, vol. 73, no. 9, pp. 4240–4247. Doi: 10.1063/1.352803
5. Mukashev B. N., Abdullin K. A., Gorelkinskii Y. V. Self-interstitials in silicon irradiated with light ions. *Physica Status Solidi A*, 1998, vol. 6, no. 1, pp. 73–85. Doi: 10.1002/(sici)1521-396x(199807)168:1<73::aid-pssa73>3.0.co;2-5
6. Makarenko L. F., Moll M., Evans-Freeman J. H., Lastovskii S. B., Murin L. I., Korshunov F. P. Kinetics of self-interstitials reactions in p-type silicon irradiated with alpha particles. *Physica B: Condensed Matter*, 2012, vol. 407, no. 15, pp. 3016–3019. Doi: 10.1016/j.physb.2011.08.101
7. Troxell J. R., Watkins, G. D. Interstitial boron in silicon: A negative-U system. *Physical Review B*, 1980, vol. 22, no. 2, pp. 921–931. Doi: 10.1103/PhysRevB.22.921
8. Troxell J. R., Chatterjee A. P., Watkins G. D., Kimerling L. C. Recombination-enhanced migration of interstitial aluminum in silicon. *Physical Review B*, 1979, vol. 19 no. 10, pp. 5336–5348. Doi: 10.1103/PhysRevB.19.5336
9. Makarenko L. F., Lastovskii S. B., Yakushevich H. S., Moll M., Pintilie I. Forward current enhanced elimination of the radiation induced boron-oxygen complex in silicon n⁺-p diodes. *Physica Status Solidi A*, 2014, vol. 211, no. 11, pp. 2558–2562. Doi: 10.1002/pssa.201431315
10. Makarenko L. F., Moll M., Korshunov F. P., Lastovski S. B. Reactions of interstitial carbon with impurities in silicon particle detectors. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 11, pp. 113537 (1–6). Doi: 10.1063/1.2745328
11. Kimerling L. C., Gibson W. M., Blood P. Defect states in proton-bombarded silicon at $T < 300$ K. Albany J. H. (ed.). *Defects and radiation effects in semiconductors*. London; Bristol, Institute of Physics, 1979, Ser. № 46, pp. 273–280.
12. Makarenko L. F., Lastovskii S. B., Korshunov F. P., Moll M., Pintilie I., Abrosimov N. V. Formation and annealing of boron-oxygen defects in irradiated silicon and silicon-germanium n⁺-p structures. *AIP Conference Proceedings*, 2014, vol. 1583, no. 1, pp. 123–126. Doi: 10.1063/1.4865618
13. Feklisova O. V., Yarykin N. A., Weber, J. Annealing kinetics of boron-containing centers in electron-irradiated silicon. *Semiconductors*, 2013, vol. 47, no. 2, pp. 228–231. Doi: 10.1134/S1063782613020085
14. Makarenko L. F., Korshunov F. P., Lastovskii S. B., Murin L. I., Moll M., Pintilie I. Formation and annealing of metastable (interstitial oxygen)-(interstitial carbon) complexes in n- and p-type silicon. *Semiconductors*, 2014, vol. 48, no. 11, pp. 1456–1462. Doi: 10.1134/S1063782614110141
15. Harris R. D., Newton J. L., Watkins G. D. Negative-U defect: Interstitial boron in silicon. *Physical Review B*, 1987, vol. 36, no. 2, pp. 1094–1104. Doi: 10.1103/PhysRevB.36.1094
16. Carvalho A., Jones R., Sanati M., Estreicher S. K., Coutinho J., Briddon, P. R. First-principles investigation of a bistable boron-oxygen interstitial pair in Si. *Physical Review B*, 2006, vol. 73, no. 24, pp. 245210 (1–7). Doi: 10.1103/PhysRevB.73.245210
17. Jones R., Carvalho A., Goss J. P., Briddon P. R. The self-interstitial in silicon and germanium. *Materials Science and Engineering: B*, 2009, vol. 159–160, pp. 112–116. Doi: 10.1016/j.mseb.2008.09.013
18. Makarenko L. F. On the cross section of electron capture into the deep state of thermal U⁻ donors in Si. *Physica Status Solidi A*, 1988, vol. 106, no. 2, pp. K153–K155. Doi: 10.1002/pssa.2211060248
19. Baraff G. A., Schluter M., Allan G. Theory of enhanced migration of interstitial aluminum in silicon. *Physical Review Letters*, 1983, vol. 50, no. 10, pp. 739–742. Doi: 10.1103/PhysRevLett.50.739

Информация об авторах

Макаренко Леонид Федорович – кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: makarenko@bsu.by

Information about the authors

Leonid F. Makarenko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: makarenko@bsu.by

Ластовскі Станіслаў Броніслававіч – кандыдат фізіка-матэматычных навук, заведуючы лабараторыяй, ГНПО «НПЦ НАН Беларусі па матэрыялаведзенню» (ул. П. Бровкі, 19, 220072, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: lastov@ifftp.bas-net.by

Якушевіч Анна Сяргееўна – маладшы навучны супрацоўнік, ГНПО «НПЦ НАН Беларусі па матэрыялаведзенню» (ул. П. Бровкі, 19, 220072, г. Мінск, Рэспубліка Беларусь). E-mail: yakushevich@ifftp.bas-net.by

Молл Майкл – доктар філосафіі (фізіка), рукіравальнік праекта, EP Department (CERN EP-DT, CH-1211 Geneva 23, Switzerland). E-mail: michael.moll@cern.ch

Пінтіліе Іоана – доктар філосафіі (фізіка), старшы навучны супрацоўнік, Нацыянальны інстытут фізікі матэрыялаў (Atomistilor Str., No. 405A PO Box MG 7, 077125, Magurele, Romania). E-mail: ioana_bcf@yahoo.com

Stanislav B. Lastovskii – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory, SSPA “Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus” (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lastov@ifftp.bas-net.by

Hanna S. Yakushevich – Junior Researcher, SSPA “Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus” (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yakushevich@ifftp.bas-net.by

Michael Moll – Ph. D. (Physics), Project Leader, EP Department (CERN EP-DT, CH-1211 Geneva 23, Switzerland). E-mail: michael.moll@cern.ch

Ioana Pintilie – Ph. D. (Physics), Senior Researcher, National Institute of Materials Physics (Atomistilor Str., No. 405A PO Box MG 7, 077125, Magurele, Romania) E-mail: ioana_bcf@yahoo.com

Я. В. Лебядок, Д. М. Кабанаў

*ДНВА «Оптыка, оптаэлектроніка і лазерная тэхніка», Мінск, Беларусь***ШЫРЫНЯ ЗАБОРОНЕНОЙ ЗОНЫ І АЖЭ-РЭКАМБІНАЦЫЯ Ў СВАТЛОДЫЁДАХ
НА АСНОВЕ GaInAsSb ПРЫ ТЭМПЕРАТУРАХ 10–300 К**

Анацыя. На падставе эксперыментальных спектраў выпрамянення для актыўнага пласта святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ былі атрыманы параметры Варшні тэмпературнай залежнасці шырыні забароненай зоны ў інтэрвале тэмператур 10–300 К, а таксама тэмпературная залежнасць велічыні энергіі спіна-арбітальнага расшчাপлення. Для тэмператур 10–80 К працэсам, што абмяжоўвае рост інтэнсіўнасці выпрамянення, з'яўляецца працэс Ажэ-рэкамбінацыі, для якога энергія рэкамбінацыі электронна-дзіркавай пары перадаецца дзірцы з пераходам апошняй у спіна-арбітальную зону. З павышэннем тэмпературы больш за 100 К адбываецца рост каэфіцыента Ажэ-рэкамбінацыі для працэсу з удзелам двух электронаў і цяжкай дзіркі, які суправаджаецца ўзбуджэннем электрона з яго пераходам у высокаэнергетычны стан у зоне праводнасці. Сума гэтых працэсаў абумоўлівае тушэнне выпрамянення з павелічэннем тэмпературы больш за 150 К.

Ключавыя словы: GaInAsSb, шырыня забароненай зоны, спіна-арбітальнае расшчাপленне, Ажэ-рэкамбінацыя

Для цытавання. Лебядок, Я. В. Шырыня забароненай зоны і Ажэ-рэкамбінацыя ў святлодыёдах на аснове GaInAsSb пры тэмпературах 10–300 К / Я. В. Лебядок, Д. М. Кабанаў // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 118–126.

Y. V. Lebiadok, D. M. Kabanau

*SSPA "Optics, Optoelectronics and Laser Technology", Minsk, Belarus***AMPLIFIED LUMINESCENCE AND AUGER RECOMBINATION
IN GaInAsSb-BASED LEDs IN THE TEMPERATURE RANGE OF 10–300 K**

The parameters for a temperature dependence of the band gap in the temperature range of 10–300 K and for a temperature dependence of spin-orbit splitting energy were obtained using the experimental emission spectra for LEDs based on $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ heterostructures. For temperatures of 10–80 K, the rise of the emission intensity is limited by the Auger recombination process, for which the recombination energy of an electron-hole pair is transferred to a hole with its transition to the spin-orbital band. With an increase in a temperature of more than 100 K, there is a rise of the coefficient of the Auger recombination process, for which the energy released by the recombination of an electron-hole pair excites another electron in the conduction band. The sum of these processes results in quenching the LED emission with increasing temperature over 150 K.

Keywords: GaInAsSb, band gap energy, spin-orbit splitting, Auger recombination

For citation. Lebiadok Y. V., Kabanau D. M. Amplified luminescence and auger recombination in GaInAsSb-based leds in the temperature range of 10–300 K. *Vesti Natsyianal'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 118–126 (in Russian).

Уводзіны. Оптаэлектронныя прылады на аснове святлодыёдаў з актыўнымі пластамі GaInAsSb шырока выкарыстоўваюцца для экалагічнага маніторынгу, кантролю тэхналагічных працэсаў, а таксама ў медыцыне і іншых галінах тэхнікі і навукі [1–3]. Прымяненне святлодыёдаў сярэдняга інфрачырвонага дыяпазону ў названых сферах патрабуе дэталёвых ведаў спектральных і энергетычных характарыстык паўправадніковых структур як паблізу пакаёвых тэмператур [3], так і пры крыягенных тэмпературах [4, 5]. Даных аб некаторых фізічных працэсах, што адбываюцца ў актыўных пластах святлодыёдаў з актыўнымі пластамі на аснове цвёрдых раствораў GaInAsSb, недастаткова. Так, вядома, што ў вузказонных паўправадніках асноўным працэсам, адказным за тушэнне люмінесценцыі, з'яўляецца Ажэ-рэкамбінацыя [2]. Аднак дэталёвае эксперыментальнае даследаванне дадзенага працэсу для святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ у шырокім інтэрвале тэмператур не праводзілася. Гэтак жа недастаткова

данных [6] аб тэмпературнай залежнасці значэнняў шырыні забароненай зоны і велічыні спін-арбітальнага расшчаплення для цвёрдых раствораў $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$.

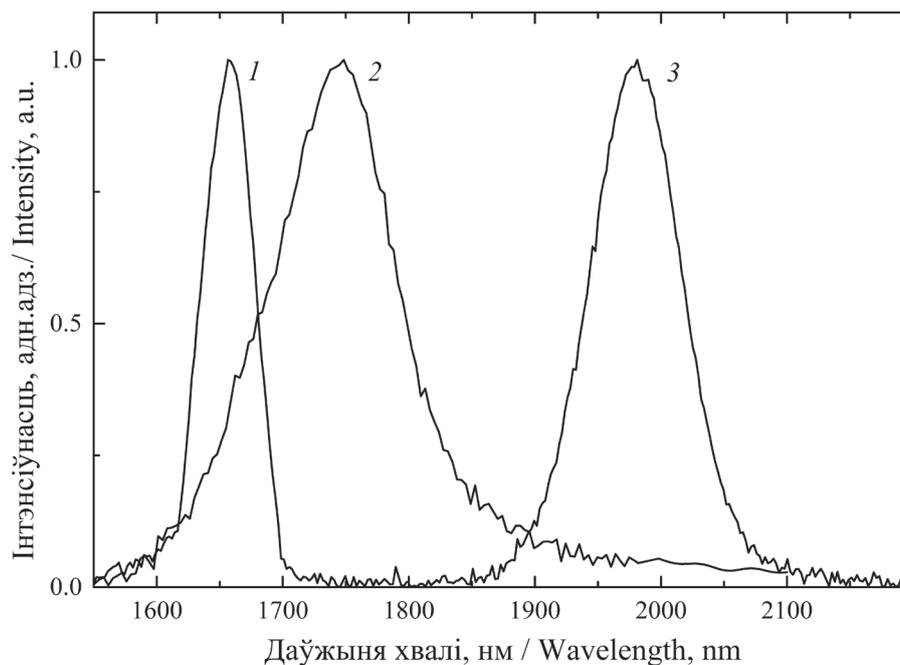
Артыкул прысвечаны ацэнцы тэмпературнай залежнасці шырыні забароненай зоны і велічыні спін-арбітальнага расшчаплення ў цвёрдых растворах $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$, а таксама даследаванню працаў Ажэ-рэкамбінацыі ў святлодыёдах на аснове гетэраструктур $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}/AlGaAsSb$.

Эксперымент. Аналізаваліся спектры выпрамянення святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}/AlGaAsSb/GaSb$ з трыма тыпамі актыўнага пласта: $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ (даўжыня хвалі максімуму выпрамянення пры пакаёвай тэмпературы каля 1.75 мкм), $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ (1.90 мкм) і $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ (2.20 мкм). Таўшчыня актыўнага пласта 3 мкм. Гетэраструктуры святлодыёдаў вырошчваліся ў Фізіка-тэхнічным інстытуце імя А. Ф. Ёфэ РАН метадам вадкафазнай эпітаксіі. Форма кантактнай пляцоўкі чыпаў святлодыёдаў уяўляе сабой кальцо з унутраным дыяметрам 200 мкм і таўшчынёй 30 мкм. Святлодыёдныя чыпы манціраваліся падкладачным бокам на корпус ТО-18. Пры сілкаванні дыёдаў выкарыстоўваўся квазіімпульсны (квазі-бесперапынны) рэжым работы з сілаватасцю $\frac{1}{2}$. Працягласць імпульсу току складала 10 мкс, велічыня току – 208 мА.

У ходзе эксперымента святлодыёды змяшчаліся ў вакуумны крыястат з выхадным акном з CaF_2 , спектр прапускання якога з’яўляецца раўнамерным у доследным спектральным дыяпазоне. Кантакты ад дыёда герметычным чынам выводзіліся за межы крыястата. Халадзільная сістэма дазваляла змяняць і кантраляваць тэмпературу ад 10 да 300 К. Для вымярэння спектраў выкарыстоўваўся спектраметр MS2004i (вытворчасці «SOL Instruments») са спектральным разрозненнем не горш за 3 нм. Рэгістрацыя выпрамянення ажыццяўлялася фотапрымальнікамі на аснове HgCdTe з аўтаматычнай карэкцыяй адчувальнасці ў дыяпазоне ад 1 да 5 мкм. Спектры выпрамянення святлодыёдаў рэгістраваліся ў адносных адзінках (мал. 1).

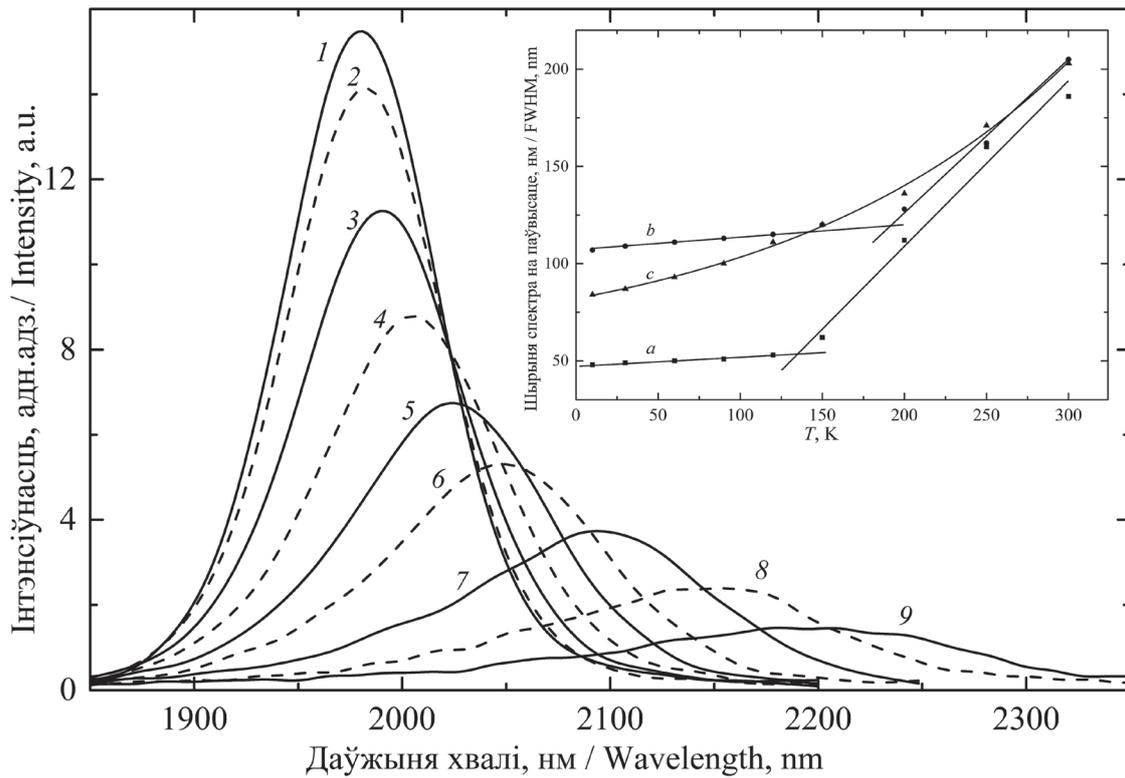
З паніжэннем тэмпературы да 200–150 К назіраецца змяншэнне шырыні спектра для ўсіх святлодыёдаў (мал. 2).

Было выяўлена, што з павелічэннем тэмпературы T з 10 да 300 К інтэгральная інтэнсіўнасць выпрамянення для святлодыёдаў з актыўным пластам $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ падае больш чым у 2.9 раза, для $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ – у 4.3 раза, пры гэтым тэмпературныя зрухі даўжыні хвалі



Мал. 1. Спектры выпрамянення святлодыёдаў з актыўным пластам $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ (1), $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ (2) і $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ (3) пры тэмпературы 10 К

Fig. 1. Emission spectra of LEDs with active layers of $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ (1), $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ (2) and $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ (3) at a temperature of 10 K



Мал. 2. Залежнасць выпрамянення святлодыёда з актыўным пластам $\text{Ga}_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ ад тэмпературы: 1 – 10, 2 – 30, 3 – 60, 4 – 90, 5 – 120, 6 – 150, 7 – 200, 8 – 250, 9 – 300 К.

На ўстаўцы: залежнасць шырыні спектраў выпрамянення ад тэмпературы для святлодыёдаў з актыўным пластам $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$ (a); $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ (b); $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ (c)

Fig. 2. Temperature dependence of the emission spectra of LEDs with an active layer of $\text{Ga}_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$: 1 – 10, 2 – 30, 3 – 60, 4 – 90, 5 – 120, 6 – 150, 7 – 200, 8 – 250, 9 – 300 K.

The insert shows the temperature dependence of FWHM of the emission spectra for LEDs with active layers of $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$ (a); $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ (b); and $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ (c)

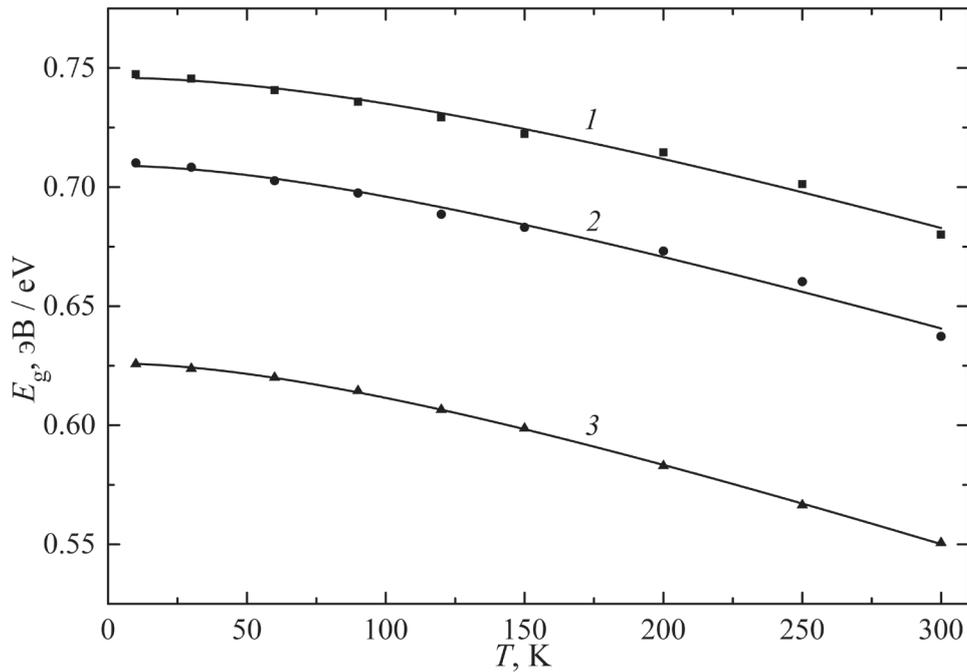
максімуму спектра выпрамянення для святлодыёдаў з актыўнымі пластамі $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$, $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ і $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ роўныя 0.39, 0.57, 0.75 нм/К адпаведна.

Тэмпературная залежнасць шырыні забароненай зоны. Шырыня забароненай зоны E_g ад тэмпературы для актыўных пластоў GaInAsSb святлодыёдаў ацэньвалася з дапамогай метаду пабудовы залежнасці палажэння (па энергетычнай шкале) максімуму спектра выпрамянення ад тэмпературы з папраўкай на велічыню $kT/2$ [7], дзе k – канстанта Больцмана. Атрыманая такім чынам эксперыментальная залежнасць шырыні забароненай зоны актыўных пластоў святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ у дыяпазоне тэмператур ад 10 да 300 К добра апраксімуецца крывой (мал. 3), што адпавядае формуле Варшні:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T}, \quad (1)$$

дзе $E_g(0)$ – шырыня забароненай зоны пры $T = 0$ К, α і β – параметры Варшні.

Такім чынам, тэмпературная залежнасць шырыні забароненай зоны для актыўных пластоў святлодыёдаў на аснове цвёрдых раствораў $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ адпавядае формуле Варшні, пры гэтым супастаўленне эксперыментальных даных і апраксімацыйнай крывой дае магчымасць вызначыць адпаведныя параметры Варшні (табл. 1). Адноснае адхіленне апраксімацыйнай крывой (1) (з параметрамі табл. 1) ад эксперыментальнай тэмпературнай залежнасці шырыні забароненай зоны не перавышае 0.15 %.



Мал. 3. Залежнасць шырыні забароненай зоны E_g ад тэмпературы для $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ (1), $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ (2) і $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ (3); кропкамі пазначаны адпаведныя эксперыментальныя значэнні

Fig. 3. The bandgap E_g dependence on temperature for LEDs with active layer $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ (1), $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ (2) and $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ (3); the experimental values are presented by points in the figure

Табліца 1. Параметры Варшні для цвёрдых раствораў $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$
 Table 1. Parameters of Varshni for solid solutions of $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$

Параметр	Актыўны пласт		
	$Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$	$Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$	$Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$
$E_g(0)$, мэВ	745.9	709.0	626.0
α , эВ/К	$3.9377 \cdot 10^{-4}$	$3.6540 \cdot 10^{-4}$	$4.0353 \cdot 10^{-4}$
β , К	261.53	181.12	178.50

Велічыня шырыні забароненай зоны пры тэмпературы 300 К для святлодыёда з актыўным пластам $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.03}Sb_{0.97}$ роўная 0.682 эВ. У [8] для блізкага па складзе раствору $Ga_{0.96}In_{0.04}As_{0.04}Sb_{0.96}$ пры $T = 300$ К велічыня $E_g = 0.685$ эВ. Для святлодыёда з актыўным пластам $Ga_{0.92}In_{0.08}As_{0.07}Sb_{0.93}$ атрыманая велічыня $E_g = 0.641$ эВ, для такога ж раствору ў [8] прыводзіцца значэнне $E_g = 0.632$ эВ. Шырыня забароненай зоны для $Ga_{0.80}In_{0.20}As_{0.17}Sb_{0.83}$ складае 0.550 эВ, для блізкага раствору $Ga_{0.8}In_{0.2}As_{0.18}Sb_{0.82}$ па даных [8] $E_g = 0.543$ эВ. Такім чынам, атрыманыя значэнні шырыні забароненай зоны пры тэмпературы 300 К даволі блізкія да вядомых з літаратуры даных.

Спін-арбітальнае расщяпленне і Ажэ-рэкамбінацыя. Даследаванне ўплыву тэмпературы на інтэгральную інтэнсіўнасць выпраямлення святлодыёдаў дазваляе вызначыць параметры тэмпературнага тушэння выпраямлення і выявіць базавыя працэсы, што адказваюць за невыпраменную рэкамбінацыю ў актыўным пласце святлодыёда. Метад разліку энергіі актывацыі працэсаў тэмпературнага тушэння выпраямлення грунтуецца на пабудове эксперыментальнай залежнасці інтэгральнай інтэнсіўнасці выпраямлення святлодыёдаў ад тэмпературы [9, 10]. Вядома [2, 11–13], што ў вузказонных паўправадніках асноўным працэсам, адказным за змяншэнне інтэнсіўнасці выпраямлення, з’яўляецца Ажэ-рэкамбінацыя. У сваю чаргу для гэтых паўправаднікоў асноўнымі працэсамі Ажэ-рэкамбінацыі з’яўляюцца працэсы CHSH (conduction-heavy hole spin-orbit-heavy hole, энергія рэкамбінацыі электронна-дзіркавай пары перадаецца дзірцы з пераходам апошняй у спін-арбітальную зону) і CHCC (conduction-heavy hole conduction-conduction, працэс з удзелам двух электронаў і цяжкай дзіркі, які суправаджаецца ўзбуджаннем электрона

з пераходам яго ў высокаэнергетычны стан у зоне праводнасці). З павелічэннем току інжэкцыі святлодыёдаў адбываецца рост канцэнтрацыі носьбітаў у актыўным пласце гетэраструктуры. Пры гэтым залежнасць хуткасці рэкамбінацыі Шоклі – Рыда – Хола ад канцэнтрацыі носьбітаў з’яўляецца лінейнай, а хуткасць выпраменнай і Ажэ-рэкамбінацыі расце як квадрат і куб канцэнтрацыі адпаведна. У сувязі з гэтым пры току інжэкцыі больш за 100 мА на рэкамбінацыю Шоклі – Рыда – Хола ў святлодыёдах на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ можна не звяртаць увагі [2]. Таму тэмпературнае тушэнне люмінесценцыі для гэтых святлодыёдаў можна апісаць формулай Арэніуса – Мота для двух працэсаў [9, 10]:

$$I(T) = \frac{I(0)}{1 + Z_1 \cdot \exp\left(\frac{-E_{\text{CHSH}}}{kT}\right) + Z_2 \cdot \exp\left(\frac{-E_{\text{CHCC}}}{kT}\right)}, \quad (2)$$

дзе $I(T)$ – інтэгральная інтэнсіўнасць выпрамянення для тэмпературы T ; $I(0)$ – інтэгральная інтэнсіўнасць выпрамянення для тэмпературы 0 К; Z_1 і Z_2 – канстанты тушэння для адпаведных каналаў; E_{CHSH} і E_{CHCC} – энергіі актывацыі CHSH- і CHCC-працэсаў Ажэ-рэкамбінацыі, якія вызначаюцца наступнымі формуламі [12, 13]:

$$\begin{aligned} E_{\text{CHSH}}(T) &= (2m_v + m_c)(E_g(T) - \Delta_{\text{SO}}(T)) / (2m_v + m_c + m_{\text{SO}}), \\ E_{\text{CHCC}}(T) &= m_c E_g(T) / (m_c + m_v), \end{aligned} \quad (3)$$

дзе $\Delta_{\text{SO}}(T)$ – энергія спін-арбітальнага расшчаплення, m_{SO} , m_c і m_v – масы носьбітаў у спін-арбітальнай зоне, зоне праводнасці і валентнай зоне адпаведна.

Тэмпературная залежнасць энергіі спін-арбітальнага расшчаплення для паўправаднікоў, падобных да GaInAsSb, апісваецца формулай [14]:

$$\Delta_{\text{SO}}(T) = \Delta(0) + \chi T, \quad (4)$$

дзе $\Delta(0)$ – энергія спін-арбітальнага расшчаплення для тэмпературы 0 К, χ – параметр лінейнай тэмпературнай залежнасці.

Супастаўленне эксперыментальнай залежнасці інтэгральнай інтэнсіўнасці выпрамянення святлодыёда ад тэмпературы з крывымі, што разлічваліся на падставе суадносін (2)–(4), дазваляе з эксперыментальных даных атрымаць залежнасць $\Delta_{\text{SO}}(T)$ і велічыню m_{SO} . Лічачы параметры $\Delta(0)$, χ і m_{SO} падчас супастаўлення падгонкавымі, іх велічыні вызначаюць, калі дасягаецца адпаведнасць разлічанай і эксперыментальнай крывых залежнасці інтэгральнай інтэнсіўнасці выпрамянення ад тэмпературы. Пры разліках выкарыстоўваліся параметры m_c і m_v з [6] (пры гэтым тэмпературная залежнасць эфектыўных мас лічыцца дастаткова малой), залежнасць шырыні забароненай зоны бралася з папярэдняга раздзела (формула (1) з параметрамі табл. 1). Атрыманая на падставе эксперыментальных даных значэнні параметраў $\Delta(0)$, χ і m_{SO} прыводзяцца ў табл. 2 (m_0 – маса свабоднага электрона).

Табліца 2. Параметры тэмпературнай залежнасці спін-арбітальнага расшчаплення

Table 2. Parameters of the temperature dependence of the spin-orbit splitting

Параметр	Цвёрды раствор		
	$\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$	$\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$	$\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$
$\Delta_{\text{SO}}(0)$, мэВ	720	678	619
χ , эВ/К	$0.22 \cdot 10^{-4}$	$0.44 \cdot 10^{-4}$	$0.76 \cdot 10^{-4}$
M_{SO}/m_0	0.3	0.2	0.18

Залежнасць $E_{\text{CHSH}}(T)$ з формулы (3) справядлівая пры $E_g(T) > \Delta_{\text{SO}}(T)$ [12, 14]. Такім чынам, з эксперыментальных даных атрымаць $\Delta_{\text{SO}}(T)$ можна да тэмператур, пры якіх $E_g(T) = \Delta_{\text{SO}}(T)$. Аднак атрыманая параметры можна скарыстаць для экстрапаляцыі на аснове формулы (4)

залежнасці $\Delta_{SO}(T)$ да больш высокіх тэмператур. Экстрапаляцыя $\Delta_{SO}(T)$ для тэмпературы 300 К з параметрамі табл. 2 для святлодыёда з актыўным пластам $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$ дае значэнне $\Delta_{SO} = 0.727$ эВ. Для блізкага па складзе раствору $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.04}\text{Sb}_{0.96}$ у розных артыкулах прыводзяцца наступныя даныя: 0.753 [6] і 0.768 эВ [8], што дастаткова блізка па складзе да атрыманых.

Для выяўлення працэсу Ажэ-рэкамбінацыі, што прыводзіць да тушэння люмінесцэнцыі, можна скарыстаць атрыманыя тэмпературныя залежнасці $E_g(T)$ і $\Delta_{SO}(T)$ (з экстрапаляцыяй на большы дыяпазон тэмператур) і наступныя суадносіны [15–17]:

$$C_{\text{CHCC}}(T) = \frac{\pi^{1/2} m_c(m_c + m_v)^2}{2\hbar (2m_v + m_c)} |M_{\text{ee}}^2| \frac{E_{\text{CHCC}}(T)^2}{(kT)^{3/2}} \exp\left(\frac{-E_{\text{CHCC}}(T)}{kT}\right); \quad (5)$$

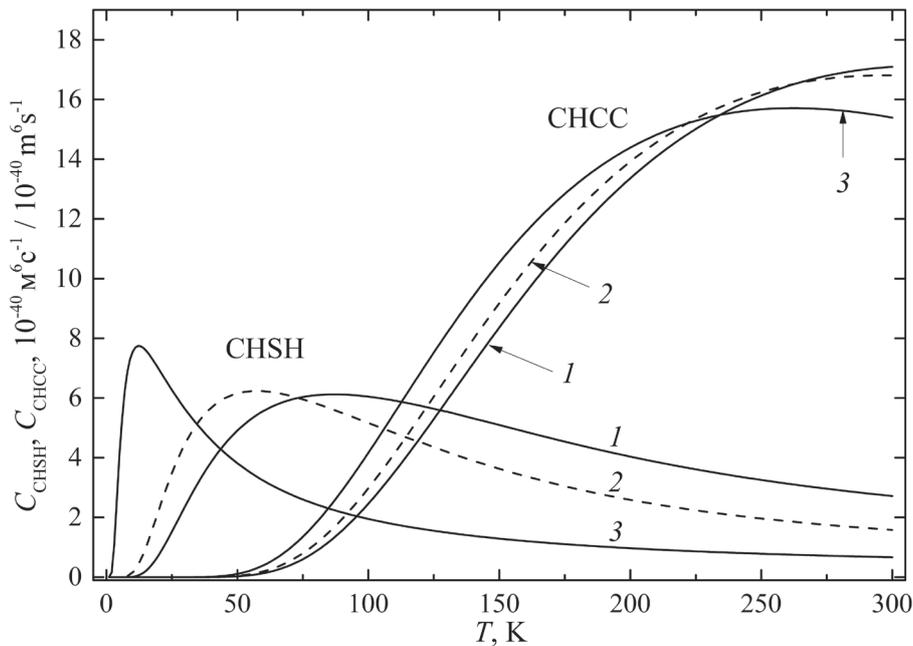
$$\begin{cases} C_{\text{CHSH}} = ABx^2 e^x \frac{2}{\pi^{1/2}} \left(\Gamma\left(\frac{3}{2}, \mu x\right) - \frac{2\Gamma\left(\frac{5}{2}, \mu x\right)}{\mu x} + \frac{\Gamma\left(\frac{7}{2}, \mu x\right)}{\mu^2 x^2} \right), & E_g \geq \Delta_{SO}, \\ C_{\text{CHSH}} = ABx^2 e^x \left(1 - \frac{3}{\mu x} + \frac{15}{4\mu^2 x^2} \right), & E_g \leq \Delta_{SO}, \end{cases} \quad (6)$$

$$A = \frac{G(\epsilon)\pi^3 \hbar^3 e^4}{2m_0^2} \left(\frac{m_v}{m_h}\right)^3 \left(\frac{m_{SO}}{2m_v + m_c}\right)^{3/2}, \quad B = \frac{\left(|M_{\text{ee}}^2| \frac{2}{m_0}\right)^2 (1 + m_{SO}/m_0)}{9E_g^2 \Delta^2 (E_g + \Delta_{SO})},$$

$$x = \frac{E_g - \Delta_{SO}}{kT}, \quad \mu = \frac{2m_v + m_c}{2m_v + m_c - m_{SO}},$$

дзе $\Gamma(a, x_0) = \int_{x_0}^{\infty} t^{a-1} \text{Exp}(-t) dt$, $G(\epsilon)$ – функцыя экранавання [15], $|M_{\text{ee}}^2|$ – квадрат матрычнага элемента невыпрамененных пераходаў. Параметры для разлікаў узятыя з [6, 18–19].

На мал. 4 прадстаўлены тэмпературныя залежнасці каэфіцыентаў працэсаў CHSH і CHCC, разлічаныя на аснове суадносін (5)–(6). Працэс Ажэ-рэкамбінацыі CHSH пачынае інтэнсіўна



Мал. 4. Тэмпературныя залежнасці каэфіцыентаў CHSH- і CHCC-працэсаў Ажэ-рэкамбінацыі для святлодыёдаў з актыўным пластам $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$ (1), $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ (2), $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ (3)

Fig. 4. Temperature dependences for CHSH and CHCC coefficients of Auger recombination for LEDs with active layers of $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$ (1), $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ (2), $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ (3)

развіваецца з ростам тэмпературы ад 10 да 80, 50, 25 К для святлодыёдаў з актыўным пластам $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$, $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$, $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ адпаведна. Пасля чаго розніца $E_g(T) - \Delta_{\text{SO}}(T)$ пачынае расці, што прыводзіць да плаўнага змяншэння каэфіцыента Ажэ-рэкамбінацыі C_{CHSH} . З павелічэннем тэмпературы навакольнага асяроддзя больш за 100 К для трох святлодыёдаў пачынае інтэнсіўна развівацца працэс СНСС. Такім чынам, атрыманыя даныя дазваляюць устанавіць, што пры нізкіх тэмпературах 10–80 К для святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ працэсам, які абмяжоўвае інтэнсіўнасць выпрамянення, з'яўляецца Ажэ-рэкамбінацыя СНSH. Пры гэтым з павышэннем тэмпературы больш за 100 К адбываецца рост каэфіцыента C_{CHCC} Ажэ-рэкамбінацыі для працэсу СНСС, які пачынае дамінаваць над каэфіцыентам C_{CHSH} . Сума гэтых працэсаў абумоўлівае тушэнне выпрамянення пры павелічэнні тэмпературы больш за 150 К.

Заклучэнне. На падставе атрыманых эксперыментальных даных залежнасці ад тэмпературы спектральных параметраў трох розных святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}/\text{GaSb}$ былі атрыманыя параметры Варшні і велічыні спін-арбітальнага расщачлення для цвёрдых раствораў $\text{Ga}_{0.96}\text{In}_{0.04}\text{As}_{0.03}\text{Sb}_{0.97}$, $\text{Ga}_{0.92}\text{In}_{0.08}\text{As}_{0.07}\text{Sb}_{0.93}$ і $\text{Ga}_{0.80}\text{In}_{0.20}\text{As}_{0.17}\text{Sb}_{0.83}$ у тэмпературным дыяпазоне 10–300 К.

Устаноўлена, што пры нізкіх тэмпературах 10–80 К для святлодыёдаў на аснове гетэраструктур $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{AlGaAsSb}$ працэсам, што абмяжоўвае інтэнсіўнасць выпрамянення, з'яўляецца працэс Ажэ-рэкамбінацыі СНSH. Пры гэтым з павышэннем тэмпературы больш за 100 К адбываецца рост каэфіцыента Ажэ-рэкамбінацыі для працэсу СНСС, які пачынае дамінаваць над каэфіцыентам для працэсу СНSH. Сума гэтых працэсаў абумоўлівае тушэнне выпрамянення пры павелічэнні тэмпературы больш за 150 К.

Падзякі. Аўтары ўдзячныя прафесару Ю. П. Якаўлеву (Фізіка-тэхнічны інстытут імя А. Ф. Ёфэ РАН) за святлодыёды, перададзеныя для даследаванняў, а таксама М. В. Ржэўцкаму за дапамогу пры выкананні эксперыменту.

Acknowledgements. The authors are grateful to Prof. Yu. P. Yakovlev (Ioffe Institute) for LEDs, as well as M. V. Rzhetski for assistance with experiment.

Спіс выкарыстаных крыніц

1. GaSb based lasers operating near 2.3 μm for high resolution absorption spectroscopy / S. Civias [et al.] // Spectrochim. Acta, Part A. – 2005. – Vol. 61, № 13/14. – P. 3066–3069.
2. Высокоэффективные светодиоды спектрального диапазона 1,6–2,4 мкм для медицинской диагностики и экологического мониторинга / Н. Д. Стоянов [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37, № 8. – С. 996–1009.
3. Измеритель содержания воды в нефти и нефтепродуктах на основе инфракрасных оптоэлектронных пар светодиод-фотодиод / М. В. Богданович [и др.] // Журн. техн. физики. – 2017. – Т. 87, вып. 2. – С. 315–318.
4. The NASA light-emitting diode medical program – progress in space flight and terrestrial applications / Н. Т. Whelan [et al.] // AIP Conference Proceedings. – 2000. – P. 37–43.
5. Light-emitting diodes for space applications / W. Lu [et al.] // Opt. Quant. Electron. – 2009. – Vol. 41, № 11/13. – P. 883–893.
6. Vurgaftman, I. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J. R. Meyer // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89, № 11. – P. 5815–5875.
7. Разъединенный гетеропереход в системе $p\text{-GaSb-n-InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($0 \leq x \leq 0,18$) / С. С. Кижаяев [и др.] // Письма в ЖТФ. – 2001. – Т. 27, № 22. – С. 66–72.
8. Mikhailova, M. P. Type II heterojunctions in the GaInAsSb/GaSb system / М. P. Mikhailova, A. N. Titkoba // Semicon. Sci. Technol. – 1994. – Vol. 9, № 7. – P. 1279–1295.
9. Temperature quenching of photoluminescence intensities in undoped and doped GaN / M. Leroux [et al.] // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol. 86, № 7. – P. 3721–3728.
10. Температурное тушение спонтанного излучения в туннельно-инжекционных наноструктурах / В. Г. Талалаев [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49, вып. 11. – С. 1531–1539.
11. Takeshima, M. Auger recombination in InAs, GaSb, InP, and GaAs / M. Takeshima // J. Appl. Phys. – 1972. – Vol. 43, № 11. – P. 4114–4119.
12. Takeshima, M. Green's-function formalism of band-to-band Auger recombination in semiconductors. Correlation effect / M. Takeshima // Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 26, № 11. – P. 917–930.
13. Direct evidence for suppression of Auger recombination in GaInAsSbP/InAs midinfrared light-emitting diodes / K. J. Cheetham [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2011. – Vol. 99, № 14. – P. 141110.

14. Takeshima, M. Unified theory of the impurity and phonon scattering effects on Auger recombination in semiconductors / M. Takeshima // *Phys. Rev. B.* – 1982. – Vol. 25, № 8. – P. 5390–5414.
15. Haug, A. Temperature dependence of Auger recombination in gallium antimonide / A. Haug // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1984. – Vol. 17, № 34. – P. 6191–6197.
16. Haug, A. Band-to-band auger recombination in semiconductors / A. Haug // *J. Phys. Chem. Solids.* – 1988. – Vol. 49, № 6. – P. 599–605.
17. Pidgeon, C. R. Suppression of non-radiative processes in semiconductor mid-infrared emitters and detectors / C. R. Pidgeon, C. M. Ciesla, B. N. Murdin // *Progress in Quantum Electronics.* – 1998. – Vol. 21, № 6. – P. 361–419.
18. Handbook series on semiconductor parameters / eds. M. Levinshtein, S. Rumyantsev, M. Shur. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1999. – Vol. 2: Ternary and Quaternary III-V Compounds. – 205 p.
19. Miller, A. Semiconductors and Semimetals / A. Miller, E. Garmire, A. Kost. – New York: Academic, 1999. – Vol. 59. *Nonlinear Optics in Semiconductors. II.*

References

1. Civiš S., Horká V., Šimeček T., Hulicius E., Pangrác J., Oswald J., Petříček O., Rouillard Y., Alibert C., Werner R. GaSb based lasers operating near 2.3 μm for high resolution absorption spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2005, vol. 61, no. 13–14, pp. 3066–3069. Doi: 10.1016/j.saa.2004.11.029
2. Stoyanov N. D., Zhurttanov B. E., Astakhova A. P., Imenkov A. N., Yakovlev Yu. P. High Efficient LEDs of 1.6–2.4 μm spectral range for medical diagnostics and ecological monitoring. *Semiconductors*, vol. 37, no. 8, pp. 971–984. Doi: 10.1134/1.1601668
3. Bogdanovich M. V., Kabanov D. M., Lebedok E. V., Shpak P. V., Ryabtsev A. G., Ryabtsev G. I., Shchemelev M. A., Andreev I. A., Kunitsyna E. V., Ivanov E. V., Yakovlev Yu. P. Measurement of the water content in oil and oil products using IR light-emitting diode–photodiode optrons. *Technical Physics*, 2017, vol. 62, no. 2, pp. 344–346. Doi: 10.1134/s1063784217020049
4. Whelan H. T. The NASA light-emitting diode medical program – progress in space flight and terrestrial applications. *AIP Conference Proceedings*, 2000, pp. 37–43. Doi: 10.1063/1.1302454
5. Lu W., Zhang T., He S. M., Zhang B., Li N., Liu S. S. Light-emitting diodes for space applications. *Optical and Quantum Electronics*, 2009, vol. 41, no. 11–13, pp. 883–893. Doi: 10.1007/s11082-010-9402-2
6. Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, no. 11, pp. 5815–5875. Doi: 10.1063/1.1368156
7. Kizhaev S. S., Molchanov S. S., Zotova N. V., Grebenshchikova E. A., Yakovlev Yu. P., Hulicius E., Šimeček T., Melichar K., Pangrác J. Broken-gap heterojunction in the p-GaSb-n-InAs $_{1-x}$ Sb $_x$ ($0 \leq x \leq 0.18$) system. *Technical Physics Letters*, 2001, vol. 27, no. 11, pp. 964–966. Doi: 10.1134/1.1424407
8. Mikhailova M. P., Titkoba A. N. Type II heterojunctions in the GaInAsSb/GaSb system. *Semiconductor Science and Technology*, 1994, vol. 9, no. 7, pp. 1279–1295. Doi: 10.1088/0268-1242/9/7/001
9. Leroux M., Grandjean N., Beaumont B., Nataf G., Semond F., Massies J., Gibart P. Temperature quenching of photoluminescence intensities in undoped and doped GaN. *Journal of Applied Physics*, 1999, vol. 86, no. 7, pp. 3721–3728. Doi: 10.1063/1.371242
10. Talalaev V. G., Novikov B. V., Tsyrlin G. E., Leipner H. S. Temperature quenching of spontaneous emission in tunnel-injection nanostructures. *Semiconductors*, 2015, vol. 49, no. 11, pp. 1483–1492. Doi: 10.1134/s1063782615110214
11. Takeshima M. Auger recombination in InAs, GaSb, InP, and GaAs. *Journal of Applied Physics*, 1972, vol. 43, no. 11, pp. 4114–4119. Doi: 10.1063/1.1660882
12. Takeshima M. Green's-function formalism of band-to-band Auger recombination in semiconductors. Correlation effect. *Physical Review B*, 1982, vol. 26, no. 11, pp. 917–930. Doi: 10.1103/physrevb.26.917
13. Cheetham K. J., Krier A., Marko I. P., Aldukhayel A., Sweeney S. J. Direct evidence for suppression of Auger recombination in GaInAsSbP/InAs midinfrared light-emitting diodes. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 99, no. 14, pp. 141110. Doi: 10.1063/1.3646910
14. Takeshima M. Unified theory of the impurity and phonon scattering effects on Auger recombination in semiconductors. *Physical Review B*, 1982, vol. 25, no. 8, pp. 5390–5414. Doi: 10.1103/physrevb.25.5390
15. Haug A. Temperature dependence of Auger recombination in gallium antimonide. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1984, vol. 17, no. 34, pp. 6191–6197. Doi: 10.1088/0022-3719/17/34/019
16. Haug A. Band-to-band auger recombination in semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1988, vol. 49, no. 6, pp. 599–605. Doi: 10.1016/0022-3697(88)90190-4
17. Pidgeon C. R., Ciesla C. M., Murdin B. N. Suppression of non-radiative processes in semiconductor mid-infrared emitters and detectors. *Progress in Quantum Electronics*, 1998, vol. 21, no. 6, pp. 361–419. Doi: 10.1016/s0079-6727(97)00012-8
18. Levinshtein M., Rumyantsev S., Shur M. (eds.). *Handbook series on semiconductor parameters. Vol. 2: Ternary and Quaternary III-V Compounds*. Singapore, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1999. 205 p. Doi: 10.1142/2046-vol2
19. Miller A., Garmire E., Kost A. *Semiconductors and Semimetals, Volume 59. Nonlinear Optics in Semiconductors. II*. New York, Academic, 1999.

Информация об авторах

Лебедок Егор Викторович – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией оптико-электронного приборостроения, ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: y.lebiadok@ifanbel.bas-net.by

Кабанов Дмитрий Михайлович – младший научный сотрудник лаборатории оптико-электронного приборостроения, ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: d.kabanau@ifanbel.bas-net.by

Information about the authors

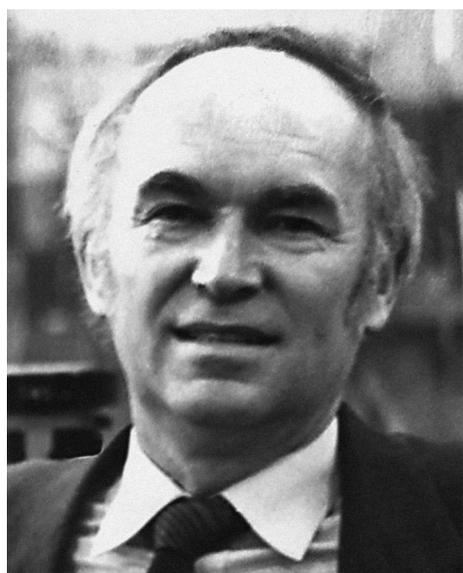
Yahor V. Lebiadok – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Optoelectronic Engineering, SSPA “Optics, Optoelectronics and Laser Technology” (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: y.lebiadok@ifanbel.bas-net.by

Dzmitry M. Kabanau – Junior Researcher of the Laboratory of Optoelectronic Engineering, SSPA “Optics, Optoelectronics and Laser Technology” (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: d.kabanau@ifanbel.bas-net.by

УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ
SCIENTISTS OF BELARUS

ДОСТАНКО АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ

(К 80-летию со дня рождения)



2 июля 2017 г. исполнилось 80 лет со дня рождения академика НАН Беларуси Анатолия Павловича Достанко – известного ученого в области твердотельной электроники, микроэлектроники, высокоэффективных пучковых технологий.

Анатолий Павлович родился 2 июля 1937 г. в д. Обчин Любанского р-на Минской обл. В 1955 г. окончил Реченскую среднюю школу. В 1957 г. поступил в Таганрогский радиотехнический институт, который окончил в 1962 г. по специальности «Электронные приборы», и был распределен в лабораторию по микроэлектронике данного института. Работал младшим научным сотрудником, руководителем сектора по микроэлектронике, начальником отдела электронно-лучевой технологии. После переезда в г. Минск в 1970 г. продолжил свою трудовую деятельность в Минском радиотехническом институте, где возглавил созданную под его руководством кафедру технологии радиоэлектронной аппаратуры. С 1985 по 1993 г. был проректором

и первым проректором по учебной работе Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Научно-исследовательской работой в области микроэлектроники А. П. Достанко начал заниматься еще в студенческие годы, выполнив и защитив дипломный проект «Получение $p-n$ -переходов электронной бомбардировкой». По результатам данного исследования был разработан способ электронно-лучевой полировки материалов (полупроводников, диэлектриков, металлов), внедренный в дальнейшем в производство электронно-лучевых приборов на Нальчинском электровакуумном заводе.

Ученым разработаны общие принципы интенсификации базовых технологий производства БИС и СБИС, созданы физико-химические основы процессов модифицирования микрообъемов твердых тел в полислоистых композиционных структурах высокоэнергетичными потоками частиц, теоретически обоснованы и экспериментально реализованы физические явления селективного ионного распыления, фазового расслоения в многокомпонентных пленочных структурах и восходящей диффузии легкого компонента под воздействием ионной бомбардировки, разработаны принципы построения интегрированных программно-управляемых модульных технологических систем. Проведены глубокие теоретические и экспериментальные исследования характеристик плазмы и ионных пучков инертных и химически активных газов, паров металлов, разработаны принципы создания высокоинформативного тепловизионного пирометрического оборудования и автоматических систем управления термическими процессами в диапазоне 450–1700 К. Это послужило в дальнейшем основой для подготовки многих докторов и кандидатов наук.

Изобретения Анатолия Павловича являются неотъемлемым звеном цепочки от фундаментальной науки (идея «на кончике пера») до реального производства и сосредоточены в таких

областях, как многокомпонентные сплавы и химические соединения токопроводящих систем на основе тугоплавких металлов; ионно-лучевая техника и интегральная технология формирования микрогетерогенных структур изделий микроэлектроники на основе металлов, сплавов, химических соединений; формирование пленочных элементов интегральных схем НЧ и СВЧ плазменными методами в химически активных и нейтральных средах; программно-управляемое физико-термическое оборудование инфракрасного нагрева для производства изделий микроэлектроники; контрольно-измерительное и диагностическое оборудование и устройства управляемых технологических процессов микроэлектроники; технологические процессы формирования элементов интегральных схем по «мокрой» и «сухой» технологии; высокоэффективные процессы для электрической изоляции элементов интегральных схем и их защиты, модульное и вакуумное многофункциональное оборудование. За заслуги в изобретательской деятельности и широкое использование созданных изобретений в народном хозяйстве в 1987 г. ему присвоено почетное звание «Заслуженный изобретатель СССР».

Ученым опубликовано более 600 научных трудов, в том числе 19 монографий; зарегистрировано свыше 300 изобретений, большинство из которых используются в народном хозяйстве и учебном процессе, многие запатентованы за рубежом.

Анатолий Павлович успешно сочетает научную и педагогическую деятельность с большой научно-организационной и общественной работой. Являлся членом Правительства Республики Беларусь, членом подкомитета по государственным премиям Республики Беларусь в области науки и техники, членом комиссии по вопросам государственной научно-технической политики при Совете Министров Республики Беларусь. Он входит в состав редакционных коллегий ряда научных и научно-технических журналов, таких как «Весті Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук», «Изобретатель», «Материалы, технологии и инструмент», «Горная механика» и др. В 2001 г. избран членом Международного комитета по присуждению премии «Глобальная энергия», в 1997 г. принят в члены Международного института инженеров по электротехнике и электронике (ШЕЕ, США).

А. П. Достанко – один из организаторов национальной системы аттестации научных и научно-педагогических кадров высшей квалификации, с 1992 по 2002 г. он возглавлял Высшую аттестационную комиссию Республики Беларусь.

Анатолий Павлович находился у истоков новых форм организации научных исследований и проведения учебного процесса, являясь руководителем созданных по его инициативе лабораторий двойного подчинения: отраслевой лаборатории Министерства электронной промышленности, лаборатории вакуумных технологий, основанной совместно с Сианским электронным университетом (Китай) и др.

Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки и техники БССР А. П. Достанко является лауреатом Государственной премии БССР (1982), Государственной премии Республики Беларусь (1996), премии Совета Министров Республики Беларусь (1991), премий Президиума АН СССР (1981) и НАН Беларуси (2005), премии академий наук Украины, Беларуси и Молдовы (2010).

За особые заслуги в развитии г. Любань и района А. П. Достанко в 1999 г. был избран Почетным гражданином города. За многолетнюю творческую деятельность по воспитанию молодого поколения в 2017 г. избран почетным профессором БГУИР.

Глубокие творческие идеи, высокий профессионализм и организаторские способности, принципиальность и тактичность обеспечили А. П. Достанко авторитет талантливого ученого и педагога, чуткого и доброжелательного человека. Сердечно поздравляем Анатолия Павловича с юбилеем, желаем ему крепкого здоровья и дальнейших творческих успехов.

*Отделение физики, математики и информатики НАН Беларуси,
Институт физики НАН Беларуси,
Белорусское физическое общество*